



Інформація про наукову та
науково-технічну діяльність
хімічного факультету
ХНУ імені В.Н. Каразіна
за 2014 рік

Заступник декана ХФ з наукової роботи,
д.х.н. проф. *Дорошенко Андрій Олегович*

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

I. Узагальнена інформація щодо наукової та науково-технічної діяльності

Назва пріоритетного напрямку розвитку науки і техніки (З-н України від 12.10.2010 №2519-17)

1) Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

*Назва пріоритетного тематичного напрямку наукових досліджень і науково-технічних розробок
постанова КМ України від 07.09.2011 № 942*

3. Найважливіші проблеми хімії та розвитку хімічних технологій

- 1. Фізична хімія розчинів, нанохімія, електрохімія*
- 2. Неорганічна хімія, фізико-хімія вуглецевих наноматеріалів*
- 3. Хімічна метрологія і аналітична хімія*
- 4. Органічна хімія, нові функціональні матеріали*
- 5. Хімічне матеріалознавство, комп'ютерне моделювання*
- 6. Органічні надпровідники і магнетики*

*Основні пріоритетні напрями
наукової діяльності хімічного
факультету:*

Доктори наук, професори – 16

Кандидати наук, доценти – 28

*Науково-педагогічні кадри
хімічного факультету:*

Викладачі та наукові співробітники без ступеню – 54

Допоміжний персонал – 44

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

I. Узагальнена інформація щодо наукової та науково-технічної діяльності

Кількість виконаних робіт та обсяги їх фінансування за останні чотири роки:

Категорії робіт	2011		2012		2013		2014	
	к-сть од.	тис. грн.	к-сть од.	тис. грн.	к-сть од.	тис. грн.	к-сть од.	тис. грн.
Фундаментальні	8	530,8	7	633,9	7	736,5	7	987,6
Прикладні	0	-	0	-	0	-	0	-
Госпдоговірні	2	38,6	3	98,5	3	185	3	98,5

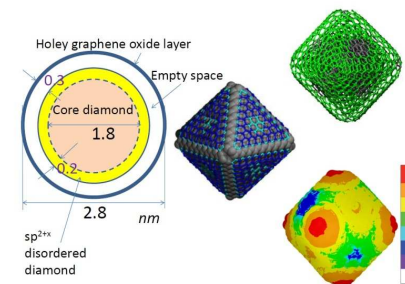
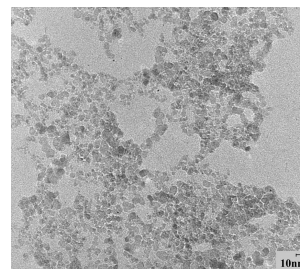
Кількість відкритих у звітному році спеціалізованих вчених рад по захисту кандидатських та докторських дисертацій, кількість захищених дисертацій:

Спецрада Д64.051.14, спеціальність 02.00.04 – фізична хімія,
захистів поки ще не було, 2 роботи (к.х.н. і д.х.н.) прийнято до розгляду

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

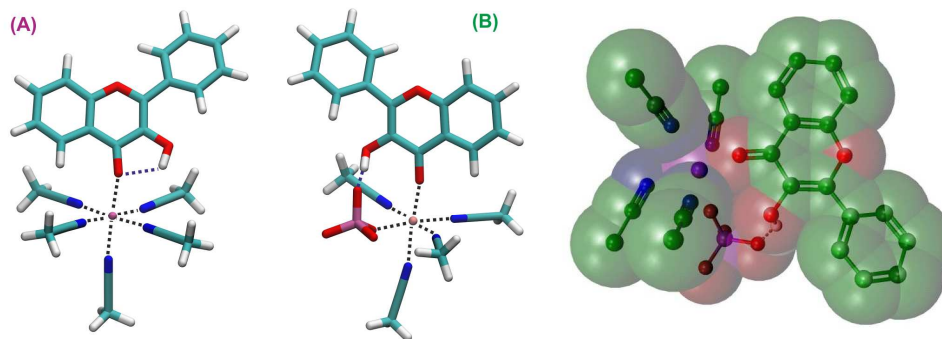
I. Узагальнена інформація щодо наукової та науково-технічної діяльності Найвагоміші результати фундаментальних досліджень та прикладних досліджень і розробок:

Тема **21-15-13**, «Фізико-хімічні процеси у рідкофазних середовищах різних типів, що містять нанорозмірні частинки та супрамолекулярні ансамблі», наук. керівн. **М.О. Мчедлов-Петросян**



Комплексне дослідження колоїдних розчинів нанодіамантів з розміром первинних частинок 2.8 нм дозволило виявити принципово нові ефекти: наявність періодичних колоїдних структур у концентрованих розчинах, а також розробити підхід до вимірювання поверхневих електричних потенціалів в цих гідрофобних системах з використанням індикаторних барвників

Тема **22-15-12**, «Мікроскопічні засади цілеспрямованого прогнозування функціональних властивостей молекулярних, іонних та іон-молекулярних рідин в об'ємній фазі та в вуглецевих наноматеріалах», наук. керівн. **І.М. В'юник**

