

**Звіт завідувача кафедри хімічного матеріалознавства  
хімічного факультету  
Коробова Олександра Ісааковича, доктора хімічних наук, професора  
ректору про роботу кафедри в 2019/2020 навчальному році**

У звітному навчальному році робота проводилася відповідно до чинного законодавства, Статуту Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна та контракту, рішень Конференції трудового колективу, Вчених рад університету та хімічного факультету, поточних розпоряджень ректора, проректорів та декана, а також з оглядом на "Стратегію розвитку Каразінського університету" на 2019-2025 роки.

У зв'язку із вагомими карантинними обмеженнями, значну увагу було приділено дистанційним формам навчання. За рахунок використання дистанційних методів (Zoom, YouTube, тощо) когнітивна складова навчального процесу була виконана в повному обсязі по всіх курсах, які викладає кафедра. В той же час, стало ще більш очевидною важлива роль безпосереднього контакту студентів та викладачів у розвитку не-когнітивних (soft skills) навичок та навичок практичної роботи в лабораторії. У разі карантинних обмежень під час осіннього семестру всі викладачі кафедри готові забезпечити дистанційне навчання по всіх курсах, які викладає кафедра. Побажання викладачів: збільшити кількість робочих місць, обладнаних якісними мікрофонами та камерами.

Незважаючи на проблеми, пов'язані з карантинними обмеженнями, зусилля співробітників кафедри було сфокусовано на проведенні наукової роботи на високому рівні, підтвердження цього рівня публікаціями у провідних наукових виданнях, забезпечення високої якості викладання, сприяння працевлаштуванню випускників та залученню абітурієнтів, залучення позабюджетних коштів. Основні показники наведені у таблиці, публікації та курси, що викладаються у додатку.

**1. Робота з кадрами**

<b>Науково-педагогічні, наукові кадри</b>	<b>Значення показника</b>
1. Загальна кількість працівників, аспірантів і докторантів	17
2. Ставки науково-педагогічних працівників станом на 1 червня 2020 р.:	
– за загальним фондом	5.6
– за спеціальним фондом	2.5
– разом	8.1
3. Кількість науково-педагогічних працівників:	
– працівники університету	9
– зовнішні сумісники	-
– разом	9
Кількість наукових працівників	2.5 ставки наукових працівників

4. Кількість докторів наук, професорів: – працівники університету – зовнішні сумісники – разом Кількість кандидатів наук: – працівники університету – зовнішні сумісники – разом Кількість аспірантів:	3 (2.5 ставки) - 3 6 - 6 3 мають вчене звання 4; план на 2019-2020 н.р. виконано
5. Підвищення кваліфікації	-
6. Вікові характеристики науково-педагогічних працівників: – середній вік – середній вік докторів наук, професорів – відсоток викладачів пенсійного віку – відсоток викладачів молодше 40 років	49 60 33% 33%

## 2. Наукова та інноваційна діяльність і роботи з комерціалізації результатів НДР

Науково-інноваційна діяльність	Значення показника
1. Обсяг фінансування базових НДР у 2019 році, тис. грн.	517425 (№ 3-15-19) 296993 (№ 15-15-18)
2. Кількість договорів на виконання досліджень у 2019 році	2
3. Обсяг фінансування НДР за договорами і грантами, кошти від яких надійшли на рахунок університету у 2019 році	50000 (№11-19) 49800 (№19-19)
4. Обсяг фінансування гранту на модернізацію у 2019 році	75000 грн (№ 811н/11-19)
5. Статті, опубліковані у виданнях, що враховуються системами SCOPUS та / або ISI (за 2019 рік):	16 (наведені у списку публікацій)
6. Підвищення наукового іміджу університету	Проведено значну роботу для включення серії «Хімія» до наукометричних баз Scopus та WoS. ?

