

Основні положення Концепції розвитку Інституту фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського НАН України

Концепція розрахована на період дії воєнного стану в Україні та 6 місяців після його припинення або скасування.

ВСТУП

Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського Національної академії наук України – найстаріший Інститут хімічного профілю України, перший в СРСР спеціалізований інститут з фізичної хімії.

Інститут було засновано видатним вченим академіком Л. В. Писаржевським, праці якого з електронної хімії заклали підвалини сучасної теорії хімічної будови та уявлень про електронну природу хімічних явищ і здобули всесвітнє визнання. Високу оцінку в Україні та за її межами отримали дослідження вчених Інституту з фундаментальних проблем каталізу, хімії ізотопів, хімії вільних радикалів та механізмів хімічних реакцій, адсорбції та адсорбентів, фізичної хімії координаційних сполук, фотохімії. Завдяки роботам академіка О. І. Бродського в Інституті вперше в Європі було одержано «важку воду». До скарбниці світової науки увійшли здійснене в Інституті відкриття гетерогенно-гомогенного каталізу, яке лежить в основі ряду промислових каталітичних процесів, піонерські роботи з одержання синтетичних цеолітів, дослідження з макрокінетики гетерогенного каталізу, з'ясування механізму фотопереносу електрона, а також інші роботи провідних вчених Інституту, якими відкрито ряд нових ефектів і явищ, що мають важливе значення для різних розділів фізичної хімії. Ці досягнення і уявлення склали основу і обумовили становлення та розвиток більшості наукових напрямів і наукових шкіл Інституту протягом всієї його історії. Згідно з Постановою Президії НАН України від 09.04.2014 №81 Інститут проводить наукову діяльність в п'яти наукових напрямках: теорія хімічної будови, кінетика і реакційна здатність; каталіз; адсорбція і адсорбенти; хімія високих енергій; фізико-неорганічна хімія.

Результати діяльності науковців Інституту здобули всесвітнє визнання, що засвідчує високий науковий рівень фундаментальних і прикладних досліджень, які виконуються в Інституті в актуальних напрямках сучасної хімічної науки, підтверджує ефективність тієї моделі академічної системи організації науки, що історично склалася в Інституті. Незважаючи на кадрові втрати, зазанані внаслідок економічних криз останніх десятиліть, Інститут зберіг свій творчий потенціал та позиції провідного наукового центру як в Україні, так і за її межами.

Мета концепції

Основною метою «Концепції розвитку Інституту фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського НАН України» (далі – «Концепція») є визначення основних завдань і показників, досягнення яких в даний період повинно забезпечити не тільки збереження позицій Інституту як визнаного провідного наукового центру з сучасних напрямів фізичної хімії, але й його сталого розвитку.

Концепція направлена на:

- підвищення рівня фундаментальних та прикладних досліджень, що здійснюються в Інституті, подальший розвиток конкурсних і програмно-цільових засад планування науково-дослідних робіт в Інституті;
- збереження і подальший розвиток кадрового потенціалу Інституту, підтримку провідних наукових шкіл, залучення до Інституту талановитої молоді, підготовку наукових кадрів вищої кваліфікації;
- активізацію наукових досліджень та виконання розробок, спрямованих на створення нових конкурентоспроможних наукоємних матеріалів і процесів сучасного хімічного виробництва;
- якісний розвиток інфраструктури досліджень, поліпшення їх матеріально-технічного та інформаційного забезпечення;
- подальшу інтеграцію Інституту до міжнародного наукового співтовариства.

Стратегічні напрями розвитку Інституту

1. Вдосконалення і оновлення тематики фундаментальних і прикладних досліджень Інституту

Буде розроблено і здійснено комплекс науково-організаційних заходів, направлених на подальше підвищення ефективності наукових досліджень, а також стимулювання творчої активності наукових співробітників і наукової молоді Інституту, в результаті яких буде забезпечено отримання нових фундаментальних знань світового рівня та виконання актуальних прикладних досліджень шляхом формування та своєчасного оновлення пріоритетних напрямів та найважливіших проблем фундаментальних і прикладних досліджень, що виконуються в Інституті.