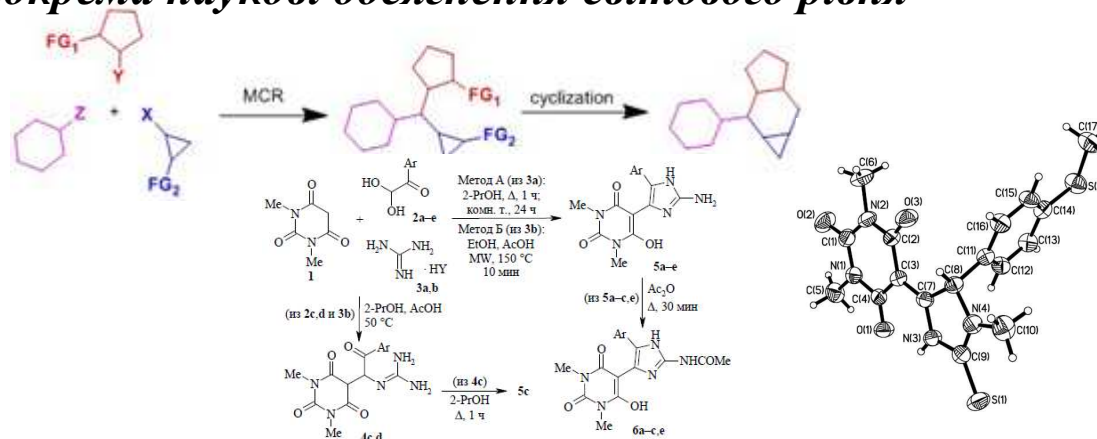


Запропоновано нову загальну методику розв'язання задачі встановлення складу й мікроскопічної будови комплексів двозарядних катіонів за участю молекул розчинника, протіонів та багатоатомних лігандів з використанням комбінації методів кондуктометрії, електронної абсорбційної і флуоресцентної спектроскопії та молекулярного моделювання. Для ацетонітрильних розчинів перхлоратів двозарядних металів встановлено моделі іонних рівноваг і склад комплексних частинок у системах $Kt(ClO_4)_2$ – 3-гідроксифлавоон – ацетонітрил, де $Kt^{2+} = Mg^{2+}, Ca^{2+}, Sr^{2+}, Ba^{2+}, Ni^{2+}$.

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

II. Визначні результати фундаментальних досліджень у галузі природничих, суспільних і гуманітарних наук, зокрема наукові досягнення світового рівня

Тема **1-15-12** «Багатокомпонентні процеси циклізації за участю карбонільних сполук та бінуклеофільних реагентів – прямий шлях до аналогів біологічно активних природних сполук», наук. керівн. **В. Д. Орлов**



Розроблені умови проведення низки нових [2+3], [3+3] та [2+4]-циклоконденсаційних процесів, які дозволяють цілеспрямовано створювати частково гідровані азотовмісні гетероциклічні системи як поетапно, двокомпонентно, так і однореакторно, багатокомпонентно, за принципом «доміно»-реакції; як в умовах класичної термічної, так і при мікрохвильовій або ультразвуковій активації. Синтезовані нові гетероциклічні системи або ансамблі циклів на основі функціоналізованих піримідинів, азолів, азоло- та азино-азинів з частково гідрованим гетероциклічним фрагментом, які за даними комп'ютерного прогнозування є перспективними для біологічних або хемосенсорних випробувань.

Тема **14-15-13** «Нові концепції і засоби багатомасштабного моделювання та прогнозування властивостей матеріалів, упорядкованих на нано- та мікрорівнях», наук. керівн. **О. І. Коробов**

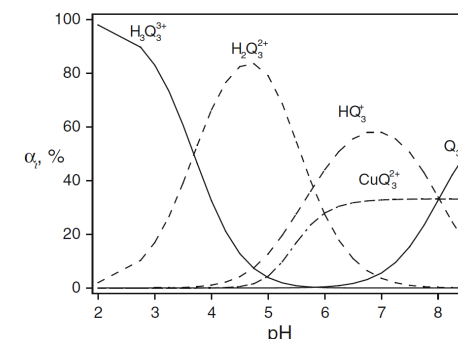
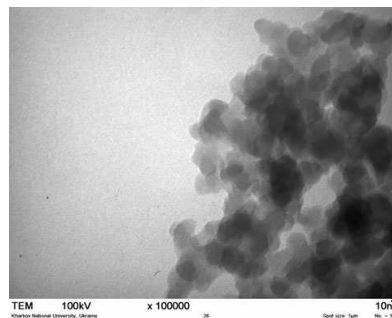


Досліджено властивості дискретних випадкових мозаїк з неевклідовою метрикою, яка визначається особливостями зростання та зіткнення зародків. Це дає змогу моделювати морфологію наноструктурованих каталізаторів, які утворюються за цим механізмом та кінетику гетерогенно-каталітичних процесів.

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

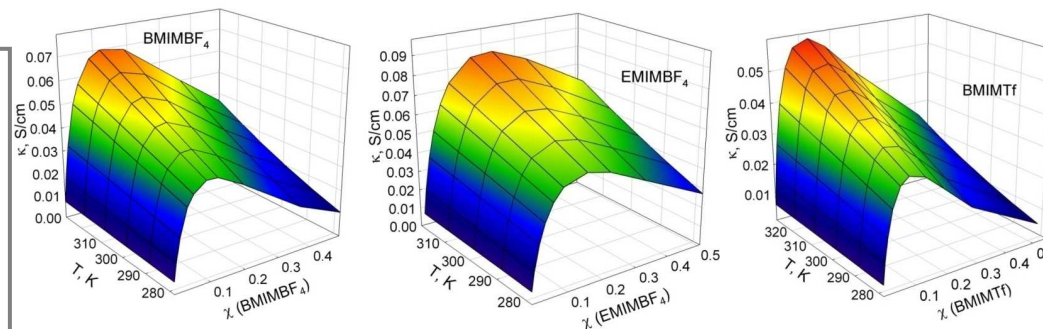
II. Визначні результати фундаментальних досліджень у галузі природничих, суспільних і гуманітарних наук, зокрема наукові досягнення світового рівня

Тема **15-15-12** «Процеси сорбції та розділення на нановпорядкованих монолітних, суцільних та поруватих матеріалах», наук. керівн. **Ю. В. Холін**



Синтезовані нові гібридні органокремнеземні сорбенти, вперше одержані кількісні характеристики стану їх приповерхневого шару, рівноваг сорбції та комплексоутворення на поверхні та в об'ємі суцільних та поруватих органокремнеземних матеріалів із іммобілізованими комплексоутворюючими та хромоформними групами.

