Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U104267

Державний реєстраційний номер: 0118U003862

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-03-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Архітектура інтерфейсу й електронні механізми формування екситонів та ексимерів в мультишарових органічних світлодіодах і транзисторах

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

Код за ЄДРПОУ: 02125622

Місцезнаходження: бульв. Шевченка, буд. 81, м. Черкаси, Черкаський р-н., Черкаська обл., 18031, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380472372142, 380472354463

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: просп. Перемоги, буд. 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1859.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Архітектура інтерфейсу й електронні механізми формування екситонів та ексимерів в мультишарових органічних світлодіодах і транзисторах

Назва роботи англійською:

Interface architecture and electronic mechanisms of exciton and excimer formation in multilayer organic light emitting diodes and transistors

Реферат українською:

Цілenапрямлений синтез нових органічних молекул та маніпуляції з делокалізацією електронів у π-спряжених системах дозволяють змінювати енергію та магнітні параметри триплетних збуджених станів і тим самим кардинально впливати на оптичні властивості електролюмінесцентних матеріалів. Маніпулювання структурою молекул на основі хіноксаліну від D-A-D до D-π-A-π-D типу приводить до значного поліпшення оптичних та електрохімічних властивостей. Досліджувані сполуки були протестовані в OLEDs; їх зовнішній квантовий вихід досягав 4.5% для глибоко червоного нелегованого пристрою з максимальною інтенсивністю електролюмінесценції при 662 нм. Використання хост-ексиплексу покращує продуктивність пристрою, що приводить до підвищення яскравості OLED до 20000 Кд/м2. Бісіндоло- та біскарбазоло-антрацени є ефективними емітерами для синіх OLEDs. Комплекси цинку(II) з лігандом 4-{(E)-[(2-фторфеніл)іміно]метил}-5-метил-2-феніл-2,4-дигідро-3H-піразол-3-ону демонструють регульовану люмінесценцію в розчині від синього до жовтого при зміні довжини хвилі збудження. Важливою їх особливістю є те, що інтенсивність випромінювання люмінесценції комплексів у твердому стані може бути легко налаштована шляхом заміни молекул розчинника, що входять до складу сольвату. Розроблено концепцію залежної від конформації флуоресценції, яка була успішно застосована для моделювання нових емісійних тетрабензо[8]циркуленів, заміщених електроноакцепторними групами. Ці нові сполуки демонструють увімкнення/вимкнення флуоресценції при конформаційній ізомеризації, що може бути дуже корисним для OLED, біовізуалізації та застосування сенсорів. Гетеро[8]циркулени мають анізотропну природу переносу заряду для кристалів та мають привабливі напівпровідникові властивості. Тетрабензоанельований тетраокса[8]циркулен та диантраценілазатриокса[8]циркулен є ефективними напівпровідниками n-типу. Загалом, їх можна розглядати як амбіполярні напівпровідники, в яких електронна провідність частково переважає над дірковою.

Реферат англійською:

Purposeful synthesis of new organic molecules and manipulation with the delocalization of electrons in π-conjugate systems allow to change the energy and magnetic parameters of triplet excited states and thus dramatically affect the optical properties of electroluminescent materials. Manipulation of the structure of quinoxaline-based molecules from D-A-D to D-π-A-π-D type leads to a significant improvement in optical and electrochemical properties. These compounds were tested in OLEDs; their external quantum yield reached 4.5% for a deep red nondoped device with a maximum electroluminescence intensity at 662 nm. The use of a host exiplex improves the performance of the device, which leads to an increase in OLED brightness to 20,000 Cd/m2. Bisindole and biscarbazole anthracenes are effective emitters for blue OLEDs. Zinc(II) complexes with 4-{(E)-[(2-fluorophenyl)imino]methyl}-5-methyl-2-phenyl-2,4-dihydro-3H-pyrazol-3-one ligand show adjustable luminescence in solution from blue to yellow when changing the wavelength of excitation. An important feature is that the luminescence intensity of these complexes in the solid state can be easily adjusted by replacing the solvent molecules. The concept of conformation-dependent fluorescence has been developed, which has been successfully applied to model new emission tetrabenzo[8]circulenes replaced by electron-accepting groups. These new compounds demonstrate fluorescence on/off in conformational isomerization, which can be very useful for

OLED, biovisualization, and sensor applications. Hetero[8]circulenes have an anisotropic nature of charge transfer for crystals and have attractive semiconductor properties. Tetrabenzoanelated tetraoxa[8]circulene and dianthracenylazatrioxa[8]circulene are effective n-type semiconductors. In general, they can be considered as ambipolar semiconductors, in which the electron conductivity partially dominates over the hole conductivity.

