

УДК 544.163.3

Шафорост Юлія Анатоліївна

к.х.н., доцент,
Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького,
ZdorYulia@ukr.net
ORCID 0000-0002-0002-2803

Бойко Віра Іванівна

к.х.н., доцент,
Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького,
boikovdek@ukr.net

Лут Олена Артурівна

к.х.н., доцент,
Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького,
lutlen@ukr.net
ORCID 0000-0002-0288-4255

ДОЦЕНТУ В. О. МІНАЄВІЙ 75-РОКІВ

У даній статті висвітлені основні етапи життя, наукової та педагогічної діяльності кандидата хімічних наук, доцента Черкаського національного університету Валентини Олександрівни Мінаєвої. У статті відображені вагомі досягнення вченої та її внесок в галузь аналітичної хімії та інфрачервоної спектроскопії стероїдних гормонів, процесів зв'язування кисню з гемоглобіном та окиснювального фосфорилування. Матеріали статті та список джерел знайомлять читача з напрямками наукової діяльності та інтересами вченої, до яких відносяться квантова хімія, квантова біохімія і дослідження спінових ефектів молекулярного кисню при біологічному окисненні.

Результати робіт В. О. Мінаєвої широко цитуються у світовій науковій літературі. На сьогоднішній день, за даними всесвітньої агенції «Google Академія», доцент В. О. Мінаєва має науковий рейтинг Хірша $h = 22$, загальне число цитувань 1348 (з них 879 - число цитувань за останні 5 р.) За даними бази «Scopus» вона має індекс Хірша, якій складає 19.

Ключові слова: стероїдні гормони, гемоглобін, зв'язування триплетного кисню, окиснювальне фосфорилування аналітична хімія, спектроскопія, метод самоузгодженого поля, метод конфігураційної взаємодії.

Нещодавно, восени 2020 року, Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького (ЧНУ) відсвяткував 75-річний ювілей від дня народження і 50 років наукової діяльності доцента кафедри хімії та наноматеріалознавства ЧНУ, кандидата хімічних наук Валентини Олександрівни Мінаєвої. Викладач вишу присвятила більше



тридцяти двох років своєї науково-педагогічної роботи в ЧНУ підготовці висококваліфікованих хіміків-аналітиків та біологів, які працюють в школах та науково-виробничих лабораторіях Черкащини, а також далеко за її межами по всій Україні. Значний внесок доцент Мінаєва зробила в справі становлення Черкаської школи аналітичної і фізичної хімії, молекулярної спектроскопії, про що свідчать її наукові публікації – майже півсотні статей в зареєстрованих журналах системи «Scopus» [1–37], 3 монографії, 15 підручників та близько тисячі цитувань за базою «Scopus».

Валентина Олександрівна закінчила хімічний факультет Томського державного університету в 1967 р. та аспірантуру ТДУ в 1972 році за спеціальністю аналітична хімія. В тому ж році захистила дисертацію на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук. Наукова діячка одержала цікаві результати з дослідження адсорбції на поверхні арсеніду галію, які згодом були впроваджені у виробництво з напівпровідникових матеріалів. Після закінчення аспірантури В. О. Мінаєва працювала молодшим науковим співробітником в Сибірському Відділенні АН СРСР в Інституті хімії нафти. В 1974 р. перейшла на посаду старшого викладача Карагандинського державного університету (КарДУ), де потім працювала доцентом на кафедрі аналітичної хімії впродовж 15 років до 1989 р. Велика родина В. О. Мінаєвої та її чоловіка на той час проживала у місті Києві, тому разом з ним і сином вона, за волею долі, переїхали до України. Валентина Олександрівна розпочала роботу на посаді доцента кафедри хімії ЧНУ і працює на цій же посаді майже 32 роки до теперішнього часу.

В Казахстані (КарДУ) доцент В. О. Мінаєва довгий час викладала аналітичну та фізичну хімію, займалась хімією халькогенідів, геохімічними дослідженнями для геології Центрального Казахстану та корозією металів у шахтах Караганди. В Україні (ЧНУ) продовжила свої методичні напрацювання в галузі викладання аналітичної хімії. Науковий працівник видала 15 підручників і посібників з аналітичної хімії та по різних спецкурсам, включаючи методи математичної обробки та застосування квантової хімії в спектральному аналізі.

