

Результати досліджень теплопровідності композитних покриттів наведено на рис. 3. Різниця температур зовнішньої сторони чистої алюмінієвої пластини (1) і пластини з покриттям PC/слода (50 %) становить близько 100 °C після нагрівання впродовж 5–10 с і 70 °C після 20–25 с. Для зразка PC/слода (60 %) різниця температур за такий же інтервал часу становить 82 °C. Захисні покриття після випробувань темніють в центрі, але не відшаровуються від поверхні і не підтримують горіння, що забезпечує їх термозахисні властивості. Отримані результати свідчать про високу ефективність композитів на основі фенольної смоли і слою як вогнетривких захисних покриттів, яка може бути підвищена хімічною модифікацією смоли, а також збільшенням товщини шару покриття.

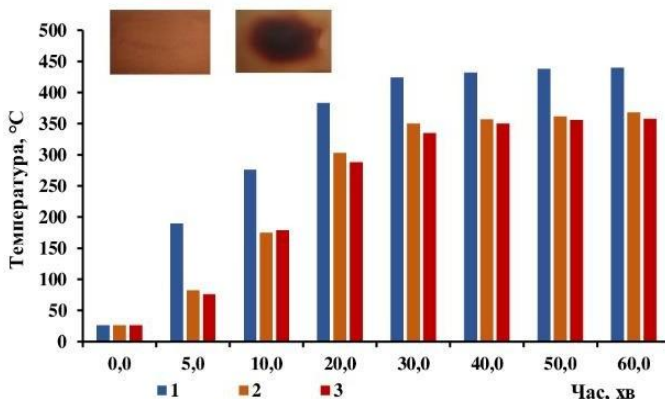


Рис. 3. Залежність температури алюмінієвих пластин від часу нагрівання: 1 – пластина без покриття, 2 – пластина з покриттям PC/слода (50 %), 3 – PC/слода (60 %)

Список використаних джерел

1. Bian L., Xiao J., Zeng J., Xing S., Yin C. *Mater.Des.* 2014, **62**, 424–429.
2. Liu Y., Jiang D., Hessien M. M., Mahmoud M. H. H., Xu M., El-Bahy Z. M. *Adv Compos Hybrid Mater.* 2024, **7**, 180.
3. Ding J., Huang Z., Luo H., Qin Y., Shi M. *Mater. Res. Innov.* 2015, **19**, S-8-440-S-8-444.
4. Yang S., Zhang S., Zhang R., Zhang J., Shen Q. *Adv. Mater.* 2025, **40**, 1231–1238.

ХІРАЛЬНО-ІНДУКОВАНА СПІНОВА СЕЛЕКТИВНІСТЬ ПРИ ДИЗАЙНІ ОРГАНІЧНИХ СВІТЛО-ВИПРОМІНЮЮЧИХ ДІОДІВ З ЦИРКУЛЯРНО ПОЛЯРИЗОВАНИМ ВИПРОМІНЮВАННЯМ

^aБорис Мінаєв, ^bПавло Стахіра, ^aОлександр Панченко, ^aВалентина Мінаєва

^a Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, кафедра хімії та наноматеріалознавства, Черкаси, Україна

^b Національний університет "Львівська Політехніка", кафедра електронної інженерії, інститут інформаційно-комунікаційних технологій та електронної інженерії, Львів, Україна. e-mail: bfm43@ukr.net

Електронні механізми всіх ключових біологічних реакцій, що лежать в основі аеробного життя, ґрунтуються на спіновому каталізі. Це кінцевий етап перетворення води в кисень при фотосинтезі і практично зворотна реакція у циклі Кальвіна при клітинному

диханні (окиснення органічної їжі з виділенням CO_2 і води). Це процеси, які відбуваються з абсолютно очевидним порушенням правила збереження спіна в хімічних реакціях. Тут природа ніби кидає виклик всій сучасній хімічній науці, але хіміки довго мовчали, наче не помічаючи проблеми. Після створення квантової механіки та теорії Паулі хіміки відразу ж використали поняття спіна для пояснення природи ковалентного хімічного зв'язку та парамагнетизму молекули кисню – молекули, яка зрештою утворила Землю і дала початок аеробному життю на планеті. Радикально-ланцюговий механізм реакцій горіння з його простою роллю одного неспареного спіна незабаром розгадали. Але робота ферментів, що перетворюють парамагнітний кисень на діаманітну воду, ще довго залишалася загадкою.

Спіновий каталіз – глобальна проблема хімічної науки, що пронизує всі новітні галузі природознавства від квантової інформаційної технології та спінової поляризації хіральних молекул до електролюмінесценції органічних полімерів та ОЛЕДів з циркулярно-поляризованим випромінюванням. Проте хіміки досі ігнорують проблеми спінового каталізу. Навіть проста класифікація цих проблем та їх систематична теорія відсутні.

Відомо, що каталіз – це прискорення хімічної реакції при додаванні якогось каталізатора, який сам не входить у продукти реакції, але допомагає знизити енергетичний бар'єр хімічного перетворення. Спін-каталіз не обов'язково пов'язаний із введенням нової речовини, його головна риса – це зміна спінових та орбітальних характеристик хвильових функцій, що викликає зміну маршруту та бар'єру реакції. В цих тезах обговорено основні характеристики спін-каталізу та його можливу роль у молекулярній електроніці [1–5].