Індекс УДК: 544, УДК 544.18 + 544.135 + 544.144 + 544.174.2

Коди тематичних рубрик: 31.15.01

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Мінаєв Борис Пилипович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Розробка концепції та виготовлення дослідних зразків органічних світлодіодів на основі нових органічних емітерів.

Назва НТП англійською: Concept development and manufacturing of prototypes of organic light-emitting diodes based on new organic emiters.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Технології, Методи, теорії

Галузь застосування: Світлотехніка

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Структури на основі хіноксаліну були протестовані в OLEDs; їх зовнішній квантовий вихід досягав 4.5% для глибокого червоного нелегованого пристрою з максимальною інтенсивністю електролюмінесценції при 662 нм. Використання хост-ексиплексу покращує продуктивність пристрою, що приводить до підвищення яскравості OLED до 20000 Кд/м2; зовнішній квантовий вихід досягає 7% та поточна ефективність 5.8 Кд/А. Розроблено методики по вдосконаленню архітектури шарів для оптимізації внутрішньої ефективності органічних світлодіодів, побудовано моделі переносу енергії у створених пристроях. Розроблено концепцію залежної від конформації флуоресценції, яка була успішно застосована для моделювання нових емісійних тетрабензо[8]циркуленів, заміщених електроноакцепторними групами. Ці нові сполуки демонструють увімкнення/вимкнення флуоресценції при конформаційній ізомеризації, що може бути корисним для OLED, біовізуалізації та застосування сенсорів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Економія енергоресурсів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською:Розробка технології та виготовлення дослідних зразків тонкоплівкових органічних польових транзисторів на основі гетероциркуленів.

Назва НТП англійською: Technology development and manufacturing of prototypes of thin-film organic field-effect transistors based on heterocirculenes.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Вироби технічні, Методи, теорії

Галузь застосування: Органічна електроніка

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Виготовлено дослідні зразки тонкоплівкових органічних польових транзисторів (OFET) на основі тетрабензоанельованого тетраокса[8]циркулену. Встановлено, що в OFET на основі тетрабензоанельованого тетраокса[8]циркулену, рухливість дірок не перевищує 10-3 см2/Впс. Значення рухливості практично не залежні від прикладеної до затвору напруги. Отримані значення є на два порядки нижчими за необхідні для забезпечення базових характеристик OTFT, що пов'язано з незадовільною досконалістю структурованості плівки. Тому подальші наші дослідження будуть спрямовані саме на забезпечення належної впорядкованості термовакуумної плівки для забезпечення високої рухливості носіїв зарядів в плівкових транзисторних структурах.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Electronic structure and spectral properties of heterocirculenes: monograph / B. F. Minaev, N. M. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov, V. A. Minaeva. – Cherkasy : Publishing dept. Chabanenko Yu. A., 2018. – 300 p.

Баришніков Г. В. Елементи та пристрої органічної електроніки: колективна монографія / Г. В. Баришніков, І. І. Гельжинський, З. Ю. Готра, Х. Б. Іванюк, Б. П. Мінаєв, П. Й. Стахіра. – Львів: Простір, 2020. – 224 с. Рекомендовано Вченою радою Національного університету "Львівська політехніка" (протокол № 66 від 27.10.2020 р.)

Баришніков Г. В. Органічні світловипромінювальні структури: колективна монографія / Г. В. Баришніков, І. І. Гельжинський, З. Ю. Готра, Х. Б. Іванюк, Б. П. Мінаєв, П. Й. Стахіра. – Львів: Видавництво Львівської політехніки, 2020. – 236 с.

Korotkova I. The Ultraviolet Radiation: Disinfection and Stimulation Processes / I. Korotkova, A. Semenov, T. Sakhno // Lambert: Academic Publishing – 2020. – 56 p. ISBN 978-620-2-68136-0.

N. N. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov, H. Ågren and B. F. Minaev, In Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering, ed. H. N. C. Wong, Chapter Furans and Their Benzo Derivatives: Structure, Elsevier, 2019, 1–43.

Молекулярна електроника: підручник. Баришніков Г.В., Волинюк Д.Ю, Гельжинський І.І., Готра З. Ю., Мінаєв Б.П., Стахіра П.Й., Черпак В.В.; за ред. Готри З. Ю. – 2-ге вид., зі змін. І допов. - Видавництво Львівської політехніки. 2019. – 324 с. ISBN978-966-941-293-5.