Тема **22-15-12**, «Мікроскопічні засади цілеспрямованого прогнозування функціональних властивостей молекулярних, іонних та іон-молекулярних рідин в об'ємній фазі та в вуглецевих наноматеріалах», наук. керівн. **І.М. В'юник**

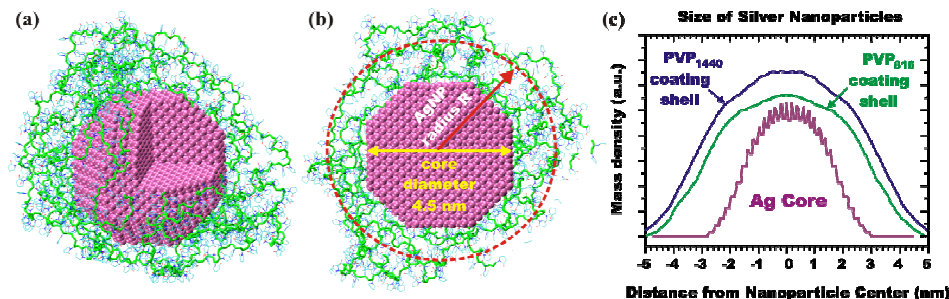


Встановлено закономірності впливу температури, розчинника, структури і природи протиіонів на електричну провідність бінарних систем **іонна рідина – молекулярна рідина**. За результатами комплексного дослідження бінарних систем серії імідазолієвих і піридинієвих іонних рідин в метанолі і ацетонітрилі **запропонована мікроскопічна модель іонної підсистеми**, яка дозволяє прогнозувати екстремальну залежність електропровідності в досліджуваних бінарних системах.

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

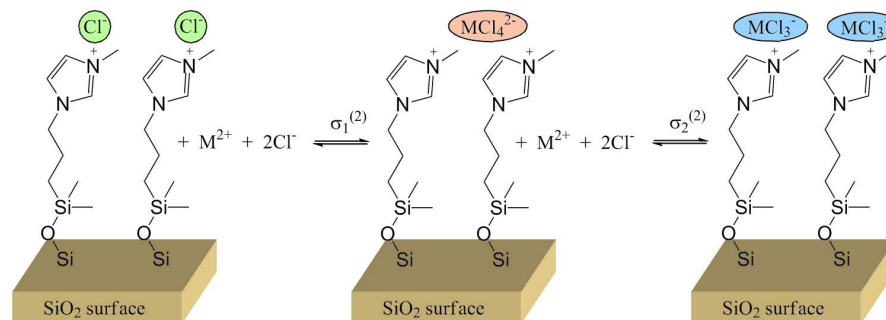
III. Найважливіші результати прикладних досліджень, конкурентоспроможні прикладні розробки

Тема **7-15-13**, «Моделювання та створення нанокон'югатів для фармацевтичного застосування», наук. керівн. **І.М. В'юник**



Методом молекулярної динаміки створена модель **квазі-сферичних наночасток срібла з діаметром 4.5 нм** з олігомерами полівінілпіролідону в водному розчині. Встановлена **оптимальна довжина молекул олігомеру, що забезпечує повне покриття поверхні срібних наночасток (2800-2900 одиниць)**. Створені на цій основі **нано-препарати зменшують патологічні зміни морфоструктури слизової кишківника, що викликані дією LT-індукованої діареї лабораторних тварин**. Найвиразніший лікувальний ефект спостерігався при застосуванні препарату із вмістом нового компоненту "наносрібло/полівінілпіролідон" – 200 мг/таб.

Тема **17-15-13** «Ефективні процедури та метрологічні засади моніторингу об'єктів, що знаходяться під техногенним навантаженням, і продуктів споживання», наук. керівн. **Ю. В. Холін та О.І. Юрченко**



Розроблено **твердофазні аналітичні реагенти і сорбенти** для вилучення, концентрування та визначення аніонних барвників та іонів металів-токсикантів, створено **нові вольтамперометричні сенсори**, розроблено та впроваджено в практику **екологічно безпечні методики визначення мікрокількостей металів**.