Валентина Олександрівна Мінаєва – одна з перших викладачів хіміків-аналітиків в Україні, яка почала впроваджувати та використовувати методи квантової хімії самоузгодженого поля для молекулярних орбіталей і метод конфігураційної взаємодії при розрахунках ультрафіолетових спектрів для задач аналітичної хімії. З 2002 року вона почала розрахунки інфрачервоних (ІЧ) спектрів стероїдних гормонів (естріол, естрадіол), а також органічних комплексів іонів металів (міді і цинку). Квантові розрахунки наукової діячки за останні 10 років на основі теорії функціоналу густини (DFT) для ІЧ спектрів кортико-стероїдних гормонів стали візитною карткою нашого університету у справі використання коливальної ІЧ спектроскопії атомних ядер при аналізі частот коливань та при визначенні зв'язків гормонів з рецепторами [2–6, 11, 18, 35]. Сумісно з вченими інших країн нею було впроваджено радіочастотну техніку вимірювання тера-герцової області коливальних низько-частотних спектрів стероїдних гормонів та їх комбінаційного розсіювання світла, що є важливим досягненням і інноваційним кроком в медико-біологічній галузі науки.

Довгий час привертав увагу доцента В. О. Мінаєвої напрям біохімії і біофізики молекулярного кисню [1, 7, 36]. На науковій ниві свого життя Валентина Олександрівна завжди відчувала теплу підтримку рідного чоловіку професора Б. П. Мінаєва, який є відомим науковим діячем в галузі квантової хімії. Науковий тандем подружжя розглядав спінові ефекти електронних спектрів O_2 та аналіз реакційної здатності кисню. Ними було розглянуто хімічні реакції молекули O_2 з органічними речовинами та враховано особливості діаманітної будови молекули та можливі переходи електронів, які заборонені за спіном. Продовжуючи вивчати та досліджувати горіння органічних сполук в повітрі, науковці розглянули причину

виникнення перших радикалів (частинок з неспареним спіном). Так горять метан і пропан при піднесенні сірника. В полум'ї сірника радикал може вступати в реакцію з O_2 і окиснювати метан до CO_2 і води за рахунок радикально-ланцюгового механізму горіння. Яка причина природнього окиснення глюкози в живій клітині і чому це відбувається? Наукова діячка розглядала ферменти глюкозо-оксидази та моно-оксигеназ методами квантової хімії і показала яким чином спін-орбітальна взаємодія в супероксид-іоні знімає спінову заборону в біологічному окисненні [34, 36]. Цікаві ефекти спін-орбітальної взаємодії були отримані для процесів зв'язування кисню з гемоглобіном [1].

Значний інтерес у багатьох хіміків-аналітиків на початку 2010-х років викликав розвиток молекулярної електроніки на основі хімічних нанотехнологій. В цій сфері проводила свої наукові дослідження доцент Мінаєва В. О. [8–33]. Основними здобутками в цій галузі є аналіз ІЧ, видимих і ультрафіолетових спектрів метало-органічних комплексів іонів іридію, рутенію, молекул роданідів, ксантенів та величезного класу гетеро[8]циркуленів. Було досліджено багато інших барвників і люмінофорів як емітерів та сенсорів для молекулярної електроніки. Ці роботи проведені в рамках кафедральних та двох держбюджетних проектів.

Під час численних наукових стажувань в університеті Лінчепінгу (1994–1998) та в вищій королівській технічній школі в Стокгольмі (1999–2014) у Швеції доцент В. О. Мінаєва проводила квантово-хімічні дослідження органічних люмінофорів і напівпровідників допованих комплексами іонів тривалентного Іридію, які використовуються в сучасних органічних світловипромінюючих діодах (ОСВД або англійською мовою – OLED). Ці роботи постійно і доволі широко цитуються в світовій літературі [12, 20, 22].

Валентина Олександрівна є автором 144 наукових статей, зафіксованих в міжнародних бібліографічних базах даних і має індекс Хірша $h=19$ за даними бази Scopus (загальна кількість 927 цитувань). За даними Google Scholar має $h=22$ (1348 цитувань). Слід відмітити, що бібліометрика української науки визначила рейтингове місце наукових здобутків Валентини Олександрівни Мінаєвої на п'ятнадцятій сходинці серед усіх науковців університетів Міністерства Освіти і Науки та Академії Наук України в галузі нанотехнології. Її досягнення в наукових публікаціях з аналізу ІЧ спектрів стероїдних гормонів і гетеро-циркуленів залишаються основними світовими досягненнями в цих галузях.

