

УДК: 544.163.3

DOI: 10.31651/2076-5835-2018-1-2023-1-4-12

**Олександр Олександрович Панченко**кафедра хімії та наноматеріалознавства, Черкаський національний  
університет імені Богдана Хмельницького, Україна  
panchenko9b@gmail.comORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7669-1424>**Юлія Анатоліївна Шафорост**кафедра хімії та наноматеріалознавства, Черкаський національний  
університет імені Богдана Хмельницького, Україна  
zdoryulia@ukr.netORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0002-2803>**Наталія Миколаївна Карауш-Кармазін**кафедра хімії та наноматеріалознавства, Черкаський національний  
університет імені Богдана Хмельницького, Україна  
karaush22@ukr.netORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9360-2593>**Максим Никандрович Гаврилюк**ННІ природничих та аграрних наук, Черкаський національний  
університет імені Богдана Хмельницького, Україна  
gavrilyuk.m@gmail.comORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5729-8184>

## ДО 80-РІЧЧЯ ВІД ДНЯ НАРОДЖЕННЯ ТА 60 РОКІВ НАУКОВОЇ ДІЯЛЬНОСТІ ПРОФЕСОРА БОРИСА ПИЛИПОВИЧА МІНАЄВА

У статті висвітлено основні періоди життя, наукової та педагогічної діяльності доктора хімічних наук, професора, заслуженого діяча науки і техніки України Бориса Пилиповича Мінаєва. Матеріали статті знайомлять читача з напрямками наукових інтересів ученого, до яких належать ефекти спин-орбітальної взаємодії в молекулах і їх вплив на спектри, фотохімію, люмінесценцію, провідність, магнітні та хімічні властивості молекул. Борис Пилипович є автором концепції спин-каталізу та її застосування у ферментативному, гомогенному і гетерогенному каталізі. Роботи професора Мінаєва Б. П. добре відомі у світі, опубліковані у провідних міжнародних наукових виданнях і широко цитуються у світовій науковій літературі. На сьогоднішній день, за даними всесвітньої агенції «Scopus», Мінаєв Б. П. має рейтинг Гірша  $h = 47$ .

**Ключові слова:** Мінаєв Борис Пилипович, спин-каталіз, молекулярний кисень, фосфоресценція, спин-орбітальна взаємодія.



**Постановка проблеми. Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Цього року професор кафедри хімії та наноматеріалознавства Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького професор Борис Пилипович Мінаєв відзначає своє 80-річчя та 60 років роботи на науковій ниві.

Б. П. Мінаєв народився 21 вересня 1943 року в м. Свердловськ (нині – Єкатеринбург) в сім'ї службовців.

У 1962 році Б. П. Мінаєв закінчив середню школу №3 в місті Караганді та вступив до фізичного факультету Томського державного університету імені В. В. Куйбишева (ТДУ). Займався спортом – був чемпіоном Казахстану з водного поло. Часто їздив на різні змагання. Ще з учнівської лави захоплювався фізикою. Свої перші наукові дослідження, присвячені квантово-хімічним розрахункам

нітросполук методом Хюккеля, Мінаєв Б. П. розпочав, навчаючись на третьому курсі університету.

Під час навчання на п'ятому курсі він проходив переддипломну практику в Інституті високомолекулярних сполук АН СРСР, за результатами якої була написана перша наукова робота 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).

У 1967 році Б. П. Мінаєв закінчив університет і вступив до аспірантури при кафедрі оптики і спектроскопії ТДУ. Уже тоді молодий аспірант захоплювався методами квантової хімії, які він застосовував для розрахунків електронної будови та спектрів молекул. У ті роки під керівництвом професора Н. О. Прилежаєвої на кафедрі оптики і спектроскопії ТДУ були створені перші в Сибіру лазери і почали застосовуватися перші ЕОМ для розрахунку молекул та їх спектрів. Наталія Олександрівна Прилежаєва була ученицею академіка А. Н. Тереніна і багато 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. Кузнецова, а через рік перейшов на кафедру органічної хімії ТДУ. На початку 1973 року захистив дисертацію на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за темою «Ефекти спин-орбітальної взаємодії в оптичних та ЕПР спектрах молекул і радикалів». Уже в ранніх роботах молодого вченого прослідковувався потяг до глибокого осмислення закономірностей в молекулярних спектрах різних класів сполук (від двохатомних молекул до комплексів з перенесенням заряду і біополімерів) на основі фундаментальних теорій. Б. П. Мінаєв також розробив методи розрахунку ефектів спин-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  $\sigma$ -електронів у спектрах цього широкого класу органічних сполук.