## 3. Навчальна діяльність

Навчальна діяльність	Значення показника
4 Навчальне навантаження кафедри у 2019/2020 навчальному році: – загальне, год. – аудиторні заняття, год.	4732 3091
2. Викладання іноземними мовами: – кількість навчальних дисциплін, що викладаються іноземними мовами,	1 (Біологічна та біоорганічна хімія, медичний факультет)
3. Кількість підручників, навчальних посібників (за 2019 рік)	-
4. WEB - забезпечення	Робочі програми навчальних дисциплін, презентаційні матеріали на сайтах факультету та кафедри

5. Забезпечення якості освіти	Поточний та підсумковий контроль з усіх дисциплін
6. Сприяння працевлаштуванню випускників	Організація проходження виробничої практики у місцях, де потенційно можливе працевлаштування
7. Профорієнтаційна активність	Участь у заходах МАН, ніч науки, ТЮХ, дні відкритих дверей

#### Внесок у виконання "Стратегії розвитку Каразинського університету" на 2019-2025 роки

Напрямок	Значення показника
Залучення позабюджетних коштів	100 000 грив., наукові дослідження
Своєчасний захист дисертацій аспірантами	Поточні плани трьох аспірантів кафедри виконані повністю
Підвищення кількості статей у журналах, що індексуються Scopus та WoS	16 у 2019 році; 5 у першому півріччі 2020 р.
Викладачі, які викладають європейськими мовами	50%
Проходження виробничої практики поза університетом	100% для денного відділення
Наукові видання, що індексуються Scopus та WoS	Проведено значну роботу для включення серії «Хімія» до наукометричних баз Scopus та WoS.

#### Курси, які викладає кафедра

«Основи хімічної технології» проф. Коробов О. І., доц. Котляр В. М.  
«Актуальні проблеми фізичної хімії» проф. Коробов О. І.  
«Теоретичні методи хімії поверхні і твердого тіла» проф. Коробов О. І.  
«Сучасні комп'ютерні методи в хімії» проф. Коробов О. І., Проф. Іванов В. В.  
«Прикладна квантова хімія» проф. Іванов В. В.  
«Хемоінформатика і хеометрія» проф. Іванов В. В., доц. Пантелеймонов А. В.  
«Молекулярне моделювання» проф. Іванов В. В., доц. Захаров А. Б.  
«Хемоінформатика та інформаційні технології для хіміків» доц. Пантелеймонов А. В., доц. Христенко І. В.  
«Кількісний фізико-хімічний аналіз» доц. Пантелеймонов А. В., доц. Христенко І. В.  
«Загальна та хімічна екологія» доц. Христенко І. В.  
«Хімія ВМС» проф. Рошаль О. Д., доц. Захаров А. Б., доц. Ткаченко О.С., Котляр В.М. (заочне від-ня)  
«Біологічна та біоорганічна хімія» проф. Рошаль О. Д., доц. Захаров А. Б., доц. Ткаченко О. С., доц. Котляр В. М., доц. Шкумат А. П.  
«Органічна та аналітична хімія», доц. Шкумат А. П. (біологічний факультет)  
«Токсикологія: Трансформація та моніторинг ксенобіотиків», доц. Шкумат А. П. (міжфакультетська дисципліна)

#### Список публікацій у 2019 та 2020 роках

##### 2019 рік

##### Монографії

1. Рошаль А.Д. Основы фотоники. Электронная абсорбционная спектроскопия. 2019, Харків: Вид. ХНУ ім. В.Н. Каразіна, 236 с.