Кисень повітря, або триплетний кисень (молекула O_2 в основному стані $X^3\Sigma_g^-$) має електронний спін $S=1$, але через відсутність орбітального кутового моменту електронів (L_z), молекула O_2 не виявляє внутрішньої магнітної енергії, принаймні в значній помітній кількості. Оскільки $L_z=0$, спін-орбітальна взаємодія (COB) також дорівнює нулю, як і величина оператора $H_{\text{сов}}$, що спостерігається, на відміну від недіагонального матричного елемента $H_{\text{сов}}$ між основним триплетом і збудженим синглетним станом $b^1\Sigma_g^+$ [1]. Це призводить до малої енергії розщеплення триплету в рамках теорії збурень другого порядку [1, 2], що особливо не позначається на хімічній поведінці кисню, але істотно впливає на спектральні властивості і на параметри фотодинамічної терапії синглетного кисню.

Перенесення електрона від молекули донора (D) на кисень різко змінює «магнітний пейзаж» у системі супероксид іону O_2^- порівняно з O_2 [1]. Основний стан супероксид аніону має симетрію $X^2\Pi_g$. Це дублет з одним неспареним спіном, який має проекцію орбітального кутового моменту електрона на вісь молекули $L_z = 1$ (в атомних одиницях, тобто дорівнює значенню постійної Планка $\hbar/2\pi$). Взаємодія між спіновим і орбітальним кутовими моментами призводить до розщеплення $X^2\Pi_g$ стану на два рівні з повним кутовим моментом $J=3/2$ і $J=1/2$. У цьому випадку енергія розщеплення дорівнює величині матричного елемента оператора COB для π_g молекулярної орбіталі кисню. Простий розрахунок COB дає енергію розщеплення 160 см^{-1} (0.2 eV) або 19 кДж/моль для двох магнітних підрівнів $X^2\Pi_g$ стану супероксиду згідно з експериментами над іон-молекулярними пучками O_2^- [1]. Ця енергія порівняно висока; вона може бути порівняна з тепловою енергією (кВТ) і в мільйони разів перевищує магнітні збурення, типові для стандартної теорії радикальних пар (ТРП) в органічній хімії. Не дивно, що стандартна теорія РП не може бути застосована до радикальних пар типу $D^+\dots\text{O}_2^-$ [2]. Магнітні сили COB, які впливають на взаєморозташування спінів у триплетній та синглетній

радикальних парах настільки сильні, що можуть викликати T–S перехід і за відсутності виродження між T та S станами РП.

Дослідження, представлене в цих тезах, було профінансовано National Science Foundation (NSF) (Grant No 0124U003833).

References

1. B. F. Minaev, N. A. Murugan, H. Ågren. Dioxyspectra and bioactivation. International Journal of Quantum Chemistry, 2013, 113 (14), 1847–1867.
2. P. J. Horie, K. Ivanov, M. R. Wasielewski. Spinchemistry. J. Chem. Phys., 2020, 152, 120401.
3. Stanitska M., Deva L., Minaev B., Minaeva V., Panchenko O., Ågren H., Volyniuk D., Keruckienė R., Khomyak S., Maksymych V., Stakhira P., Gražulevičius J. V. Hetero-donors-adorned anthraquinones with near infra-red absorption for solution-processable photodetectors. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2025, 332, 125805
4. M. Engström, B. Minaev, O. Vahtras, H. Ågren. Linear response calculations of electronic g-factors and spin-rotational coupling constants for diatomic molecules with a triplet ground state. Chemical physics, 1998, 237 (1-2), 149–158.
5. B. Minaev, M. Sukhyna, P. Stakhira, V. Minaeva, H. Ågren. Unusuallyhighspin–orbitcoupling in themethioninesinglet–triplettransition and therole of magnetic perturbations in aminoacids. Physical Chemistry Chemical Physics, 2025, 27 (25), 13340–13351.

МОДЕЛЮВАННЯ ЧУТЛИВОСТІ ДО ТЕРТЯ ВИСОКОАЗОТНИХ ГЕТЕРОЦИКЛІВ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ ANN ТА GFA-ПІДХОДІВ

Роман Заболотний, Сєрґій Бондарчук

*Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,
кафедра хімії та наноматеріалознавства, Черкаси, Україна
e-mail: zabolotnii.roman2221@vu.edu.edu.ua*

Чутливість до механічних впливів, зокрема до тертя (FS), є критично важливою характеристикою енергоємних сполук, зокрема високоазотних гетероциклів, що широко досліджуються як перспективні вибухові речовини наступного покоління. Традиційні експериментальні методи визначення чутливості є дорогими, небезпечними та трудомісткими, що зумовлює активний розвиток теоретичних і обчислювальних підходів до її прогнозування. Сучасні дослідження демонструють високу ефективність методів машинного навчання, зокрема глибокого навчання, проте такі підходи вимагають значних за обсягом наборів даних, що налічують сотні і навіть тисячі значень. З іншого боку використання малих наборів даних, що становить десятки значень зазвичай вимагає інформаційно дуже важливих дескрипторів, таких, які можна отримати на основі квантово-хімічних розрахунків молекул, а подекуди і кристалів неемпіричними методами, зокрема в рамках теорії функціоналу густини (DFT) [1]. Інший підхід, який гарно зарекомендував себе для малих наборів даних, це метод апроксимації генетичної функції (GFA) [2]. І хоча в обох випадках отримані емпіричні рівняння демонструють високі коефіцієнти кореляції ($R^2 = 0,96$ та $R^2 = 0,9$), тестування отриманих моделей на незалежному зовнішньому наборі даних не проводилось, а була виконана лише внутрішня перехресна валідація. Тому в рамках цієї роботи нами було перевірено результати використання методів GFA та штучних нейронних мереж (ANN) для невеликих наборів даних із незалежним зовнішнім тестуванням отриманих моделей чутливості.