Протягом 1974–1988 рр. Б. П. Мінаєв працював спочатку доцентом кафедри теоретичної фізики, а потім завідувачем кафедри фізичної хімії Карагандинського державного університету (КарДУ). Саме в КарДУ він 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 виключно магнітну природу і відбуваються за рахунок дуже специфічної спин-орбітальної взаємодії в молекулі кисню.

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. Через два роки, керуючись тими ж принципами, Мінаєв пояснив специфічне посилення світіння синглетного  $^1\Delta_g$  кисню в розчинах.

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.

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.

Посилення хаосу внаслідок перебудови та розпаду СРСР змусило Б. П. Мінаєва виїхати з Казахстану. Він був запрошений за конкурсом на посаду завідувача кафедри хімії до 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. Мінаєва підготував трьох кандидатів наук.

Україна в серці Бориса Пилиповича ще з раннього дитинства. Він пам'ятає, як батько часто розмовляв українською. Але на той час мало що розумів і постійно допитувався його, що це за така дивна мова. А батько лише посміхався. Зрештою пізніше дізнався, що його прадід родом із Слобожанщини. І коли підріс, то теж почав цікавитися Україною. Пам'ятає, що у молодших класах він часто ходив у школу у вишиванці. У мальовниче наддніпрянське місто професор закохався з першого погляду.

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 – був обраний завідувачем створеної ним кафедри хімії та наноматеріалознавства ЧНУ.

Таким чином, вже понад чверть століття в Черкасах проводяться дослідження електронної будови, спектрів і хімічної реакційної здатності молекул з урахуванням спин-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) діаманітних молекул, в роботах Мінаєва акцентується увага на роль триплетних станів у хімії, молекулярній електроніці, біохімії і каталізі при розрахунку СОВ, спин-спінової взаємодії, анізотропії g-фактора та інших магнітних взаємодій.

Б. П. Мінаєвим спільно з колегами з Королівського технологічного університету (м. Стокгольм) проведено квантово-хімічні розрахунки електронної будови ряду ферментів флавопротеїдів і купрумвмісних амінооксидаз. Ці ферменти утворюють супероксид-іон  $O_2^-$ , те ж саме відбувається і при мимовільному окисненні гемоглобіну, ферредоксинів і адреналіну. 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. Виявилось, що активація кисню, ця вікова загадка біохімії, зводиться до дуже простого та ясного з фізичної точки зору спінового ефекту: великій спин-орбітальній взаємодії між квазівиродженими станами супероксид-іона, утвореного в радикальній парі з ферментом (флавопротеїдів) та швидкій спин-гратковій релаксації в цьому радикалі. Ці ідеї були вперше висвітлені у 2002 році на конгресі в Токіо, але до них Б.П. Мінаєв повертався неодноразово, про що свідчать його статті. Виявилось, що прояв внутрішніх магнітних взаємодій у спектрах  $O_2$  пов'язаний з активацією кисню оксигеназами й іншими ферментами.

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 спин-орбітальної взаємодії, тому що синглет-триплетні переходи втричі 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 спин-орбітальної взаємодії в комплексі  $Ir(III)$  з фенілпіридилними лігандами для пояснення роботи фосфоресцентних ОЛЕДів. У подальшому ці роботи заклали основу для нових напрямків у розвитку молекулярної електроніки у співробітництві з кафедрою електронних приладів Національного університету «Львівська політехніка». Цикл робіт по ОЛЕДах узагальнений в огляді, опублікованому в журналі *Physical Chemistry Chemical Physics* (РССР) у 2014 р., який за даними агенції Scopus процитований понад 170 разів.