##### Статті у журналах, що мають імпакт-фактор та/або реферується системами SCOPUS або Web of Science

1. Photoreactive fused aziridinylpiperazines on the background of 4-substituted chalcones and their benzimidazolic analogs / Volodymyr M. Kotlyar, Oleksii O. Kolomoitsev, [Dmytro V. Nikolaievskiy](#) [et al.] // *Journal of molecular Structure*. – 2019. – Vol. 1180. – P. 741-746. DOI: [10.1016/j.molstruc.2018.12.015](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.12.015)
2. 4'-Methoxy-3-hydroxyflavone excited state intramolecular proton transfer reaction in alcoholic solutions: Intermolecular versus intramolecular hydrogen bonding effect / Andrey O. Doroshenko, Alexander V. Kyrychenko, Oksana M. Valyashko, Vladimir M. Kotlyar, Denis A. Svechkarov // *Journal of Photochemistry & Photobiology A: Chemistry*. – 2019. Vol. 383. – P. 111964. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2019.111964>
3. A.V. Tkachenko, M.O. Onizhuk, O.S. Tkachenko, L.T. Arenas, E.V. Benvenutti, Y. Gushikem, A.V. Panteleimonov (2019) An Electrochemical Sensor Based on Graphite Electrode Modified with Silica

- Containing 1-*n*-Propyl-3-Methylimidazolium Species for Determination of Ascorbic Acid. *Methods and objects of chemical analysis* 14(1):5-14. <https://doi.org/10.17721/moca.2019.5-14> (IF=0.3 in 2018)
4. L.V. de Souza, O. Tkachenko, B. Nunes, T.M. Pizzolato, S.L.P. Dias, L.T. Arenas, T.M.H. Costa, C.C. Moro, E.V. Benvenuti (2019) Strategy to control the amount of titania dispersed on SBA-15 surface preserving its porosity, aiming to develop a sensor for electrochemical evaluation of antibiotics. *Microporous & Mesoporous Materials* 287:203–210. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2019.06.013> (IF=4.18 in 2018)
  5. L.V. de Souza, D.S. da Rosa, O.S. Tkachenko, A. de A. Gomes, T.M. H. Costa, L.T. Arenas, E.V. Benvenuti (2019) The role silica pore structure plays in the performance of modified carbon paste electrodes. *Ionics* 25:3259–3268. <https://doi.org/10.1007/s11581-019-02882-0> (IF=2.29 in 2018)
  6. D.A. Mishurov, A. A. Voronkin, O. D. Roshal. Hydroxyflavone-containing polymers: theoretical prediction of spectral and nonlinear optical properties // *Functional materials* –2019.–26 (1). P.164-173. <https://doi.org/10.15407/fm26.01.164> (SCOPUS)
  7. Krzyński K., Roshal A., Rudnicki-Velasquez P., Źamojć K. On the use of acridinium indicators for the chemiluminescent determination of the total antioxidant capacity of dietary supplements // *Luminescence*.- 2019.- V.34, iss.5.- P.512-519. <https://doi.org/10.1002/bio.3629> (SCOPUS, WoS)
  8. Mchedlov-Petrosyan N.O., Cheipesh T.A., Shekhovtsov S.V., Ushakova E.V., Roshal A.D., Omelchenko I.V. Aminofluoresceins vs fluorescein: Ascertained new unusual features of tautomerism and dissociation of hydroxyxanthene dyes in solution // *The Journal of Physical Chemistry A*.- 2019.- V.123, iss. 41.- P. 8845-8859 <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b05810> (SCOPUS, WoS)