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

IV. Розробки, які впроваджено у 2014 році за межами ВНЗ або НУ

№ з/п	Назва та автори розробки	Важливі показники, які характеризують рівень отриманого наукового результату	Місце впровадження	Дата акту впровадження	Практичні результати, які отримано ВНЗ/науковою установою від впровадження
1	<p>Методика встановлення складу та мікроскопічної будови комплексів двозарядних катіонів за участю молекул розчинника, аніонів та багатоатомних лігандів із застосуванням комбінації кондуктометрії, спектральних методів та молекулярного моделювання.</p> <p><u>Калугін О.М., Агеєнко В.М., В'юник І. М.</u></p>	<p>Впроваджена методика дозволяє прогнозувати практично важливі структурні, транспортні та термодинамічні властивості складних комплексів двозарядних металів</p>	<p>Національний технічний університет "Харківський політехнічний інститут", факультет технології неорганічних речовин</p>	26.12.2014	<p>Налагоджено співпрацю для подальшої роботи</p>
2,3	<p>Технологічний процес травлення друкарських плат мідно-хлоридними розчинами з повторним використанням промивних розчинів, вод і утилізацією відпрацьованих травильних розчинів, складу низькоконцентрованих нітратних електролітів для отримання гальванонашарувань міді, а також методик атомно-абсорбційного і атомно-емісійного з індуковано-зв'язаною плазмою визначення міді, ніколя, свинцю, кадмію, хрому, цинку, марганцю та заліза в цих розчинах, нафтопродуктах, газоконденсаті і водах різного походження, з застосуванням ультразвуку і нових сорбентів.</p> <p><u>Юрченко О.І., Добріян М.О., Беліков К.М., Тітова Н.П., Черножук Т.В.</u></p>	<p>Застосування ПАР і ультразвукової обробки проб забезпечує максимальне вилучення металів, а застосування β-дикетонатів металів як стандартних зразків складу у вигляді розчинів, що вміщують ту ж кількість поверхнево-активних речовин максимально наближує по хімічному складу аналізовані та калібрувальні розчини.</p> <p>При цьому підвищується точність визначення металів в багатокомпонентних системах</p>	<p>1) ПП «Експо-ремонтаж», код 30912163, Україна, Дніпропетровська обл., м. Жовті води 2) ДП Науково-виробничий комплекс «Автоматіка», код 36004020, Україна, Дніпропетровська обл., м. Жовті води, Міністерство енергетики і вугільної промисловості України.</p>	10.10.2014 20.11.2014	<p>Налагоджено співпрацю для подальшої роботи</p>

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

VI. Список наукових праць, опублікованих та прийнятих редакцією до друку у 2014 році у зарубіжних виданнях, які мають імпакт-фактор:

№ з/п	Автори	Назва роботи	Назва видання, де опубліковано роботу	Том, номер, перша-остання сторінки роботи
1	Cheipesh T.A., Zagorulko E.S., Mchedlov-Petrosyan N.O., Rodik R.V., Kalchenko V.I.	The Difference between the Aggregates of a Short-Tailed and a Long-Tailed Cationic Calix[4]arene in Water as Detected Using Fluorescein Dyes	J. Mol. Liquids.	2014. V. 193. P.232-238
2	Лебедь А. В., Бирюков А. В., Мчедлов-Петросян Н. О.	Квантово-химическое исследование таутомерных равновесий флуоресцеиновых красителей в ДМСО	Химия гетероцикл. соед.	2014. № 3. С.367-380.
3	Решетняк Е. А., Чернышёва О.С., Никитина Н.А., Логинова Л.П., Мчедлов-Петросян Н.О.	Кoeffициенты активности алкилсульфатных и алкилсульфонатных ионов в водных и водно-солевых домицеллярных растворах	Коллоидный журн.	2014. Т. 76. № 3. С.389-396
4	Софронов Д.С., Камнева Н.Н., Катрунов К.А., Булгакова А.В., Баумер В.Н., Вовк О.М.	Влияние условий осаждения на размер частиц ZnS и их оптические свойства	Неорганические материалы	2014 №7. – С.703-707
5	Mchedlov-Petrosyan N.O.	Adsorption of ionic surfactants on the water/air interface: One more transformation of the Gibbs equation	Электронная обработка материалов	2014. Т. 50. № 2. С. 71-80
6	Kamneva N.N., Kharchenko A.Yu., Bykova O.S., Sundenko A.V., Mchedlov-Petrosyan N.O.	The influence of 1-butanol and electrolytic background on the properties of CTAB micelles as examined using a set of indicator dyes	J. Mol. Liquids	2014. Vol. 199. P. 376-384
7	Agieienko V.N., Kolesnik Y.V., Kalugin O.N.	Structure, solvation, and dynamics of Mg ²⁺ , Ca ²⁺ , Sr ²⁺ , and Ba ²⁺ complexes with 3-hydroxyflavone and perchlorate anion in acetonitrile medium: A molecular dynamics simulation study	The Journal of Chemical Physics	2014 Vol. 140, 194501, P. 1-14
8	Marekha B.A., Kalugin O.N., Bria M., Buchner R., [et.al]	Translational Diffusion in Mixtures of Imidazolium ILs with Polar Aprotic Molecular Solvents	The Journal of Physical Chemistry B	2014, Vol. 118, P. 5509–5517

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

VI. Список наукових праць, опублікованих та прийнятих редакцією до друку у 2014 році у зарубіжних виданнях, які мають імпакт-фактор:

№ з/п	Автори	Назва роботи	Назва видання, де опубліковано роботу	Том, номер, перша-остання сторінки роботи
9	Drozd A. V., Leonova N.A.	The determination of concentrations of Ni ²⁺ , Co ²⁺ , Fe ²⁺ , Cu ²⁺ with 1-(2-pyridylazo)-2-naphthol in aqueous-micellar medium on two-intensive parameters	Chemistry and Chemical Technology	2014. Vol. 8, Issue 2. – P. 129-134
10	Чепелева Л.В., Рошаль А.Д., Лукьянов Б.С., [et.al]	Фото- и термохромные спирапы 41. Квантовохимическое исследование геометрии и электронного строения 1,3,3-триметил-1',2'-дифенилспиро[фуоро[3,2-f]хромен-7',2-индолина] в основном и возбужденном состояниях	Химия гетероцикл. соед.	2014, №3, С. 397-403
11	Бородин О.О., Ильяшенко Р.Ю., Дорошенко А.О.	5-[4-(N,N-диметиламино)фенил]-2-(4-пиридил)-1,3-оксазол как флуоресцентный зонд для мониторинга микрогетерогенных сред	Химия гетероцикл. соед.	2014, №3, С. 413-423
12	Kyrychenko A., Ladokhin A.S.	Refining membrane penetration by a combination of steady-state and time-resolved depth-dependent fluorescence quenching	Analytical Biochemistry	2014, V. 446, P. 19-21
13	Kyrychenko A., Freites J.A., He J., [et.al]	The regioselective synthesis of spirooxindolo pyrrolidines and pyrrolizidines via three-component reactions of acrylamides and aroylacrylicacids with isatins and α -amino acids	Beilstein J. Org. Chem.	2014.-Vol. 10. – P.117-126
14	Gella I. M., Drushlyak T. G., Babak N. L., [et.al]	Structural Analysis of Chiral Dopants in Nematic Systems by Example of Ether-Ester-Substituted 1,4:3,6-Dianhydrohexitols	Mol. Cryst. Liq. Cryst.	2014. -Vol. 591. P. 34-44.
15	Pushkarova Y., Kholin Y.	A procedure for meaningful unsupervised clustering and its application for solvent classification	Cent. Eur. J. Chem.	2014 V.12, P. 594-603
16	Korobov. A.	Scaling properties of planar discrete Poisson-Voronoi tessellations with von Neumann neighborhoods constructed according to the nucleation and growth mechanism	Phys. Rev. E	2014. V. 89. – P. 032405

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

VI. Список наукових праць, опублікованих та прийнятих редакцією до друку у 2014 році у зарубіжних виданнях, які мають імпакт-фактор:

№ з/п	Автори	Назва роботи	Назва видання, де опубліковано роботу	Том, номер, перша-остання сторінки роботи
17	Zakharov A.B., Ivanov V.V., Adamowicz L.	Molecular Nonlinear Optical Parameters of π -Conjugated Non-Alternating Hydrocarbons Obtained in Semiempirical Local Coupled-Cluster Theory	Journal of Physical Chemistry. C	2014 V. 118. - P. 8111-8121
18	Serdiuk I.E., Varenikov A.S., Roshal A.D.	7-Hydroxyflavone revisited: spectral, acid-base properties and interplay of the protolytic forms in the ground and excited state	Journal of Physical Chemistry A	2014. V. 118.- P. 3068-3080
19	Wera M., Chalyi A.G., Roshal A.D. [et al.]	Structure, tautomerism and features of 1-(5-acetyl-2,4-dihydroxyphenyl)-3-(furan-2-yl)prop-2-en-1-one and 1,1'-(4,6-dihydroxybenzene-1,3-diyl)bis[3-furan-2-yl)prop-2-en-1-one)	Structural Chemistry	2014 V.25, N.3. P.969-977
20	Санин Э. В., Новиков А. И., Рошаль А.Д.	Квантово-химическое исследование структуры и спектральных свойств солей 2-(3-кумароил)-бензопирилеиновых солей	Химия гетероцикл. соед.	2014 №3.- С. 404-412
21	Vasylets G., Starodub V.A., Potočňák I. et al	Influence of metal ions on the structure and spectral properties of TCNQ salts with tris(phenanthroline) cations	Synthetic Metals	2014 V. 189, pp. 86-93
22	Vasylets G.Y., Starodub V.A., Barszcz, B. et.al.	Structure and spectral properties of TCNQ salts with Zn(II) and Ni(II) 2,2'-bipyridine complexes	Synthetic Metals	2014 V. 191, pp. 89-98
23	Korsun O.M., Kalugin O.M., Prezhdo O.V.	Control of Carbon Nanotube Electronic Properties by Lithium Cation Intercalation	J. Phys. Chem. Lett.	2014.—Vol. 4.— P. 4129-4133
24	Golenya I.A., Gumienna-Kontecka E., Matti Haukka, Korsun O.M., Kalugin O.N., Fritsky I.O.	Copper(II) complexes of 3- and 4-picolinehydroxamic acids: from mononuclear compounds to 1D- and 2D-coordination polymers	Cryst. Eng. Comm.	2014 Vol. 16.— P. 1904-1918

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

VI. Список наукових праць, опублікованих та прийнятих редакцією до друку у 2014 році у зарубіжних виданнях, які мають імпакт-фактор:

№ з/п	Автори	Назва роботи	Назва видання, де опубліковано роботу	Том, номер, перша-остання сторінки роботи
25	Richert S., Vazquez S.M., Grzybowski M., Gryko D.T., Kyrychenko A., Vauthey E.	Excited-State Dynamics of an Environment-Sensitive Push–Pull Diketopyrrolopyrrole: Major Differences between the Bulk Solution Phase and the Dodecane/Water Interface	Journal of Physical Chemistry B	2014. Vol. 118. P. 9952–9963
26	Agieienko V.N. Kalugin O.N.	Complexation of Ni(ClO ₄) ₂ and Mg(ClO ₄) ₂ with 3-Hydroxyflavone in Acetonitrile Medium: Conductometric, Spectroscopic, and Quantum Chemical Investigation	J. Phys. Chem. B	2014. Vol. 118. P. 12251-12262
27	Lukashova M.S., Belikov K.N., Bryleva E.Yu., Kharchenko S.G., Vishnevskii S.G., Kal'chenko V.I.	Sorption of Eu(III) on Merrifield Resin Modified with Thiocalix[4]arenes	Protection of metals and physical chemistry of surfaces	2014 Vol. 50 No. 5 608-612
28	Анисимович П.В., Темердашев З.А., Починок Т.Б., Решетняк Е.А., Смоленская Т.С., Ломакина О.Ю.	Визуальное тест-определение Pb(II) с использованием индикаторной желатиновой пленки	Аналитика и контроль	2014, Т. 17, № 4, с. 328-337
29	Kolosov M.A., Beloborodov D.A., Kulyk O.G., Orlov V.D.	Synthesis of 2,5,7-triaryl-4,7(6,7)-dihydropyrazolo[1,5-a]pyrimidine-3-carbonitriles by reaction of 5(3)-amino-3(5)-aryl-1H-pyrazole-4-carbonitriles with chalcones	J. Heterocycl. Chem.	2014. - Vol. 51. - P. E89-E92
30	Kolosov M.A., Kulyk O.G., Shvets E.G., Orlov V.D.	Synthesis of 5-cinnamoyl-3,4-dihydropyrimidine-2(1H)-ones	Synthetic commun.	2014. V. 44. P. 1649-1657
31	Pavlovskaya T.L., Yaremenko F.G., Lipson V.V., Shishkina S.V., Shishkin O.V., Musatov V.I., Karpenko A.S.	The regioselective synthesis of spirooxindolopyrrolidines and pyrrolizidines via three-component reactions of acrylamides and aroylacrylic acids with isatins and α-amino acids	Beilstein J. Org. Chem.	2014. –Vol. 10. P. 117–126

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

VI. Список наукових праць, опублікованих та прийнятих редакцією до друку у 2014 році у зарубіжних виданнях, які мають імпакт-фактор:

№ з/п	Автори	Назва роботи	Назва видання, де опубліковано роботу	Том, номер, перша-остання сторінки роботи
32	Petrova O.N., Zamigajlo L.L., Gella I.M., Musatov V.I., Shishkina S.V., Shishkin O.V., Vashchenko E.V., Borisov A.V., Lipson V.V.	Three-component synthesis of 4-aryloxy-2(1),4,5,7-tetrahydropyrazolo[3,4-b]pyridin-6-ones and their properties	Хим. гетероцикл. соед.	2014. № 4. - С. 562-576
33	Бабак Н.Л., Гелла И.М., Семенов А.Н., Шишкина С.В., Шишкин О.В., Мусатов В.И., Липсон В.В.	α,β -Непредельные кетоны на основе аллобетулона	Журн. орг. химии	2014. Т. 50, вып. 7. С. 1063-1070
34	Chebanov V.A., Desenko S.M.	Switchable multicomponent heterocyclization for diversity oriented synthesis	Diversity Oriented Synthesis	2014, V.1, P. 43-63
35	Ткаченко В.В., Муравьева Е.А. Шишкина С.В., Шишкин О.В., Десенко С.М., Чебанов В.А.	Изучение трёхкомпонентных реакций с участием 5-амино-3-метилизоксазола, N-ариламидов ацетоуксусной кислоты и ароматических альдегидов	Химия гетероцикл. соединений	2014, №8, С. 1263- 1274
36	Panteleimonov A., Tkachenko O., Baraban A., Benvenuto E.V., Gushikem Y., Kholin Yu.	Probing Silica-Organic Hybrid Materials Using Small Probes: Simulation of Adsorption Equilibria Influenced by Cooperativity Effects	Adsorption Science & Technology	2014. -V. 32.- P. 305-320
37	Tkachenko O., Panteleimonov A., Padalko I., Korobov A., Gushikem Y., Kholin Y.	Silica functionalized with 1-propyl-3-methylimidazolium chloride as an efficient adsorbent for the removal of Eosin Yellow and Reactive Blue 4	Chemical Engineering Journal	2014.- V. 254. - P. 324-332
38	Váňovská L., Potočník I., Vitushkina S., Dušek M., Titiš J., Voča R.	Low-dimensional compounds containing cyanido groups. XXVI. Crystal structure, spectroscopic and magnetic properties of Co(II) complexes with non-linear pseudohalide ligands	Polyhedron	2014. V.81, P. 396-408

Додатково: 4 монографії (з них 2 за кордоном) та 7 патентів України

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

VII. Відомості про науково-дослідну роботу та інноваційну діяльність студентів, молодих учених

Роки	Кількість студентів, які беруть участь у наукових дослідженнях та відсоток від загальної кількості студентів	Кількість молодих учених, які працюють у ВНЗ або науковій установі	Відсоток молодих учених, які залишаються у ВНЗ або установі після закінчення аспірантури
2011	174 (52%)	24	4
2012	113 (35%)	24	3
2013	113 (36%)	27	2
2014	101 (32%)	27	1

Внутрішні стимулюючі заходи та відзнаки:

доповіді на наукових конференціях (в тому числі на Хімічних Каразінських читаннях), наукові публікації у рейтингових журналах, аспірантура у ХНУ або спільна аспірантура у закордонних університетах, підвищення власної конкурентоздатності для роботи в Україні або за кордоном, премії за наукові статті в журналах із імпаکت-фактором >1 (2013, 2014).

