Учений, учитель, ентузіаст

Борис Пилипович Мінаєв

До 75-го дня народження

Черкаси
2018

УДК 54(092)Мінаєв
У91

***Учений, учитель, ентузіаст.* Борис Пилипович Мінаєв. До 75-го дня народження** / В. А. Литвин, В. О. Мінаєва, Н. М. Карауш-Кармазін, Г. В. Баришніков. – Черкаси : Вид. Чабаненко Ю. А., 2018. – 80 с.
ISBN 978-966-920-313-7

У книзі висвітлені основні періоди життя, наукової та педагогічної діяльності доктора хімічних наук, професора, академіка Академії наук Вищої школи України, заслуженого діяча науки і техніки України Бориса Пилиповича Мінаєва, а також наведено огляд його найважливіших наукових праць. Книга відображає величезний доробок вченого у науково-дослідній діяльності та інформує науковий загал про досягнення Б. П. Мінаєва у галузі фізичної органічної хімії та молекулярної електроніки.

Книга присвячена 75-річниці від дня народження видатного вченого та 55 річниці його наукової діяльності.

УДК 54(092)Мінаєв

Рекомендовано до друку Вченою радою Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького
(протокол № 8 від 18 червня 2018 р.)

ISBN 978-966-920-313-7
© ЧНУ ім. Б. Хмельницького, 2018
© В. А. Литвин
© В. О. Мінаєва
© Н. М. Карауш-Кармазін
© Г. В. Баришніков

Завідувачу кафедри хімії та наноматеріалознавства Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького професору Борису Пилиповичу Мінаєву цього року виповнюється 75 років. Одночасно ми святкуємо ще одну знаменну дату – 55 років його наукової діяльності.

Б. П. Мінаєв народився 21 вересня 1943 року в Свердловську (нині Єкатеринбург) в сім'ї службовців. Його батько, Пилип Прокопович, в цей час працював заступником голови Свердловського облвиконкому, був куратором Уралмашу та інших великих уральських заводів, де створювалася зброя Перемоги. Після війни батько керував Новгородським і Семипалатинським облвиконкомами, Міністерством промисловості будматеріалів в Казахстані, тому сім'я часто переїжджала з одного кінця Союзу в інший. Мати, Тетяна Миколаївна, – педагог за освітою, викладала в школі історію та виховувала трьох дітей.

Пилип Прокопович Мінаєв, батько, 1951 р.

Тетяна Миколаївна Мінаєва, мати, 1951 р.

У 1962 році Б. П. Мінаєв закінчив середню школу №3 в місті Караганда і вступив до фізичного факультету Томського державного університету імені В. В. Куйбишева (ТДУ). Свої перші наукові дослідження, присвячені розрахункам нітросполук методом Хюккеля, Мінаєв Б. П. розпочав, навчаючись на третьому курсі університету.

Дитинство Мінаєва Б., 1949 р.

Мінаєв Б. із старшим братом, 1950 р.

Учень 6-го класу середньої школи №15 м. Алмати, 1956 р.

Юнацькі роки Мінаєва Б., 1959 р.

Навчаючись на п’ятому курсі, він проходив переддипломну практику в Інституті високомолекулярних сполук АН СРСР, за результатами якої була написана перша наукова стаття студента Мінаєва Б. П.: «Об относительной стабильности различных водород-связанных конфигураций производных пуринов и пиримидинов» у співавторстві з Ю. Г. Баклановою, І. Е. Мілевською, Ю. Е. Ейзнером (Молекулярная биология. – 1968. – № 2. – С. 303–309).

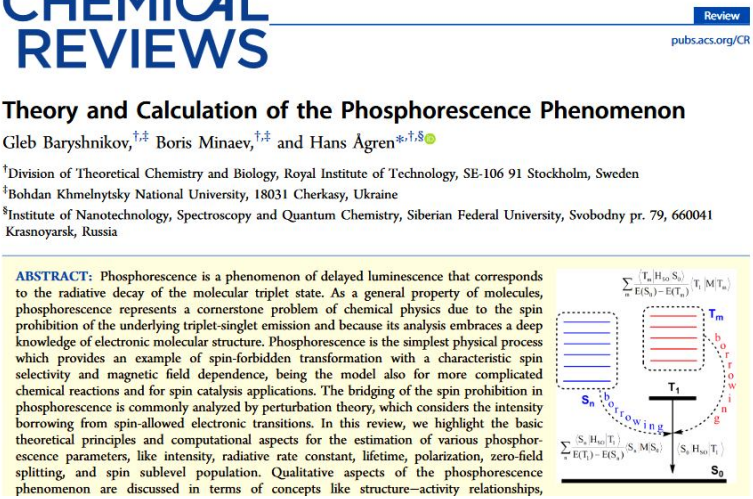
Мінаєв Б. П. – студент 5-го курсу
в період переддипломної практики
(Інститут високомолекулярних сполук АН СРСР,
Санкт-Петербург, 1966 р.)

У 1967 році Б. П. Мінаєв закінчив університет і вступив до аспірантури при кафедрі оптики і спектроскопії ТДУ. Уже тоді молодого аспіранта захоплювали методи квантової хімії, які він застосовував для розрахунку електронної будови та спектрів молекул [1–4]. В ті роки під керівництвом професора Н. О. Прилежаєвої на кафедрі оптики і спектроскопії ТДУ були створені перші в Сибірі лазери і почали застосовуватися перші ЕОМ для розрахунку молекул і їх спектрів. Наталія Олександрівна Прилежаєва була ученицею академіка А. Н. Тереніна і розповідала про його відкриття триплетної природи фосфоресценції. Крім спектрів газового розряду, професор Прилежаєва Н. О. цікавилася теорією збуджених станів молекул. Цей інтерес до електронної теорії збуджених станів молекул вона прищепила і своєму аспіранту.

З 1970 року Б. П. Мінаєв працював молодшим науковим співробітником Сибірського фізико-технічного інституту імені академіка В. Д. Кузнєцова, а через рік переходить на кафедру органічної хімії ТДУ. На початку 1973 року захистив дисертацію на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за темою «Ефекти спін-орбітальної взаємодії в оптичних та ЕПР спектрах молекул і радикалів». Уже в ранніх роботах молодого вченого прослідковується потяг до глибокого осмислення закономірностей в молекулярних спектрах різних класів сполук (від двохатомних молекул [4] до комплексів з переносом заряду [1] і біополімерів) на основі фундаментальних теорій. Б. П. Мінаєв також розробив методи розрахунку ефектів спін-орбітальної взаємодії (СОВ) на основі теорії самоузгодженого поля Хартрі-Фока і методів конфігураційної взаємодії для збуджених станів. Врахування СОВ і розрахунок часу життя фосфоресценції ароматичних молекул дозволили Б. П. Мінаєву вперше пояснити роль міцно зв’язаних σ-електронів в спектрах

цього широкого класу органічних сполук [2, 3]. Раніше $\sigma \rightarrow \pi^*$ переходи практично не враховувалися: забарвлення органічних молекул і барвників справедливо пояснювалося за рахунок $\pi \rightarrow \pi^*$ переходів. Для пояснення часу життя фосфоресценції [1–4] $\sigma \rightarrow \pi^*$ переходи є головним джерелом «запозичення інтенсивності» для забороненого триплет-синглетного випромінювання, тому молодий аспірант був змушений приділяти багато уваги вивченню збуджень σ-електронів. Б. П. Мінаєв показав, що перші $\sigma \rightarrow \pi^*$ переходи в ароматичних сполуках знаходяться в ближній УФ області, але мають малу інтенсивність і тому перекриваються інтенсивними $\pi \rightarrow \pi^*$ переходами [2, 3].

Працюючи на кафедрі органічної хімії ТДУ, Б. П. Мінаєв розвинув теорію спектрів комплексів з переносом заряду на основі нітробензену і його похідних та пояснив властивості комплексів Мезенгеймера [5]. Досвід дослідження ефектів СОВ дозволив Мінаєву ще в той час провести перші систематичні розрахунки анізотропії g-фактора спектрів електронного парамагнітного резонансу (ЕПР) на основі теорії самоузгодженого поля для великої кількості радикалів [6]. Чверть століття потому він провів перші неемпіричні розрахунки g-факторів спільно з колегами зі Швеції. Нині цей пріоритет є загальновизнаним. Нещодавно результати досліджень теоретичних аспектів фосфоресценції молекул протягом останніх 50-ти років були узагальнені в статті, надрукованій у високорейтинговому журналі «Chemical Reviews» Американського Хімічного Товариства [7] (імпакт фактор журналу дорівнює 44.2). У цьому огляді також розглянуто питання оптичного детектування магнітного резонансу, розщеплення в нульовому полі і спектрах ЕПР для триплетних станів і проблеми молекулярної електроніки, залежні від спінової статистики носіїв зарядів в аморфних напівпровідниках.



CHEMICAL REVIEWS

Review

pubs.acs.org/CR

Theory and Calculation of the Phosphorescence Phenomenon

Gleb Baryshnikov,[†,‡] Boris Minaev,[†,‡] and Hans Ågren[*,†,§]

[†]Division of Theoretical Chemistry and Biology, Royal Institute of Technology, SE-106 91 Stockholm, Sweden

[‡]Bohdan Khmelnytsky National University, 18031 Cherkasy, Ukraine

[§]Institute of Nanotechnology, Spectroscopy and Quantum Chemistry, Siberian Federal University, Svobodny pr. 79, 660041 Krasnoyarsk, Russia

ABSTRACT: Phosphorescence is a phenomenon of delayed luminescence that corresponds to the radiative decay of the molecular triplet state. As a general property of molecules, phosphorescence represents a cornerstone problem of chemical physics due to the spin prohibition of the underlying triplet-singlet emission and because its analysis embraces a deep knowledge of electronic molecular structure. Phosphorescence is the simplest physical process which provides an example of spin-forbidden transformation with a characteristic spin selectivity and magnetic field dependence, being the model also for more complicated chemical reactions and for spin catalysis applications. The bridging of the spin prohibition in phosphorescence is commonly analyzed by perturbation theory, which considers the intensity borrowing from spin-allowed electronic transitions. In this review, we highlight the basic theoretical principles and computational aspects for the estimation of various phosphorescence parameters, like intensity, radiative rate constant, lifetime, polarization, zero-field splitting, and spin sublevel population. Qualitative aspects of the phosphorescence phenomenon are discussed in terms of concepts like structure–activity relationships,

З 1974 по 1988 рік Б. П. Мінаєв працював спочатку доцентом кафедри теоретичної фізики, а потім завідувачем кафедри фізичної хімії Карагандинського державного університету (КарДУ). Саме в КарДУ Мінаєв розробив свою знамениту теорію інтенсивностей синглет-триплетних переходів у видимій та ближній ІЧ області спектру молекулярного кисню. У верхніх шарах атмосфери ці слабкі переходи мають суто магнітну природу і відбуваються за рахунок дуже специфічної спін-орбітальної взаємодії в молекулі O_2 [8].

У 1978 році Б. П. Мінаєв показав, що добре відома червона лінія Фраунгофера при поглинанні атмосферою сонячного світла запозичує свою інтенсивність з магнітного переходу ЕПР між спіновими підрівнями основного триплетного стану молекули O_2. Така незвичайна природа оптичного поглинання була вперше відкрита у молекулярній спектроскопії [9]. Через два роки, керуючись тими ж принципами, Мінаєв пояснив специфічне посилення світіння синглетного $^1\Delta_g$ кисню у розчинах [10].

INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY, VOL. XVII, 367–374 (1980)

Intensities of Spin-Forbidden Transitions in Molecular Oxygen and Selective Heavy-Atom Effects*

B. F. MINAEV

Karaganda State University, 470061, Karaganda, U.S.S.R.

Abstract

Intensities of $a\,^1\Delta g \leftarrow X\,^3\Sigma_g^-$ and $b\,^1\Sigma_g^+ \leftarrow X\,^3\Sigma_g^-$ transitions in molecular oxygen have been calculated on the basis of the INDO method taking into account spin-orbit coupling by perturbation theory. The transitions are magnetic dipole in nature. The first of them ($a - X$) steals its intensity from $^3\Pi_g$-$^3\Sigma_g^-$ and $^1\Pi_g$-$^1\Delta_g$ transitions, which are determined by the orbital angular-momentum operator. This source is not the principal one for the intensity of the second (b-X) transition. Its intensity is stolen principally from microwave transitions between spin sublevels of the ground $^3\Sigma_g^-$ state. The last source explains the large difference in intensities of the a-X and b-X transitions. Calculated oscillator strengths are in a good agreement with experiment. The same integrals that determine the intensity also determine the parameters of the spin Hamiltonian for the ground $^3\Sigma_g^-$ state. These parameters are in a good agreement with experiment also, showing the validity of the whole calculation. In a condensed phase the investigated transitions are enhanced by intermolecular exchange interaction. It is known that an external heavy atom (EHA) enhances the b-X transition of oxygen in solution, but does not influence the a-X transition. In the collision complex O_2-EHA, which has a geometry without inversion symmetry, the microwave transitions between spin sublevels of the "$^3\Sigma_g^-$" state obtain electric-dipole moments, which are stolen from the charge-transfer transition. This mechanism explains the selective effect of EHA.

У 1984 році Б. П. Мінаєв захистив докторську дисертацію за спеціальністю 02.00.04. – фізична хімія на тему: «Теоретичний аналіз і прогнозування ефектів СОВ в молекулярній спектроскопії і хімічній кінетиці». У листі за підписом академіка В. А. Легасова експертна рада ВАК СРСР дозволила Б. П. Мінаєву отримати ступінь доктора хімічних наук на основі захисту автореферату без написання дисертації. Захист пройшов в Ордена Леніна Інституті хімічної фізики імені М. М. Семенова АН СРСР в Москві і викликав великий інтерес в науковій спільноті. До складу Вченої Ради Інституту входили провідні академіки і вчені АН СРСР (серед них два Нобелівських лауреати).

У 1984 році в КарДУ була створена друга (після МДУ) в Радянському Союзі кафедра квантової хімії, яку очолив професор Б. П. Мінаєв. За цей час він підготував шість кандидатів і двох докторів наук.

ОРДЕНА ЛЕНИНА ИНСТИТУТ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
АКАДЕМИИ НАУК СССР

На правах рукописи
УДК 535.37:538.61:541.27

МИНАЕВ Борис Филиппович

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ

02.00.04 — физическая химия

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора химических наук

МОСКВА 1983 г.

Б. П. Мінаєв з колегами кафедри органічної хімії КарДУ, 1975 р.

В лабораторії квантової хімії (м. Караганда, 1985 р.)

Мінаєв Б. П. з колегами та аспірантами кафедри квантової хімії КарДУ, 1985 р.

Наукова школа Б. П. Мінаєва зайняла міцні позиції в квантовій хімії колишнього СРСР і набула широкої популярності за кордоном. Працюючи в КарДУ, професор Мінаєв розробив актуальну на той час теорію оптичного детектування магнітного резонансу (ОДМР) у низько-температурних спектрах фосфоресценції молекулярних кристалів та інтенсивностей свічення синглетного кисню в газовій фазі і в розчинах. Цю теорію Б. П. Мінаєв вперше доповів у 1982 році на всесоюзній школі з квантової хімії (м. Каркаралінськ, поблизу м. Караганда), проте широке визнання теорія отримала тільки після 1997 року, коли німецькі фізики провели пряму експериментальну її перевірку на основі імпульсних експериментів.

Посилення хаосу внаслідок перебудови та розпаду СРСР змусило Б. П. Мінаєва виїхати з Казахстану. Він був запрошений за конкурсом на посаду завідувача кафедри хімії в філії Київського політехнічного інституту в м. Черкаси і з лютого 1988 року працював в цьому ВНЗ, який пізніше був реформований в Черкаський державний технологічний університет (ЧДТУ). За час роботи в ЧДТУ Б. П. Мінаєв підготував трьох кандидатів наук.