  9. Mchedlov-Petrosyan N.O., Cheipesh T.A., Roshal A.D., Shekhovtsov S.V., Moskaeva E.G., Omelchenko I.V. Aminofluoresceins vs fluorescein: Peculiarities of fluorescence // *The Journal of Physical Chemistry A*.- 2019.- V.123, iss. 41.- P. 8860-8870. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b05812> (SCOPUS, WoS)
  10. Mishurov D., Voronkin A., Roshal A., Bogatyrenko S., Vashchenko O. Synthesis and characterization of dyedoped polymer films for non-linear optical applications // *Chemistry & Chemical Technology*.- 2019.- V.13, iss. 4.- P. 459-464. <https://doi.org/10.23939/chcht13.04> (SCOPUS)
  11. Anton B. Zakharov, Anastasia V. Dyachenko, Vladimir V. Ivanov, Topological Characteristics of Iterated Line Graphs in QSAR Problem: Octane Numbers of Saturated Hydrocarbons // *Journal of Chemometrics*. – 2019. – V. 33 (9). – P. e3169. <https://doi.org/10.1002/cem.3169>
  12. Mykhailo I. Berdnyk, Anton B. Zakharov, Vladimir V. Ivanov, Application of L<sub>1</sub>-regularization approach in QSAR problem. Linear regression and artificial neural networks // *Methods and Objects of Chemical Analysis*. – 2019. – V. 14, N 2. – P. 79-90. <https://doi.org/10.17721/moca.2019.79-90>
  13. В.Р. Карпіна, С.М. Коваленко, О.В. Заремба, О.В. Сілін, В.В. Іванов, С.С. Коваленко, Т. Лангер, Пошук нових потенційних інгібіторів протеїнази Pim-1 серед амідів 1,2,4-триазоло[4,3-а]піридин-3-метанаміну з 1,2,4-оксадіазольним циклом у 7 та 8 положеннях // *Журнал органічної та фармацевтичної хімії*. – 2019. – V.17, N 3(67). – С 58-67. <https://doi.org/10.24959/ophcj.19.174807>
  14. Anton B. Zakharov and Vladimir V. Ivanov, A new Approach in Topological Descriptors Usage. Iterated Line Graphs in the problem of Physico-Chemical properties of Saturated Hydrocarbons // *Kharkov University Bulletin. Chemical Series*. – 2019. – Issue 32 (55). – P. 38-45. <https://doi.org/10.26565/2220-637X-2019-32-02>
  15. Synthesis, X-ray crystal structure, Hirshfeld surface analysis, and molecular docking study of novel inhibitor of hepatitis B: methyl 4-fluoro-3-(morpholinosulfonyl)benzo[b]thiophene-2-carboxylate/ A. V. Ivachtchenko, O. D. Mitkin, D. V. Kravchenko, S. M. Kovalenko, S. V. Shishkina, N. D. Bunyatyan, I. S. Konovalova, I. G. Dmitrieva, V. V. Ivanov, T.Langer // *Heliyon*. – 2019. – V. 5, N 11. – P. e02738 (10 pages). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2019.e02738>
  16. Synthesis, Single Crystal X-ray Analysis, Prediction and Study of Pharmacological Activity of 4-(1H-Benzo[d]imidazol-2-yl)-1-phenyl-1H-1,2,3-triazol-5-amine and Its Solvates / A. V. Ivachtchenko, O. Mitkin, D. V. Kravchenko, S. M. Kovalenko, S. V. Shishkina, N. D. Bunyatyan, I. S. Konovalova, V. V. Ivanov, O. D. Konovalova, T. Langer. // *Crystals*. – 2019. – V. 9, 644; <https://doi.org/10.3390/cryst9120644>