Наукові здобутки доцента Мінаєвої В. О. є загальноновизнаними. Не менш значимою є її навчальна діяльність. Сотні випускників хіміків, біологів, які працюють в школах, коледжах, університетах, науково-дослідних та заводських лабораторіях вдячні Валентині Олександрівні за глибокі теоретичні знання та практичні навички, набуті в стінах рідного університету. Кожна дисципліна, яку за дорученням кафедри веде доцент Мінаєва В. О. супроводжується якісним навчально-методичним забезпеченням: сучасні ґрунтовні навчальні програми, електронні конспекти лекцій, детальні методичні розробки до лабораторних і практичних занять, пакети контрольних завдань.

Високу професійність, вимогливість, принциповість, бажання якісно підготувати студента до виконання своїх професійних обов'язків у майбутньому – основні риси доцента Мінаєвої В. О. як викладача.

Вдячні Валентині Олександрівні і молоді науковці кафедри. Вона була їх викладачем-наставником не лише у студентські роки, а й в період становлення молодого педагога, науковця. Постійно сприяла професійному зростанню молодих колег, залучала їх до активної наукової діяльності.

Валентино Олександрівно! Ваш творчий науковий пошук триває, попереду – нові відкриття, наукові перемоги та досягнення. Зичимо Вам творчих успіхів і натхнення,

втілення всіх задумів і здійснення найзаповітніших мрій, родинного тепла і любові, миру і злагоди в сім'ї!

Список використаної літератури

1. Minaev B.F., Minaeva V.A. Spin-dependent binding of dioxygen to heme and charge transfer mechanism of spin-orbit coupling enhancement. *Ukrainica Bioorganica Acta*. 2008. Vol.6, №2. P.56–64.
2. Minaeva V.A. Vibrational spectra of the steroid hormones, estradiol and estriol, calculated by density functional theory. The role of low-frequency vibrations. *Ukr. Biokhim. Zh.* 2008. Vol. 80, №4. P. 82–95.
3. Minaeva V.A. Experimental and theoretical study of IR and Raman spectra of tetraoxa[8]circulenes. *Vibrational Spectroscopy*. 2012. Vol. 61. P. 156–166.
4. Cherkasova O.P., Nazarov M.M., Sapozhnikov D.A., Man'aposkova A.A., Fedulova E.V., Volodin V.A., Minaeva V.A., Minaev B.F., Baryshnikov G.V. Vibrational spectra of corticosteroid hormones in the terahertz range. *Laser Applications in Life Sciences*. 2010. P.73760.
5. Minaev B.F., Minaeva V.A. Study of IR spectrum of the 17 β -estradiol using quantum-chemical density functional theory. *Biopolymers & Cell*. 2006. Vol. 22, №5. P.363–374.
6. Minaeva V.A., Cherkasova O.P., Minaev B.F., Baryshnikov G.V., Khmara A.V. Features of terahertz adsorption and Raman scattering of mineralocorticoid hormones. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2015. Vol.79, №9. P. 1196–1201.
7. Minaev B.F., Agren. H, Minaeva V. A. Spin-orbit coupling in enzymatic reactions and the role of spin in biochemistry. *Handbook of Computational Chemistry*.2017.1557–1587.
8. Minaeva V.A., Minaev B.F., Baryshnikov G.V., Romeyko O.M., Pittelkow M. The FTIR spectra of substituted tetraoxa circulenes and their assignments based on DFT calculations. *Vibrational Spectroscopy*. 2013. Vol. 65. P.147–158.
9. Minaev B.F., Minaeva V.A., Baryshnikov G.V., Girtu M.A., Agren H. Theoretical study of vibration spectra of sensitizing dyes for photoelectrical converters based on ruthenium (II) and iridium (III) complexes. *Russian journal of applied chemistry*. 2009. Vol. 82, №7. P. 1211–1221.
10. Minaeva V.A., Minaev B.F., Baryshnikov G.V., Romeyko O.N., Pittelkow M. Raman spectra of tetraoxa circulenes. *p*-dinaphthalenodiphenylenetetrafurane and its tetraalkyl derivatives (DFT study and experiment). *Journal of Applied Spectroscopy*. 2012. Vol. 79, №5. P. 695–707.
11. Minaeva V.A., Minaev B.F., Baryshnikov G.V., Surovtsev N.V., Cherkasova O.P., Tkachenko L.I., Karaush N.N., Stromylo E.V. Temperature effects in low-frequency Raman spectra of corticosteroid hormones. *Optics and Spectroscopy*. 2015. Vol. 118, №2. P. 214–223.
12. Minaev B.F., Minaeva V.A. *Ab Initio* Study of the Phosphorescence of Nitrite Ions. *Journal of Fluorescence*. 1999. Vol.9, №3. P. 221–232.
13. Minaeva V., Karaush-Karmazin N., Baryshnikov G. Acomplete characterization of vibrational IR and Raman spectra of the highly-symmetrical octathia[8]circulene. *Vibrational Spectroscopy*. 2019. Vol. 100. P. 107–116.
14. Minaeva V.A., Karaush N.N., Minaev B.F., Baryshnikov G.V., Chen F., TanakaT., OsukaA. Comparative study of the structural and spectral properties of tetraaza- and tetraoxaannelated tetracirculenes. *Optics and Spectroscopy*. 2017. Vol. 122, №4. P. 523–540.
15. Slepets A.A., Minaeva V.A. A study of the role played by the Hartree-Fock orbital exchange in the formation of the energy of the first singlet charge-transferexcited state. *Optics and Spectroscopy*. 2014. Vol. 116, №3. P. 431–437.
16. Minaeva V.A., MinaevB.F., KapinusS.S. Study of IR spectrum of the testosterone and ethyniltestosterone by quantum-chemical density functional theory. *Biopolymers and cell*. 2010. Vol.26, №1. P.62–71.
17. Gusev A.N., Kiskin M.A., Braga E.V., Chapran M., Wiosna-Salyga G., Baryshnikov G.V., Minaeva V.A., Minaev B.F., Ivaniuk K., Stakhira P. Ågren H., Linert W. Novel Zinc Complex with an Ethylenediamine Schiff Base for High-Luminance Blue Fluorescent OLED Applications. *Journal of Physical Chemistry C*. 2019. Vol. 123, №18. P. 11850–11859.
18. Milekhin I.A., Cherkasova O.P., Milekhin A.G., Kuznetsov S.A., Rodyakina E.E., Minaeva V.A. Surface-enhanced infrared spectroscopy for cortisol analysis. *Proceedings–International Conference Laser Optics*. 2018.
19. Baryshnikov G.V., Valiev R.R., Cherepanov V.N., Karaush-Karmazin N.N., Minaeva V.A., Minaev B.F., Agren H. Aromaticity and photophysics of tetrasila- and tetragerma-annelated tetrathienylenes as new representatives of the heterocirculene family. *Physical chemistry chemical physics*. 2019. Vol. 21, №18. P. 9246–9254.
20. Minaev B.F., Minaeva V.A., Agren H. Theoretical study of the cyclometalated iridium (III) complexes used as chromophores for organic light-emitting diodes. *The Journal of Physical ChemistryA*. 2009. Vol. 113, №4. P. 726–735.