Одночасно професор Мінаєв читав лекції з квантової хімії в Черкаському національному університеті імені Богдана Хмельницького (ЧНУ). У 2007 р. він перейшов на посаду завідувача кафедри органічної хімії ЧНУ, а пізніше – на посаду завідувача створеної ним кафедри хімії та наноматеріалознавства ЧНУ.

Співробітники кафедри хімії та наноматеріалознавства, 2018 р.

Таким чином, ось вже чверть століття в Черкасах проводяться дослідження електронної будови, спектрів і хімічної реакційної здатності молекул з урахуванням спін-орбітальної та інших слабких магнітних взаємодій, початок яким покладено працями професора Мінаєва. Крім традиційного підходу до магнетохімії, коли магнітні збурення враховуються для розрахунку надтонкої структури в спектрах електронного парамагнітного резонансу (ЕПР) радикалів або ядерного магнітного резонансу (ЯМР) діамагнітних молекул, в роботах Мінаєва акцентується увага на роль триплетних станів в хімії, молекулярній електроніці, біохімії і каталізі при розрахунку СОВ, спін-спінової взаємодії, анізотропії g-фактора та інших магнітних взаємодій [11].

Russian Chemical Reviews **76** (11) 988 – 1010 (2007) © 2007 Russian Academy of Sciences and Turpion Ltd

DOI 10.1070/RC2007v076n11ABEH003720

Electronic mechanisms of molecular oxygen activation

B F Minaev

Contents

I.	Introduction	988
II.	Mechanisms of triplet – singlet transitions in the oxygen molecule	989
III.	Influence of collisions of oxygen molecule on intensities of forbidden transitions	993
IV.	Quenching of the $O_2(a^1\Delta g)$ molecule	1002
V.	Biochemical activation of the molecular oxygen	1004
VI.	Conclusion	1008

Хімічно стабільні речовини, які існують при звичайних умовах, як правило, діамагнітні, тобто мають синглетний основний стан: через насичення хімічних валентностей всі спіни спарені, повний спін дорівнює нулю. Перший збуджений стан таких молекул завжди є триплетним (T_1) і характеризується наявністю двох неспарених електронних спінів [12]. Триплетні стани

багатьох молекул є фотохімічно стабільними і добре вивчені в спектрах фосфоресценції, ЕПР, а також за допомогою Т-Т перенесення енергії в кристалах, склі і рідких розчинах [12]. Оскільки спонтанний перехід з T_1-стану в основний синглетний стан (S_0) заборонений по спіну і дозволяється тільки за рахунок слабкої спін-орбітальної взаємодії, яка злегка змішує синглетні і триплетні стани, T_1-стан є метастабільним. Не дивно, що багато фотохімічних реакцій проходять через проміжний триплетний T_1-стан. Б. П. Мінаєвим спільно з колегами проводяться численні розрахунки електронних механізмів фотохімічних реакцій з урахуванням СОВ, зокрема, для T-S переходів в проміжних бірадикалах [11, 13–15]. Він показав, що роль триплетних станів набагато ширша і не вичерпується тільки фотохімічними процесами: Борис Пилипович давно висловлює думку про те, що майже вся хімія діамагнітних речовин закодована у властивостях неспарених електронів збудженого триплетного стану [12]. При хімічних перетвореннях молекули проходять стадію активованого комплексу, їх електронна структура набагато ближча до властивостей триплету, ніж до властивостей основного S_0 стану. Ця ідея отримана з теоретичних розрахунків методами квантової хімії і здається зараз очевидною, хоча її експериментальна перевірка дуже складна. Адже всі вимірювання в хімії проводяться для стабільних молекул і досліджувати перехідний стан в реакції можна тільки непрямими методами хімічної кінетики. Розв’язуючи ж рівняння Шредінгера, ми можемо розрахувати і нестабільну молекулу, і будь-який її збуджений стан. Такі розрахунки перехідних станів в ряді хімічних реакцій показали, що розпарювання і переворот спінів можуть здійснюватися в ході темнових (а не тільки фотохімічних) перетворень. Спін-орбітальна взаємодія в активованому комплексі може ефективно змішувати S і T стани, перемикаючи канали хімічних реакцій і отримуючи

більший виграш в обмінній енергії, яка в основному керує хімічним зв'язком. Якщо витрати енергії на подолання енергетичного активаційного бар'єру хімічної реакції можна порівняти з тараном, що ламає фортечний мур, то слабку спін-орбітальну взаємодію можна порівняти з маленьким ключем, легкий поворот якого відкриває фортечні ворота. За таким же принципом діють і багато каталізаторів, зокрема, ферменти, хоча роль спіну в каталізі може бути і більш складною; при цьому важливу роль можуть відігравати не тільки магнітні взаємодії, але й спіновий обмін з каталізатором [11, 13–15]. Наприклад, окиснення органічних речовин – сильно екзотермічна реакція, що і забезпечило швидку еволюцію аеробних форм життя після виникнення фотосинтезу на Землі (перших синьо-зелених водоростей) і появи кисню в атмосфері 1,4 мільярда років тому. Зауважимо при цьому, що вся жива матерія термодинамічно нестійка в сенсі можливого згоряння в кисні повітря. Втім вся біосфера Землі цілком стійка, що, по суті, суперечить основним принципам термодинаміки. Цей парадокс можна пояснити в силу кінетичних спінових заборон для реакцій триплетного кисню. До робіт Б. П. Мінаєва [11, 13] в біохімії не існувало чіткого уявлення про роль цих заборон і про те, як вони долаються в живій матерії (в дихальному ланцюзі і при клітинному окисненні вуглеводів, жирів, ліпідів). Кисень парамагнітний, а більшість органічних поживних речовин і продукти їх окиснення – діамагнітні. В силу заборони по спіну горіння органічних речовин вимагає початкової активації у вигляді високотемпературної стадії запалювання – створення початкових радикалів [14]. Радикально-ланцюговий процес горіння спричиняє неконтрольоване виділення енергії у вигляді тепла і світла [14, 15]. Зрозуміло, що такий механізм окиснення молекулярним киснем неприйнятний для живих клітин. В результаті метаболізму енергетичні

потреби клітин тварин задовольняються за рахунок енергії, що вивільняється при окисненні органічних сполук за участю кисню [11]. Ця енергія використовується клітиною для проведення всіх хімічних синтезів ДНК і білків, транспорту іонів, механічної роботи і діяльності мозку.

Всі різноманітні метаболічні процеси і реакції, що дають енергію всьому аеробному життю, підкоряються тонкому ферментативному контролю. До цих пір залишалося відкритим питання про специфіку спінового контролю в процесах біологічного окиснення молекулярним киснем.

Б. П. Мінаєвим спільно з колегами з університету Стокгольма проведено квантово-хімічні розрахунки електронної будови ряду ферментів флавопротеїдів і купрум вмісних аміноокcидаз [13]. Ці ферменти утворюють супероксид-іон O_2^-, те ж саме відбувається і при мимовільному окисненні гемоглобіну, фередоксинів і адреналіну [14]. Б. П. Мінаєв вперше показав, чому окиснювальна атака молекулою O_2 відбувається повільно і чому після приєднання першого електрона до кисню подальше відновлення протікає легко [11]. Виявилося, що активація кисню, ця вікова загадка біохімії, зводиться до дуже простого та ясного з фізичної точки зору спінового ефекту: великій спін-орбітальній взаємодії між квазівиродженими станами супероксид-іона, утвореного в радикальній парі з ферментом (флавопротеїдів) та швидкій спін-гратковій релаксації в цьому радикалі [12]. Ці ідеї були вперше висвітлені у 2002 році на конгресі в Токіо [11], але до них Б. П. Мінаєв повертався неодноразово [12–15], про що свідчать наведені нижче статті. Виявилося, що прояв внутрішніх магнітних взаємодій у спектрах O_2 пов’язаний з активацією кисню оксигеназами й іншими ферментами.

International Journal of QUANTUM CHEMISTRY WWW.Q-CHEM.ORG REVIEW

Dioxygen Spectra and Bioactivation

Boris F. Minaev,[a] N. Arul Murugan,[b] and Hans Ågren*[b]

Intensities of spin-forbidden transitions in electronic absorption and emission spectra of molecular oxygen are analyzed in order to understand the key mechanisms of spin-states mixing induced by spin-orbit coupling (SOC) and the ways to overcome spin prohibition for various photophysical and biochemical processes. Multireference configuration interaction calculations with SOC account are used to generalize spin-selection rules for the oxygen atmospheric and Herzberg bands in free O_2 molecule and in collision complexes. Intensity enhancement of the atmospheric $a^1\Delta_g \rightarrow X^3\Sigma_g^-$, $b^1\Sigma_g^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-$, and Noxon $b^1\Sigma_g^+ \rightarrow a^1\Delta_g$ transitions upon bimolecular collisions are compared with those for Herzberg III transitions $A'^3\Delta_u \leftarrow X^3\Sigma_g^-$. Electric quadrupole, dipole, and magnetic approximations are used for transition probability calculations. Intensity distribution in rotational lines is also considered. With this background, we propose some simple spin-selection rules for dioxygen activation in enzymatic reactions. © 2013 Wiley Periodicals, Inc.

DOI: 10.1002/qua.24390

Boris Minaev was born in Yekateriburg (Russia) in 1943. He has graduated from Tomsk State University (in Siberia) and received there his PhD in physics devoted to EPR and phosphorescence lifetime calculations. In 1974, Minaev received an assistant professor position in Karaganda State University (Kazakhstan) and the chief of physical chemistry chair (1976). He has defended habilitation work in Moscow Institute of chemical physics (1983) and created a quantum chemistry chair in Karaganda SU. Minaev moved to Ukraine just before the collapse of the Soviet Union and received a chemistry chair in Cherkassy Institute of Technology. Since 2007, he is a chief of Organic Chemistry Department and director of Scientific Institute of Physics and Chemistry of Functional Materials at Bogdan Khmelnitsky Natioanl University in Cherkasy. As a guest professor, during last decade, Minaev delivered lectures at the Royal Institute of Technology and collaborates with a group of Hans Ågren. [Color figure can be viewed in the online issue, which is available at wileyonlinelibrary.com.]

N.A. Murugan was born in Paramakudi, India, in 1976. He received his master degree in general chemistry in 1998 from GRI Deemed University, Dindigul, India. He was awarded with a PhD degree from Indian Institute of Science in 2005 for his contributions in understanding temperature- and pressure-induced structural transitions in organic molecular crystals using variable shape Monte Carlo simulations. Until 2010, he had postdoctoral visits to ULB (Brussels), UPC (Barcelona), KTH (Stockholm). From 2011, he is working as a researcher at the Department of Theoretical Chemistry and Biology at the Royal Institute of Technology, Sweden. His current research is mostly devoted to understanding the structure, dynamics, and properties of molecular probes for medical diagnosis application. [Color figure can be viewed in the online issue, which is available at wileyonlinelibrary.com.]

Hans Ågren was born 1950 in the town of Skelleftea in northern Sweden. In 1979, he received his PhD in experimental atomic and molecular physics at the University of Uppsala under the supervision of Kai Siegbahn. After a few PostDoc years in USA, he became assistant professor in Quantum Chemistry in Uppsala in 1983. He became the first holder of the chairs in Computational Physics at Linköping University in 1991 and in Theoretical Chemistry at the Royal Institute of Technology, Stockholm, in 1998. The Department of Theoretical Chemistry and Biology at KTH, which he currently heads, houses ca 20 scientists and 40 PhD students, with research activities in theoretical modeling primarily in the areas of molecular/nano/bio photonics and electronics, in catalysis, and in X-ray science. The research is a mix of method development and problem-oriented applications in collaboration with experimentalists. Hans Ågren participates in several national and international networks in his research areas. He spends his spare moments in the summer cottage close to his home town up north, with some fishing and mountain hiking. [Color figure can be viewed in the online issue, which is available at wileyonlinelibrary.com.]

ACCOUNTS of chemical research

Article

pubs.acs.org/accounts

Singlet Oxygen Photophysics in Liquid Solvents: Converging on a Unified Picture

Mikkel Bregnhøj,[†] Michael Westberg,[†] Boris F. Minaev,[‡] and Peter R. Ogilby*[,†]

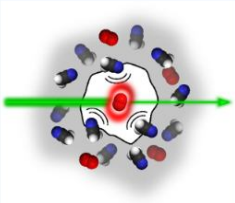
[†]Department of Chemistry, Aarhus University, DK-8000 Aarhus, Denmark

[‡]Department of Natural Sciences, Bogdan Khmelnitsky National University, Cherkassy 18031, Ukraine

Supporting Information

CONSPECTUS: Singlet oxygen, $O_2(a^1\Delta_g)$, the lowest excited electronic state of molecular oxygen, is an omnipresent part of life on earth. It is readily formed through a variety of chemical and photochemical processes, and its unique reactions are important not just as a tool in chemical syntheses but also in processes that range from polymer degradation to signaling in biological cells. For these reasons, $O_2(a^1\Delta_g)$ has been the subject of intense activity in a broad distribution of scientific fields for the past ~50 years.

The characteristic reactions of $O_2(a^1\Delta_g)$ kinetically compete with processes that deactivate this excited state to the ground state of oxygen, $O_2(X^3\Sigma_g^-)$. Moreover, $O_2(a^1\Delta_g)$ is ideally monitored using one of these deactivation channels: $O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow O_2(X^3\Sigma_g^-)$ phosphorescence at 1270 nm. Thus, there is ample justification to study and control these competing processes, including those mediated by solvents, and the



Переворот спіна в супероксид-іоні рівнозначний T-S переходу в іон-радикальній парі $ФАДН_2^+$ ... O_2^-, після чого йде звичайна «синглетна хімія» діамагнітних речовин – перенесення атомів Гідрогену з утворенням пероксиду H_2O_2 і окисненого флавінаденіндинуклеотиду (ФАД). Незвичайним аспектом є твердо встановлений Б. П. Мінаєвим факт перевороту спіну на стадії переносу електрона і утворення іон-радикальної пари [12, 13]. Запропонований механізм спінової релаксації в супероксид-іоні знімає всі питання в цій проблемі. Наступні реакції вже в синглетному стані системи флавопротеїдів мають малі енергії активації і протікають швидко [13]. Оскільки вихід радикалів в об’єм клітини є згубним для організму, спіновий перехід пригнічує радикальний канал.

Ми бачимо, що спінові ефекти відіграють важливу роль у відкритті глибоких таємниць живої матерії. Спін – це виключно квантова властивість електрона; переворот спіну при T-S переході відноситься до числа найбільш

тонких квантових ефектів, що не мають ніяких аналогів в класичній фізиці. Ми помічаємо, що специфіка живого (на прикладі дихального ланцюга і ферментів оксидаз, що використовують кисень повітря для окиснення глюкози), визначається квантовими ефектами.

Звідси можна зробити висновок, що найбільш ефективною медициною може бути та, що безпосередньо впливає на квантові переходи в живих клітинах за допомогою електромагнітних полів СВЧ [16] і радіодіапазону терагерц. Зауважимо, що T-S розщеплення в радикальній парі $ФАДН_2^+$ ... O_2^- відноситься до СВЧ діапазону, і на цій частоті можна впливати на швидкість спінової конверсії і на роботу ферменту. СВЧ поля давно використовуються в лікуванні і в діагностиці (ядерна томографія заснована на спектрах ЯМР, тобто на переходах між спіновими підрівнями ядер).