#### Статті за матеріалами конференцій та в виданнях, що не цитовані в Scopus

1. Глибицкий Д.М., Горобченко О.А., Николов О.Т., Чейпеш Т.А., Джимиева Т.Н., Зайцева И.С., Рoshаль А.Д., Зибаров А.М., Шестопалова А.В., Семенов М.А., Глибицкий Г.М.. Метод оценки влияния химических и физических факторов на биополимеры по текстурам их пленок. // *Radiofizika i elektronika*.- 2019.- V.24, N1.- P.58-68., DOI: 10.15407/fej2019.01.058
2. Орешина А.О., Ходжаева Р.С., Сердюк І.С., Рoshаль А.Д. 7-гідрокси-8-формілфлавоон як індикатор гідратованості середовища. // *Збірник статей за матеріалами Міжнародної науково-практичної конференції “Хімія, біотехнології, нанотехнології, екологія і економіка в харчовій та косметичній промисловості”*, 7-8.11.19, Харків, Україна, С.25-28

## Тези доповідей

1. А. И. Коробов. Двумерные разбиения Пуассона-Вороного на квадратных решетках: масштабируемые линейные характеристики. XXXI конференция «Современная химическая физика», 16.09.2019-25.09.2019: Тезисы докладов, Туапсе, С. 237.
2. А. И. Коробов. Кинетический фазовый переход в решеточной модели обратимого изменения формы островка нанесенного катализатора в условиях химической реакции. XXXI конференция «Современная химическая физика», 16.09.2019-25.09.2019: Тезисы докладов, Туапсе, С. 238.
3. Педан П. І. Перетворення 2-амінокислот. Синтез диазгетероциклів / П. І. Педан, О. О. Коломойцев, В. М. Котляр // XI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразинські читання – 2019": тези доп., 22 - 24 квітня 2019 р., Харків / Харків, 2019. – С. 97.
4. Синтез та модифікація енонів на основі аліциклічних та гетероциклічних карбонільних сполук / О. Коломойцев, П. Педан, Д. Тарасенко [та інш.] // XVII Наукова конференція "Львівські хімічні читання – 2019": тези доп., 2 - 5 червня 2019 р., Львів / Львів, 2019. – С. У23.
5. V. Kotliar, O. Buravov, O. Kolomoitsev. Transformation des 2-aminoacides. Synthèse de diazaheterocycles. 10<sup>th</sup> International Conference Toulouse-Kiev: b. abs., 3<sup>rd</sup>-5<sup>th</sup> June 2019, Toulouse, France / Toulouse, 2019. – P. P62.
6. O. Kolomoitsev, O. Buravov, V. Kotliar. Synthèse et modification des enones a base de carbonyles Alicycliques et heterocycliques. 10<sup>th</sup> International Conference Toulouse-Kiev: b. abs., 3<sup>rd</sup>-5<sup>th</sup> June 2019, Toulouse, France / Toulouse, 2019. – P. P63.
7. Д. О. Тарасенко, О. О. Коломойцев, В. М. Котляр. Пентадієнони на основі 2,4-дизаміщених 5-формілтіазолів. Ювілейна XXV українська конференція з органічної та біоорганічної хімії: тези доп., 16 - 20 вересня 2019 р., Луцьк / Луцьк, 2019. – С. Д51.
8. Москаева Е.Г., Рошаль А.Д., Шеховцов С.В., Чейпеш Т.А.. Флуориметрическое исследование дианионов 4'- и 5'-аминофлуоресцеинов и 4'-нитрофлуоресцеина в ап-ротонных растворителях. XI Всеукраїнська конференція «Хімічні Каразинські читання» 22-24 квітня 2019 г., Харків, Україна, С.152-153.
9. Roshal A.D.. Flavonol “smart” ligands for metal ion detection. *International Conference Toulouse Kiev – 10th edition*, 2-6 juin 2019, Toulouse, France, CO30.
10. Barthes C., Zhu Ch., Maraval V., Chauvin R., Khodzhaieva R. , Roshal A.D.. Spectral properties of expanded  $\pi$ -systems: light absorption and emission of a tetraphenyl carbo-benzene. *International Conference Toulouse Kiev – 10th edition*, 2-6 juin 2019, Toulouse, France, P.53.
11. А.Орешина, Р. Ходжаєва, І. Сердюк, О. Рошаль. 8-форміл-7-гідроксифлаво́н як перспективний індикатор ступеню гідратованості середовища. XVII наукова конференція “Львівські хімічні читання – 2019”, 2-5.06.19, Львів, Україна, Ф16.
12. Т. Котляревська, Р. Ходжаєва, І. Сердюк, О. Рошаль. 6-фенілпропаноїл-7-гідроксифлаво́н як металофлуорохромний індикатор на іони галію. XVII наукова конференція “Львівські хімічні читання – 2019”, 2-5.06.19, Львів, Україна, А10.
13. О.О.Орлова, І.В.Христенко Сорбція іонів металів на поверхні органо-кремнеземних матеріалів модифікованих фосфоновими групами // Тези доповідей XX Міжнародної конференції студентів та аспірантів «Сучасні проблеми хімії». – Київ. – 2019. – С.158
14. А.В.Васильєва, І.В. Христенко Дослідження складу комплексів купруму з N-[1 [аміно(гідроксиіміно)метил]-циклогептил]-ацетамідом // XI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразинські читання –2019" 22–24 квітня 2019 року: тези доповідей.– Х.: ХНУ імені В.Н.Каразіна, 2019.– С.119.
15. Г.А.Олімова, І.В.Христенко Дослідження властивостей середовища в при поверхневому шарі органо-мінеральних матеріалів модифікованих фосфоновими групами // XI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразинські читання –2019" 22–24 квітня 2019 року: тези доповідей.–Х.: ХНУ імені В.Н.Каразіна, 2019.– С.159-160.
16. О.Н.Калугин, В.В.Иванов Виртуальный скрининг и квантовохимическое моделирование спектральных свойств  $\pi$ -сопряженных систем // XI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразинські читання –2019" 22–24 квітня 2019 року: тези доповідей.–Х.: ХНУ імені В.Н.Каразіна, 2019.– С.166.

