

- *Сучасні методи комп'ютерного моделювання для дослідження речовини: від фізичних характеристик до медичного застосування (доповідач — член-кореспондент НАН України С.І. Оковитий)*
- *Формування засад національно укорінені стійкості та безпеки економічного розвитку України в умовах нової гібридної реальності «мир-війна» (доповідач — академік НАН України А.А. Гриценко)*
- *Про нагородження відзнаками НАН України (доповідач — академік НАН України В.Л. Богданов)*
- *Кадрові та поточні питання*

ІЗ ЗАЛИ ЗАСІДАНЬ ПРЕЗИДІЇ НАН УКРАЇНИ

19 березня 2025 року

Засідання Президії НАН України 19 березня 2025 р. відбулося під головуванням президента НАН України академіка НАН України А.Г. Загороднього.

Члени Президії НАН України заслухали наукову доповідь ректора Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара члена-кореспондента НАН України **Сергія Івановича Оковитого** на тему «Сучасні методи комп'ютерного моделювання для дослідження речовини: від фізичних характеристик до медичного застосування» (стенограму див. на с. 54).

Міждисциплінарні дослідження за цією тематикою здійснюються в Дніпровському національному університеті імені Олеся Гончара в тісній співпраці з провідними науково-дослідними установами НАН України, а також з низкою закордонних університетів, серед яких Оксфордський університет (Велика Британія), Джексонський державний університет (США), Університет Павла Йозефа Шафарика (Словаччина), Фрейбурзький університет (Німеччина) та Амстердамський вільний університет (Нідерланди).

Актуальність цієї наукової проблематики зумовлена нагальною потребою у вдосконаленні наявних і створенні принципово нових методів дослідження хімічних, фізичних та фармакологічних властивостей речовин. Реалізація таких досліджень є ключовою передумовою для раціонального синтезу речовин із заданими характеристиками.

Серед найбільш вагомих отриманих результатів можна, зокрема, виокремити такі:

- створено низку фізично адаптованих для квантово-механічного розрахунку електричних і магнітних властивостей молекул та міжмолекулярних комплексів наборів базисних функцій. На основі отриманих при цьому аналітичних виразів розроблено пакет комп'ютерних програм. Використання розроблених наборів базисних функцій значно підвищує ефективність застосування методів квантової механіки для розрахунку таких



Виступ члена-кореспондента НАН України Сергія Івановича Оковитого

властивостей молекул, як поляризованість, гіперполяризованість, магнітна сприйнятливість, люмінесценція, оптичне обертання, а також параметрів коливальних, електронних спектрів і спектрів ядерного магнітного резонансу;

- дослідження топології поверхні потенційної енергії органічних реакцій дало змогу з'ясувати особливості перебігу процесів. Зокрема, вперше отримано переконливі теоретичні підтвердження того, що реакція епоксидування олефінів пероксикидотами відбувається за двостадійним бірадикальним механізмом. Запропонований і реалізований на прикладі розкриття епоксидного циклу алгоритм генерації «хімічних» маршрутів для багатоканальних бімолекулярних реакцій є ефективним для вивчення взаємодії конформаційно рухливих молекул;

- реалізовано комп'ютерне моделювання механізмів і кінетики реакцій розпаду високоенергетичних (вибухових) речовин та продуктів їх окиснення, а також їхньої взаємодії з іншими речовинами довкілля, що допомагає розробляти методи ефективного вилучення цих забруднювачів з навколишнього середовища;

- проведено комп'ютерне моделювання взаємодії потенційних лікарських речовин з біохімічними об'єктами (ферментами та рецепторами фактора росту) методами молекулярного

докінгу, напівемпіричними квантово-механічними методами, а також гібридним методом QM/MM, який поєднує квантово-механічні та молекулярно-механічні методи. Розраховані при цьому величини енергії взаємодії між зазначеними об'єктами добре узгоджуються з показниками біологічної активності, що дає змогу використовувати моделювання для прогнозування біологічної активності нових, ще не досліджених, сполук.

Отримані результати мають високу наукову та практичну значущість і є вагомим внеском у розвиток методів комп'ютерного моделювання фізичних, хімічних та фармакологічних властивостей речовин.