Мінаєв Б. П. Практикум з навчальної дисципліни «Квантова хімія (будова речовини, хімічний зв'язок)»: Навчально-методичний посібник для студентів вищих навчальних закладів / Б. П. Мінаєв, Н. М. Карауш, В. О. Мінаєва, Г. В. Баришніков. – Черкаси : Вид. від ЧНУ імені Богдана Хмельницького, 2019. – 406 с.

Twisted-Planar-Twisted expanded porphyrinoid dimer as a rudimentary reaction-based methanol indicator / Q. Li, C. Li, G. Baryshnikov, Y. Ding, C. Zhao, T. Gu, F. Sha, X. Liang, W. Zhu, X. Wu, H. Agren, J.L. Sessler // Nature Commun. 2020, 11, 5289-5299

Pedersen S.K. A Fully Conjugated Planar Heterocyclic [9]Circulene / S. K. Pedersen, K. Eriksen, H. Ågren, B. F. Minaev, N. N. Karaush-Karmazin, O. Hammerich, G. V. Baryshnikov, M. Pittelkow // J. Am. Chem. Soc. 2020, 142, 33, 14058–14063.

BODIPY-core 1, 7-diphenyl-substituted derivatives for photovoltaics and OLED applications / K. Ivaniuk, A. Pidluzhna, P. Stakhira, G.V. Baryshnikov, Y.P. Kovtun, Z. Hotra, B.F. Minaev, H. Ågren // Dyes and Pigments . – 2020. Vol, 175. – P. 108123.

Can attachment of tert-butyl substituents to methoxycarbazole moiety induce efficient TADF in diphenylsulfone-based blue OLED emitters? / A. Bucinskas, K. Ivaniuk, G. Baryshnikov, O. Bezvikonnyi, P. Stakhira, B. Minaev, H. Ågren, Y. Zhydachevskyy // Organic Electronics – 2020. – Vol. 86. – 105894.

Structure and tuneable luminescence in polymeric zinc compounds based on 3-(3-pyridyl)-5-(4-pyridyl)-1, 2, 4-triazole / A. Gusev, E. Braga, Y. Baluda, M. Kiskin, M. Kryukova, N. Karaush-Karmazin, G. Baryshnikov, A. Kuklin, B. Minaev, H. Ågren, W. Linert // Polyhedron. - 2020. Vol. 191. 114768.

Aromaticity of Even-Number Cyclo[n]carbons (n = 6–100) / G.V. Baryshnikov, R.R. Valiev, R.T. Nasibullin, D. Sundholm, T. Kurten, H. Agren // The Journal of Physical Chemistry A. – 2020. Publication Date: December 10, 2020

N-Confused Hexapyrrolic Phlorinoid with NIR Absorption: Synthesis, Fusion, Oxidation, and Copper (II) Coordination / Y. Du, B. Zhu, Q. Li, G. Baryshnikov, C. Wei, Y. Lin, G. Su, C. Li, H. Ågren, Y. Xie // Organic Letters. – 2020. Publication Date:December 9, 2020

Expanded N-Confused Phlorin: A Platform for a Multiply Fused Polycyclic Ring System via Oxidation within the Macrocycle / C. Li, Q. Li, J Shao, Z Tong, M Ishida, G Baryshnikov, H Ågren, H Furuta // Journal of the American Chemical Society – 2020. – Vol.142 (40). 17195-17205.

Luo M. Back Cover: Integrating Time□Resolved Imaging Information by Single□Luminophore Dual Thermally Activated Delayed Fluorescence / M. Luo, X. Li, L. Ding, G. Baryshnikov, S. Shen, M. Zhu, L. Zhou, M. Zhang // Angewandte Chemie International Edition -2020. – Vpl. 59 (39). – P. 17304-17304.

Valiev R.R. When are antiaromatic molecules paramagnetic? / R.R. Valiev, G.V. Baryshnikov, R.T. Nasibullin, D. Sundholm, H. Ågren // The Journal of Physical Chemistry C. – 2020. – Vol. 124 (38). P. 21027-21035.

Rational Synthesis of 5, 5, 5□Tricyclic Fused Thia□heptaphyrin (1.1. 1.1. 1.1. 0) From a Helical Oligopyrrin Hybrid / Y. Fu, X. Liu, C. Li, Z. Tong, G. Baryshnikov, H. Ågren, Q. Li, Y. Xie // Chemistry–An Asian J. – 2020. - Vol. 15 (8). – P. 1285-1289.

Fluorescence–Phosphorescence–Phosphorescence Triple-Channel Emission Strategy for Full-Color Luminescence / T. Weng, G. Baryshnikov, C. Deng, X. Li, B. Wu, H. Wu, H. Ågren, Q. Zou // Small – 2020. - Vol. 16 (7). 1906475.