Подальшого розвитку набудуть такі дослідження з наукових напрямів Інституту:

в науковому напрямі «Теорія хімічної будови, кінетика і реакційна здатність» дослідження будуть спрямовані на:

розвиток фундаментальних засад створення нових наноматеріалів для сучасної техніки, зокрема для мікро- та оптоелектроніки, хімічних джерел струму, світлоперетворюючих систем, каталізаторів та носіїв каталізаторів, адсорбційної та сенсорної техніки; розроблення фізико-хімічних принципів створення нових функціональних наноструктурованих та нанокомпозиційних матеріалів. На основі електропровідних супряжених органічних полімерів (ЕПП), графену, графеноподібних матеріалів (MoS_2 , WS_2 та ін.), нанопористого вуглецю, сірки тощо будуть створені нові гібридні нанокомпозиційні катодні матеріали з покращеними електрохімічними функціональними властивостями (висока питома ємність, стабільність при циклуванні заряду-розряду, швидкісні характеристики електродів); встановлені фундаментальні закономірності для прогнозування фізико-хімічних параметрів таких систем і можливості їх цілеспрямованого

регулювання; будуть розроблені нові підходи до одержання нанопористих ЕПП (ПАН, ППі, їх похідних, що містять гетероатоми N, S, B) та допованих гетероатомами вуглецевих матеріалів, одержаних шляхом піролізу зазначених ЕПП – гетерогенних каталізаторів для низькотемпературних паливних елементів, здійснення процесів ацилування та окиснення спиртів та амінів; етерифікації карбонових кислот, гідрування нітрофенолу та ін.; будуть встановлені будова, морфологія, пористість таких наноматеріалів, їх каталітична активність у зазначених процесах та вплив на неї різних чинників; будуть створені нові гібридні нанокомпозити на основі ЕПП (ПАН, ППі, політіюфени, поліпарафенілени та їх похідні) та графену з покращеними функціональними властивостями (електропровідність, люмінесценція, чутливість та селективність як сенсорних масивів тощо); будуть встановлені фундаментальні закономірності для прогнозування фізико-хімічних параметрів таких систем і можливості їх регулювання і використання в електронних і опто-електронних пристроях.

Будуть проведені дослідження, направлені на розробку нових методів одержання намагнітних та люмінесцентних наночастинок оксидів і сульфідів металів, допованих лантаноїдами і нових композитних матеріалів на їх основі, що можуть знайти використання в сучасній електроніці; розроблені фізико-хімічні засади створення нових функціональних нанокомпозитних матеріалів на основі поліядерних комплексів і координаційних полімерів з практично важливими для сучасної техніки властивостями.

Будуть розроблені підходи до створення нових плівкових гетероструктур на основі нанокристалів халькопіритів та кестеритів заданого складу та розміру з мезопористими оксидними напівпровідниками та досліджена їх фотоелектрохімічна активність як чутливих до видимого світла фотоанодів сонячних комірок в полісульфідних водних електролітах.

в науковому напрямі «Каталіз» дослідження будуть спрямовані на:

розвиток фундаментальних основ створення нових високоефективних (селективних) каталітичних процесів, зокрема, з використанням як каталізаторів нанокомпозитних матеріалів нового покоління. Будуть розвинуті уявлення про вплив хімічної природи нанокомпозитних каталізаторів та особливостей їх просторової організації на перебіг низки гетерогенно-каталітичних процесів. Будуть встановлені закономірності впливу морфології, складу, окисно-відновних та кислотно-основних властивостей нанокомпозиційних каталізаторів та масопереносу реагентів на активність, селективність та продуктивність таких каталізаторів і умови перебігу гетерогенно-каталітичних процесів. Розроблені підходи стануть основою створення нових шляхів активації малих молекул, зокрема, кисню, метану, оксидів вуглецю та азоту, а також розроблення нових ефективних каталізаторів перетворення відновлювальної сировини в цінні органічні продукти, зокрема, олефіни, ароматичні аміни, компоненти моторного палива.

Набудуть подальшого розвитку фундаментальні засади створення новітніх гетерогенно-каталітичних процесів, в т.ч. тандем-процесів одержання цінних органічних продуктів (бутадієну, метилацетату, пропіонової кислоти, пропілену,

цінних спиртів: коричневого, ванілінового, анісового тощо, та несиметричних ефірів), зокрема з відновлювальної сировини. Розвиток наукових засад структурно-функціонального дизайну оксидних та цеолітних каталізаторів, з'ясування закономірностей перебігу складних окисно-відновних та кислотно-основних процесів за участю вуглеводнів, оксигенатів, оксидів вуглецю, оксидів азоту дозволить створити нові каталітичні системи для одержання цінних органічних сполук, каталітичного спалювання вуглеводневого палива, перетворення (утилізації) парникових та біогазів.