17. А.В.Дяченко, А.Б.Захаров, В.В.Иванов Реберні графи у проблемі побудови прогностичних моделей QSAR при описі фізико-хімічних властивостей органічних сполук // XI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання –2019" 22–24 квітня 2019 року: тези доповідей.–Х.: ХНУ імені В.Н.Каразіна, 2019.– С.131.
18. К.А. Денисенко, А.Б. Захаров, В.В. Иванов Альтернативные способы построения уравнения линейной регрессии в описании физико-химических параметров молекул. проблема валидации // XI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання –2019" 22–24 квітня 2019 року: тези доповідей.–Х.: ХНУ імені В.Н.Каразіна, 2019.– С.128.
19. Бердник М.І. L1-регуляційний підхід у розрахунках фізико-хімічних властивостей молекул // Тези доповідей XX Міжнародної конференції студентів та аспірантів «Сучасні проблеми хімії». – Київ. – 2019. – С.140
20. Степанюк Д. С., Лановая М. А., Тростянюк П. В., Коваленко С. Н., Калугин О. Н., Иванов В. В. Виртуальный скрининг и квантовохимическое моделирование спектральных свойств  $\pi$ -сопряженных систем // XI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання - 2019" (ХКЧ'19). 22–24 квітня 2019 року, с. 166.
21. Molecular dynamics simulation and DFT study of dye-sensitized titanium dioxide nanoparticles / M. Blazhynska, A. Kyrychenko, S. Kovalenko, V. Ivanov, F.-A. Miannay, O. Kalugin, A. Idrissi // Збірник наукових праць: XVII Наукова конференція "Львівські хімічні читання – 2019": Львівський національний університет імені Івана Франка, 2-5 червня 2019 р, — Львів: 2019. – С 344.
22. The Virtual Screening and the Quantum Chemical Modeling of the Spectral Properties Of  $\pi$ -Conjugation Systems / D.S. Stepaniuk, M.A. Lanova, P.V. Trostyanko, S.N. Kovalenko, O.N. Kalugin, V.V. Ivanov //Spectroscopy of Molecules and Crystals. Book of Abstracts of XXIV Galyna Puchkovska International School-Seminar. Dedicated to 90<sup>th</sup> anniversary of the Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine. August 25 – 30, 2019, Odesa, Ukraine. – P. 191.
23. Ivanov V. V., Zakharov A. B. Conductivity Effects of  $\pi$ -Conjugated System in External Electrostatic Field // Spectroscopy of Molecules and Crystals. Book of Abstracts of XXIV Galyna Puchkovska International School-Seminar. Dedicated to 90<sup>th</sup> anniversary of the Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine. August 25 – 30, 2019, Odesa, Ukraine. – P. 193.
24. О. Решетняк, Н. Німець, А. Пантелеймонов, О. Чернишова. Візуальне бінарне тестування та фотометричне визначення гідроген сульфід, розчиненого у підземних супутньо-пластових водах нафтогазоконденсатних родовищ // Тези доп. Всеукраїнської наук. конф. з міжнародною участю «Аналітична хімія – методи та інструменти». – Ужгород. – 2019. – С. 65.