21. Minaeva V.A., Minaev B.F., Baryshnikov G.V., Agren H., Pittelkow M. Experimental and theoretical study of IR and Raman spectra of tetraoxacirculenes. *Vibrational Spectroscopy*. 2012. Vol. 61. P. 156-166.
22. Minaev B.F., Minaeva V.A. MCSCF response calculations of the excited states properties of the O₂ molecule and a part of its spectrum. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2001. Vol.3, № 5. P. 720–729.
23. Baryshnikov G.V., Minaev B.F., Karaush N.N., Minaeva V.A. Design of nanoscaled materials based on tetraoxa circulene. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2014. Vol.16, № 14. P. 6555–6559.
24. Baryshnikov, G.V. Minaev B.F., Karaush N.N., Minaeva V.A. The art of the possible: computational design of the 1D and 2D materials based on the tetraoxa[8]circulene monomer. *RSC Advances*. 2014. Vol.4, №49. P. 25843–25851.
25. Baryshnikov G.V., Minaev B.F., Minaeva V.A. Electronic structure, aromaticity and spectra of hetero circulenes. *Russian Chemical Reviews*. 2014. Vol. 84, №5. P. 455–477.
26. Baryshnikov G.V., Minaev B.F., Minaeva V.A., Nenajdenko V.G. Singlecrystal architecture and absorption spectra of octathio[8]circulene and sym-tetraselenatetra thio[8]circulene: QTAIM and TD-DFT approach. *Journal of molecular modeling*. 2013. Vol. 19, №10. P. 4511–4519.
27. Baryshnikov G.V., Minaev B.F., Minaeva V.A. Quantum-chemical study of effect of conjugation on structure and spectral properties of C105 sensitizing dye. *Optics and Spectroscopy*. 2011. Vol.110, №3. P.393–397.
28. Baryshnikov G.V., Minaev B.F., Minaeva V.A., Podgornaya A.T., Ågren H. Application of Bader's atoms in molecules theory to the description of coordination bond in the complex compounds of Ca²⁺ and Mg²⁺ with methylenide. *Russian Journal of General Chemistry*. 2012. Vol. 82, №7. P. 1254–1262.
29. Baryshnikov G.V., Minaev B.F., Korop A.A., Minaeva V.A., Gusev A.N. Structure of zinc complexes with 3-(pyridin-2-yl)-5-(arylideneiminophenyl)-1H-1,2,4-triazoles in different tautomeric forms: DFT and QTAIM study. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2013. Vol. 58, №8. P. 928–934.
30. Baryshnikov G.V., Minaeva V.A., Minaev B.F., Karaush N.N. ADFT and QTAIM study of the noble metal complexes with tetraoxa[8]circulene-based ligands. *New Journal of Chemistry*. 2015. Vol. 39, №10. P. 7815–7821.
31. Karaush N.N., Baryshnikov G.V., Minaeva V.A., Ågren H., Minaev B.F. Recent progress in quantum chemistry of hetero circulenes. *Molecular Physics*. 2017. Vol. 115, №17–18. P. 2218–2230.
32. Baryshnikov G. V., Minaev B.F., Minaeva V.A., Ning Z., Zhang Q. Structure and spectral properties of truxenedye S5. *Optics and Spectroscopy*. 2012. Vol. 112, №2. P. 168–174.
33. Minaeva V.A., Minaev B.F., Baryshnikov G.V., Kopylova T.N., Gadirov R.M. Study of structure and spectral characteristics of the binuclear zinc complex with (E)-2-({2-[3-(pyridin-2-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]phenylimino}methyl)phenol. *Russian Journal of General Chemistry*. 2011. Vol. 81, №11. P. 2332–2344.
34. Minaev B.F., Minaeva V.A. Spin-orbit coupling in dioxygen activation and the role of spin in chemistry. *Springer Berlin / Heidelberg*. 2012. P. 1067–1093.
35. Cherkasova O.P., Nazarov M.M., Mañkova A.A., Fedulova E.V., Volodin V.A., Minaeva V.A., Minaev B.F., Baryshnikov G.V. Terahertz time-domain spectroscopy of testosterone, estradiol and estriol. *2010 International Kharkov Symposium on Physics and Engineering of Microwaves, Millimeter and Submillimeter waves*. (Kharkiv, 21-26 June 2010). Kharkiv: IEEE, 2010. P.616–618.
36. Minaev B.F., Minaeva V.A., Leschenko V.N. Electronic structure models of flavoproteins and mechanism of oxidases action. *Biopolymers and Cell*. 2004. Vol. 20, №3. P. 224–232.
37. Baryshnikov G. V., Minaev B. F., Minaeva V. A., Quantum-chemical study of the structure and optical properties of sensitized dyes of an indoline-thiazolidine series. *Optics and Spectroscopy*. 2012. Vol. 108, № 1. P. 16-22.