Integrating Time□Resolved Imaging Information by Single□Luminophore Dual Thermally Activated Delayed Fluorescence / M. Luo, X. Li, L. Ding, G. Baryshnikov, S. Shen, M. Zhu, L. Zhou, M. Zhang // Angewandte Chemie - 2020. – Vol. 132, 139. – P. 17166-17173.

Compressing a Non□Planar Aromatic Heterocyclic [7] Helicene to a Planar Hetero [8] Circulene / B. Lousen, S.K. Pedersen, P. Bols, K.H. Hansen, M.R. Pedersen, S. Bondarchuk, B. Minaev, G. V. Baryshnikov // Chemistry–A European Journal – 2020. – Vol. 26 (22). – P. 4935-4940.

Molecular Phosphorescence in Polymer Matrix with Reversible Sensitivity / H. Wu, L. Gu, G.V. Baryshnikov, H. Wang, B.F. Minaev, H. Ågren, Y. Zhao // ACS Applied Materials & Interfaces – 2020. – Vol. 12 (18). – P. 20765-20774.

The effect of molecular structure on the properties of quinoxaline-based molecules for OLED applications / P. Ledwon, R. Motyka, K. Ivaniuk, A. Pidluzhna, P.Stakhira, G. Baryshnikov, B.F.Minaev, H. Ågren // Dyes and Pigments – 2020. – Vol. 173. – P. 108008.

Through-space charge transfer in luminophore based on phenyl-linked carbazole-and phthalimide moieties utilized in cyan-emitting OLEDs / Y. Danyliv, D. Volyniuk, O. Bezvikonnyi, I. Hladka, K. Ivaniuk, I. Helzhynskyy, P. Stakhira, A. Tomkeviciene // Dyes and Pigments – 2020. – Vol. 172. – P. 107833.

Bondarchuk S. V. Bipentazole (N10): a low-energy molecular nitrogen allotrope with high intrinsic stability / S. V. Bondarchuk // J. Phys. Chem. Lett. – 2020. – Vol. 11, N 14. – P. 5544-5548.

Confused Phlorin□Prodigiosin Chimera: meso□Aryl Oxidation and π□Extension Triggered by Peripheral Coordination / G. Su, Q. Li, M. Ishida, C. Li, F. Sha, X.Y. Wu, L. Wang, G. Baryshnikov, D. Li, H. Ågren, H. Furuta, Y. Xie // Angewandte Chemie International Edition – 2020. – Vol. 59 (4). – P. 1537-1541.

Dual□Phase Thermally Activated Delayed Fluorescence Luminogens: A Material for Time□Resolved Imaging Independent of Probe Pretreatment and Probe Concentration / X .Li, G. Baryshnikov, L. Ding, X. Bao, X. Li, J. Lu, M. Liu, S. Shen, M. Luo, M. Zhang, H. Ågren, X. Wang, L. Zhu // Angewandte Chemie. Int. Ed. – 2020. – Vol. 59. – P. 7548 – 7554.

Bondarchuk S. V. Theoretical evaluation of hexazinane as a basic component of nitrogen-rich energetic onium salts / S. V. Bondarchuk // Mol. Syst. Des. Eng. – 2020. – N 5. – P. 1003-1011.

Bondarchuk S. V. Modeling of explosives: 1,4,2,3,5,6-dioxatetrazinane as a new green energetic material with enhanced performance / S. V. Bondarchuk // J. Phys. Chem. Solids – 2020. – Vol. 142. – P. 109458.

Мерехтіння освітленості та стробоскопічний ефект, що утворюють світлодіодні лампи та світильники / С. Шпак, С. Кислиця, Г. Кожушко, Т. Сахно, С. Багіров // Системи управління, навігації та зв'язку. 2020. – Т. 2 (60). – С. 135-143.

Synthesis of Iron Nanoparticles by Thermal Decomposition of Diironnonacarbonyl in Ionic Liquid and Their Potential Use as Nanotracers for Mixer Studies in Liquids Feeds / I. Irgibaeva, N. Barashkov, T. Sakhno, A. Mantel, S. Mendigaliyeva, I. Barashkova, Y. Sakhno // Scientific Research. – 2020. – Vol. 10 (3). – P. 201–209.

Valiev R.R. The blue vibronically resolved electroluminescence of azatrioxa[8] circulene / R.R. Valiev, R.M. Gadirov, K.M. Degtyarenko, D.V. Grigoryev, R.T. Nasubullin, G.V. Baryshnikov, B. F Minaev, S. K Pedersen, M. Pittelkow // Chemical Physics Letters – 2019. – Vol.732. – 136667.