В обговоренні доповіді взяли участь директор Інституту фізики конденсованих систем НАН України член-кореспондент НАН України Т.М. Брик; завідувач відділу молекулярної та квантової біофізики Інституту молекулярної біології і генетики НАН України доктор хімічних наук Л.Г. Горб; академік-секретар Відділення фізики і астрономії НАН України академік НАН України В.М. Локтев; віцепрезидент НАН України, голова Секції хімічних і біологічних наук НАН України академік НАН України В.Г. Кошечко; академік-секретар Відділення хімії НАН України академік НАН України М.Т. Картель; директор Головної астрономічної обсерваторії НАН України академік НАН України Я.С. Яцків.

* * *

Далі члени Президії НАН України заслухали наукову доповідь заступника директора з наукової роботи Державної установи «Інститут економіки та прогнозування НАН України» академіка НАН України **Андрія Андрійовича Гриценка** про формування засад національної укоріненої стійкості та безпеки економічного розвитку України в умовах нової гібридної реальності «мир-війна» (стенограму див. на с. 61).

У доповіді зазначено, що з огляду на економічні перетворення, які відбувалися в економіці України протягом останніх трьох десятиліть, можна констатувати, що нашій країні був при-

таманний інверсійний тип розвитку ринкової економіки, проте вона весь цей час використовувала методи й засоби класичного типу.

Якщо у класичному типі розвиток відбувається від дрібної власності до більшої, від вільної конкуренції до монополії, від вільного ціноутворення до регулювання цін, то в інверсійному типі перехід протилежний — від загального одержавлення до приватної власності, від державної монополії до розвитку конкуренції, від директивного планування до вільного ціноутворення. Внаслідок ринкової трансформації інверсійного типу в умовах глобалізації та поєднання приватизації, лібералізації і глобалізації Україна не змогла сформувати внутрішній ринок, вибудувати господарський комплекс і перетворилася на сировинний придаток економік більш розвинених країн.

Така спотворена внутрішня структура економіки весь цей час відтворювалася, причому в розширеному масштабі, що призвело до деіндустріалізації, поглиблення внутрішньоекономічних і соціальних суперечностей, розшарування населення за статками.

Зміст національного укорінення економічного розвитку полягає у формуванні національного господарського комплексу, який, спираючись на національні сировинні, науково-технічні й трудові ресурси, здатний вибудувати мережу ланцюгів доданої вартості та створювати кінцеву продукцію для задоволення внутрішніх потреб населення, зростання його добробуту, а також для збільшення експорту. Ця стратегія поєднання зовнішньої та внутрішньої інклюзивності повинна бути реалізована в процесі повоєнного відновлення України.

Подібний світовий досвід найбільшою мірою узагальнено в так званих міжнародних консенсусах щодо засад економічного розвитку, і його необхідно врахувати при побудові стратегії національного укорінення економічного розвитку в Україні.

Важливими складовими успіху відбудови є створення досить ліберального ринкового і конкурентного середовища (Вашингтонський консенсус), активне залучення держави до ви-



Виступ академіка НАН України Андрія Андрійовича Гриценка

значення та підтримки стратегічних напрямів розвитку (Пекінський консенсус), всебічний розвиток внутрішнього ринку (Мумбайський консенсус), стратегічне значення розбудови інфраструктури (Сеульський консенсус), соціальний розвиток і міжнародна співпраця (Європейський консенсус). Не менш важливими чинниками є також впровадження промислової політики, яка нині виходить із забуття і стає актуальною у всьому світі, та збалансований аграрно-сільський розвиток, оскільки в Україні є великі успішні агрохолдинги, а село деградує. Крім того, необхідно врахувати імператив інноваційного розвитку, представлений у доповіді відомого економіста і колишнього прем'єра Італії Маріо Драгі «Майбутнє європейської конкурентоспроможності». Такий підхід загалом може становити основу Київського консенсусу.

Перехід від індустріально-ринкової до інформаційно-мережевої системи господарювання створює ситуацію, коли в центрі розвитку опиняються університети, наука, людина як основне джерело інформації й фундаментальне підґрунтя подальшого розвитку сучасної індустрії. Це зумовлює необхідність визначити якість життя як ключову категорію та важливу ланку повоєнного відновлення.