References

1. Minaev, B. F., & Minaeva, V. A. (2008). Spin-dependent binding of dioxygen to heme and charge-transfer mechanism of spin-orbit coupling enhancement. *Ukrainica Bioorganica Acta*, 6(2), 56–64.
2. Minaeva, V.A. (2008). Vibrational spectra of the steroid hormones, estradiol and estriol, calculated by density functional theory. The role of low-frequency vibrations. *Ukr. Biokhim. Zh.*, 80(4), 82–95.
3. Minaeva, V. A. (2012). Experimental and theoretical study of IR and Raman spectra of tetraoxa circulenes. *Vibrational Spectroscopy*, 61, 156–166.
4. Cherkasova, O. P., Nazarov, M. M., Sapozhnikov, D. A., Man'aposkova, A. A., Fedulova, E. V., Volodin, V. A., Minaeva, V. A., Minaev, B. F., Baryshnikov, G. V. (2010). Vibrational spectra of corticosteroid hormones in the terahertz range. *Laser Applications in Life Sciences*, 73760.
5. Minaev, B. F., & Minaeva, V. A. (2006). Study of IR spectrum of the 17β-estradiol using quantum-chemical density functional theory. *Biopolymers & Cell*, 22(5), 363–374.
6. Minaeva, V. A., Cherkasova, O. P., Minaev, B. F., Baryshnikov, G. V., & Khmara, A. V. (2015). Features of terahertz adsorption and Raman scattering of mineralocorticoid hormones. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 79(9), 1196–1201.