Ще одним прикладом квантової медицини є використання лазерів видимого діапазону для терапії раку. До хворої клітини підводиться барвник, потім за допомогою лазера і світловода його переводять в збуджений стан. Барвник переносить свою енергію електронного збуждення на триплетний молекулярний кисень, завжди присутній в клітинних розчинах, і виходить нова активна форма $^1O_2$ – синглетний кисень в стані $^1\Delta_g$ [17]. Для синглетного кисню немає заборони по спіну в реакціях з діамагнітними речовинами, і він дуже реакційноздатний. Такий кисень вбиває хворі клітини. Теоретичним дослідженням синглетного кисню присвячено понад сотні статей Мінаєва та його учнів, захищена докторська і вісім кандидатських дисертацій.

Б. П. Мінаєв вперше пояснив механізм світіння синглетного $^1\Delta_g$ і $^1\Sigma_g^+$ кисню в газовій фазі без зіткнень (при нульовому тиску) і в розчинах, дав пояснення гасіння $^1\Delta_g$ кисню, розрахував вплив O_2 на синглет-триплетні

переходи в кристалах і передбачив кооперативні ефекти в комплексах зіткнення кисню з діамагнітними і парамагнітними молекулами. Досвід дослідження спінових ефектів в кисні, безумовно, допоміг в розробці теорії ферментативного спін-каталізу. Наприклад, в теорії гасіння синглетного кисню аліфатичними амінами в газовій фазі, запропонованої майже 30 років тому, були враховані ефекти спін-орбітальної взаємодії між станами переносу заряду, які були використані нещодавно при поясненні швидкості спінової релаксації в супероксид-іоні [11, 13].

Украинский биохимический журнал, 2009, №3

СПИН-КАТАЛИЗ В ПРОЦЕССАХ ФОТО- И БИОАКТИВАЦИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА

Б. Ф. МИНАЕВ

Черкасский национальный университет им. Богдана Хмельницкого, Украина;
e-mail: bfmin@rambler.ru

Обзор посвящен анализу электронно-спиновых механизмов фотофизической и биохимической активации кислорода. Парамагнитный характер основного состояния молекулы O_2 приводит к сильным спиновым запретам на химические реакции кислорода с органическими веществами, а также на оптические триплет-синглетные (T-S)-переходы в видимой и ближней инфракрасной областях спектра. Ускорение радиационных и безызлучательных T-S-переходов в молекуле O_2 под влиянием растворителя, включая сенсибилизацию синглетного кислорода, $O_2(a^1\Delta_g)$, а также T-S-переходы в реакциях O_2 с энзимами, объединены под термином спин-катализ. Рассмотрена структура и энергетика низших состояний кислорода, а также его комплексов с энзимами и растворителями. С учетом спин-орбитального взаимодействия (СОВ) объяснено усиление вероятности перехода $a^1\Delta_g$ - $X^3\Sigma^-_g$, а также его тушение в различных растворителях (Р). Отмечена роль переноса заряда $P^+{}^-O_2^-$, приводящая к росту СОВ между T-S-состояниями. Знания физических механизмов активации и тушения синглетного $O_2(a^1\Delta_g)$ кислорода важны не только для его детектирования in vivo (фотобиология), но и для понимания энзиматических процессов окисления кислородом.

Ключевые слова: синглетный кислород, супероксид-ион, глюкозооксидаза, медьаминоксидазы, гемоглобин, миоглобин, цитохромоксидазы, спин-орбитальное и обменное взаимодействие, фотодинамическая терапия.

Багато уваги Б. П. Мінаєв приділяє і проблемам екології [18–28]. Відомо, що синглетний $^1\Delta_g$ кисень бере участь в утворенні смогу над задимленими містами. У верхній атмосфері йде постійний фоторозклад O_2 на атоми і їх зворотна рекомбінація з утворенням метастабільних форм кисню. Молекула O_2 поглинає майже всю сонячну радіацію в ультрафіолетовій області за рахунок поглинання в смузі Шумана-Рунге. Питання про більш довгохвильове поглинання кисню надзвичайно важливе

для моделювання фотохімії атмосфери і проблеми озонового шару. Оскільки всі переходи в електронному спектрі молекули кисню в більш довгохвильовій області (200–1200 нм) заборонені по спіну або по парності, питання визначення інтенсивності цих слабких переходів дуже складне, хоча у всьому світі проводяться спроби виміряти інтенсивність смуг кисню за допомогою новітніх експериментальних методів.

Нещодавно Б. П. Мінаєвим проведений новий цикл розрахунків по визначенню інтенсивності синглет-триплетних смуг кисню методами квантової хімії. Вперше розраховані спектри поглинання синглетного кисню $b^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^3\Sigma_u^-$, встановлено, що перехід $a^1\Delta_g \rightarrow c^1\Sigma_u^-$ є порівняно інтенсивним, що було підтверджено дослідниками з NASA (США).

Поглинання стратосферного озону в ближній УФ області рятує життя на Землі від згубних променів Сонця [19]. Мінаєвим та його учнями з ЧДТУ багато років проводилася робота за держбюджетною тематикою по розрахунках спектрів поглинання озону і його фотокаталітичного розпаду за участю оксидів галогенів [19, 20]. У цих роботах вперше розглянуто роль спін-орбітальної взаємодії і спін-ефектів в процесі розпаду озону. Показано, що слабке поглинання озону в області 1000 нм (смуга Вульфа) є триплет-синглетним переходом [19]. Верхній Т збуджений стан цієї системи смуг є метастабільним: його енергія лежить трохи вище дисоціативної межі, проте відділена від нього незначним потенціальним бар’єром. Оскільки такі стани можуть утворюватися при рекомбінації атомів і молекул кисню в нижній стратосфері, де тиск сторонніх газів ще досить великий, то для утворення озону з метастабільних Т станів не потрібно потрійних зіткнень. Ця обставина надзвичайно важлива для фотохімії озонового шару і парникового

ефекту. Б. П. Мінаєвим передбачені також ефекти спін-орбітальної взаємодії при фоторозпаді хлоратної(I) HClO і броматної(I) HBrO кислот [20], які відіграють важливу роль у фотохімічному циклі розпаду озону. Дослідження спін-селективності процесів фотолізу цих кислот і самого озону дозволяє робити висновки про можливий вплив зовнішніх магнітних полів на озоновий шар.

В останні роки [21–23] Б. П. Мінаєв приділяє багато уваги застосуванню квантової хімії у нанотехнологіях. Тепер можна збирати нанокластери «вручну», що дозволяє вбудовувати їх в напівпровідникові структури, використовувати їх як елементи пам'яті, молекулярні провідники тощо. Фулерени і нанотрубки володіють унікальними властивостями, які можна використовувати в електроніці, в квантових комп'ютерах, в діагностиці ДНК, в генній інженерії і в медицині. При цьому важливу роль відіграють методи квантової хімії, що дозволяють передбачати і розуміти процеси, що протікають на атомному і електронному рівнях. Тут квантова теорія безпосередньо перетинається з технологією. Конструювання і синтез нових органічних полімерів з високою провідністю і надпровідністю можуть плануватися на основі квантово-хімічних розрахунків [22–27]. Нові напівпровідникові діоди, що випромінюють світло, створені на основі політіофену та інших спряжених полімерів, містять домішки комплексів іридію і рутенію. Розрахунками їх електронної структури займаються багато лабораторій США, Японії та інших країн. Б. П. Мінаєвим вперше враховані ефекти впливу СОВ на провідність таких полімерів і молекулярних провідників [23]. На цій основі передбачено вплив зовнішнього магнітного поля і СВЧ полів на провідність полімерних плівок [23]. Можливість феромагнітного вибудовування спінів в молекулярних системах, складених з бірадикалів і монорадикалів, вже

давно цікавить фізиків і хіміків [1]. Розрахунки, проведені на кафедрі хімії та наноматеріалознавства ЧНУ [28–30], враховують не тільки обмінні взаємодії, але і СОВ: розрахунок розщеплення в нульовому полі і спін-селективності реакцій синтезу магнітних полімерів може виявитися дуже істотним для отримання таких матеріалів. Мова йде про нову галузь наноматеріалознавства – спінтроніку. Ці дослідження тісно пов'язані з проблемою спін-каталізу, якою Б. П. Мінаєв займається багато років [1, 3, 16, 17, 24–40].

Відомо, що близько 90% всіх процесів в хімічній промисловості і майже всі біохімічні реакції є каталітичними. За рахунок високої активності і хімічної специфічності ферменти значно перевершують промислові каталізатори. Як уже зазначалося, спін-ефекти відіграють центральну роль в роботі ряду ферментів, таких як оксидази на основі ФАД. Не дивно, що загальна теорія каталізу повинна їх враховувати. Отримання амоніаку, сульфатної та нітратної кислот, крекінг нафти і синтез полімерів – все це багатотонні виробництва, що залежать від активності каталізаторів [25, 36]. Б. П. Мінаєвим запропоновані моделі каталізу, в яких основну увагу приділено спін-залежним електронним механізмам активації. Наприклад, активація метану кластерами платини і паладію зводиться до примішування триплет-збудженого стану метану до триплетних станів металів [25–27]. Такий двохтриплетний стан [28–30] має повний спін, рівний нулю, як і вихідні реагенти, однак триплетний метан спонтанно дисоціює на радикали $CH_3 + H$, а в основному синглетному стані його розпад вимагає великої енергії активації [24]. Каталізатор дозволяє «підключити» триплетний стан метану до процесу розриву С–Н зв'язку. При цьому виявлена важлива характеристика каталізатора – положення його триплетного рівня [24]. Раніше цей

параметр каталізатора не розглядався. Розпарювання спінів на активованому хімічному зв'язку може відбуватися під дією каталізатора без зміни спіна всієї системи (обмінний механізм) або за рахунок спін-орбітальної взаємодії з переворотом спіна. Ідеї спін-каталізу застосовані до адсорбції ацетилену, етилену і бензену на поверхні ряду металів [25–27]. Показано, що адсорбовані молекули мають форму, яка практично співпадає зі структурою триплет-збуджених молекул, при цьому кластер, що моделює поверхню металу, також має неспарені спіни.

Координація алканів з металокомплексами є початковою стадією багатьох важливих каталітичних процесів. Органометалічні комплекси родію та іридію активують метан, а аналогічні ізовалентні комплекси кобальту – ні. Пояснення цього парадоксу знайдено в теорії спін-каталізу [27]. Комплекс кобальту має триплетний основний стан і не може здійснювати T-S переходи через слабкі СОВ: його каталітична активність в активації метану блокована по спіну. За час роботи в Черкасах Б. П. Мінаєв показав, що ефекти спін-орбітальної взаємодії відіграють важливу роль у багатьох фізичних, хімічних і біологічних процесах [25–40]. Вони важливі в каталізі, молекулярній електроніці, хімії атмосфери, фізиці горіння, біології, диханні клітин.

У 1993 році на семінарі відділу молекулярної електроніки у місті Лінчепінг (Швеція) Б. П. Мінаєв вперше акцентував увагу на тому, що в органічних світловипромінюючих діодах (ОЛЕДах) важливі ефекти спін-орбітальної взаємодії, тому що синглет-триплетні переходи в три рази підвищують ефективність рекомбінації електронів і дірок при електролюмінесценції ОЛЕДів. У 1999 році в США ця ідея була втілена у життя при використанні комплексів важких іонів іридію. Мінаєв першим тоді застосував теорію функціоналу густини для розрахунку спін-орбітальної взаємодії в комплексі Ir(III) з

фенілпіридильними лігандами для пояснення роботи фосфоресцентних ОЛЕДів.

В подальшому роботи, присвячені дослідженням комплексів Ir(III) для ОЛЕДів, заклали основу для нових напрямків у розвитку молекулярної електроніки, що було закріплено у співробітництві з кафедрою електронних приладів Національного університету «Львівська Політехніка». Цикл робіт по ОЛЕДам узагальнений в огляді, опублікованому в журналі Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP) в 2014 р., який за даними агенції Scopus процитований понад 170 разів.

PCCP

PERSPECTIVE

View Article Online
View Journal | View Issue

Principles of phosphorescent organic light emitting devices

Cite this: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2014, 16, 1719

Boris Minaev,*[ab] Gleb Baryshnikov[b] and Hans Agren[a]

Organic light-emitting device (OLED) technology has found numerous applications in the development of solid state lighting, flat panel displays and flexible screens. These applications are already commercialized in mobile phones and TV sets. White OLEDs are of especial importance for lighting; they now use multilayer combinations of organic and elementoorganic dyes which emit various colors in the red, green and blue parts of the visible spectrum. At the same time the stability of phosphorescent blue emitters is still a major challenge for OLED applications. In this review we highlight the basic principles and the main mechanisms behind phosphorescent light emission of various classes of photofunctional OLED materials, like organic polymers and oligomers, electron and hole transport molecules, elementoorganic complexes with heavy metal central ions, and clarify connections between the main features of electronic structure and the photo-physical properties of the phosphorescent OLED materials.

Received 6th September 2013,
Accepted 15th October 2013

DOI: 10.1039/c3cp53806k

www.rsc.org/pccp

Boris Minaev

Boris Minaev was born in Yekateriburg, Russia in 1943. He graduated from Tomsk State University with a PhD in physics on EPR and phosphorescence lifetime calculations. In 1974 he became assistant professor at Karaganda State University, Kazakhstan and chief of physical chemistry in 1976. Since 2007 he has been chief of the Organic Chemistry Department and director of Scientific Institute of Physics and Chemistry of Functional Materials at Bogdan Khmelnitsky National University in Cherkassy. He has delivered lectures as a guest professor at the Royal Institute of Technology. Prof. Minaev is a specialist in the field of spin chemistry and phosphorescence theory.

Gleb Baryshnikov

Gleb Baryshnikov was born 1989 in the town of Kramatorsk in the eastern Ukraine. He graduated 2011 in Ukraine and then continued his study in the graduate school under the supervision of Prof. B. Minaev. Gleb Baryshnikov is the winner of the young scientist's prize of the National Academy of Sciences of Ukraine (2012) for the work in theoretical design of structure and spectral properties of sensitizing dyes for DSSCs. Gleb Baryshnikov is an author of 30 publications in international journals. His research interests are focused on heterocirculenes photophysical properties and theoretical design of organic materials for the DSSCs.

This journal is © the Owner Societies 2014

Новий напрям у розвитку кафедри був започаткований у 2011 році і пов'язаний з дослідженнями циркуленів. Ці матеріали привернули увагу Бориса Пилиповича завдяки своїй високій симетрії і тим, що їх стали використовувати для ОЛЕДів. Великий цикл ДФТ розрахунків електронної будови, ІЧ та УФ спектрів тетраокса[8]циркуленів, їх магнітних і ароматичних властивостей був виконаний на кафедрі хімії та наноматеріалознавства ЧНУ. Це слугувало поштовхом до посилення твердотільних ДФТ розрахунків двовимірних нанополімерів на основі [8]циркуленів, а також моделюванню нових нітроген-вмістних високо-енергетичних матеріалів. Були запропоновані моделі нових алотропних модіфікацій графену. Ця стаття в журналі «Chemical Physics Letters» видавництва «Elsevier» була винесена на обкладинку журналу за вибором редактора як найбільш значущої статті у даному номері.

Chemical Physics Letters 612 (2014) 229–233

Contents lists available at ScienceDirect

Chemical Physics Letters

journal homepage: www.elsevier.com/locate/cplett

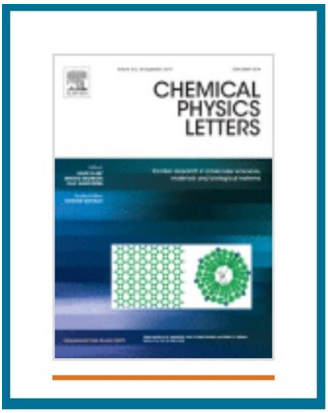
DFT characterization of a new possible graphene allotrope

Nataliya N. Karaush [a,*], Gleb V. Baryshnikov [a], Boris F. Minaev [a,b]

[a] Bohdan Khmelnytsky National University, 18031 Cherkasy, Ukraine

Abstract

In the present work we have studied the electronic and magnetic properties of the new one- and two-dimensional π-conjugated materials containing biphenylene (Bp)-monomer on the basis of DFT calculations including the periodic boundary condition for the infinite structures. Thus, we have predicted a new planar and stable graphene allotrope composed of a combination of the four-, six- and eight-membered rings of the (4, 6, 6, 8) topology, which resembles the classical graphene. These novel materials are predicted to demonstrate the promising hole/electron mobility values which are typical for the ambipolar organic semiconductors. Furthermore, the growth of π-conjugated Bp-based 2D sheets leads to the material with the band-gap being significantly smaller than that for the 1D polymer ribbons containing the same number of the Bp-units. The Bp-based nanotubes are also designed and are predicted to be promising candidates for miniaturizing electronics.