в науковому напрямі "Адсорбція і адсорбенти" дослідження будуть спрямовані на:

створення нового покоління селективних сорбентів для розділення сумішей промислово важливих органічних речовин, зокрема, оптичних ізомерів, а також для розділення газових сумішей, вибіркової адсорбції органічних сполук. Набудуть подальшого розвитку дослідження впливу хімічної і кристалічної будови, хімічної природи поверхні нових класів пористих речовин і матеріалів – мікрomezопористих цеолітвмісних матеріалів і металоорганічних каркасів, нанопористих матеріалів на основі вуглецю, модифікованого гетероатомами (N, P, S, B, тощо), зокрема, пористих напівпровідників (нітрид вуглецю тощо), композитів таких пористих речовин з нанорозмірними металами, оксидами металів тощо – на їх сорбційні властивості. Будуть з'ясовані особливості адсорбції зазначеними вище пористими речовинами субстратів з газової фази та розчинів, а також процесів хроматографічного розділення сумішей з використанням одержаних пористих систем як стаціонарних фаз. На цьому підґрунті будуть створені нові селективні сорбенти, стаціонарні фази для хроматографії, а також пористі матеріали, що перспективні для використання як каталізatori або носії для каталізаторів органічних реакцій.

в науковому напрямі «Хімія високих енергій» дослідження будуть спрямовані на:

пошук та дослідження нових чутливих до видимого світла наноматеріалів, а саме допованих металами та неметалами оксидних напівпровідників, шаруватих металатів, наногетероструктур на основі частинок напівпровідників, нітриду вуглецю, металічних та біметалічних наночастинок та на створення за їх участю нових фотокаталітичних та фотоелектрокаталітичних систем та процесів одержання цінних органічних речовин, виділення молекулярного водню з води тощо, а також нових фотолюмінесцентних матеріалів.

Значну увагу буде приділено створенню та дослідженню новітніх флуоресціюючих напівпровідникових наноструктур, а також матеріалів на основі наночастинок вуглецю.

в науковому напрямі «Фізико-неорганічна хімія» дослідження будуть спрямовані на:

розробку фізико-хімічних засад створення нових нанокompозитів з цінними функціональними властивостями (фотокаталітичними, каталітичними, люмінесцентними тощо) на основі мезопористих оксидів (TiO_2 , SiO_2), метал-органічних каркасів, що містять в порах наночастки різної природи та органічні субстрати, та на пошук шляхів їх практичного використання для розробки нових функціональних матеріалів, зокрема електродних та мембранних матеріалів для паливних комірок, фотокаталізаторів, окисно-відновних та кислотно-основних каталізаторів гетерогенних рідинно- і газофазних процесів, матеріалів для нелінійної оптики, оптоелектронних пристроїв (в тому числі сенсibiliзованих барвниками), активних елементів сенсорних систем, матеріалів для медичних потреб, а також вирішення актуальних екологічних проблем.

*

*

*

З метою подальшого підвищення актуальності наукової тематики з урахуванням тенденцій розвитку світової науки та пріоритетних напрямів розвитку науки і техніки в Україні на засіданнях Вченої ради Інституту будуть постійно заслуховуватись питання оновлення тематики, що виконується в Інституті, подальшого удосконалення набуде система внутрішньої та зовнішньої експертизи запитів на фінансування робіт за відомчим замовленням Відділення хімії НАН України. Особливу роль в експертизі нових тем та звітів за завершеними роботами будуть відігравати Об'єднані наукові семінари Інституту.

Нового розвитку набуде практика виконання в Інституті проектів міжнародних фондів, цільових комплексних програм наукових досліджень і цільових наукових і науково-технічних проектів, робіт за замовленням вітчизняних і іноземних фірм з метою забезпечення збільшення до 50% частки науково-дослідних робіт, що виконуються поза відомчим замовленням Відділення хімії НАН України.

З метою підвищення ефективності роботи наукових підрозділів в Інституті буде розроблено і апробовано рейтингову систему показників комплексної оцінки їх діяльності. В перспективі планується запровадження відповідних виважених принципів фінансування наукових підрозділів в залежності від їх рейтингів, розроблення та запровадження критеріїв їх фінансування з урахуванням відповідності рівня досліджень світовим тенденціям і стандартам.

Подальшого удосконалення набуде система проведення атестації наукових працівників відповідно до вимог Закону України «Про наукову і науково-технічну діяльність», особливу увагу буде приділено активізації зусиль науковців на подальше підвищення публікаційної активності в вітчизняних і міжнародних рейтингових виданнях, що мають визначені значення імпаکت-факторів, інтеграції у міжнародний науковий простір шляхом участі у виконанні проектів міжнародних наукових програм, за грантами міжнародних наукових фондів, проведенню робіт за контрактами з вітчизняними і іноземними фірмами, участі у виконанні проектів за державними і академічними науковими та науково-технічними програмами.