Нині формується потужний рух підприємницьких структур, малого і середнього

бізнесу, інших суб'єктів господарювання, громадянського суспільства, наукової спільноти, спрямований на активну участь у процесі відновлення та розвитку української економіки. Інститут економіки та прогнозування НАН України розробив і направив до органів державної влади низку практичних пропозицій щодо створення інститутів сприяння національно укоріненому розвитку, розв'язання базових проблем відтворення життєдіяльності людей та структури економічного розвитку.

Реалізація стратегії національно укоріненого розвитку потребує вирішення низки невідкладних завдань, серед яких прийняття закону про державне стратегічне планування; організаційне забезпечення вирішення завдань з аналізу гео економічного положення та конкурентних переваг нашої країни для формування Стратегії розвитку України, зокрема створення в НАН України структурного підрозділу, здатного повноцінно забезпечувати реалізацію цього дуже складного та відповідального завдання; створення інститутів та планово-ринкових механізмів забезпечення вирішення стратегічних завдань, необхідних для розвитку внутрішнього ринку; формування інституційної спроможності суспільства, держави та бізнесу для реалізації завдань забезпечення повоєнного реконструктивного відновлення та розвитку України шляхом створення мережі проміжних ланок перероблення сировини на готову продукцію, що має внутрішній і зовнішній попит.

В умовах невизначеності та надзвичайної складності суспільних процесів вирішити завдання національного укорінення економічного розвитку можливо лише з опорою на меритократичний підхід, коли в державній владі переважають фахівці, які мають належний досвід і здатні забезпечити високу якість управління.

В обговоренні доповіді взяли участь заступник голови Об'єднання організацій роботодавців України Василь Костиця; голова ради директорів Науково-технологічного комплексу «Інститут монокристалів» НАН України академік НАН України В.П. Семиноженко; дирек-

тор ДУ «Інститут економіки та прогнозування НАН України» академік НАН України В.М. Геєць; директор Головної астрономічної обсерваторії НАН України академік НАН України Я.С. Яцків; академік-секретар Відділення економіки НАН України академік НАН України Е.М. Лібанова; віцепрезидент НАН України, голова Секції фізико-технічних і математичних наук НАН України академік НАН України В.Л. Богданов.

* * *

Далі члени Президії НАН України заслухали інформацію віцепрезидента НАН України академіка НАН України В.Л. Богданова про результати оцінювання ефективності діяльності наукових установ НАН України у 2024 році.

З метою об'єктивного оцінювання ефективності діяльності наукових установ НАН України та відповідно до розпорядження Президії НАН України від 19.02.2024 № 107 «Про оцінювання ефективності діяльності наукових установ НАН України у 2024 році» в період від 01.04.2024 до 30.11.2024 Офіс оцінювання діяльності наукових установ НАН України організував, а експертні комісії провели оцінювання ефективності діяльності 46 наукових установ НАН України і, відповідно, 389 наукових підрозділів цих установ. До складу експертних комісій, які здійснювали оцінювання діяльності наукових установ, було залучено 269 експертів, з яких 122 особи (45,4 %) — представники позаакадемічних установ і 31 (11,5 %) — зарубіжні експерти.

Робота експертних комісій проходила у звичайному режимі з відвідуванням наукових установ. Особливістю процедури оцінювання наукових установ у 2024 р. було те, що періоди оцінювання деяких установ становили більш як 5 років, що пов'язано з відтермінуванням проведення оцінювання у 2022 р. (постанова Президії НАН України від 06.04.2022 № 102 «Про відтермінування проведення оцінювання ефективності діяльності наукових установ НАН України») у зв'язку з військовою агресією РФ проти України та введенням в Україні воєнного стану. Постійна комісія НАН України з

оцінювання ефективності діяльності наукових установ НАН України розглянула надані постійними комісіями за науковими напрямками звіти про діяльність установ та затвердила їх результати (протоколи від 11.02.2025 № 1/2025 та від 18.02.2025 № 2/2025).