Хімічно стабільні речовини, які існують при звичайних умовах, як правило, діаманітні, 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. 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. 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 Т-S переходів у проміжних бірадикалах. 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 діаманітних речовин закодована у властивостях неспарених електронів збудженого триплетного стану. 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 у 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 у ряді хімічних реакцій показали, що розпарювання і переверот 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 вигреш 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 із каталізатором. 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 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 – діаманітні. В силу заборони по спіну горіння органічних речовин вимагає початкової активації у вигляді високотемпературної стадії запалювання – створення початкових радикалів. Радикально-ланцюговий процес горіння спричиняє неконтрольоване виділення енергії у вигляді тепла і світла. Зрозуміло, що такий механізм окиснення молекулярним киснем неприйнятний для живих клітин. У результаті метаболізму енергетичні потреби клітин тварин задовольняються за рахунок енергії, що вивільняється при окисненні органічних сполук за участю кисню. Ця енергія використовується клітиною для проведення всіх хімічних синтезів ДНК і білків, транспорту іонів, механічної роботи і діяльності мозку. Всі різноманітні

метаболичні 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.

Переворот спіна в супероксид-іоні рівнозначний T-S переходу в іон-радикальній парі  $\text{ФАДН}_2^+ \dots \text{O}_2^-$ , після чого йде звичайна «синглетна хімія» діаманітних речовин – перенесення атомів Гідрогену з утворенням пероксиду  $\text{H}_2\text{O}_2$  і окисненого флавінаденіндинуклеотиду (ФАД). Незвичайним аспектом є твердо встановлений Б. П. Мінаєвим факт перевороту спіну на стадії переносу електрона і утворення іон-радикальної пари. 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. Оскільки вихід радикалів в об'єм клітини є згубним для організму, спіновий перехід пригнічує радикальний канал. Таким чином, що спінові ефекти відіграють важливу роль у відкритті глибоких тасмниць 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 і радіодіапазону терагерц. Зауважимо, що T-S розщеплення в радикальній парі  $\text{ФАДН}_2^+ \dots \text{O}_2^-$  належить 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 збудження на триплетний молекулярний кисень, завжди присутній в клітинних розчинах, і виходить нова активна форма  $^1\text{O}_2$  – синглетний кисень в стані  $^1\Delta_g$ . Для синглетного кисню немає заборони по спіну в реакціях з діаманітними речовинами, і він дуже реакційноздатний. Такий кисень вбиває хворі клітини. Теоретичним дослідженням синглетного кисню присвячено понад сотня 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  $\text{O}_2$  на синглет-триплетні переходи в кристалах і передбачив кооперативні ефекти в комплексах зіткнення кисню з діаманітними і парамагнітними молекулами. Досвід дослідження спінових ефектів в кисні, безумовно, допоміг у розробці теорії ферментативного спін-каталізу. Наприклад, у 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.

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).

Відомо, що близько 90% всіх процесів у 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. 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. Такий двохтриплетний стан має повний спін, рівний нулю, як і вихідні реагенти, однак триплетний метан спонтанно дисоціює на радикали  $\text{CH}_3 + \text{H}$ , а в основному синглетному стані його розпад вимагає великої енергії активації. Каталізатор дозволяє «підключити» триплетний стан метану до процесу розриву C–H зв'язку. При цьому виявлена важлива характеристика каталізатора – положення його триплетного рівня. 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 перевертанням спіна. Ідеї спін-каталізу застосовані до адсорбції ацетилену, етилену і бензену на поверхні ряду металів. 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. 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. Вони важливі в каталізі, молекулярній електроніці, хімії атмосфери, фізиці горіння, біології, диханні клітин.

Багато уваги Б. П. Мінаєв приділяє і проблемам екології. Відомо, що синглетний  $^1\Delta_g$  кисень бере участь в утворенні смогу над задимленими містами. У верхній атмосфері йде постійний фоторозклад  $\text{O}_2$  на атоми та їх зворотна рекомбінація з утворенням метастабільних форм кисню. Молекула  $\text{O}_2$  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.

Новий напрям у розвитку кафедри хімії та наноматеріалознавства ЧНУ був започаткований у 2011 році і пов'язаний із дослідженнями циркуленів. Ці матеріали привернули увагу Бориса Пилиповича завдяки своїй високій симетрії і тим, що їх стали використовувати для ОЛЕДів. Було проведено великий цикл квантово-хімічних розрахунків електронної будови, ІЧ та УФ спектрів тетраокса циркуленів, їх магнітних і ароматичних властивостей. Це слугувало поштовхом для посилення розрахунків двовимірних нанополімерів на основі циркуленів, а також моделюванню нових нітроген-вмістних високо-енергетичних матеріалів із застосуванням молекулярного і твердотільного підходів. Були запропоновані моделі нових алотропних модифікацій графену. Зокрема, стаття «DFT characterization of a new possible graphene allotrope» в журналі «Chemical Physics Letters» видавництва «Elsevier» була винесена на обкладинку журналу за вибором редактора як найбільш значущої статті у даному номері.