Багато уваги Борис Пилипович приділяє роботі з молоддю [41–95]. Його лекції з біохімії, екології та квантової хімії не залишають студентів байдужими. Тут поєднуються високий професіоналізм, наукова глибина і емоційне напруження. Відомості про атоми і кванти завжди розповідаються цікаво, з доповненнями з особистого досвіду досліджень і з гумором.

Б. П. Мінаєв із студентами, 2013 р.

У роботі з аспірантами Борис Пилипович дуже вимогливий і одночасно дуже щедрий: він постійно ділиться своїми знахідками, дарує ідеї і взагалі дуже допомагає в цій важкій роботі по розрахунку електронних властивостей молекул.

Під керівництвом Мінаєва Бориса Пилиповича виконано та захищено 16 дисертаційних робіт на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук та 4 дисертаційних роботи на здобуття наукових ступенів доктора хімічних наук (3) та доктора фізико-математичних наук (1).

Доктори та кандидати наук,
що вийшли із групи Б. П. Мінаєва

1	Іргібаєва І. С. к.ф.-м.н., д.х.н.	Професор Євразійського національного університету імені Л. М. Гумільова, м. Астана, Республіка Казахстан	
2	Даушеєв Ж. К. к.х.н.	Доцент Казахського хіміко-технологічного університету, м. Чимкент, Республіка Казахстан	
3	Мухін Р. Р. к.х.н., д.ф.-м.н.	Професор Старооскольського технологічного інституту НІТУ МІСіС, м. Старий Оскол, Російська Федерація	
4	Букетова А. Є. к.х.н., д.т.н.	Доцент кафедри хімічної інженерії Казахстансько-Британського технічного університету, м. Алмати, Республіка Казахстан	

5	Іванова Н. М. к.х.н., д.х.н.	Завідувач лабораторією електрокаталізу Інституту органічного синтезу і вуглехімії, м. Караганда, Республіка Казахстан	
6	Кукуєва В. В. к.х.н.	Докторант державної установи «Інституту геохімії навколишнього середовища» АН України, м. Київ, Україна	
7	Хоменко О. М. к.х.н.	Професор, завідувач кафедри екології Черкаського державного технологічного університету, м. Черкаси, Україна	
8	Кобзєв Г. І. к.х.н., д.х.н.	Професор кафедри хімії Оренбурзького державного університету, Російська Федерація	
9	Лобода О. А. доктор філософії	Співробітник Інституту хімії Грацького університету імені Карла Франца, м. Грац, Австрійська Республіка	
10	Шевченко О. П. к.х.н.	Доцент кафедри хімії та наноматеріалознавства ЧНУ імені Б. Хмельницького, м. Черкаси, Україна	
11	Ящук Л. Б. к.х.н.	Доцент кафедри екології Черкаського державного технологічного університету, м. Черкаси, Україна	

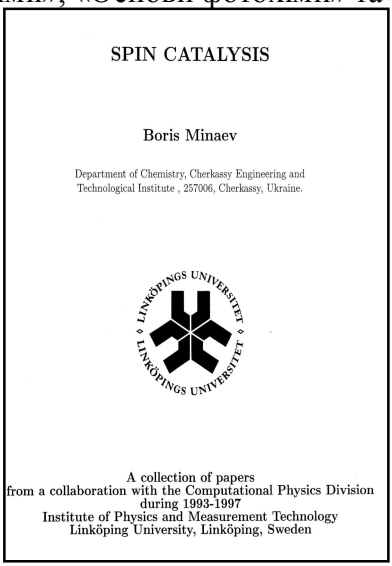
12	Сатья Перумаль доктор філософії	Інститут Наук Індії, Відділ структурної хімії, м. Бангалор, Республіка Індія	
13	Литвин В. А. к.х.н.	Доцент кафедри хімії та наноматеріалознавства ЧНУ імені Б. Хмельницького, м. Черкаси, Україна	
14	Філоненко С. М. к.х.н.	Науковий співробітник відділу пористих матеріалів і сорбентів Інституту фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського НАНУ, м. Київ, Україна	
15	Баришніков Г. В. к.х.н.	Доцент кафедри хімії та наноматеріалознавства ЧНУ імені Б. Хмельницького, м. Черкаси, Україна	
16	Бондарчук С. В. к.х.н.	Старший викладач кафедри якості, стандартизації та управління проектами ЧНУ імені Б. Хмельницького, м. Черкаси, Україна	
17	Карауш Н. М. к.х.н.	Науковий співробітник лабораторії квантової хімії ЧНУ імені Б. Хмельницького, м. Черкаси, Україна	

Всі ці роки поруч з Борисом Пилиповичем працює його дружина – вірний супутник в науці і житті, кандидат хімічних наук, доцент Валентина Олександрівна Мінаєва. Кількість їх спільних наукових робіт становить понад сто. Ці роботи присвячені розшифровці ІЧ та УФ- спектрів органічних і елементоорганічних барвників, стероїдних гормонів, гемоглобіну та інших сполук.

Б. П. Мінаєв з дружиною на стажуванні у відділі теоретичної хімії і біології Королівського технологічного університету (м. Стокгольм, Швеція, 2002 р.)

Наукові здобутки Б. П. Мінаєва

Науковий доробок Б. П. Мінаєва складає понад 600 статей у фахових світових журналах у сфері квантової хімії та 6 монографій. Три з них – у видавництві «Наука»: «Теория электронного строения молекул» (1988), «Квантовая электрохимия алкалоидов» (1986), «Оптические и магнитные свойства триплетного состояния» (1983). Підручник «Органічна електроніка» (2014) був виданий у Національному університеті «Львівська Політехніка», монографія «Електронна будова та спектральні властивості гетероциркуленів» (2017) – у видавництві ЧНУ. Два великих розділи опубліковані у монографіях «Organic Light Emitting Diode – Material, Process and Devices» (2011) та «Handbook of Computational Chemistry» (2017). Університет м. Лінчепінгу (Швеція) опублікував об'ємну роботу «Spin Catalysis» за 5 років роботи Б. Мінаєва. Розроблено навчальні курси «Квантова хімія», «Спектральні методи дослідження», «Фізика та хімія наноматеріалів», «Теоретичні основи органічної хімії», «Основи фотохімії» та ін.

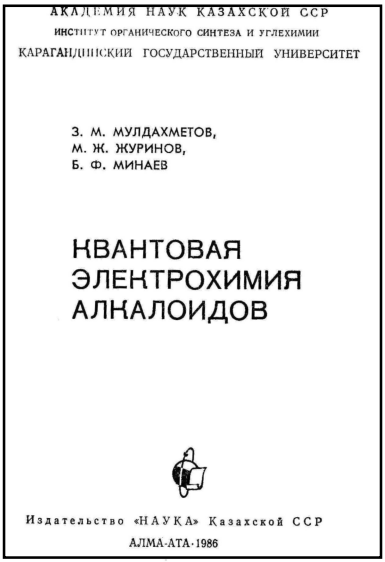

SPIN CATALYSIS

Boris Minaev

Department of Chemistry, Cherkassy Engineering and Technological Institute , 257006, Cherkassy, Ukraine.

LINKÖPINGS UNIVERSITET

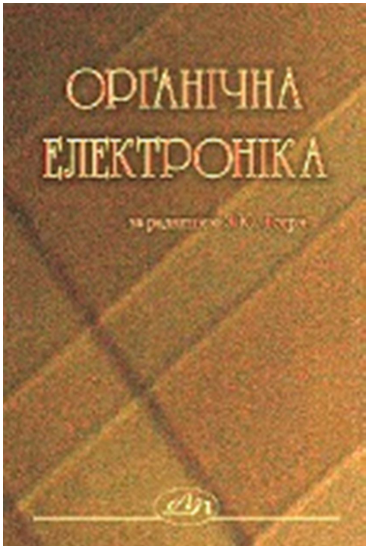
A collection of papers
from a collaboration with the Computational Physics Division
during 1993-1997
Institute of Physics and Measurement Technology
Linköping University, Linköping, Sweden

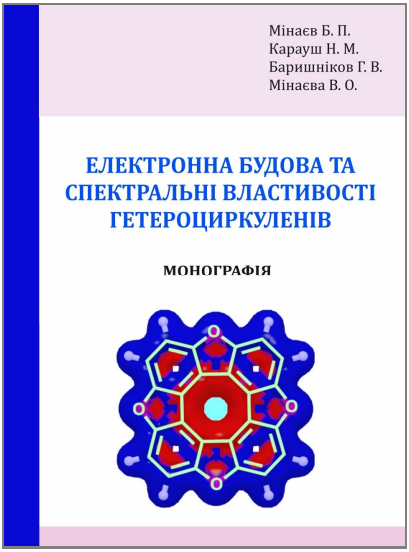

АКАДЕМИЯ НАУК КАЗАХСКОЙ ССР
ИНСТИТУТ ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА И УГЛЕХИМИИ
КАРАГАНДИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

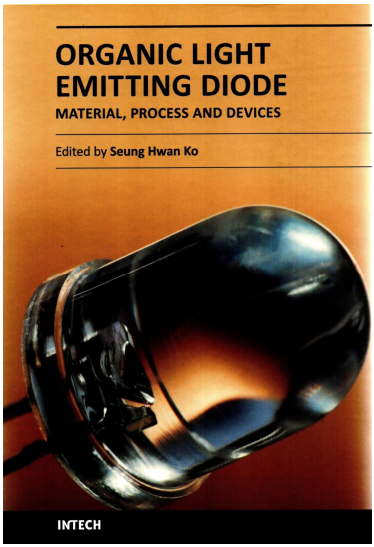
З. М. МУЛДАХМЕТОВ,
М. Ж. ЖУРИНОВ,
Б. Ф. МИНАЕВ

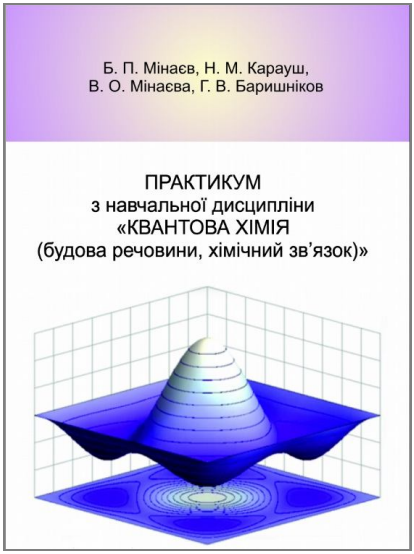
КВАНТОВАЯ
ЭЛЕКТРОХИМИЯ
АЛКАЛОИДОВ

Издательство «НАУКА» Казахской ССР
АЛМА-АТА·1986









Б. П. Мінаєв був керівником наукового гранту INTAS (1993–1996), спільного українсько-американського гранту CRDF (UKC1-2819-CK-06) «Теоретичне дослідження

нових смуг в молекулі кисню і процесів, індукованих зіткненням в нічному світінні атмосфери» (2006–2008), керівником спільного українсько-румунського гранту «Design of novel sensitizing dyes for nanocrystalline TiO_2 solar cells on the basis of their electronic structure calculations» (2008–2009), шведсько-українського гранту Visby «Theoretical design of solar cell dyes» (2008–2011), отримав звання «Соросівський професор» (1997), грант Академії Наук КНР в рамках міжнародної ініціативи президента АН Китаю для запрошених вчених (Інститут Хімії Китайської АН, Пекін, 2015). Нині керує держбюджетними темами.

Борис Пилипович є лауреатом світової премії «World Lifetime Achievement Award ABI-USA-1999», нагороджений медаллю «25 років Центрально-Казахстанському відділенню національної академії наук Республіки Казахстан» за заслуги у розвитку хімічної науки республіки (2010), почесним званням «Заслужений діяч науки і техніки України» (2011), премією «Scopus Award Ukraine» (2016), грамотою та медаллю Кабінету Міністрів України (2017).

Вручення премії «Scopus Award Ukraine» британським представником «Ельзевіру», 2016 р.

18 червня 2016 року Б. П. Мінаєв обраний академіком Академії наук Вищої школи України.

ДИПЛОМ

АКАДЕМІКА АКАДЕМІЇ НАУК ВИЩОЇ ШКОЛИ УКРАЇНИ

№ 279

м. Київ

АКАДЕМІЯ НАУК ВИЩОЇ ШКОЛИ УКРАЇНИ

на підставі свого Статуту обрала

Мінаєва Бориса Пилиповича

академіком

по відділенню хімії

обрання затверджене загальними зборами

16 06 2016 р.

Президент АН ВШ України О.Г. Наконечний

Головний вчений секретар І.В. Бейко

27 позицію). За даними інформаційно-пошукової системи Scopus має індекс Гірша h рівний 35.

Мінаєв Б. П. постійно запрошується для усних доповідей на закордонних міжнародних конференціях (Швеція, Японія, Фінляндія, США, Іспанія, Китай, Польща та ін.).

Мінаєв Б. П. (в центрі) на конференції в м. Чимкент. Зліва – д.ф.-м.н., професор Соколов М. Д. (ІХФ, Москва), справа – д.х.н., ректор КазХТІ Мулдахметов З. М., 1976 р.

У 1999 році Мінаєв Б. П. організував та провів міжнародну конференцію в м. Торунь (Польща) в рамках програми REHE Євросоюзу, а також організовував міжнародні конференції в м. Черкаси (2010 р.), м. Лінчепінг (1997 р.) та м. Стокгольм (2003 р.).

Мінаєв Б. П. (в центрі) на конференції «Релятивістські ефекти в хімії», м.Торунь, 1999 р.

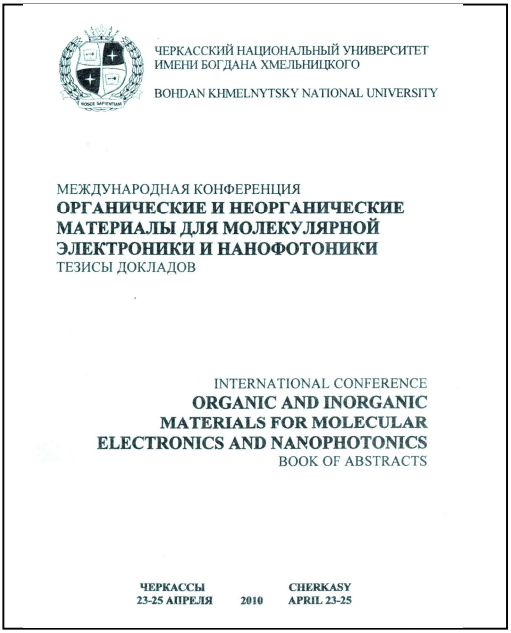
Б. П. Мінаєв з професором Ульріхом Штайнером (ФРН) на конференції «Spin chemistry and magnetic spin effects», Швейцарія, Альпи, 1999 р.

Зустріч через 20 років з колишніми аспірантами (професори Іванова Н. М. та Іргібаєва І. С.) на Міжнародному конгресі квантової хімії, Гельсінкі, Фінляндія, 2009 р.