Bondarchuk S. V. Beyond molecular nitrogen: revelation of two ambient-pressure metastable single- and double-bonded nitrogen allotropes built from three-membered rings / S. V. Bondarchuk // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2019. – Vol. 21, N 41. – P. 22930-22938.

Bondarchuk S. V. Impact sensitivity of aryl diazonium chlorides: limitations of molecular and solid-state approach / S. V. Bondarchuk // J. Mol. Graphics Modell. – 2019. – Vol. 89. – P. 114-121.

Bondarchuk S. V. A unified model of impact sensitivity of metal azides / S. V. Bondarchuk // New J. Chem. – 2019. – Vol. 43, N 3. – P. 1459-1468.

A complete characterization of vibrational IR and Raman spectra of the highly-symmetrical octathia[8]circulene / V. Minaeva, N. Karaush-Karmazin, G. Baryshnikov, B. Minaev // Vibrational Spectroscopy – 2019. - Vol. 100. – P. 107-116.

Aromaticity and photophysics of tetrasila-and tetragerma-annelated tetrathienylenes as new representatives of the hetero[8]circulene family / R.R. Valiev, V.N. Cherepanov, N.N. Karaush-Karmazin, V.A. Minaeva, B.F. Minaev, H. Ågren // Physical Chemistry Chemical Physics. - 2019. Vol. 21- P. 9246-9254.

Gusev A.N. A Novel Zinc Complex with Ethylenediamine Schiff Base for Highly Luminance Blue Fluorescent OLED Applications /A N. Gusev, M. A. Kiskin, E. V. Braga, M. Chapran, G. Wiosna-Salyga, G. V. Baryshnikov, V. A. Minaeva, B. F. Minaev, K. Ivaniuk, P. Stakhira, H. Agren, W. Linert // J. Phys. Chem. C, - 2019. – Vol. 123 (18). 11850–11859.

Pidluzhna A. Multi-channel electroluminescence of CdTe/CdS core-shell quantum dots implemented into a QLED device / A. Pidluzhna, K. Ivaniuk, P. Stakhira, Z. Hotra, M. Chapran, J. Ulanski, Y. Khalavka, G. V. Baryshnikov, B.F. Minaev, H. Ågren // Dyes and pigments – 2019. – Vol. 162. - P. 647-653.

Litvin V.A. Experimental and theoretical study of the mechanism formation of silver nanoclusters in the reduction reaction of Ag+ ions by alizarin solution / V.A. Litvin, B.F. Minaev, G.V. Baryshnikov // Colloid and Interface Science Communications – 2019. – Vol. 29. – P. 47-54.

Baryshnikova A. Computational study of the structure and magnetic properties of the weakly-coupled tetranuclear square-planar complex of Cu (II) with a tetraporphyrin sheet / A.T. Baryshnikova, B.F. Minaev, G.V. Baryshnikov, H. Ågren // Inorganica Chimica Acta – 2019. – Vol. 485. – P. 73-79.

Impact of heteroatoms (S, Se, and Te) on the aromaticity of heterocirculenes / N. N. Karaush-Karmazin, G.V. Baryshnikov, L.I. Valiulina, R.R. Valiev, H. Ågren, B.F. Minaev // New journal of chemistry. 2019. Vol. 43, № 30. P. 12178-12190.

Korneev O. V. Nanoparticles-based photosensitizers with effect of aggregation-induced emission / O. V. Korneev, T. V. Sakhno, I. V. Korotkova, Biopolymers & Cell. – 2019. – Vol. 35 (4). – P. 249–267.

Kuklin A.V. Strong topological states and high charge carrier mobility in tetraoxa [8] circulene nanosheets // A.V. Kuklin, G.V. Baryshnikov, B.F. Minaev, N. Ignatova, H. Ågren // J. Physical Chemistry C. – 2018. – Vol. 122 (38). – P. 22216-22222.

Optical tuning of tetrabenzo [8] circulene derivatives through pseudorotational conformational isomerization / G.V. Baryshnikov, R.R. Valiev, B.F. Minaev, H. Ågren // Dyes and Pigments – 2018. – Vol. 151. – P. 372-379.

A theoretical study of new representatives of closed-and open-circle benzofuran and benzocyclopentadienone oligomers / N.N. Karaush, G.V. Baryshnikov, H. Ågren, B.F. Minaev // New Journal of Chemistry – 2018. – Vol. 42 (14). – P. 11493-11505.

Contribution of TADF and exciplex emission for efficient “warm-white” OLEDs / G. Grybauskaite-Kaminskiene, K. Ivaniuk, G. Bagdziunas, P. Turyk, P. Stakhira, G. Baryshnikov, D. Volyniuk, V. Cherpak, B. Minaev. // Journal of

Materials Chemistry C. – 2018. – Vol. 6 (6). – P. 1543-1550.