#### Патенти

1. Пат. 131970 Україна, МПК G01N 33/18 (2006.01), G01N 21/29 (2006.01). Спосіб візуального бінарного тестування Fe(II, III) в наземних та підземних водах: Пат. 131970 Україна, МПК G01N 33/18 (2006.01), G01N 21/29 (2006.01) / О. О. Решетняк, Н. М. Німець, П. О. Кравець, Н. П. Тітова, А. В. Пантелеймонов (Україна); Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна. – № u201808134; заявл. 23.07.2018; опубл. 11.02.2019, бюл. № 3/2019 – 5 с.
2. Мишуров Д.А., Авраменко В.Л., Рошаль А.Д., Воронкін А.А.. Полімерний композиційний матеріал. Пат. 119395, Україна, МПК C08K 5/13. Заявл. 06.11.2017. Опубл. 10.06.2019. Бюл № 11.

#### Інвіріччя 2020 рік

#### Статті

1. Korobov, A. Dynamic vs static behaviour of a supported nanoparticle with reaction-induced catalytic sites in a lattice model. *Sci Rep* **2020**, *10*, 2882. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-59739-0>
2. Ivachtchenko Alexandre V., Kovalenko Sergiy M., Kravchenko Dmitry V., Mitkin Oleg D., Ivanov Vladimir V., Langer Thierry Crystal structure, Hirshfeld analysis and a molecular docking study of a new inhibitor of the Hepatitis B virus (HBV): ethyl 5-methyl-1,1-dioxo- 2-{{[5-(pentan-3-yl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]methyl}- 2H-

<https://doi.org/10.1107/S2056989019015986>

3. Zakharov A. B., Ivanov V. V., Adamowicz L. Electronic Perturbation Effects in the presence of Electric Field for  $\pi$ -conjugated systems. An electron correlation Study. *International Journal of Quantum Chemistry* **2020**, *e26260*, (11 pages). <https://doi.org/10.1002/qua.26260>
4. Євсєєва Л., Іванов В., Карпіна В., Коваленко С., Кузнецов І., Лангер Т., Маєс Л., Коваленко С. Використання віртуального скринінгу для пошуку потенційних противірусних агентів для лікування коронавірусної хвороби COVID-19. *Журнал органічної та фармацевтичної хімії*. **2020**, *V.18, N 2 (70)*.
5. Chumak, A. Yu.; Denysieva, Ye. O.; Kolomoitsev, O. O.; Kotlyar, V. M.; Shvets, E. H.; Doroshenko, A. O. N-Ethyl Substituted 2-Benzimidazolyl-3-hydroxychromone: Atypical to Highly Fluorescent Dyes of Flavonol Series Excited State Intramolecular Proton Transfer to Nitrogen. *Journal of Luminescence* **2020**, *223*, 117206–117210. doi: [10.1016/j.jlumin.2020.117206](https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2020.117206).
6. Kolomoitsev, O. O.; Kotliar, V. M.; Tarasenko, D. O.; Buravov, O. V.; Doroshenko, A. O. 2,4-Disubstituted 4-(1,3-thiazol-5-yl)but-3-en-2-ones: synthetic approaches to and consequent chemical modification. *Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly* **2020**, *151 (5)*, 765–772. doi: [10.1007/s00706-020-02612-7](https://doi.org/10.1007/s00706-020-02612-7)

#### Патент

Решетняк О., Німець Н., Чернишова О., Пантелеймонов А. Спосіб візуального бінарного тестування гідроген сульфід, розчиненого у супутньо-пластових водах. Акціонерне товариство «Укргазвидобування». Патент на корисну модель України. UA 141982 U; Бюл. №9, 12.05.2020

Звіт заслухано та одногосно схвалено на засіданні кафедри,  
протокол № 2 від 18.09.2020

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ Коробов О. І.  
підпис