8th European Conference on Computational Chemistry

25-28 August 2010, Lund, Sweden

Satellite meeting to 3rd EuCheMS Chemistry Congress in Nürnberg



ЧЕРКАССКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ БОГДАНА ХМЕЛЬНИЦКОГО

BOHDAN KHMELNYTSKY NATIONAL UNIVERSITY

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

ОРГАНИЧЕСКИЕ И НЕОРГАНИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ И НАНОФОТОНИКИ

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL CONFERENCE

ORGANIC AND INORGANIC MATERIALS FOR MOLECULAR ELECTRONICS AND NANOPHOTONICS

BOOK OF ABSTRACTS

ЧЕРКАССЫ 23-25 АПРЕЛЯ 2010 CHERKASY APRIL 23-25

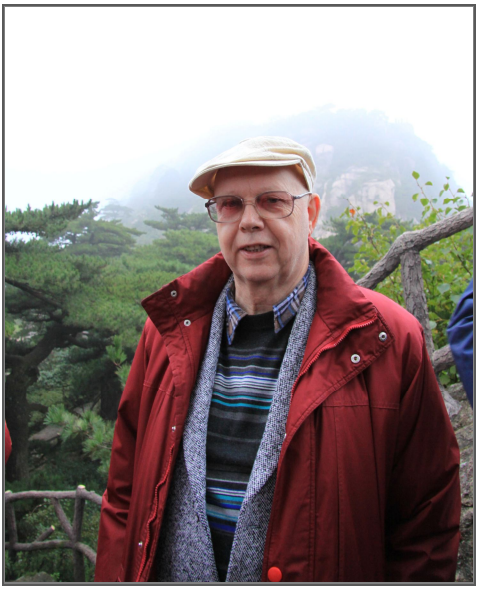
Черкаси, 2010 р.

На конференції «Correspondence Between Concepts in Chemistry and Quantum Chemistry», Валадален, Швеція, 2010 р. Зліва направо: професори Ханс-Георг Йенсен (Данія), Пер Зігбан (Швеція), Борис Мінаєв (Україна), Фахми Хімо (Швеція), Ханс Огрен (Швеція), Веньян Ліу (Китай)

中国-北欧分子生物及纳米科学会议（合肥，2010）
Nordic-China Symposium on Molecular Bio- and Nanoscience
Hefei, China, Sep. 20-25, 2010

Професор Мінаєв Б. П.
з пленарною доповіддю
“Relativistic Effects in Biochemistry”

“Nordic-China Simposium on molecular Bio- and Nanoscience Sep. 20-25, 2010, Hefei, China”



На екскурсії під час конференції «Relativistic Effects in Heavy Elements», м. Пекін (Китай) 25–29 вересня 2010 р.

На конференції «European Advanced Materials Congress», 22–24 серпня 2015 р., Стокгольм, Швеція

Повідомлення про виступ на семінарі Інституту Хімії Академії Наук Китаю з доповіддю «Фото- і біоактивація кисню», Пекін, 2015 р.

SSL 分子动态与稳态结构国家重点实验室
State Key Laboratory for Structural Chemistry of Unstable and Stable Species

学术报告

Photo- and bio-activation of dioxygen

报告人：Professor Boris F. Minaev

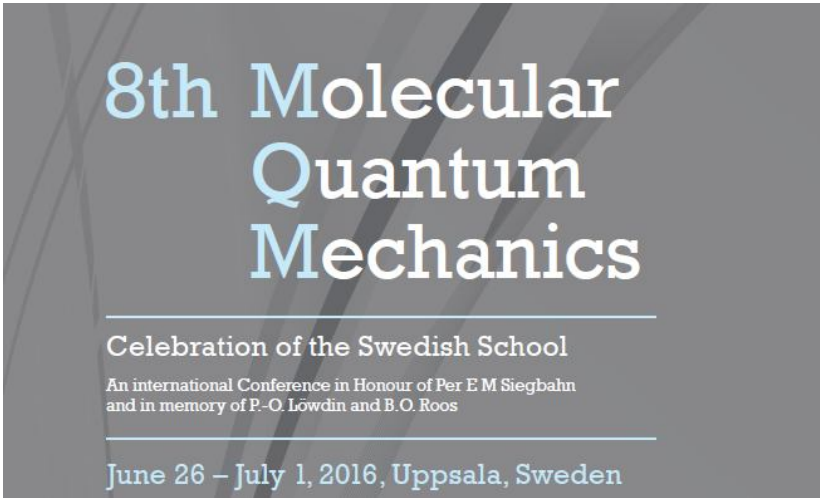
Head of Organic Chemistry Department, National University in Cherkasy, Ukraine; Professor emeritus, Division of Theoretical Chemistry& Biology, Royal Institute of Technology, Sweden

报告地点：3号楼101会议室

报告时间：2015年11月5日（星期四）下午14:00

Research interests: Quantum chemistry, spin-orbit coupling effects in molecular spectra and in chemical reactivity; Phosphorescence spectra of molecules including the zero field splitting properties; New mechanisms of CIDEP and magnetic field effects on photophysical and photochemical properties of triplet molecules; Optical and chemical properties of molecular oxygen.

Vita: 1967, BS and MS in Physics, Tomsk State University; 1974, PhD in Physics and Mathematics, Tomsk State University; 1984, Dr. Sci. Degree by the USSR Attestation Committee.
1974, Assistant professor, Theoretical Physics Department in Karaganda State University (KarSU); 1976-1984, Head of Physical Chemistry Department at Chemical Faculty of KarSU; 1984-1989, Head of Quantum Chemistry Department at Chemical Faculty of KarSU; 1989-2007, Head of the General Chemistry Department at Cherkasy State University of Technology, Cherkasy, Ukraine; 2007-present: Head of Organic Chemistry Department at Cherkasy State University by B. Khmelnitskij, Cherkasy, Ukraine.
Visiting professorship: Linkoping University, Sweden; Royal Institute of Technology, Sweden; ICCAS.



Участь у конференції «European Advanced Materials Congress» з пленарною доповіддю «Tetraoxa[8]circulenes and heterocirculenes expedient synthesis for OLED: Excited state engineering of these conjugated organic materials by the oxygen and chain-group substitution», 22–24 серпня 2017 р., Стокгольм, Швеція

Список вибраних робіт Б. П. Мінаєва

1. Минаев Б. Ф. Спин-орбитальное взаимодействие в комплексах с переносом заряда / Б. Ф. Минаев, А. Ф. Терпугова // Изв. вузов. Физика. – 1969. – № 10. – С. 30–36.
2. Минаев Б. Ф. Расчет молекулы бензола по методу ППДП КВ с учетом спин-орбитального взаимодействия // Изв. вузов. Физика. – 1971. – № 8. – С. 118–122.
3. Минаев Б. Ф. Расчет спектров ненасыщенных углеводородов по методу ППДП КВ с учетом спин-орбитального взаимодействия // Изв. вузов. Физика. – 1971. – № 5. – С. 93–100.
4. Минаев Б. Ф. Спин-орбитальное взаимодействие в дублетных состояниях молекул // Оптика и спектроскопия. – 1972. – Т. 32, № 1. – С. 22–27.
5. Ryzhova G. L. Experimental and theoretical study of donor-acceptor complexes of trinitrobenzene with alkoxy ions / G. L. Ryzhova, A. F. Terpugova, B. F. Minaev // Труды Томского университета. – Томск, 1973. – № 240. – С. 3–11.
6. Минаев Б. Ф. Расчет анизотропии g-фактора по методу полного пренебрежения дифференциальным перекрыванием с учетом спин-орбитального взаимодействия // Оптика и спектроскопия. – 1974. – Т. 36, № 2. – С. 275–279.
7. Baryshnikov G. Theory and calculation of the phosphorescence phenomenon / G. Baryshnikov, B. Minaev, H. Ågren // Chem. Rev. – 2017. – Vol. 117, N 9. – P. 6500–6537.
8. Минаев Б. Ф. Влияние спин-орбитального взаимодействия на интенсивность магнитных дипольных переходов в молекуле кислорода // Изв. вузов. Физика. – 1978. – Т. 21, № 9. – С. 115–121.

9. Минаев Б. Ф. Интенсивность синглет-триплетных переходов в молекуле кислорода и избирательный эффект внешнего тяжелого атома // Оптика и спектроскопия. – 1978. – Т. 45, № 6. – С. 1202–1207.

10. Minaev B. F. Intensities of spin-forbidden transitions in molecular oxygen and selective heavy-atom effects // Int. J. Quantum Chem. – 1980. – Vol. 17, N 2. – P. 367–374.

11. Minaev B. F. Spin effects in reductive activation of O_2 by oxidase enzymes // RIKEN Rev. – 2002. – Vol. 44. – P. 147–149.

12. Мулдахметов З. М. Оптические и магнитные свойства триплетного состояния / З. М. Мулдахметов, Б. Ф. Минаев, Г. А. Кецле. – Алма-Ата : Наука. – 1983. – 322 с.

13. Prabhakar R. A theoretical study of the dioxygen activation by glucose oxidase and by copper amine oxidase / R. Prabhakar, P. Siegbahn, B. Minaev // Biochim. Biophys. Acta. – 2003. – Vol. 1647, N 1–2. – P. 173–178.

14. Минаев Б. Ф. Квантово-химическое исследование механизма реакции зарождения цепей при горении водорода // Хим. физика. – 1984. – Т. 3, № 7. – С. 983–987.

15. Minaev B. F. Spin-catalysis phenomena / B. F. Minaev, H. Agren // Int. J. Quantum Chem. – 1995. – Vol. 57, N 3. – P. 519–525.

16. Kalhori S. Quantum chemical model of an SN2 reaction in microwave field / S. Kalhori, B. Minaev, S. Stone-Elander, N. Elander // J. Phys. Chem. A. – Vol. 106, N 37. – 2002. – P. 8516–8524.

17. Minaev B. F. Collision influence of the $b^1\Sigma_g^+$ – $a^1\Delta_g$ transition in molecular oxygen: model calculations for the collision complex O_2 + H_2 / B. F. Minaev, S. Lunell,

G. I. Kobzev // Int. J. Quantum Chem. 1994. – Vol. 50, N 4. – P. 279–292.

18. Minaev B. F. Theory of solvent effect on radiation probability of $a^1\Delta_g$ – $X^3\sum_g^-$ transition in the oxygen molecule // Opt. Spektrosk, – 1985. – Vol. 58. – P. 761–764.

19. The interpretation of the Wulf absorption-band of ozone / B. F. Minaev, H. Agren // Chem. Phys. Letters. – 1994. – Vol. 217, N 5–6. – P. 531–538.

20. Minaev B. F. The singlet-triplet absorption and photodissociation of the HOCl, HOBr and HOI molecules calculated by MCSCF quadratic response method // J. Phys. Chem. A. – 1999. – Vol. 103, N 36. – P. 7294–7309.

21. Minaeva V. A. Experimental and theoretical study of IR and Raman spectra of tetraoxa[8]circulenes / V. A. Minaeva, B. F. Minaev, G. V. Baryshnikov, H. Agren, M. Pittelkow // Vib. Spectrosc. – 2012. – Vol. 61. – P. 156– 166.

22. Minaev B. F. Density functional theory study of electronic structure and spectra of tetraoxa[8]circulenes / B. F. Minaev, G. V. Baryshnikov, V. A. Minaeva // Comp. Theor. Chem. – 2011. – Vol. 92, N 1–3. – P. 68–74.

23. Minaev B. Organometallic materials for electroluminescent and photovoltaic devices / B. Minaev, X. Li, Z. Ning, H. Tian, H. Agren // Organic light emitting diode – material, process and devices: Published by InTech, Croatia. – 2012 – P. 61–100.

24. Minaev B. On the interpretation of the external heavy-atom effect on singlet-triplet transitions / B. Minaev, S. Knuts, H. Agren // Chem. Phys. – 1994. – Vol. 181, N 1–2. – P. 15–28.

25. Minaev B. F. Spin uncoupling in molecular hydrogen activation by platinum clusters / B. F. Minaev, H. Agren //

J. Mol. Catal. A. : Chemical. – 1999. – Vol. 149, N 1–2. – P. 179–195.

26. Triguero L. Spin uncoupling in surface chemisorption of unsaturated hydrocarbons / L. Triguero, L. Pettersson, B. F. Minaev, H. Agren // J. Chem. Phys. – 1998. – Vol. 108, N 3. – P. 1193–1205.

27. Minaev B. F. Spin effects in activation of hydrocarbons. The role of triplet states in catalysis // J. Mol. Catal. A. – 2001. – Vol. 171, N 1–2. – P. 53–72.

28. Minaev B. F. Photochemical Water Decomposition in the Troposphere: DFT Study with a Symmetrized Kohn–Sham Formalism / B. F. Minaev, I. I. Zakharov, O. I. Zakharova, A. B. Tselishtev, A. V. Filonchook, A. V. Shevchenko // ChemPhysChem. – 2010. – Vol. 11, N 18. – P. 4028–4034.

29. Bondarchuk S. V. About possibility of the triplet mechanism of the Meerwein reaction / S. V. Bondarchuk, B. F. Minaev // J. Mol. Struct. : THEOCHEM. – 2010. – Vol. 912. – P. 1–7.

30. Bondarchuk S. V. Density functional study of ortho-substituted phenyl cations in polar medium and in the gas phase / S. V. Bondarchuk, B. F. Minaev // Chem. Phys. – 2011. – Vol. 389, N. 1–3. – P. 68–74.

31. Agren H. Response theory studies of triplet-state spectra and radiative lifetimes of naphthalene, quinoxaline, and phthalazine / H. Agren, B. Minaev, S. Knuts // J. Phys. Chem. – 1994. – Vol. 98, N 15. – P. 3943–3949.

32. Luo Y. The hyperpolarizability of molecular oxygen / Y. Luo, H. Ågren, B. F. Minaev, P. Jorgensen. // J. Mol. Struct. : THEOCHEM. – 1995. – Vol. 336, N 1. – P. 61–67.

33. Minaev B. Responce theory calculations of singlet-triplet transitions in molecular nitrogen / B. Minaev, P. Norman, D. Jonsson et. al. // Chem. Phys. – 1995. – Vol. 190, N 1. – P. 11–29.

34. Minaev B. F. Spin-catalysis of ortho-para hydrogen conversion / B. F. Minaev, H. Agren // J. Phys. Chem. – 1995. – Vol. 99, N 21. – P. 8936–8940.
35. Minaev B. F. Character and spectra of triplet states in short polyens / B. F. Minaev, D. Jonsson, P. Norman, H. Agren // Chem. Phys. – 1995. – Vol. 194, N 1 – P. 19–31.
36. Zakharov I. I. DFT-based thermodynamics of Fenton reactions rejects the 'pure' aquacomplex models / I. I. Zakharov, K. Yu. Kudjukov, V. V. Bondar, N. F. Tyupalo, B. F. Minaev // Comput. Theor. Chem. – 2011. – Vol. 964. – P. 94–99.
37. Minaev B. The vibronically induced phosporescence in benzene / B. Minaev, S. Knuts, H. Agren, O. Vahtras // Chem. Phys. – 1993. – Vol. 175, N 2–3. – P. 245–254.
38. Luo Y. Response theory calculations of the vibronically induced $^1A_{1g}$–$^1B_{2u}$ two-photon spectrum of benzene / Y. Luo, H. Agren, S. Knuts, B. Minaev // Chem. Phys. Lett. – 1993. – Vol. 209, N 6. – P. 513–518.
39. Minaev B. F. Configuration interaction study of the O_2–C_2H_4 exciplex: collision-induced probabilities of spin-forbidden radiative and nonradiative transitions / B. F. Minaev, V. V. Kukueva, H. Agren // J. Chem. Soc., Faraday Trans. – 1994. – Vol. 90, N 11. – P. 1479–1486.
40. Minaev B. F. Classification of spin-orbit coupling effects in organic chemical reactions / B. F. Minaev, S. Lunell // Z. Phys. Chem. – 1993. – Vol. 182. – P. 263–284.
41. Litvin V. A. Kinetic and mechanism formation of silver nanoparticles coate by synthetic humic substances / V. A. Litvin, R. L. Galagan, B. F. Minaev // Colloids Surf., A. – 2012. – Vol. 414, N 2. – P. 234–243.
42. Perumal S. Spin-spin and spin-orbit interactions in nanographene fragments: A quantum chemistry approach /

S. Perumal, B. Minaev, and H. Ågren // J. Chem. Phys. – 2012. – Vol. 136, N 10. – P. 104702– 104718.

43. Litvin V. A. Spectroscopy study of silver nanoparticles fabrication using synthetic humic substances and their antimicrobial activity / V. A. Litvin, B. F. Minaev // Spectrochim. Acta, Part A. – 2013. – Vol. 108. – P. 115–122.