7. Minaev, B.F., Agren, H., & Minaeva, V. A. (2017). Spin-orbit coupling in enzymatic reactions and the role of spin in biochemistry. *Handbook of Computational Chemistry*, 1557–1587.
8. Minaeva, V. A., Minaev, B. F., Baryshnikov, G. V., Romeyko, O. M., & Pittelkow, M. (2013). The FTIR spectra of substituted tetraoxa circulenes and their assignments based on DFT calculations. *Vibrational Spectroscopy*, 65, 147–158.
9. Minaev, B. F., Minaeva, V. A., Baryshnikov, G. V., Girtu, M. A., & Agren, H. (2009). Theoretical study of vibration spectra of sensitizing dyes for photoelectrical converters based on ruthenium (II) and iridium (III) complexes. *Russian journal of applied chemistry*, 82(7), 1211–1221.
10. Minaeva, V. A., Minaev, B. F., Baryshnikov, G. V., Romeyko, O. N., & Pittelkow, M. (2012). Raman spectra of tetraoxa circulenes. *p*-dinaphthalenodiphenylenetetrafulan and its tetraalkyl derivatives (DFT study and experiment). *Journal of Applied Spectroscopy*, 79,(5), 695–707.
11. Minaeva, V. A., Minaev, B. F., Baryshnikov, G. V., Surovtsev, N. V., Cherkasova, O. P., Tkachenko, L. I., Karaush, N. N., Stromylo, E. V. (2015). Temperature effects in low-frequency Raman spectra of corticosteroid hormones. *Optics and Spectroscopy*, 118(2), 214–223.
12. Minaev, B. F., & Minaeva, V. A. (1999). Ab Initio Study of the Phosphorescence of Nitrite Ions. *Journal of Fluorescence*, 9(3), 221–232.
13. Minaeva, V., Karaush-Karmazin, N., Baryshnikov, G. (2019). A complete characterization of vibrational IR and Raman spectra of the highly-symmetrical octathia circulene. *Vibrational Spectroscopy*, 100, 107–116.
14. Minaeva, V. A., Karaush, N. N., Minaev, B. F., Baryshnikov, G. V., Chen, F., Tanaka, T., Osuka, A. (2017). Comparative study of the structural and spectral properties of tetraaza- and tetraoxa-annulated tetra-circulenes. *Optics and Spectroscopy*, 122(4), 523–540.
15. Slepets, A. A., & Minaeva, V. A. (2014). A study of the role played by the Hartree-Fock orbital exchange in the formation of the energy of the first singlet charge-transfer excited state. *Optics and Spectroscopy*, 116(3), 431–437.
16. Minaeva, V. A., Minaev, B. F., & Kapinus, S. S. (2010). Study of IR spectrum of the testosterone and ethynyltestosterone by quantum-chemical density functional theory. *Biopolymers and cell*, 26(1), 62–71.
17. Gusev, A. N., Kiskin, M.A., Braga, E. V., Chapran, M., Wiosna-Salyga, G., Baryshnikov, G. V., Minaeva, V. A., Minaev, B. F., Ivaniuk, K., Stakhira, P., Ågren, H., Linert, W. (2019). Novel Zinc Complex with an Ethylenediamine Schiff Base for High-Luminance Blue Fluorescent OLED Applications. *Journal of Physical Chemistry C*, 123(18), 11850–11859.
18. Milekhin, I. A., Cherkasova, O. P., Milekhin, A. G., Kuznetsov, S. A., Rodyakina, E. E., & Minaeva, V. A. (2018). Surface-enhanced infrared spectroscopy for cortisol analysis. *Proceedings – International Conference Laser Optics*.
19. Baryshnikov, G.V., Valiev, R. R., Cherepanov, V. N., Karaush-Karmazin, N. N., Minaeva, V. A., Minaev, B. F., Agren, H. (2019). Aromaticity and photophysics of tetrasila- and tetra-germa-annulated tetrathienylenes as new representatives of the hetero [8] circulene family. *Physical chemistry chemical physics*, 21(18), 9246–9254.
20. Minaev, B.F., Minaeva, V. A., & Agren, H. (2009). Theoretical study of the cyclometalated iridium (III) complexes used as chromophores for organic light-emitting diodes. *The Journal of Physical Chemistry A*, 113(4), 726–735.
21. Minaeva, V.A., Minaev, B. F., Baryshnikov, G. V., Agren, H., & Pittelkow, M. (2012). Experimental and theoretical study of IR and Raman spectra of tetraoxa [8] circulenes. *Vibrational Spectroscopy*, 61, 156–166.
22. Minaev, B. F., & Minaeva V. A. (2001). MCSCF response calculations of the excited states properties of the O₂ molecule and a part of its spectrum. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 3(5), 720–729.
23. Baryshnikov, G.V., Minaev, B.F., Karaush, N.N., & Minaeva, V.A. (2014). Design of nanoscaled materials based on tetraoxa circulene. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16(14), P. 6555–6559.
24. Baryshnikov, G.V. Minaev, B.F., Karaush, N.N., & Minaeva, V.A. (2014). The art of the possible: computational design of the 1D and 2D materials based on the tetraoxa circulene monomer. *RSC Advances*, 4(49), P. 25843–25851.
25. Baryshnikov, G.V., Minaev, B.F., & Minaeva, V.A. (2014). Electronic structure, aromaticity and spectra of hetero circulenes. *Russian Chemical Reviews*, 84(5), P. 455–477.
26. Baryshnikov, G.V., Minaev, B.F., Minaeva, V.A., & Nenajdenko, V.G. (2013). Single crystal architecture and absorption spectra of octathio circulene and sym-tetraselenatetrathio circulene: QTAIM and TD-DFT approach. *Journal of molecular modeling*, 19(10), P. 4511–4519.
27. Baryshnikov, G.V., Minaev, B.F., & Minaeva, V.A. (2011). Quantum-chemical study of effect of conjugation on structure and spectral properties of C105 sensitizing dye. *Optics and Spectroscopy*, 110(3), P. 393–397.
28. Baryshnikov, G.V., Minaev, B.F., Minaeva, V.A., Podgornaya, A.T., & Ågren, H. (2012). Application of Bader's atoms in molecules theory to the description of coordination bonds in the complex compounds of Ca²⁺ and Mg²⁺ with methylenide. *Russian Journal of General Chemistry*, 82(7), P. 1254–1262.