2. Координація наукових досліджень

Реалізація функції Інституту як провідної вітчизняної наукової установи в галузі фізичної хімії передбачає його провідну роль в організації та координації фундаментальних наукових досліджень, здійсненні наукового прогнозування та експертної оцінки актуальності тематики проектів, що виконуються в цій галузі в Україні. Посилення координуючої ролі Інституту у проведенні в Україні фундаментальних досліджень в галузі сучасної фізичної хімії і фізико-хімічного матеріалознавства буде здійснюватись, зокрема, через діяльність Наукової ради НАН України з проблеми «Нанохімія», а також робочої групи цільової комплексної програми фундаментальних досліджень НАН України «Фундаментальні проблеми створення нових речовин і матеріалів хімічного виробництва», базовою організацією яких визначено Інститут, активної участі науковців Інституту в роботі наукових і експертних рад НАН України і МОН України.

Буде продовжено практику проведення Інститутом наукових форумів (конференцій, симпозіумів, семінарів тощо) з актуальних наукових напрямів, що розвиваються в Інституті, за участю провідних іноземних вчених.

3. Підготовка кадрів вищої кваліфікації і робота з науковою молоддю

Подальшого розвитку в Інституті набуде система підготовки кадрів вищої кваліфікації через аспірантуру Інституту. З цією метою буде здійснено комплекс заходів, спрямованих на одержання ліцензії на провадження діяльності у сфері вищої освіти за третім (освітньо-науковим) рівнем, розроблено освітньо-наукову програму та навчальні програми з дисциплін, за якими буде здійснюватись підготовка здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії в Інституті.

Атестаційна складова освітньо-наукової програми підготовки докторів філософії в аспірантурі Інституту буде включати вже існуючі ефективні форми роботи, такі, як проведення двічі на рік атестації аспірантів Інституту на засіданні Вченої Ради Інституту, кваліфікаційну атестацію дисертаційної роботи на засіданні семінару наукового відділу, в якому працює здобувач, та на засіданнях Об'єднаних наукових семінарів Інституту. Для захисту дисертаційних робіт в Інституті буде постійно працювати та оновлюватись спеціалізована вчена рада.

Подальшої практики набуде формування перспективних планів захисту дисертацій на здобуття наукових ступенів доктора наук і доктора філософії співробітниками Інституту і постійний контроль за їх виконанням.

Регулярно будуть проводитись щорічні конференції-конкурси молодих вчених і спеціалістів Інституту для апробації результатів наукових досліджень, набуття навичок їх презентації та обговорення, ведення наукової дискусії. Продовжиться робота з організації участі співробітників і аспірантів Інституту в конкурсах на здобуття премій, грантів і стипендій для молодих вчених.

Важливим напрямком роботи залишиться співробітництво з освітянами щодо підготовки студентів, які проявили здібності до наукової роботи, в рамках

створених за участю Інституту спільних з закладами вищої освіти (ЗВО) навчально-наукових структур та договорів про співпрацю.

З метою залучення до наукової роботи в Інституті обдарованої молоді систематично будуть проводитись Дні відкритих дверей, зустрічі з провідними науковцями Інституту студентів провідних профільних вузів України, буде продовжено практику виконання в Інституті дипломних робіт.

На засіданнях Вченої ради Інституту за участі Ради молодих учених і спеціалістів Інституту будуть розглядатися питання про шляхи активізації наукової роботи молодих вчених Інституту, питання стимулювання їх досліджень в актуальних напрямках сучасної хімії.

Провідні науковці Інституту будуть брати активну участь у викладанні ряду лекційних курсів з новітніх напрямів хімії в рамках освітньо-наукових програм підготовки докторів філософії, магістрів в Інституті та провідних ЗВО, будуть очолювати Державні екзаменаційні комісії на профільних кафедрах ЗВО України.

4. Участь в міжнародному науковому і науково-технічному співробітництві

З метою подальшого розширення співробітництва Інституту з провідними науковими центрами і компаніями буде продовжена практика укладання угод про наукове і науково-технічне співробітництво, будуть розроблені заходи щодо стимулювання участі співробітників Інституту, особливо наукової молоді, у дослідженнях за міжнародними грантами, поновлення участі вчених Інституту у роботі міжнародних наукових форумів, збільшення стажувань науковців в провідних закордонних наукових центрах. Набуде подальшого розвитку участь науковців Інституту у різноманітних проектах міжнародних наукових фондів, зокрема програм Європейської спільноти Горизонт 2020, Горизонт Європа.