Вірною дружиною ювіляра й надійною соратницею Бориса Пилиповича є кандидат хімічних наук, доцент, старша наукова співробітниця ЧНУ Валентина Мінаєва, з якою Борис Пилипович прожив уже понад пів віку. Чимало наукових праць створено професором у

співавторстві з дружиною, разом вони беруть участь у багатьох наукових заходах, закордонних відрядженнях. Мають сина та онуків.

Багато уваги Борис Пилипович приділяє роботі з молоддю. У роботі з аспірантами дуже вимогливий і одночасно дуже щедрий: він постійно ділиться своїми знахідками, дарує ідеї і взагалі допомагає в цій важкій роботі по розрахунку електронних властивостей молекул. Під його керівництвом виконано та захищено 17 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).

Науковий доробок Б. П. Мінаєва складає понад 700 статей у фахових світових журналах у галузі квантової хімії та 9 монографій. Три з них – у видавництві «Наука»: «Теорія електронного строєння молекул» (1988), «Квантовая электрохимия алкалоидов» (1986), «Оптические и магнитные свойства триплетного состояния» (1983). Підручник «Органічна електроніка» (2014) та монографія «Органічні світловипромінювальні структури: колективна монографія» (2020) були видані у Національному університеті «Львівська політехніка», монографія «Електронна будова та спектральні властивості гетероциркуленів» (2017) – у видавництві ЧНУ, монографія «Елементи та пристрої органічної електроніки: колективна монографія» (2020) – у Львівському видавництві «Простір». Три великих розділи опубліковані у монографіях «Organic Light Emitting Diode – Material, Process and Devices» (2011), «Handbook of Computational Chemistry» (2017) та «In Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering». Університет м. Лінчепінгу (Швеція) опублікував об'ємну роботу «Spin Catalysis» за 5 років роботи Б. Мінаєва.

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), двічі нагороджений премією «Scopus Award Ukraine» (2016, 2017), грамотою та медаллю Кабінету Міністрів України (2017), премією «Web of Science Awards 2019». У червні 2016 року Б. П. Мінаєв був обраний академіком Академії наук Вищої школи України. В 2021 році Борису Пилиповичу було призначено довічну стипендію Кабінету Міністрів України, а в 2022 році – нагороджено орденом «За заслуги» III ступеня (Указ Президента України №27/2022).

З травня 2022 р. по серпень 2023 р. Мінаєв Б.П. працював у Швеції в Університеті Упсали та виконав серію квантово-хімічних досліджень присвячених молекулярній електроніці. Загалом опубліковано 11 статей.

Праці професора Б. П. Мінаєва добре відомі у світі. Сотні статей побачили світ у рейтингових (міжнародних) часописах англійською мовою. За даними інформаційно-пошукової системи Scopus індекс Гірша (показник цитованості вченого) дорівнює 47, а Google Academia – 56. Загалом в активі вченого — понад 10700 цитувань.

Колектив кафедри пишається своїм наставником, вчителем, науковцем, взірцем та вважає за честь працювати разом та переймати досвід. Його наукові доробки надихають усіх працівників для майбутніх здобутків та творчих ідей.

Такі постаті, як професор Борис Мінаєв, відіграють важливу роль у становленні України. Пишаємось, що понад 16 років працюємо з ним в Черкаському національному університеті.

Колектив ННІ природничих та аграрних наук ЧНУ, редакційна колегія журналу «Вісник Черкаського університету», учні та колеги вітають професора Мінаєва Бориса Пилиповича з 80-річчям та бажають йому подальшої плідної роботи.

### Список використаної літератури

1. Литвин В. А., Мінаєва В.О., Карауш-Кармазін Н. М., Баришніков Г. В. Учений, учитель, ентузіаст. Борис Пилипович Мінаєв. До 75-го дня народження. Черкаси : Вид. Чабаненко Ю. А., 2018. 80 с.

2. Мінаєв Борис Пилипович: доктор хімічних наук, професор, заслужений діяч науки і техніки України. Біобібліографічний покажчик. Черкаси: Вид. від. ЧНУ ім. Б. Хмельницького, 2012. 117с.
3. Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького. К.: Світ Успіху, 2009. 207 с.
4. Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького. Черкаси: Вертикаль, 2016. 184 с.