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

ІХ. Наукове та науково-технічне співробітництво із закордонними організаціями

Країна партнер	Установа - партнер	Тема співробітництва	Документ, в рамках якого здійснюється співробітництво, термін його дії	Практичні результати від співробітництва
Бразилія	Університет штату Сан-Паулу в м. Кампінас	Chemistry of surface of hybrid silica-organic materials	Договір про співробітництво (дата підписання 25.05.2006)	Спільні наукові публікації, відрядження до країни-партнера
Бразилія	Федеральний університет Ріо-Гранде-ду-Сул в м. Порту-Алегрі	Chemistry of surface of hybrid silica-organic materials	Договір про співробітництво (дата підписання 18.09.2012)	Спільні наукові публікації, відрядження до країни-партнера
Велика Британія	Університет Абертей Данді	Застосування методу розсіяння та дифракції нейтронів для іон-молекулярних систем	Договір про співробітництво в галузі освіти та науки, до 2017 р.	Спільні наукові публікації, підготовка запитів на міжнародні гранти
Польща	Університет м. Гданьск	1) Фізична органічна хімія 2) Програма подвійних аспірантур	Договір про співробітництво в галузі освіти та науки, до 2018 р	Спільні наукові публікації, відрядження до країни-партнера

**Інформація про наукову та науково-технічну діяльність
хімічного факультету ХНУ за 2014 рік**
***ІХ. Наукове та науково-технічне співробітництво із закордонними
організаціями***

Країна партнер	Установа - партнер	Тема співробітництва	Документ, в рамках якого здійснюється співробітництво, термін його дії	Практичні результати від співробітництва
Сполучені Штати Америки	Медичний центр Канзаського університету, м. Канзас-Сіті	Флуоресцентні зонди в дослідженні біологічних систем	<i>Без договору</i>	Спільні наукові публікації, відрядження до країни-партнера
Сполучені Штати Америки	Університет Рочестера, м. Рочестер	Молекулярне моделювання вуглецевих наноматеріалів	<i>Без договору</i>	Спільні наукові публікації, відрядження до країни-партнера
Франція	Університет Ніцци, Софія Антіполіс	Програма подвійних магістратур	Договір про співробітництво в галузі освіти та науки, до 2017 р	Виконання та захист 2-х магістерських кваліфікаційних робіт
Франція	Університет Лілль 1, Науки і Технології	Програма подвійних магістратур і аспірантур. Фізико-хімічні та оптичні властивості бінарних сумішей молекулярних рідин з іонними рідинами для електрохімічного застосування	Договір про співробітництво в галузі освіти та науки, до 2019 р.	Виконання та захист 2-х магістерських робіт виконання та захист <u>PhD дисертації</u> (Б. Мареха , 19.09.2014 р.) за програмою подвійних аспірантур, спільні наукові публікації

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

ІХ. Наукове та науково-технічне співробітництво із закордонними організаціями

Країна партнер	Установа - партнер	Тема співробітництва	Документ, в рамках якого здійснюється співробітництво, термін його дії	Практичні результати від співробітництва
Франція	Laboratoire de Chimie Physique et Microbiologie pour l'Environnement, CNRS Université de Lorraine, Villers-lès-Nancy, France	Дослідження модифікованих мезопоруватих структур	<i>Без договору</i>	Спільні наукові публікації, відрядження до країни-партнера
Швейцарія	Університет м. Женеви, кафедра фізичної хімії	Надшвидкісна оптична спектроскопія органічних сполук	<i>Без договору</i>	Спільні наукові публікації, відрядження до країни-партнера
Японія	NanoCarbon Research Institute, Ltd, AREC (Asama Research Extension Center), Faculty of Textile Science and Technology, Shinshu University, 3-15-1 Tokida, Ueda, Nagano, Japan	Вивчення колоїдних розчинів нанодіамантів	<i>Без договору</i>	Спільні наукові публікації

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

Х. Інформація про наукову та науково-технічну діяльність, що здійснювалась спільно з науковими установами Національної академії наук України та національних галузевих академій наук

Діє договір про наукову співпрацю хімічного факультету ХНУ та ДНУ НТК «Інститут Монокристалів» НАН України.

ХФ ХНУ на безоплатній основі користується сучасним науковим обладнанням та обчислювальними потужностями ДНУ НТК «Інститут Монокристалів».

*За останній рік було опубліковано **6** спільних наукових статей в журналах, які входять до б/д SCOPUS.*

*За спільними напрямками працювали: магістрів – **10**, аспірантів – **2**.*

*На хімічному факультеті ХНУ викладають **2** доктори наук та **3** кандидати наук установ НАН України (ДНУ НТК «Інститут Монокристалів»).*

*Кількість студентів, які виконували курсові та дипломні роботи на базі установ НАНУ – **12**, проходили практику **15** студентів.*

*Впродовж навчального року було організовано **3** спільних наукових семінари, VI Всеукраїнська конференція молодих вчених «Хімічні Каразінські читання 2014».*

Розпочато роботу з організації міжнародної конференції «Хімія нітрогенвмісних гетероциклів-2015» (жовтень 2015).

*Співробітники хімічного факультету регулярно проходять стажування на базі ДНУ НТК «Інститут Монокристалів» – до **2-3** осіб на рік.*

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

XII. Відомості щодо поліпшення рівня інформаційного забезпечення наукової діяльності, доступу до електронних колекцій наукової періодики та баз даних провідних наукових видавництв світу про патентно-ліцензійну діяльність.

Хімічний факультет ініціював підписку на наукові видання Королівського хімічного товариства (www.rsc.org - Велика Британія)

XIII. Інформація про науково-дослідні роботи, що виконуються на кафедрах у межах робочого часу викладачів

У більшості випадків тематика досліджень викладачів є близькою до наукової проблематики кафедри і держбюджетної наукової тематики, яку веде кафедра.