За результатами оцінювання 39 (84,8 %) наукових установ НАН України віднесено до категорії «А» (установа займає лідерські позиції за багатьма науковими напрямками, має вагомі наукові та практичні результати своєї діяльності, визнані на міжнародному та найвищому національному рівнях, високий науковий потенціал та ефективно його використовує, має винятковий вплив на науково-технічний та соціальний розвиток; установу інтегровано у світовий науковий простір), 7 (15,2 %) наукових установ — до категорії «Б» (установа займає сильні позиції на національному рівні, є провідною за певними напрямками наукових досліджень та розробок, впровадження конкретних видів наукової та технічної продукції, має вагомі результати для забезпечення розвитку науки і практики відповідної галузі науки України, значний потенціал для наукового, технічного та соціального розвитку країни, виявляє активність щодо інтегрування у світовий науковий простір з урахуванням національних інтересів). До категорій «В» та «Г» не віднесено жодної наукової установи.

* * *

Члени Президії НАН України розглянули також низку поточних питань:

- затвердили списки зареєстрованих кандидатів у дійсні члени (академіки) і члени-кореспонденти НАН України на виборах до складу НАН України у 2025 р. за відповідними відділеннями та спеціальностями;
- схвалили проект Звіту про діяльність Національної академії наук України в 2024 році;
- погодили відтермінувати проведення виборів керівників наукових установ НАН України та подовжили терміни повноважень нинішніх директорів: Інституту космічних досліджень НАН України та ДКА України (директор — член-кореспондент НАН України

О.П. Федоров); Інституту геотехнічної механіки ім. М.С. Полякова НАН України (директор — академік НАН України А.Ф. Булат); Головної астрономічної обсерваторії НАН України (директор — академік НАН України Я.С. Яцків); Радіоастрономічного інституту НАН України (директор — член-кореспондент НАН України В.В. Захаренко); Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН України (директор — доктор фізико-математичних наук О.В. Долбин); Інституту електронної фізики НАН України (директор — член-кореспондент НАН України Г.М. Гомонай); Фізико-технологічного інституту металів та сплавів НАН України (директор — член-кореспондент НАН України А.В. Нарівський); Інституту імпульсних процесів і технологій НАН України (директор — член-кореспондент НАН України О.І. Вовченко); Інституту електродинаміки НАН України (директор — академік НАН України О.В. Кириленко); Інституту біології клітини НАН України (директор — академік НАН України А.А. Сибірний); Державної установи «Інститут енциклопедичних досліджень НАН України» (директор — кандидат філологічних наук М.Г. Железняк); Державної установи «Інститут Івана Франка НАН України» (директор — академік НАН України Є.К. Нахлік); Інституту мовознавства ім. О.О. Потебні НАН України (директор — академік НАН України Б.М. Ажнюк); Українського мовно-інформаційного фонду НАН України (директор — академік НАН України В.А. Широков); Інституту народознавства НАН України (директор — академік НАН України С.П. Павлюк); Державної установи «Інститут досліджень науково-технічного потенціалу та історії науки ім. Г.М. Доброва НАН України» (директор — доктор економічних наук Б.А. Маліцький); Центру досліджень інтелектуальної власності та трансферу технологій НАН України (директор — доктор юридичних наук Ю.М. Капіца);

- погодили рішення про тимчасове виконання обов'язків голови Ради молодих вчених НАН України першим заступником голови Ради молодих вчених НАН України.

Відзнакою НАН України «За професійні здобутки» нагороджено:

- заступника начальника відділу інформаційно-комунікаційного забезпечення Управління справами НАН України **Ходимчук Ірину Петрівну** за багатолітню плідну сумлінну працю, вагомий внесок у підтримку ефективного функціонування інформаційних технологій в апараті Президії НАН України та відповідальне ставлення до виконання посадових обов'язків.

Подякою НАН України відзначено:

- старшого наукового співробітника Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН

України кандидата технічних наук **Єпіфанцеву Тетяну Олександрівну** за багатолітню плідну творчу працю та вагомий особистий внесок у розроблення технологій отримання порошкових виробів;

- старшого наукового співробітника Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України кандидата технічних наук **Хоменка Олексія Ігоровича** за багатолітню плідну творчу працю та вагомий особистий внесок у розроблення апаратно-програмних комплексів для дослідження властивостей матеріалів.

*За матеріалами засідання
підготувала О.О. Мележик*