Bondarchuk S. V. Significance of crystal habit sphericity in the determination of the impact sensitivity of bistetrazole-based energetic salts / S. V. Bondarchuk // CrystEngComm. – 2018. – Vol. 20, N 38. – P. 5718-5725.

Bondarchuk S. V. Quantification of impact sensitivity based on solid-state derived criteria / S. V. Bondarchuk // J. Phys. Chem. A – 2018. – Vol. 122, N 24. – P. 5455-5463.

Vibronic Absorption Spectra of Angular Fused Bisindolo- and Biscarbazoloanthracene Blue Fluorophores / G. V. Baryshnikov, D. A. Sunchugashev, R. R. Valiev, B. F. Minaev // Chem. Phys. – 2018. – Vol. 513. – P. 105–111.

Identification of tautomeric intermediates of a novel thiazolylazonaphthol dye – A density functional theory study / N. N. Karaush, V. A. Minaeva, G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev, H. Ågren // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. – 2018. – Vol. 203 (5). – P. 324–332.

Zassowski P. 1,3,5-Triazine and carbazole derivatives for OLED applications / P. Zassowski, P. Ledwon, A. Kurowska, A. P. Herman, M. Lapkowski, V. Cherpak, Z. Hotra, P. Turyk, Kh. Ivaniuk, P. Stakhira, G. Sych, D. Volyniuk, J. V. Grazulevicius // Dyes and Pigments. 2018. – Vol. 149. – P. 804–811.

Bondarchuk S. V. An algorithm for evaluation of potential hazards in research and development of new energetic materials in terms of their detonation and ballistic profiles / S. V. Bondarchuk, N. A. Yefimenko // Propellants Explos. Pyrotech. – 2018. – Vol. 43 (8). – P. 818-824.

Granchak V. M. Aggregation-Induced Emission in Organic Nanoparticles: Properties and Applications: a Review / V. M. Granchak, T. V. Sakhno, I. V. Korotkova, Yu. E. Sakhno, S. Ya. Kuchmy // Theoretical and Experimental Chemistry. – 2018. – Vol. 54. – P. 147–177.

Спосіб виготовлення органічного світлодіода / З. Ю. Готра, Г. І. Барило, П. Й. Стахіра, В. В. Вірт, Х. Б. Іванюк; заявн. Національний університет "Львівська політехніка". – u201812743; заявл. 21.12.2018; опубл. 10.05.2019; Бюл. № 9.

Патент на корисну модель № 143102 України. Спосіб одержання синтетичних фульвокислот з фенольних сполук оплодня гранату // Литвин В. А.; Мінаєв Б.П.; заявник і власник Черкаський національний університет ім. Богдана Хмельницького. – № u202000696; заявл. 05.02.2020; опубл. 10.07.2020, бюл. № 13.

Спосіб виготовлення органічного фотоперетворювача / З. Ю. Готра, П. Й. Стахіра, П. М. Турик; заявн. Національний університет "Львівська політехніка". – u201708177; заявл. 07.08.2017; опубл. 26.03.2018; 6/2018.

Дерев'янко В. Ю. Вплив замісників у бензеновому циклі на іч спектр молекули 1-[(5-бензил-1,3-тіазол-2-іл)діазеніл]нафтален-2-олу / В. Ю. Дерев'янко // XX Всеукраїнська наукова конференція молодих учених Актуальні проблеми природничих та гуманітарних наук у дослідженнях молодих учених «Родзинка – 2018» квітень 19-20, 2018: тези доповідей. – Черкаси, Україна, 2018. – Р. 497.

Кузьмишина Н. В. Аналіз електронних і іч спектрів спряжених олігомерів на основі 4,4'-трифеніламінвінілену / Н. В. Кузьмишина // XX Всеукраїнська наукова конференція молодих учених Актуальні проблеми природничих та гуманітарних наук у дослідженнях молодих учених «Родзинка – 2018» квітень 19-20, 2018: тези доповідей. – Черкаси, Україна, 2018. – Р. 497.

Dvirnyk N. Density functional theory calculation of the uv-vis spectra for the novel thiazolylazonaphthol dye in various tautomeric forms / N. Dvirnyk, H. Ågren // XX Всеукраїнська наукова конференція молодих учених Актуальні проблеми природничих та гуманітарних наук у дослідженнях молодих учених «Родзинка – 2018» квітень 19-20, 2018: тези доповідей. – Черкаси, Україна, 2018. – Р. 497.