29. Baryshnikov, G.V., Minaev, B.F., Korop, A.A., Minaev, V.A., & Gusev, A.N. (2013). Structure of zinc complexes with 3-(pyridin-2-yl)-5-(arylideneiminophenyl)-1H-1, 2, 4-triazoles in different tautomeric forms: DFT and QTAIM study. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 58(8), P. 928–934.
30. Baryshnikov, G.V., Minaeva, V.A., Minaev, B.F., & Karaush, N.N. (2015). A DFT and QTAIM study of the novel d-block metal complexes with tetraoxa circulene-based ligands. *New Journal of Chemistry*, 39(10), P. 7815–7821.
31. Karaush, N.N., Baryshnikov, G.V., Minaeva, V.A., Ågren, H., & Minaev, B.F. (2017). Recent progress in quantum chemistry of hetero circulenes. *Molecular Physics*, 115(17–18), P. 2218–2230.
32. Baryshnikov, G.V., Minaev, B.F., Minaeva, V.A., Ning, Z., & Zhang, Q. (2012). Structure and spectral properties of truxene dye S5. *Optics and Spectroscopy*, 112(2), P. 168–174.
33. Minaeva, V. A., Minaev, B. F., Baryshnikov, G.V., Kopylova, T.N., & Gadirov, R.M. (2011). Study of structure and spectral characteristics of the binuclear zinc complex with (E)-2-(2-[3-(pyridin-2-yl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]phenylimino)methylphenol. *Russian Journal of General Chemistry*, 81(11), P. 2332–2344.
34. Minaev, B.F., & Minaeva, V. A. (2012). Spin-orbit coupling in dioxygen activation and the role of spin in chemistry. *Springer Berlin/Heidelberg*, P. 1067–1093.
35. Cherkasova, O.P., Nazarov, M.M., Maňkova, A.A., Fedulova, E.V., Volodin, V.A., Minaeva, V.A., Minaev, B.F., Baryshnikov, G.V. (2010). Terahertz time-domain spectroscopy of testosterone, estradiol and estriol. *2010 International kharkov symposium on physics and engineering of microwaves, millimeter and submillimeter WAVES*. (Kharkiv, 21–26 June 2010). Kharkiv: IEEE, P. 616–618.
36. Minaev, B. F., Minaeva, V.A., & Leschenko, V.N. (2004). Electronic structure models of flavoproteins and mechanism of oxidases action. *Biopolymers and Cell*, 20(3), P. 224–232.
37. Baryshnikov, G. V., Minaev B. F., & Minaeva V. A. (2012). Quantum-chemical study of the structure and optical properties of sensitized dyes of an indoline-thiazolidine series. *Optics and Spectroscopy*, 108(1), P. 16–22.