44. Baryshnikov G. V. Design of nanoscaled materials based on tetraoxa[8]circulene / Gleb V. Baryshnikov, Boris F. Minaev, Nataliya N. Karaush, Valentina A. Minaeva // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2014. – Vol. 16. – P. 6555–6559.

45. Karaush N. N. A Comparative Study of the Electronic Structure and Spectra of Tetraoxa[8]circulene and Octathio[8]circulene / N. N. Karaush, B. F. Minaev, G. V. Baryshnikov, and V. A. Minaeva // Opt. Spektrosk., 2014. – Vol. 116, No. 1. – P. 33–46.

46. Karaush N. N. DFT simulation of the heteroannelated octatetraenes vibronic spectra with the Franck–Condon and Herzberg–Teller approaches including Duschinsky effect / N. N. Karaush, R. R. Valiev, G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev, H. Ågren // Chem. Phys. – 2015. – Vol. 459. – P. 65–71.

47. Karaush N. N. Alkali and alkaline-earth metal complexes with tetraoxa[8]circulene sheet: A computational study by DFT and QTAIM methods / N. N. Karaush, G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev // RSC Adv. – 2015. – Vol. 5, N 31. – P. 24299–24305

48. Litvin V. A. Synthesis and properties of synthetic fulvic acid derived from hematoxylin / V. A. Litvin, B. F. Minaev, G. V. Baryshnikov // J. Mol. Struct. – 2015. – Vol. 1086. – P. 25–33.

49. Baryshnikov G. V. Aromaticity of the doubly charged [8]circulenes / G. V. Baryshnikov, R. R. Valiev,

N. N. Karaush, D. Sundholme, B. F. Minaev // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2016. – Vol. 18, N 13. – P. 8980–8992.

50. Барышникова А. Т. Квантовохимическое исследование строения и магнитных свойств моно- и биядерного комплексов Cu(II) с 1,3-бис(3-(пиримидин-2-ил)-1H-1,2,4-триазол-5-ил)пропаном / А. Т. Барышникова, Б. Ф. Минаев, Г. В. Барышников, В.-Х. Сунн // Журн. неорг. химии. – 2016. – Т. 61, № 5. – С. 616–622.

51. Karaush N. N. Computational study of the structure, UV-vis absorption spectra and conductivity of biphenylene-based polymers and their boron nitride analogues / N. N. Karaush, S. V Bondarchuk, G. Baryshnikov, V. Minaeva, W.-H. Sun, B. Minaev // RSC. Adv. – 2016. – Vol. 6, N 55. – P. 49505–49516.

52. Барышников Г. В. Анализ электронных, ИК и ^{1}H ЯМР спектров сопряженных олигомеров на основе 4,4′-трифениламинвинилена / Г. В. Барышников, В. А. Минаева, Б. Ф. Минаев, В.-Х. Сунн, М. Григорас // Оптика и спектроскопия – 2016. – Т. 121, № 3. – С. 377–386.

53. Baryshnikov G. V. Benzoannelated aza-, oxa- and azaoxa[8]circulenes as promising blue organic emitters / G. V. Baryshnikov, R. R. Valiev, N. N. Karaush, V. A. Minaeva, A. N. Sinelnikov, S. K. Pedersen, M. Pittelkow, B. F. Minaev, H. Ågren // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2016. – Vol. 18, N 40. – P. 28040–28051.

54. Baryshnikov G. V. Solvatochromic effect in absorption and emission spectra of star-shaped bipolar derivatives of 1,3,5-triazine and carbazole. A time-dependent density functional study / G. V. Baryshnikov, S. V. Bondarchuk, V. A. Minaeva, H. Ågren, B. F. Minaev // J. Mol. Model. – 2017. – Vol. 23, N 2. – P. 55.

55. Bondarchuk S. V. Super high-energy density single-bonded trigonal nitrogen allotrope – a chemical twin of the cubic gauche form of nitrogen / S. V. Bondarchuk, B. F. Minaev // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2017. – Vol. 19, N 9. – P. 6698–6706.

56. Karaush N. N. Recent progress in quantum chemistry of hetero[8]circulenes / N. N. Karaush, G. V. Baryshnikov, V. A. Minaeva, H. Ågren, B. F. Minaev // Mol. Phys. – 2017. – Vol. 115, N 17–18. – P. 2218–2230.

57. Минаева В. А. Сравнительное исследование структурных и спектральных свойств тетрааза- и тетраоксааннелированных тетрациркуленов / В. А. Минаева, Н. Н. Карауш, Б. Ф. Минаев, Г. В. Барышников, Ф. Чен, Т. Танака, А. Осука // Оптика и спектроскопия. – 2017. – Vol. 122, N 4. – P. 543–559.

58. Baryshnikov G. V. A computational study of aromaticity and photophysical properties of unsymmetrical azatrioxa[8]circulenes / G. V. Baryshnikov, R. R. Valiev, B. F. Minaev, H. Ågren // New J. Chem. – 2017. – Vol. 41, N 7. – P. 2717–2723.

59. Ivaniuk K. B. New WOLEDs based on π-extended azatrioxa[8]circulenes / K. B. Ivaniuk, G. V. Baryshnikov, P. Y. Stakhira, S. K. Pedersen, M. Pittelkow, A. Lazauskas, D. Volyniuk, J. V. Grazulevicius, B. F. Minaev, H. Ågren // J. Mater. Chem. C. – 2017. – Vol. 5. – P. 4123–4128.

60. Bondarchuk S. V. Two-dimensional honeycomb (A7) and zigzag sheet (ZS) type nitrogen monolayers. A first principles study of structural, electronic, spectral, and mechanical properties / S. V. Bondarchuk, B. F. Minaev // Comput. Mater. Sci. – 2017. – Vol. 133. – P. 122–129.

61. Bondarchuk S. V. DFT design of polyguanidine – a unique twodimensional material with high-energy density

/ S. V. Bondarchuk, B. F. Minaev // Mol. Phys. – 2017. – Vol. 115, N 19. – P. 2423–2430.

62. Ivaniuk K. $BaZrO_3$ perovskite nanoparticles as emissive material for organic/inorganic hybrid light-emitting diodes / K Ivaniuk, V Cherpak, P Stakhira, G. Baryshnikov, B. Minaev, Z Hotra, et al. // Dyes and Pigments. – 2017. – Vol. 145. – P. 399–403.

63. Baryshnikov G. V. 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.

64. Baryshnikov G. V. The Electronic Structure and Spectra of Triphenylamines Functionalized by Phenylethynyl Groups / G. V. Baryshnikov, V. A. Minaeva, B. F. Minaev, M. Grigoras // Opt. Spektrosk. – 2018. – Vol. 124, N 1. – P. 57–64.

65. Minaeva V. A. Calculation of the optical spectra of the copper(I) complex with triphenylphosphine, iodine, and 3-pyridine-2-yl-5-phenyl-1*H*-1,2,4-triazole by the DFT method / V. A. Minaeva, B. F. Minaev, G. V. Baryshnikov // Opt. Spektrosk. – 2017. – Vol. 122, N 2. – P. 175–183.

66. Valiev R. R. Influence of Molecular Oxygen on Ortho-Para Conversion of Water Molecules / R. R. Valiev, B. F. Minaev // Rus. Phys. J. – 2017. – Vol. 60, N 3. – P. 485–493.

67. Baryshnikov G. V. A computational study of structural and magnetic properties of bi-and trinuclear Cu(II) complexes with extremely long Cu---Cu distances / G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev, A. T. Baryshnikova, H. Ågren // Chem. Phys. – 2017. – Vol. 491. – P. 48–55

68. Baryshnikov G. V. Nine-ring Angular Fused Biscarbazoloanthracene Displaying a Solid State Based Excimer Emission Suitable for OLED Application /

G. V. Baryshnikov, P. Gawrys, K. Ivaniuk, B. Witulski, R. J. Whitby, et al. // J. Mater. Chem. C – 2016. – Vol. 4, N. 24. – P. 5795 – 5805.

69. Minaev B. F. Spin-dependent effects in ethylene polymerization with bis(imino)pyridine iron(II) complexes / B. F. Minaev, A. Baryshnikova, Wen-Hua Sun // J. Organomet. Chem. – 2016. – Vol. 811, N. 1. – P. 48 – 65.

70. Ivaniuk K. Highly Luminous Sky-Blue Organic Light-Emitting Diodes Based on the Bis[(1,2)(5,6)]-indoloanthracene Emissive Layer / K. Ivaniuk, V. Cherpak, P. Stakhira, Z. Hotra, B. Minaev, G. Baryshnikov, E. Stromylo, et al. // J. Phys. Chem. C – 2016. – Vol. 120, N.11. – P. 6206–6217.

71. Valiev R. Electroluminescence of halogen complexes with monovalent copper: OLED Devices and DFT Modeling / R. Valiev, B. F. Minaev, R. M. Gadirov, E. N. Nikonova, T. A. Solodova, S. Yu. Nikonov, M. B. Bushuev, T. N. Kopylova // Russ. Phys. J. – 2016. – Vol. 58, N. 9. – P. 1205 – 1211.

72. Minaev B. F. Computational and Experimental Investigation of the Optical Properties of the Chromene Dyes / B. F. Minaev, R. R. Valiev, E. N. Nikonova, R. M. Gadirov, T. N. Kopylova, E. N. Tel'minov // J. Phys. Chem. A – 2015. – Vol. 119, N. 10. – P. 1948 – 1956.

73. Grigoras M. Tuning optical and electronic properties of poly(4,4'-triphenylamine-vinylene)s by post-modification reactions / M. Grigoras, A. M. Catargiu, T. Ivan, L. Vacareanu, B. Minaev, E. Stromylo // Dyes and Pigments – 2015. – Vol. 113. – P. 227 – 238.

74. Bučinskas A. N-annelated perylenes as effective green emitters for OLEDs / A. Bučinskas, D. Volyniuk, Y. Danyliv, J. V. Grazulevicius, G. Baryshnikov,

B. Minaev, K. Ivaniuk, V. Cherpak, P. Stakhira // RSC Adv. – 2015. – Vol. 5, N 95. – P. 78150–78159.

75. Karaush N. DFT and QTAIM study of the novel d-block metal complexes with tetraoxa[8]circulene-based ligand / N. Karaush, G. Baryshnikov, V. Minaeva, B. Minaev // New J. Chem. – 2015. – Vol. 39, N 10. – P. 7815–7821.

76. Minaeva V. A. Structure and spectroscopic characterization of tetrathia- and tetraselena[8]circulenes as a new class of polyaromatic heterocycles / V. A. Minaeva, G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev, N. N. Karaush, X.-D. Xiong, M.-D. Li, D. L. Phillips, H. N. C. Wong // Spectrochim. Acta. A. – 2015. – Vol. 151. – P. 247–261.

77. Xiong X. Tetrathio and Tetraseleno[8]circulenes: Synthesis, Structures, and Properties / X. Xiong, C.-L. Deng, B. F. Minaev, G. V. Baryshnikov, X.-S. Peng, H. N. C. Wong // Chem. Asian J. – 2015. – Vol. 10, N 4. – P. 969–975.

78. Cherpak V. Mixing of Phosphorescent and Exciplex Emission in Efficient Organic Electroluminescent Devices / V. Cherpak, P. Stakhira, B. Minaev, G. Baryshnikov, E. Stromylo, et al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. – 2015. – Vol. 7, N 2. – P. 1219–1225.

79. Baryshnikov G. V. Electronic structure, aromaticity and spectra of hetero[8]circulenes / G. V. Baryshnikov; B. F. Minaev; V. A. Minaeva // Russ. Chem. Rev. – 2015. – T. 84. – P. 455–484.

80. Bondarchuk S. V. Electronic descriptors for analytical use of the benzidine-based compounds and the mechanism of oxidative coupling of anilines / S. V. Bondarchuk, B. F. Minaev // J. Phys. Org. Chem. – 2014. – Vol. 27, N. 8. – P. 640–651.

81. Baryshnikov G. Aromaticity of the planar hetero[8]-circulenes and of their doubly charged ions: NICS and

GIMIC characterization / G. Baryshnikov, R. Valiev, N. Karaush, B. Minaev // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2014. – Vol. 16, N 29. – P. 15367–15374.

82. Bondarchuk S. V. The State-dependent global and local electrophilicity of the aryl cations / S.V. Bondarchuk, B. F. Minaev // J. Phys. Chem. A. – 2014. – Vol. 118, N 17. – P. 3201–3210.

83. Минаева В. А. Влияние гетероатома на строение и колебательные спектры гетероаннелированных тетрафениленов / В. А. Минаева, Г. В. Барышников, Б. Ф. Минаев // Оптика и спектроскопия. – 2015. – Т. 119, № 4. – С. 604–616.

84. V. A. Litvin The size-controllable, one-step synthesis and characterization of gold nanoparticles protected by synthetic humic substances / V. A. Litvin, B. F. Minaev // Mater. Chem. Phys. – 2014. – Vol. 144, N 1–2. – P. 168–178.

85. Volyniuk D. Highly Efficient Blue OLEDs Based on Intermolecular Triplet-Singlet Energy Transfer / D. Volyniuk, V. Cherpak, P. Stakhira, B. F Minaev, G. V. Baryshnikov, M. Chapran, A. Tomkeviciene, J. Keruckas, J. V. Grazulevicius // J. Phys. Chem. C. – 2013. – Vol. 117, N 44. – P. 22538–22544.

86. Bondarchuk S. V. The Singlet-Triplet Energy Splitting of π-Nucleophiles as a Measure of their Reaction Rate with Electrophilic Partners / S. V. Bondarchuk, B. F. Minaev // Chem. Phys. Lett. – 2014. – Vol. 607. – P. 75–80.

87. Nielsen C. B. Azatrioxa[8]circulenes: Planar Anti-Aromatic Cyclooctatetraenes / C. B. Nielsen, T. Brock-Nannestad, P. Hammershøj, T. K. Reenberg, M. Schau-Magnussen, D. Trpcevski, T. Hensel, R. Salcedo, G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev, M. Pittelkow // Chem. Eur. J. – 2013. – Vol. 19, N 12. – P. 3898–3904.

88. Minaeva V. A. The FTIR spectra of substituted tetraoxa[8]circulenes and their assignments based on DFT calculations / V A. Minaeva, B F. Minaev, G V. Baryshnikov, O. M. Romeyko, M. Pittelkow // Vib. Spectrosc. – 2013. – Vol. 65. – P. 147–158.

89. Baryshnikov G. The art of the possible: computational design of the 1D and 2D materials based on the tetraoxa[8]circulene monomer / G. Baryshnikov, B. Minaev, N. Karaush, V. Minaeva // RSC Adv. – 2014. – Vol. 4, N 49. – P. 25843–25851.

90. Minaev B. Principles of phosphorescent organic light emitting devices / B. Minaev, G. Baryshnikov, H. Agren // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2014. – Vol. 16, N 5. – P. 1719–1758.