Мінаєв Б. П. Порівняльний аналіз ІЧ та КР спектрів октатіа[8]циркулену та sym-тетраселенатетратіа[8]циркулену. / Б. П. Мінаєв, В. О. Мінаєва, Г. В. Баришніков., Н. М. Карауш, І. А. Поурець, О. О. Панченко // Матеріали VI міжнародної науково-практичної інтернет-конференції «Сучасне матеріалознавство та товарознавство: теорія, практика, освіта. – 2019. – Полтава : ПУЕТ – С. 52–56.

Мінаєв Б. П. Моделювання кристалічної гратки октатіа[8]циркулену та розрахунок ІЧ спектру отриманих структур / Б. П. Мінаєв, В. О. Мінаєва, Т. В. Сахно, Г. В.Баришніков., Н. М. Карауш, О. О. Панченко, В. С. Гавриленко // Збірник матеріалів ІІІ Міжнародної науково-практичної інтернет-конференції «Хімія, агрохімія, екологія та освіта». – 2019. – Полтава : ПДАА – С. 17–22.

Дерев'янко В. Ю. Спектральні властивості тетрасіла- і тетрагерма[8]-циркуленів як нових представників класу гетеро[8]циркуленів / Кваліфікаційна робота на здобуття освітнього ступеня магістра. Спеціальність 102 – Хімія // 2019. – Черкаси. – 55 с.

Поурець І. А. Порівняльний аналіз ІЧ та КР спектрів октатіа[8]циркулену та sym-тетраселенатетратіа[8]циркулену / Кваліфікаційна робота на здобуття освітнього ступеня магістра. Спеціальність 102 – Хімія // 2018. – Черкаси. – 41 с.

Khomenko O. M., Minaev B.F. Potential curves and spectra of ClO- and HOCl species studied by ab initio methods. – Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii. – 2018. – Issue 3. – P. 44–49.

Karaush-Karmazin N. N. Charge-transport properties of tetraaza- and tetraoxa[8]circulenes / N. N. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev, H. Ågren // Круглий стіл «Наука та інноватика: вітчизняний і зарубіжний досвід – 2020» 13 травня 2020 р.: тези доповідей. – Черкаси, 2020 – С. 58.

Karaush-Karmazin N. N. Impact of molecular and packing structure on charge-transport properties of tetrathia- and tetraselena[8]circulenes / N. N. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov // Хімія, Агрохімія, Екологія та Освіта: Збірник матеріалів IV Міжнародної науково-практичної інтернет-конференції (м. Полтава, 21–22 травня 2020 року). – Полтава: ПДАА, 2020. – С. 10–13.

Keruckiene R. On-doped blue emitters based on novel indole and benzo[b]carbazole derivatives / Keruckiene R., Ivanëiuk Kh., Stakhira P., Volyniuk D., Grazulevicius J. V. // 5-th workshop on organic electronics and nanophotonics (WOREN) Wisla, Poland, 11-15.02.2018. – P. 29.

Bondarchuk S. V. Spectral properties of single- and double-bonded solid form of nitrogen / S. V. Bondarchuk // Optics & High Technology Material Science SPO 2017: 18th International Young Scientists Conference, 26-29 October 2017: abstracts. – Kyiv, 2017. – P. 53-54.

Bondarchuk S. V. DFT Study of the Decomposition Pathways of 5,5'-bitetrazole-1,1'-diide as a Parent Anion in the Family of Highly Energetic Green Explosives / S. V. Bondarchuk // ECSOC-21 : 21th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry, 1-30 November 2017 : abstracts. – Sciforum Electronic Conference Series, Vol. 21, 2017; doi:10.3390/ecsoc-21-04781.

Karaush N. N. Photophysical properties of the benzoannelated and NH/O-substituted hetero[8]circulenes / N. N. Karaush, G. V. Baryshnikov, M. Pittelkow, B. F. Minaev , H.Ågren // International scientific internet-conference «Electronics and Photonics of Organic Nanomaterials», June 6-7, 2017 – theses of report. – Cherkasy, Ukraine, 2017. – P. 107–113.

Bondarchuk S. V. A new member in the family of single-bonded nitrogen allotropes: insight from first principles crystal structure prediction / S. V. Bondarchuk // Фізичні явища в твердих тілах : XIII Міжнародна конференція, 5-8 грудня 2017 : тези допов. – Харків, 2017. – С. 57.