### References

1. Litvin V.A., Minaeva V.A., Karaush-Karmazin N.N., Baryshnikov G.V. (2018). Scientist, Teacher, Enthusiast. Boris Filipovych Minaev: On the 75th anniversary. Cherkasy: Chabanenko Yu. A., 80.
2. Minaev Boris Filipovich: Doctor of Chemical Sciences, Professor, Honored Worker of Science and Technology of Ukraine. Bibliographic index. (2012). Cherkasy: Pub. Depart. of the B. Khmelnytsky ChNU, 117. (inUkr.).
3. Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy. K.: Svit Uspikhu [The World of Success], 2009. 207. (in Ukr.).
4. Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy. Cherkasy: Vertikal'[Vertical], 2016. 184. (in Ukr.).

**Panchenko O.O., Shaforost Yu.A., Karaush-Karmazin N.M., Gavrilyuk M.N. On the 80th Anniversary of Birthday and 60 years of Scientific Activity of the Doctor of Chemical Sciences, Professor, Honored Science and Technology Worker of Ukraine – Boris Filipovych Minaev**

*The article highlights the main periods of life, scientific and pedagogical activity of the Doctor of Chemical Sciences, Professor, Head of the Department of Chemistry and Nanomaterials Science – Boris Filipovich Minaev. The main directions of Minaev's scientific interests are the spin-orbit coupling effects in molecules and their influence on spectra, biochemistry, luminescence and chemical reactivity. His scientific works are well-known in the world. They are published in the leading international journals and are widely cited in the scientific literature. In these works, the professor explores many extraordinary problems of chemistry. For example, an unusual fact of spin-flip at the stage of electron transfer and the formation of an ion-radical pair in the ion-radical pair  $FADH_2^+ \dots O_2^-$  is firmly established by B. F. Minayev. The proposed mechanism of spin relaxation in the superoxide ion removes all questions in this problem. B. F. Minaev first explained the mechanism of luminescence of singlet  $^1\Delta_g$  and  $^1\Sigma_g^+$  oxygen in the gas phase without collisions (at zero pressure) and in solutions, gave an explanation for the quenching of  $^1\Delta_g$  oxygen, calculated the effect of  $O_2$  on singlet-triplet transitions in crystals and predicted cooperative effects in complexes collision of oxygen with diamagnetic and paramagnetic molecules. Together with his colleagues from the KTH Royal Institute of Technology (Stockholm), quantum-chemical calculations of the electronic structure of a number of flavoprotein enzymes and copper-containing aminooxidases were carried out. In addition to the traditional approach to magnetochemistry, when magnetic perturbations are taken into account to calculate the ultrafine structure in the spectra of electron paramagnetic resonance (EPR) of radicals or nuclear magnetic resonance (NMR) of diamagnetic molecules, Minayev's works emphasize the role of triplet states in chemistry, molecular electronics, biochemistry and catalysis in the calculation of SOC, spin-spin interaction, g-factor anisotropy and other magnetic interactions. B.F. Minaev first focused attention on the fact that spin-orbit interaction effects are important in organic light-emitting diodes (OLEDs), because singlet-triplet transitions triple the efficiency of recombination of electrons and holes during the electroluminescence of OLEDs. He proposed models of catalysis in which the main attention is paid to spin-dependent electronic activation mechanisms. In total, B.F. Minayev's scientific achievements include more than 700 articles in professional world journals in the field of quantum chemistry and 9 monographs. According to the information and search system Scopus, the Hirsch index (a scientist's citation index) is 47, and Google Academia – 56. In total, the scientist has more than 10700 citations.*

*Such figures as Professor Borys Minaev play an important role in the formation of Ukraine. We are proud to have worked with him at Cherkasy National University for more than 16 years. The staff of the Institute of Natural and Agrarian Sciences of the ChNU, the editorial board of the magazine "Cherkasy University Bulletin", students and colleagues congratulate Professor Minaev Borys Pylypovich on his 80th birthday and wish him further fruitful work.*

**Keywords:** *Minaev Boris Filipovych, spin-orbit coupling, spin-catalysis, molecular oxygen, phosphorescence.*

Одержано редакцією: 4.12.2023  
Прийнято до публікації: 14.12.2023