91. Minaeva V. A. Features of Terahertz Adsorption and Raman Scattering of Mineral-Corticoid Hormones / V. A. Minaeva, O. P. Cherkasova, B. F. Minaev, G. V. Baryshnikov, A. V. Khmara // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. – 2015. – Vol. 79. – P. 1196–1201.

92. Minaev B. Fragmentation of the adenine and guanine molecules induced by electron collisions / Boris Minaev, Miroslav Shafranyosh, Yury Svida, Maria Sukhoviya, Ivan Shafranyosh, Gleb Baryshnikov, Valentina Minaeva // J. Chem. Phys. – 2014. – Vol. 140, N 17. – P. 175101.

93. Minaeva V. A. Raman Spectra of Alkyl-Substituted Azaoxa[8]circulenes: DFT Calculation and Experiment / V. A. Minaeva, B. F. Minaev, G. V. Baryshnikov, M. Pittelkow // Opt. Spektrosk. – 2013. – Vol. 114, N. 4. – P. 509–521.

94. Miliaresi E. E. Genesis of absorption spectra and PPP calculation for benzene derivatives with amino and ethoxycarbonyl groups / E. E. Miliaresi, V. I. Danilova, B. F. Minaev, G. D. Barabashova // Opt. Spektrosk. – 1971. – Vol. 30, N 5. – P. 882–886.

95. Spin-orbit interaction in the complexes with charge transfer / B. F. Minaev, A. F. Terpugova // Teory of Electronic Shells of Atoms and Molecules. «Mintis». – Vilnus, 1971. – P. 321–324.

96. Минаев Б. Ф. Расчеты σπ*- и πσ*-состояний в спектрах ненасыщенных молекул по методу ППДП КВ / Б. Ф. Минаев, А. Ф. Терпугова // Теор. Эксперимент. Хим. – 1972. – Т. 8. – № 4. – С. 380–384.

97. Минаев Б. Ф. Сравнение одноэлектронных энергий трехатомных молекул, полученных по методу ППДП и ab initio / Б. Ф. Минаев, Ю. В. Митренин // Теор. Эксперимент. Хим. – 1974. – Т. 10, № 2. – С. 231–234.

98. Минаев Б. Ф. Теоретическое рассмотрение безызлучательных переходов в комплексах с переносом заряда / Б. Ф. Минаев, А. Ф. Терпугова // Проблемы молекулярной спектроскопии. Новосибирск : Наука, 1974. – С. 205–211.

99. Кижнер Д. М. Электронные спектры комплексов *п*-бензохинона и *п*-хлоранила с анилином и *п*-хлоранилином / Д. М. Кижнер, Г. Л. Рыжова, Б. Ф. Минаев, С. А. Матасова // Ж. физ. химии. – 1975. – Т. 49, № 6. – С. 1369–1373.

100. Минаев Б. Ф. Полуэмпирические расчеты спектров поглощения и излучения молекулы нитробензола // Спектроскопия и ее применение в геофизике и химии. – Новосибирск, 1975. – С. 266–270.

101. Минаев Б. Ф. Расчет излучательных времен жизни и тонкой структуры низших триплетных состояний нитрит- и нитрат-ионов // Оптика и спектроскопия. – 1976. – Т. 41, № 5. – С. 752–757.

102. Минаев Б. Ф. Расчет интенсивности ИК спектра этилена в основном и первом возбужденном состоянии методом ЧПДП / Б. Ф. Минаев, Т. О. Тлепбергенов, З. М. Мулдахметов,

В. Б. Ясинский // Физические исследования. – 1976. – Т. 3. – С. 95–100.

103. Минаев Б. Ф. Влияние спин-орбитального взаимодействия на вероятности микроволновых переходов в нулевом поле фосфоресцентного состояния нитрит-иона // Оптика и спектроскопия. – 1977. – Т. 42, № 2. − С. 1096.

104. Bratchikov A. V. Complexing with charge transfer in the *n*-butylamine-nitrobenzene dimer system / A. V. Bratchikov, G. L. Ryzhova, B. F. Minaev // Rus. J. Phys. Chem. – 1978. – Vol. 52, № 2. – P. 451–452.

105. Брюханов В. В. Влияние внешнего тяжелого атома на замедленную флуоресценцию родамина 6Ж в растворах / В. В. Брюханов, Г. А. Кецле, Л. В. Левшин, Б. Ф. Минаев // Оптика и спектроскопия. – 1978. – Т. 45, № 6. – С. 1090–1096.

106. Минаев Б. Ф. Влияние молекулярного кислорода на интенсивность синглет-триплетных переходов в органических молекулах. Расчеты конфигурационного взаимодействия в комплексе кислорода с этиленом / Б. Ф. Минаев, В. С. Черкасов // Оптика и спектроскопия. – 1978. – Т. 45, № 2. – С. 264–268.

107. Минаев Б. Ф. Интерпретация фосфоресцентно-микроволнового двойного резонанса в молекуле SO_2. / Б. Ф. Минаев, Т. О. Тлепбергенов, З. М. Мулдахметов // Оптика и спектроскопия. – 1978. – Т. 45, № 4. – С. 679–683.

108. Минаев Б. Ф. Исследования механизма фотореакции альдегидов типа II по Норришу методом ППДП/2 / Б. Ф. Минаев, И. С. Иргибаева, В. З. Габдракипов, З. М. Мулдахметов // Журн. структ. химии. – 1978. –Т. 12, № 2. – С. 209–212.

109. Мельников Г. В. Конкурирующее влияние внешнего магнитного поля и внешнего тяжелого атома на

аннигиляционную замедленную флуоресценцию антрацена и родамина 6Ж в растворах / Г. В. Мельников, Г. А. Кецле, Б. Ф. Минаев // Поляризация ядер и электронов и эффекты магнитного поля в химических реакциях. – К., 1978. – С. 55–56.

110. Минаев Б. Ф. Спин-орбитальное взаимодействие в молекулах и механизм влияния внешнего магнитного поля на люминесценцию // Оптика и спектроскопия. – 1978. – Т. 44, № 2. – С. 256–260.

111. Минаев Б. Ф. Теоретическая модель триплет-триплетной аннигиляции // Изв. вузов. Физика. – 1978. – Т. 21, № 9. – С. 12–17.

112. Минаев Б. Ф. Спиновая ориентация триплетного состояния и новые методы в исследовании фосфоресценции // Физика молекул. – Киев : Наукова Думка. – 1979. – № 7. – С. 34–67.

113. Minaev B. F. Calculations of quartet state spectra for diatomic species by INDO CI method including spin-orbit coupling perturbation / B. F. Minaev, R. Zahradnik // Collect. Czech. Chem. Commun. – 1981. – Vol. 46, N 1. – P. 179–193.

114. Minaev B. F. CNDO/S CI calculation of spin-orbit coupling and intersystem crossing in photochemical biradical formation reaction / B. F. Minaev, D. M. Kizner // Collect. Czech. Chem. Commun. – 1981. – Vol. 46, N 6. – P. 1318–1323.

115. Ketsle G. A. Mechanism of a magnetic-field effect on triplet-triplet compound annihilation / G. A. Ketsle, L. V. Levshin, G. V. Melnikov, B. F. Minaev // Opt. Spektrosk. – 1981. – Vol. 51, N 4. – P. 665–668.

116. Минаев Б. Ф. К вопросу об эффекте Штарка в спектрах фосфоресцентно-микроволнового двойного

резонанса // Оптика и спектроскопия. – 1981. – Т. 50, № 2. – С. 387–389.

117. Кецле Г. А. Влияние внешнего магнитного поля на замедленную флуоресценцию эксиплексов антрацена / Г. А. Кецле, Л. В. Левшин, Г. В. Мельников, Б. Ф. Минаев // Журн. прикл. спектроскопии. – 1981. – Т. 34, № 3. – С. 435–440.

118. Минаев Б. Ф. Спин-орбитальное взаимодействие как ключ к пониманию стереоспецифичности в реакциях атомарного кислорода с олефинами / Б. Ф. Минаев, З. М. Мулдахметов. – Черкассы, 1981. – 22 с. – Деп. ОНИИТЭХИМ, № 272 КР-Д81.

119. Minaev B. F. Quantum chemical calculations of PMDR spectra / B. F. Minaev, Z. M. Muldahmetov, I. S. Irgibaeva, T. O. Tlepbergenov, D. M. Kizner // Int. J. Quantum Chem. – 1982. – Vol. 22, N 5. – P. 863– 869.

120. Minaev B. F. Quantum-chemical study of the *o*-carboranyl-substituted allyl anion / B. F. Minaev, A. V. Kazantsev, B. E. Kozhakov // J. Struct. Chem. – 1982. – Vol. 22, N 5. – P. 778–780.

121. Минаев Б. Ф. О снятии запрета по спину в реакциях триплетного молекулярного кислорода // Ж. структ. химии. – 1982. – Т. 23, № 2. – С. 170– 175.

122. Минаев Б. Ф. Влияние межмолекулярного взаимодействия на запрещенные переходы в молекуле кислорода. – Черкассы, 1983. –Деп. ОНИИТЭХИМ, г. Черкассы, 14.07.1983, № 727. ХП-Д-83.

123. Свешникова Е. В. Механизм безызлучательного тушения синглетного кислорода в растворе / Е. В. Свешникова, Б. Ф. Минаев // Оптика и спектроскопия. – 1983. – Т. 54, № 3. – С. 542–545.

124. Минаев Б. Ф. Влияние спин-орбитального взаимодействия на интенсивность оптических дублет-дублетных и триплет-триплетных переходов в

молекулах / Б. Ф. Минаев, З. М. Мулдахметов // Оптика и спектроскопия. – 1984. – Т. 56, № 1. – С. 48–52.

125. Минаев Б. Ф. Об ионном механизме реакции циклоприсоединения триплетного кислорода к олефинам / Б. Ф. Минаев, В. А. Тихомиров, Ж. К. Даушеев // Хим. физика. – 1984. – Т. 3, № 5. – С. 615–618.

126. Минаев Б. Ф. Спин-орбитальное взаимодействие состояний с переносом заряда и механизм тушения синглетного кислорода аминами // Теор. и эксперимент. химия. – 1984. – Т. 20, № 2. – С. 209–212.

127. Минаев Б. Ф. Квантово-химическое исследование механизма фотосенсибилизации, люминесценции и тушения синглетного $^1\Delta_g$ кислорода в растворах // Ж. прикл. спектроск. – 1985. – Т. 42. – № 5. – С. 766– 772.

128. Минаев Б. Ф. Механизм влияния внешнего тяжелого атома на излучательные синглет-триплетные переходы // Журн. прикл. спектроскопии. – 1985. – № 43. – С. 249–253.

129. Минаев Б. Ф. О механизме кооперативно-вибронного излучения синглетного $^1\Delta g$ кислорода в растворах // Теор. и эксперимент. химия. – 1985. – Т. 21, № 5. – С. 594–596.

130. Минаев Б. Ф. Расчет эффектов спин-орбитального взаимодействия в линейных молекулах с основным регулярным 2π термом. Молекулы CH и SiF // Оптика и спектроскопия. – 1985. – Т. 58, № 3. – С. 541–545.

131. Минаев Б. Ф. Роль спин-орбитального взаимодействия в химических реакциях / Б. Ф. Минаев, З. М. Мулдахметов // Доклады АН Казахской ССР. – 1985.– № 3. – С. 48–53.

132. Минаев Б. Ф. Теория влияния растворителя на радиационную вероятность перехода $a^1\Delta_g$ – $X^3\Sigma_g^-$ в молекуле кислорода // Оптика и спектроскопия. – 1985. – Т. 58, № 6. – С. 1238–1241.

133. Serebrennikov Ju. A. Magnetic field effects due to spin-orbit coupling in transient intermediates / Ju. A. Serebrennikov, B. F. Minaev // Chem. Phys. – 1987. – Vol. 114. – P. 359–367.

134. Минаев Б. Ф. Квантово-химическое исследование механизма хемилюминесценции при рекомбинации формильных радикалов / Б. Ф. Минаев, Р. Ф. Васильев, Н. М. Иванова // Изв. АН. Сер. Физика. – 1987. – Т. 51. № 3. – С. 548–551.

135. Heterogeneous and homogeneous spin-catalisis / B. F. Minaev, G. K. Dausheev // USSR VIII conference on heterogeneous catalysis, Alma-Ata, 1988. – P. 209.

136. Minaev B. F. Solvent induced emission of molecular oxygen // J. Mol. Struct. (THEOCHEM). – 1989. – Vol. 183. – P. 207–214.

137. Мулдахметов З. М. Электронное строение молекул. Новые аспекты / З. М. Мулдахметов, Б. Ф. Минаев, С. А. Безносюк. – Алма-Ата : Наука, 1988. – 215 с.

138. Minaev B. F. MINDO/3 CI study of NCO spectrum and the chemiluminescent reaction N + CO → NCO + hν / B. F. Minaev, N. M. Ivanova, Z. M. Muldahmetov // Spectrosc. Lett. – 1989. – Vol. 22, N 7. – P. 901–923.

139. Минаев Б. Ф. О влиянии спин-орбитального взаимодействия на механизмы реакций ненасыщенных углеводородов с атомарным кислородом // Журн. физ. химии. – 1992. – Т. 66, № 11. – С. 2992–2997.

140. Minaev B. F. The influence of intermolecular interaction on the forbidden near-IR transitions in molecular oxygen / B. F. Minaev, S. Lunell, G. I. Kobzev // J. Mol. Struct. (THEOCHEM). – 1993. – Vol. 103, – P. 1–9.

141. Minaev B. F. Collision influence on the $b^1\Sigma^+ - a^1\Delta$ transition in molecular oxygen: model calculations for the collision complex $O_2 + H_2$ / B. F. Minaev, S. Lunell, G. Kobzev // Int. J. Quantum Chem. – 1994. – Vol. 50, N 4. – P. 279–292.

142. Минаев Б. Ф. Расчет основного и возбужденного состояний димера $(O_2)_2$ методом конфигурационного взаимодействия // Журн. физ. химии. – 1994. – Т. 68, № 8. – С. 1432–1437.

143. Knuts S. Spin-orbit coupling in the intersystem crossing of the ring-opened oxirane biradical / S. Knuts, B. Minaev, O. Vahtras, H. Agren // Int. J. Quantum Chem. – 1995. – Vol. 55, N 1. – P. 23–34.

144. Minaev B. F. Spin-orbit coupling induced chemical reactivity and spin-catalysis phenomena / B. F. Minaev, H. Agren // Collect. Czech. Chem. Commun. – 1995. – Vol. 60, N 3. – P. 339–371.

145. Minaev B. F. A configuration interaction study of the $(O_2)_2$ dimer / B. F. Minaev, V. D. Nikolaev, H. Agren // Spectrosc. Lett. – 1996. – Vol. 29, N 4. – P. 677–695.

146. Ågren H. Response theory and calculations of spin-orbit coupling phenomena in molecules / H. Ågren, O. Vahtras, B. F. Minaev // Adv. Quantum Chem. – 1996. – Vol. 27. – P. 71–162.

147. Minaev B. F. Magnetic phosphorescence of molecular oxygen / B. F. Minaev, O. Vahtras, H. Agren // Chem. Phys. – 1996. – Vol. 208, N 3. – P. 299–311.

148. Minaev B. F. Paramagnetic spin catalysis of radical recombination reactions // Mol. Eng.– 1996. – V. 6, No 3. – P. 261–279.

149. Минаев Б. Ф. Межмолекулярное взаимодействие в системе $O_2 + H_2$ в реакции рекомбинации радикалов // Теор. и эксперимент. химия. – 1996. – Т. 32, № 4. – С. 229–233.

150. Minaev B. F. Collision-induced electronic transitions in complexes between benzene and molecular oxygen / B. F. Minaev, K. V. Mikkelsen, H. Agren // Chem. Phys. – 1997. – Vol. 220, N 1–2. – P. 79–94.