Кафедра фізичної хімії:

Доц. Рубцов В.І. та Бондарєв М.В. - *Іонні рівноваги у розчинах: кислотно-основні рівноваги, рівноваги комплексоутворення, термодинаміка цих процесів, транспортні властивості розчинів.*

Кафедра неорганічної хімії:

Проф. Калугін О.М., доц. Панченко В.Г., ст. вик. Черножук Т.В., викл. Рябчунова А.В., ас. Коверга В.А. - *Комп'ютерне моделювання електролітних розчинів, молекулярних та іонних рідин в об'ємній фазі та в середині вуглецевих нанотрубок. Теоретичне та експериментальне дослідження міжмолекулярних, іон-іонних та іон-молекулярних взаємодій, мікроструктури та динаміки частинок в іон-молекулярних системах.*

Доц. Кійко С.М. - *Сольватохромні ефекти бетаїнових барвників у змішаних розчинниках. Катіон-заміщені апатити, як матеріали для ортопедичних імплантантів.*

Доц. Колесник Я.В. - *Молекулярно-динамічне моделювання неводних розчинів електролітів.*

Доц. Кириченко О.В., ст.викл. Корсун О.М., вик. Вовчинський І.С. - *Комп'ютерне моделювання наноматеріалів.*

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

XIII. Інформація про науково-дослідні роботи, що виконуються на кафедрах у межах робочого часу викладачів

Кафедра хімічної метрології:

Проф. Юрченко О.І. - Дослідження метрологічних характеристик атомно-абсорбційного, атомно-емісійного з індуктивно-зв'язаною плазмою, рентгено-флуоресцентного та емісійного спектрального визначення вмісту металів в нафтопродуктах, водах різного походження, повітрі промислових підприємств, продуктах харчування, вихідних матеріалах, стандартних зразках кольорових металів та сплавів і інших багатоконпонентних системах.

Проф. Бакланов О.М. - Аналітична хімія великих та надмалих концентрацій, фізичні та фізико-хімічні методи аналізу (сонолюмінісцентна спектроскопія, атомно-абсорбційна спектрометрія, спектрофотометрія, потенціометрія з іонселективними електродами, полярографія).

Доц. Решетняк О.О. - Метрологічне забезпечення візуального тестового аналізу, приготування зразків порівняння для бінарного тестування забруднювачів у водах складного складу, побудова кольорних шкал порівняння, оцінювання адитивності сигналу поліестрів, вивчення тест-реакцій в отверділому желатиновому гелі, створення нових тест-систем; сорбційно-спектроскопічні методи аналізу, колірометрія.

Доц. Чернишова О.С. - Іонометрія, електрофорез, хімічні рівноваги біологічно активних речовин в організованих розчинах.

Кафедра органічної хімії:

Проф. Колос Н.М. - Хімія азотовмісних гетероциклів, енонові системи, азотовмісні бінуклеофіли, одnoreакторні багатоконпонентні циклоконденсації.

Проф. Дорошенко А.О. - Органічні гетероциклічні люмінесцентні матеріали, флуорофори з аномально високим Стоксовим зсувом, реакція фотопереносу протона, флуоресцентні зонди і сенсори.

Доц. Папонов Б.В. - Мезоіонні сполуки, реакції циклоприєднання, аміноазолі, конденсовані гетероцикли.

Доц. Колосов М.О. - Спрямовання синтез органічних сполук, реакція Біджинеллі, хімія похідних 3,4-дигідропіримідин-2(1H)-ону, хімія 3(5)-амінопіразолів.

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

XIII. Інформація про науково-дослідні роботи, що виконуються на кафедрах у межах робочого часу викладачів

Кафедра хімічного матеріалознавства:

Проф. Іванов В.В. - Хімічний додаток теорії зв'язаних кластерів у багатовимірних модельних просторах; неемпіричні розрахунки молекул. Методи прогнозу біологічної активності хімічних сполук.

Доц. Шкумат А.П. - Синтез, властивості та використання органічних люмінофорів з гетероциклічними фрагментами.

Доц. Пантелеймонов А.В., викл. Ткаченко О.С. - Аналіз даних в хімії та хемометрія (робастні методи, рішення некоректних задач, кластерний аналіз, теорія нечітких множин); гібридні органо-мінеральні матеріали (синтез, властивості, аналітичне використання), хемометрія якісного аналізу.

Доц. Христенко І.В. - Гібридні органо-мінеральні матеріали (синтез, властивості, аналітичне використання); кількісний фізико-хімічний аналіз.

Ст. викл. Котляр В.М. - Синтез, властивості та використання гетероциклічних сполук.

Кафедра прикладної хімії:

Проф. Чебанов В.А. - Багатокомпонентні реакції з керованою селективністю.

Проф. Черановський В.О., ст.викл. Кравченко О.А. - Теоретичне моделювання низькотемпературних властивостей квазіодновимірних сполук перехідних металів та пошук нових ефективних розрахункових методів, що описують властивості наноструктурованих магнетиків зі складною елементарною коміркою.

Доц. Кравченко А.В. - Електросинтез нових провідних молекулярних кристалів катіон-радикальних солей на основі похідних фульвалену.

Доц. Зіолковський Д.В. - Віртуальний скрінінг для пошуку нових лікарських засобів.

Доц. Комихов С.О. - Гетероциклічні сполуки; частково гідровані похідні азолопіримідинів.

Ст. викл. Єфімов П.В. - Числа переносу та гранична іонна рухомість у неводних розчинах 1-1 електролітів.

Інформація про наукову та науково-технічну діяльність
хімічного факультету ХНУ за 2014 рік

Дякую за увагу!