Minaeva V. Analysis of IR and Raman vibrational spectra for the highly-symmetrical octathia[8]circulene / V. Minaeva, N. Karaush-Karmazin, B. Minaev, G. Baryshnikov, H. Agren // International MECM Conference dedicated to the 75th anniversary of professor Boris F. Minaev «Molecular Engineering and Computational Modelling for Nano- and Biotechnology: From Nanoelectronic to Biopolymers», September 26–26, 2018: theses of report. – Cherkasy, Ukraine, 2018. – P. 86.

Bondarchuk S. V. Spectral Behavior of Star-Shaped Bipolar Derivatives of 1,3,5-Triazine and Carbazole as a Function of the Solvent Polarity / S. V. Bondarchuk, G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev, H. Ågren // 11th International Conference on Nanophotonics, July 2–6, 2018: theses of report. – Wrocław, Poland, 2018. – P. 140.

Kh. Ivaniuk High-efficiency WOLED based on double emission layers/ Kh. Ivaniuk, P. Turyk , I. Duplaik , I. Helzhynskyy, P. Stakhira, X. Tan, D. Volyniuk, J. V. Grazulevicius // 11th International Conference «Electronic Processes in Organic and Inorganic Materials» (ICEPOM-11), May 21–25, 2018: theses of report. – Ivano-Frankivsk, Ukraine, 2018, P. 208.

Deep blue fluorescence organice light-emitting diode // K. Ivaniuk, S. Kutsiy, I. Helzhynskyy, A. Fechan, P. Stakhira, Z. Hotra // Матеріали VIII Міжнародної науково-практичної конференції "Фізико-технологічні проблеми передавання, оброблення та зберігання інформації в інфокомунікаційних системах", 3-5 жовтня, 2019.: тези доповідей. – Чернівці-Вижниця, 2019. – P. 37.

Карауш-Кармазін Н. М. Ароматичність тіациркуленів з різним числом конденсованих тіофенових циклів / Н. М. Карауш-Кармазін, Г. В. Баришніков, Б. П. Мінаєв // XX Міжнародна конференція студентів та аспірантів «Сучасні проблеми хімії» 15-17 травня 2019 р.: тези доповідей. – Київ, 2019. – С. 105.

Ivaniuk K. A new interface engineering method is demonstrated for the preparation of an efficient white organic light-emmitting diode (WOLED) / K. Ivaniuk, S. Kutsiy, I. Helzhynskyy, H. Kuchmiy, P. Stakhira, Z. Hotra // Матеріали VIII Міжнародної науково-практичної конференції "Фізико-технологічні проблеми передавання, оброблення та зберігання інформації в інфокомунікаційних системах". 3-5 жовтня, 2019.: тези доповідей. – Чернівці-Вижниця, 2019. – P. 38.

Pidluzhna A. Quantum dots application in inverted solar cell / A. Pidluzhna, A. Kostruba, P. Stakhira, G. Baryshnikov // 11th International Congress SHP Science in the age of globalisation. - 12-15 September 2019.: тези доповідей. – Szczecin, 2019. – P. 116.

Pidluzhna A. InP/ZnS quantum dots application in inverted solar cell / A. Pidluzhna, P. Stakhira, G. Baryshnikov // 20th International Conference on the Science and Application of Nanotubes and Low-Dimensional Materials NT19, – 21–26 July 2019. – Würzburg, Germany, 2019. – p.442.

Karaush-Karmazin N. M. DFT study of the one-dimensional tetrathia- and tetraselena[8]circulene-based materials / N. M. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev // XII Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання - 2020", 21–23 квітня 2020 р.: тези доповідей. – Харків, 2020. – С. 62.

Karaush-Karmazin N. N. S, Se, Te-Heteroatom impact on the aromaticity of hetero[8]circulenes / N. N. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov, R. Valiev, H. Ågren, B. F. Minaev // 1th International Conference on Excited State Aromaticity and Antiaromaticity, July 30th – August 2nd, 2019: theses of report. – Sigtuna, Sweden, 2019. – P-02.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Черевко Олександр Володимирович
д. е. н., 08.00.05

Перелік осіб-виконавців

Баришніков Гліб Володимирович

Баришнікова Аліна Тарасівна

Бондарчук Сергій Вікторович

Двірник Ніколь Юріївна

Дерев'янко Вікторія Юріївна

Карауш-Кармазін Наталія Миколаївна
(к. х. н.)

Кузьмишина Надія Володимирівна

Мельнічак Аліна Петрівна

Мінаєва Валентина Олександрівна

Пономаренко Олена Володимирівна

Поурець Ігор Андрійович

Підлужна Анна Юріївна

Сахно Тамара Вікторівна

Стахіра Павло Йосипович
(д. т. н., 05.27.06)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Карауш-Кармазін Наталія Миколаївна

Телефон

+38 (093) 647-57-39

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