151. Vahtras O. Ab initio calculations of electronic g-factors by means of multiconfiguration response theory / O. Vahtras, B. F. Minaev, H. Agren // Chem. Phys. Letters. – 1997. – Vol. 281, N 1–3. – P. 186–192.

152. Minaev B. F. Internuclear distance dependence of the spin-orbit coupling contributions to proton NMR chemical shifts / B. Minaev, J. Vaara, K. Ruud // Chem. Phys. Lett. – Vol. 295, N 5–6. – P. 455–461.

153. Luo Y. Some resent developments of high-order response theory / Y. Luo, D. Jonsson, P. Norman, K. Ruud, O. Vahtras, B. Minaev, H. Agren, A. Rizzo, K. V. Mikkelsen // Int. J. Quantum Chem. – 1998. – Vol. 70, N 1. – P. 219–239.

154. Daniel C. Spin-orbit coupling effects on the metal-hydrogen bond homolysis of $M(H)(CO)_3$(H-DAB) (M = Mn, Re; H-DAB = 1,4-diaza-1,3-butadiene) / C. Daniel, D. Guillaumont, C. Ribbing, B. F. Minaev // J. Phys. Chem. – 1999. – Vol. 103, N 29. – P. 5766–5772.

155. Minaev B. F. The singlet oxygen absorption to the upper state of the Schumann-Runge system // Phys. Chem. Chem. Phys. – 1999. – Vol. 1, N 15. – P. 3403–3413.

156. Minaev B. F. The singlet-triplet transition of the nitrite ion calculated by MCSCF quadratic response method / B. F. Minaev, V. A. Minaeva // J. Fluorescence. – 1999. – Vol. 9, N 3. – P. 221–232.

157. Engstrom M. Hydrogen bonding to tyrosyl radical analyzed by ab initio g-tensor calculations / M. Engstrom, F. Himo, A. Graslund, B. Minaev // J. Phys. Chem. A. – 2000. – Vol. 104, N 21. – P. 5149–5153.

158. Minaev B. F. Spin uncoupling in chemical reactions / B. F. Minaev, H. Agren // Adv. Quant. Chem. – 2001. – Vol. 40, Part. 2. – P. 191–211.

159. Semaniak J. Dissociative recombination of $HCNH^+$. Absolute cross sections and branching ratios / J. Semaniak, B. Minaev, M. Derkach, M. Larsson // Astrophys. J. Supplement Series. – 2001. – Vol. 135, N 2. – P. 275–283.

160. Minaev B. F. Ab initio calculations of zero-field splitting parameters / B. F. Minaev, O. Loboda, O. Vahtras, H. Agren, K. Ruud // Chem. Phys. – 2002. – Vol. 279. – P. 133–142.

161. Minaev B. F. MCSCF linear response study of the three-body dissociation channel $CH_2^+ + e = C + 2H$ / B. F. Minaev, M. Larsson // Chem. Phys. – 2002. – Vol. 280, No 1–2. – P. 15–30.

162. Prabhakar R. Activation of triplet dioxygen by glucose oxidase: spin-orbit coupling in the superoxide ion / R. Prabhakar, P. Siegbahn, B. F. Minaev, H. Agren // J. Phys. Chem. B. – 2002. – Vol. 106, N 14. – P. 3742–3750.

163. Минаев Б. Ф. Электронные механизмы биоактивации молекулярного кислорода // Укр. біохім. журн. – 2002. – Т. 74, № 3. – С. 11–19.

164. Minaev B. F. Fine- and hyperfine- structure in three low-lying $^3\sum^+$ states of molecular hydrogen / B. Minaev, O. Loboda, Z. Rinkevicius, O. Vahtras, H. Ågren // Mol. Phys. – 2003. – Vol. 101, N 15. – P. 2335–2346.

165. Minaev B. Fine structure and radiative life-time of the low-lying triplet states of the helium eximer / B. Minaev // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2003. – Vol. 5, N 11. – P. 2314–2319.

166. Минаев Б. Ф. Квантовая теория молекулярного мотора, включающего донорно-акцепторные

заместители / Б. Ф. Минаев, А. Г. Францева // Вісник ЧІТІ. – 2003. – № 2. – С. 54–59.

167. Minaev B. F. Ab initio study of the ground state properties of molecular oxygen // Spectrochim. Acta, Part A. – 2004, – Vol. 60, N 5. – P. 1027–1041.

168. Prabhakar R. Spin transition during H_2O_2 formation in the oxidative half-reaction of copper amine oxidase / R. Prabhakar, P. E. M. Siegbahn, B. F. Minaev, H. Agren // J. Phys. Chem. B. – 2004. – Vol. 108, N 36. – P. 13882–13892.

169. Minaev B. F. Response calculations of electronic and vibrational transitions in molecular oxygen induced by interaction with noble gases / B. F. Minaev, G. I. Kobzev // Spectrochim. Acta. A. – 2004. – Vol. 60, N 5. – P. 1027–1041.

170. Minaev B. F. Solvent effects on optically detected magnetic resonance in triplet spin labels / B. Minaev, O. Loboda, O. Vahtras, K. Ruud, H. Agren // Theor. Chem. Accounts. – 2004. – Vol. 111, N 2–6. – P. 168–175.

171. Minaev B. F. Theoretical study of the external heavy atom effect on phosphorescence of free-base porphin molecule // Spectrochim. Acta. Part A. – 2004. – Vol. 60, N 13. – P. 3213–3224.

172. Loboda O. Theoretical Study of the Triplet State properties of Free-Base Porphin / O. Loboda, I. Tunnell, B. Minaev, H. Agren // Chem. Phys. – 2005. – Vol. 312, N 1-3. – P. 299–309.

173. Minaev B. F. Calculation of the Phosphorescence of Porphyrins by the Density Functional Method / B. F. Minaev, A. B. Minaev // Opt. Spektrosk. – 2005. – Vol. 98, N 2. – P. 214–219.

174. Minaev B. F. Theoretical DFT study of phosphorescence from porphyrins / B. F. Minaev, H. Agren // Chem. Phys. – 2005. – Vol. 315, N 3. – P. 215–239.

175. Minaev B. F. Application of density functional theory for studies of excited states and phosphorescence of platinum(II) acetylides / B. Minaev, E. Jansson, M. Lindgren // J. Chem. Phys. – 2006. – Vol. 125, N 9. – P. 094306.

176. Minaev B. F. Density functional theory study of vibronic structure of the first absorption Q_x band in free-base porphin / B. Minaev, Y. H. Wang, C. K. Wang, Y. Luo, H. Agren // Spectrochim. Acta. Part A. – 2006. – Vol. 65, N 2. – P. 308–323.

177. Minaev B. F. Theoretical study of phosphorescence in dye dopped light emitting diods / B. F. Minaev, E. Jansson, H. Agren, S. Schrader // J. Chem. Phys. – 2006. – Vol. 125, N 23. – P. 234704.

178. Jansson E. Time-dependet DFT calculations of phosphorescence parameters for fac-tris(2-phenylpyridine) iridium / E. Jansson, B. Minaev, S. Schrader, H. Agren // Chem. Phys. – 2007. – Vol. 333, N 2. – P. 157–167.

179. Lindgren M. Electronic states and phosphorescence of dendron functionalized platinum(II) acetylides / M. Lindgren, B. Minaev, E. Glimsdal // J. Lumin. – 2007. – Vol. 124, N 2. – P. 302–310.

180. Минаев Б. Ф. Электронные механизмы активации молекулярного кислорода // Успехи химии. – 2007. – Т. 76, № 11. – С. 1059–1083.

181. Minaev B. F. Spin-dependent binding of dioxygen to heme / B. F. Minaev, V. A. Minaeva // Ukr. Bioorganica Acta. – 2008. – Vol. 6, No. 2. – C. 55–62.

182. Minaev B. F. Quantum-Chemical Study of the Singlet Oxygen Emission / B. F. Minaev, V. A. Minaeva, Yu. V. Evtuhov // Int. J. Quantum Chem. – 2009. – Vol. 109, N 3. – P. 500–515.

183. Minaev B. F. Theoretical study of the Cyclometalated Iridium(III) Complexes Used as Chromophores for

Organic Light-Emitting Diodes / B. Minaev, V. Minaeva, H. Agren // J. Phys. Chem. A. – 2009. – Vol. 113, N. 4. – P. 726–735.

184. Minaev B. F. Vibration and Fluorescence Spectra of Porphyrin-Cored 2,2-bis(methylol)-propionic Acid Dendrimers / B. Minaev, M. Lindgren // Sensors. – 2009. – Vol. 9. – P. 1937–1966.

185. Минаев Б. Ф. Спин-катализ в процессах фото- и биоактивации молекулярного кислорода // Укр. біохім. журн. – 2009. – Т. 81. – № 3. – С. 21–45.

186. Minaev B. F. Environment friendly spin catalysis for dioxigen activation // Chem. & Chem. Technol. – 2010. – Vol. 4, N 1. – P. 1–23.

187. Minaev B. F. Dioxygen spectra and bioactivation / Minaev B. F., Murugan N. A., Ågren H. // Int. J. Quantum Chem. – 2013. – Vol. 113, N 14. – P. 1847–1867.

188. Volyniuk D. Highly Efficient Blue OLEDs Based on Intermolecular Triplet-Singlet Energy Transfer / D. Volyniuk, V. Cherpak, P. Stakhira, B. F Minaev, G. V. Baryshnikov, M. Chapran, A. Tomkeviciene, J. Keruckas, J. V. Grazulevicius // J. Phys. Chem. C. – 2013. – Vol. 117, N 44. – P. 22538–22544.

189. Брюханов В. В. Влияние наночастиц золота на обменные процессы в комплексах столкновения молекул триплетного и синглетного кислорода с возбужденными молекулами эозина / В. В. Брюханов, Б. Ф. Минаев, А. В. Цибульникова, В. А. Слежкин // Оптика и спектроскопия. – 2015. – Т. 119, № 1. – С. 32–41.

190. Ибрагимова Л. Б. Анализ процессов диссоциации-рекомбинации молекулы CO_2 с учетом спин-орбитального взаимодействия / Л. Б. Ибрагимова, Б. Ф. Минаев // Оптика и спектроскопия. – 2016. – Т. 120, № 3. – С. 362–368.

191. Minaev B. F. Photochemistry and spectroscopy of singlet oxygen in solvents. Recent advances which support the old chemistry / B. F. Minaev // Chem. and Chem. Technol. – 2016. – Vol. 10, N 4. – P. 519–530.

192. Minaev B. F. Spin-orbit coupling mechanism of singlet oxygen $a^1\Delta_g$ quenching by solvent vibrations / B. F. Minaev // Chem. Phys. – 2017. – Vol. 483. – P. 84–95.

193. Bregnhøj M. Singlet Oxygen Photophysics in Liquid Solvents: Converging on a Unified Picture / M. Bregnhøj, M. Westberg, B. F. Minaev, P. R. Ogilby // Acc. Chem. Res. – 2017. – Vol. 50, N 8 – P. 1920–1927.

194. Grybauskaite-Kaminskiene G. Contribution of TADF and exciplex emission for efficient "warm-white" OLEDs / G. Grybauskaite-Kaminskiene, K. Ivaniuk, G. Bagdziunas, B. Minaev, H. Ågren, J. V. Grazulevicius // J. Mater. Chem. C. – 2018. – Vol. 6, N 6. – P. 1543–1550.

195. Minaev Boris F. Spin-Orbit Coupling in Enzymatic Reactions and the Role of Spin in Biochemistry / Boris F. Minaev, Hans Ågren, and Valentina O. Minaeva // Handbook of Computational Chemistry [Editor Jerzy Leszczynski] : Springer – 2017. – Vol. 2. – Part IV. – P. 1557–1588.

Борис Пилипович із сином Олександром, 1979 р.

Син Олександр з дружиною та дочкою Поліною, 2007 р.

Внуки Ян і Поліна підростають, 2018 р.

Святкування Нового року у дружному сімейному колі, 2006 р.

Похід за чорницею з дружиною в Стокгольмі
(Швеція, 2010 р.)

На шляху до Стокгольмського архіпелагу, 2002 р.

Annotation. Scientist, teacher, initiator. **Professor Boris Filippovich Minaev: By the 75th birthday.** *In the book the main periods of life, scientific and pedagogic activity of doctor of chemical sciences, the Honoured Scientist of Ukraine, professor Boris Filippovich Minaev are described and a short review of his scientific works is presented. A significant contribution of the scientist and his achievements in the field of physical organic chemistry and molecular electronics are represented in the review. The material informs the reader on the range of scientific interests of B. F. Minaev which include spin-orbit coupling effects in molecules and their influence on spectra, photochemistry, luminescence and chemical reactivity. Boris Filippovich is an author of spin-catalysis theory and of its applications in enzymatic, homogeneous and heterogeneous catalysis. For the first time he has calculated the atmospheric oxygen bands intensity, indicated the role of spin-orbit coupling in the oxygen magnetic phosphorescence phenomena, has developed the quantum theory of phosphorescence for unsaturated hydrocarbons and dyes, spin splitting in zero magnetic field, hyperfine structure in the triplet state and the solvent effects on these EPR parameters.*

The scientific works of professor Minaev B. F. are well known in the world; they are published in the leading international journals and are widely cited in the scientific literature. According to Scopus agency the Hirsch index of Minaev B. F. is equal h = 35 and professor Minaev B. F. enters the number of five best chemists among all Ukrainian universities.

Аннотация. Ученый, учитель, энтузиаст. **Борис Филиппович Минаев. К 75-му дню рождения.** *В книге освещены основные периоды жизни, научной и педагогической деятельности доктора химических наук,*

профессора, заслуженного деятеля науки и техники Украины Бориса Филипповича Минаева, а также дан краткий обзор избранных научных трудов ученого. Книга отражает весомые достижения Б. Ф. Минаева в научно-исследовательской деятельности и информирует научную общественность о достижениях ученого в области физической органической химии и молекулярной электроники. Материалы книги знакомят читателя с кругом научных интересов Минаева Б. Ф., к которым относятся эффекты спин-орбитального взаимодействия в молекулах и их влияние на спектры, фотохимию, люминесценцию, проводимость, магнитные и химические свойства молекул. Борис Филиппович является автором концепции спин-катализа и ее применения в ферментативном, гомогенном и гетерогенном катализе. Он впервые рассчитал интенсивности атмосферных полос молекулярного кислорода, показал роль спин-орбитального взаимодействия в формировании магнитной фосфоресценции кислорода, разработал квантовую теорию фосфоресценции непредельных углеводородов и красителей, спинового расщепления в нулевом магнитном поле, сверхтонкой структуры в триплетном состоянии и влияния растворителя на эти параметры электронного парамагнитного резонанса.

Работы профессора Минаева Б. Ф. хорошо известны в мире, опубликованы в ведущих международных научных журналах и широко цитируются в мировой научной литературе. На сегодняшний день по данным всемирного агенства «Scopus» Минаев Б. Ф. имеет рейтинг Хирша h = 35.

Валентина Анатоліївна Литвин,
Валентина Олександрівна Мінаєва,
Наталія Миколаївна Карауш-Кармазін,
Гліб Володимирович Баришніков

Учений, учитель, ентузіаст
Борис Пилипович Мінаєв

До 75-го дня народження

Наукове видання

Підписано до друку 20.06.2018. Формат 60х84/16.
Гарнітура Таймс
Папір офсет. Ум. друк. арк. 5,0. Тираж 100 пр.

Видавець: Чабаненко Ю. А.
Свідоцтво про внесення до державного реєстру видавців
серія ДК № 1898 від 11.08.2004 р.
Україна, м. Черкаси, вул. О. Дашковича, 39.
Тел. (0472) 56-46-66

Друк: ФОП Нечитайло О. Ф.
Україна, 18002 м. Черкаси, вул. О. Дашковича, 39.
Тел/факс: (0472) 37-62-60
e–mail: print@306.com.ua