Summary. *Shaforost Yu. A., Boyko V.I. Lut. , O.A. Associate professor V. A. Minaeva celebrates 75 years from her birthday*

Introduction. *This article covers the main periods of life, scientific and pedagogical activity of the candidate of chemical sciences, associate professor of Cherkasy national university – Valentina Olexandrivna Minaeva.*

Purpose. *The main purpose of this review is to elucidate the creative life path-way of the associate professor V. O. Minaeva during 50 years of her scientific carrier. In the article there are reflected the significant achievements of the scientist and her contribution in the field of analytical chemistry and IR spectroscopy of steroid hormones, O₂ binding by hemoglobin and oxidative phosphorylation processes. The materials of the article and the list of references acquaint the readers with the directions of scientific activity and with scientific interests of the scientist, which include quantum chemistry and investigations of the molecular oxygen spin effects during biological oxidation.*

Methods. *Results being described and discussed in this article are obtained by quantum-chemical methods (DFT, MC SCF, MRCI, TDDFT, linear and quadratic response in CASSCF method) and by experimental studies with the FT-IR, Raman and UV-vis spectroscopy methods.*

Results. *Three main groups of V. O. Minaeva studies are discussed here; (i) theoretical analysis of IR and Raman spectra of steroid hormones including THz applications, (ii) calculations of spin-orbit coupling effects in O₂ molecule and in its enzymatic reactions, (iii) studies of absorption and luminescence spectra of organic semiconductors used in emitter layer of light emitting diodes (OLEDs). The results of associate professor V. O. Minaeva studies are well cited in the world science. According to the world agency “Googlr Scholar” the associate professor V. O. Minaeva has the Hirsch index $h=22$ and the total number of 1348 citations (879 since 2015 year). According to “Scopus” Minaeva V. O. has the Hirsch rating $h = 19$.*

Originality. *Electronic mechanisms of dioxygen activation by glucose oxidases, by mono- and di-oxygenases through electron transfer from FAD cofactor or from substrate itself to superoxide ion are the first physically well-grounded mechanisms of overcoming spin prohibition in biological oxidation. The role of low-frequency vibrations of steroid hormones (including the THz applications) is shown and explained for the first time. The detailed analysis of FTIR and Raman spectra of numerous heterocirculenes is also an original contribution and achievement of ChNU chemical group led by V. O. Minaeva.*

Conclusion. *Valentyna Oleksandrivna Minaeva has spent more than thirty years of her scientific and pedagogical activity to the teaching and training of highly qualified chemists-analysts, which are working in schools, scientific and research-production laboratories of Cherkasy region, as well as behind and throughout Ukraine. Associate Professor Minaeva made a significant contribution to the establishment of the Cherkasy School of Analytical and Physical Chemistry, Molecular Spectroscopy, as evidenced by her scientific publications – more than half hundred articles in the Scopus-registered journals (some of them are presented in Refs. [1-33]), 3 monographs, 15 textbooks and about a thousand citations. The main achievements include analysis of IR, visible and ultraviolet (UV) spectra of steroid hormones, metal complexes of iridium and ruthenium, xanthenes, rhodanides and a big new class of [8]circulene compoundss. During last 10 years V. O. Minaeva has based her quantum calculations on the density functional theory (DFT) for the force fields of steroid hormones; their IR spectra became the hallmark of our university in respect to hormones vibrational spectroscopy, in analysis of hormone–receptor interaction and recognition. Introduction of terahertz radiofrequency techniques for the studies of steroid hormones low-frequency IR spectra together with their Raman scattering measurmentsprovide an innovative step in this important branch of the medico-biological science.*

Keywords: *steroid hormones, triplet oxygen binding by hemoglobin, oxidative phosphorylation, analytical chemistry, IR and UV spectroscopy.*

Одержано редакцією 19.09.20
Прийнято до публікації 05.10.20