5. Видавнича діяльність і публікація наукових статей

Інститут продовжить здійснювати випуск наукового журналу “Теоретична та експериментальна хімія”, який видавництвом Springer у повному обсязі перекладається англійською мовою, видається та розповсюджується за передплатою в багатьох країнах світу. Постійна увага буде приділятися актуалізації наукових напрямів, за якими здійснюються публікації в журналі, подальшому підвищенню його рівня, буде розроблено і здійснено комплекс заходів, спрямованих на стале зростання його імпаکت-фактору.

Інститутом буде здійснено підготовку і видання ряду книг і буклетів, присвячених його історії і сьогоденню, серії «Провідні вчені Інституту», наукових монографій, підручників і наукових посібників для студентів і аспірантів, збірників матеріалів конференцій і симпозіумів.

Велику увагу буде приділено зростанню кількості статей, які публікуються науковцями Інституту в рейтингових фахових журналах, з високим імпакт-

фактором. Аналіз публікаційної роботи співробітників Інституту буде щорічно розглядатись на засіданнях Вченої ради Інституту.

6. Інноваційна діяльність та зв'язки з виробництвом

Подальшого розвитку набуде в Інституті виконання прикладних наукових досліджень, результати яких є перспективними для впровадження у практику, за рахунок виконання проектів державних цільових науково-технічних програм і державного замовлення на створення науково-технічної продукції за пріоритетними напрямками науки і техніки, науково-технічних проектів інноваційної спрямованості НАН України і за замовленням установ державної і приватної форм власності. Для комерціалізації високотехнологічних і наукоємних розробок Інституту значні зусилля буде направлено на більш тісну та дієву співпрацю наукових підрозділів з державними підприємствами Інституту «Радма», «Катек» і «Колоран». Буде започатковано практику розгляду на засіданнях Вченої ради Інституту питань про стан інноваційної діяльності у наукових підрозділах і державних підприємствах Інституту, впровадження ними окремих перспективних розробок, їх участь у виконанні державних цільових науково-технічних програм і державного замовлення на створення науково-технічної продукції. Буде посилена співпраця наукових підрозділів з державними підприємствами з метою підвищення частки продукції, що випускається ними з використанням наукових розробок Інституту.

Будуть розроблені і визначені основні напрями розвитку інноваційної діяльності Інституту та відповідні інноваційні пріоритети, які будуть враховуватись при оцінюванні поданих запитів на фінансування за відомчим замовленням НАН України, а також при формуванні тематики досліджень.

З метою одержання інформації про потреби промислового комплексу України в наукоємних розробках буде налагоджено дієві зв'язки наукових підрозділів і державних підприємств Інституту з Союзом хіміків України.

7. Патентно-ліцензійна діяльність, захист інтелектуальної власності

Значна увага буде приділятися розробці заходів, спрямованих на забезпечення високого науково-технічного рівня, патентоспроможності і патентної чистоти розробок Інституту для підвищення їх науково-технічного і інноваційного потенціалу. З цією метою в Інституті буде надаватись необхідна інформаційна та методологічна підтримка при складанні заявок на видачу патентів на винаходи і корисні моделі, які створені за результатами виконаних наукових досліджень, а також консультативно-методична допомога виконавцям науково-дослідних робіт з проведення патентних, патентно-кон'юктурних та маркетингових досліджень. Регулярно на засіданнях Вченої ради Інституту будуть розглядатись результати аналізу патентних та інформаційних матеріалів, створених науковцями Інституту, проводитись оцінка технічного рівня і комерційної значущості винаходів та вироблення рекомендацій з їх використання.

Науково-технічна продукція Інституту буде постійно рекламуватися шляхом підготовки відповідних рекламних матеріалів, представленням експозицій на вітчизняних та міжнародних виставках, форумах, ярмарках тощо, а також на сайті Інституту.

8. Матеріально-технічне забезпечення досліджень

Основну увагу буде приділено підтримці функціонування приладного парку і обладнання, що функціонує в Інституті, своєчасній його профілактиці і ремонту.

Буде поновлено практику закупівлі наукового обладнання загальноінститутського призначення за рахунок об'єднання коштів наукових підрозділів Інституту і в рамках Програми з закупівлі коштовного обладнання НАН України.