

Міністерство освіти і науки України
Державна наукова установа «Інститут модернізації змісту освіти»
Полтавський національний педагогічний університет імені В. Г. Короленка
Вінницький державний педагогічний університет імені Михайла Коцюбинського
Національний університет «Чернігівський колегіум» імені Т. Г. Шевченка
Уманський державний педагогічний університет імені Павла Тичини
Центральноукраїнський державний педагогічний університет
імені Володимира Винниченка
Житомирський державний університет імені Івана Франка
Полтавська академія неперервної освіти ім. М. В. Остроградського
Центр професійного розвитку педагогічних працівників Полтавської міської ради



ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

**ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ**

«XVIII ПОЛТАВСЬКІ ХІМІЧНІ ЧИТАННЯ»

12 – 13 березня 2025 року

Полтава 2025

1. Aboyewa J.A., Sibuyi N.R.S., Meyer M., Oguntibeju O.O. Green synthesis of metallic nanoparticles using some selected medicinal plants from Southern Africa and their biological applications. *Plants*. 2021. Vol. 10. P. 1-24.
2. Микитюк М.В. Наночастинки та перспективи їх застосування в біології і медицині. *Проблеми екології та медицини*. 2011. 15, № 5-6. С.41-49.
3. Salem S.S., Fouda A. Green Synthesis of Metallic Nanoparticles and Their Prospective Biotechnological Applications: an Overview. *Biol Trace Elem Res*. 2021. Vol. 199. P. 344–370.
4. Бірюцький В.С., Цехмістренко С.Ш., Мельниченко Ю.О. Екстракти рослин як джерело відновників і стабілізаторів у разі зеленого синтезу наночастинок металів і металоїдів. Аграрна освіта та наука: досягнення, роль, фактори росту: Інноваційні технології в агрономії, землеустрої, електроенергетиці, лісовому та садово-парковому господарстві : матеріали Міжн. наук.-практ. конф. м. Біла Церква, 3 жовтня 2024 р. Біла Церква, 2024. С. 37-38.
5. Chemistry and Technology Innovation to Advance Green and Sustainable Chemistry / P. Prabhakaran et al. Sustainable Green Catalytic Processes. Editor: M. Sen. 2024. Chapter 12. 546 p.
6. Nano-QSAR modeling for predicting the cytotoxicity of metallic and metal oxide nanoparticles: A review / G. Li et al. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 2022. Vol. 243. ID 11395.
7. Rybińska-Fryca A., Mikołajczyk A., Puzyn T. Structure–activity prediction networks (SAPNets): a step beyond Nano-QSAR for effective implementation of the safe-by-design concept. *Nanoscale*. 2020. Vol.12. P. 20669-20676.

ДОСЛІДЖЕННЯ МЕХАНІЗМУ ВИНИКНЕННЯ ПОВЕРХНЕВОЇ ПРОВІДНОСТІ АЛМАЗУ В ЙОННИХ РОЗПЛАВАХ

**В. В. Соловйов¹, Т. Ю. Кузнецова¹, В. Л. Чергинець², О. А. Коваленко¹,
О. Г. Дрючко³**

¹ Полтавський національний педагогічний університет імені В. Г. Короленка

² Інститут сцинтиляційних матеріалів

³ Національний університет «Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»

Виявлені раніше методи ефективного осадження на алмази гальванічних покриттів з карбідів тугоплавких металів під час контакту алмазу з карбонатомісними розплавами ініціювали проведення квантовохімічних розрахунків з метою виявлення електронного механізму поверхневої провідності алмазу в йонних розплавах. Проведене моделювання взаємодії поверхні алмазу з молекулами оксидних розплавів дало змогу встановити найвірогідніше конфігурації взаємодій кластера алмазу, який має в своєму складі 38 атомів карбону з молекулами розплавів та виділити дві причини перерозподілу заряду в кластері алмазу: електронну будову молекул розплаву та геометричні особливості взаємодій.

Розрахунки проводили за методом ССП МО ЛКАО, поверхню алмазу моделювали вуглецевим кластером; у якості характерних частинок для йонних оксидних розплавів, обрали CO_2 , CO_3^{2-} , VO_2^- , VO_3^{3-} [1, 2].

Аналіз величин енергій зв'язків С-С у кластері алмазу, розподіл заряду на атомах за Маллікеном, особливості міграції електронної густини у взаємодіях кластера з CO_2 або CO_3^{2-} характерних для карбонатомісних розплавів, дозволили зробити такі висновки: взаємодія поверхні алмазу зі структурними частинками карбонатомісних розплавів

відбувається за змішаним π -, σ -механізмом із превалюванням π -складової в перерозподілі електронної густини в кластері алмазу для взаємодії з CO_2 , що призводить до перебудови електронного спектра в поверхневому шарі алмазу і переходу останнього у фізично інший стан (напівпровідник, провідник). Ці висновки добре узгоджуються з експериментальними результатами.

Під час вивчення міжфазової межі алмаз-борвмісний розплав як характерні для розплаву обрано молекули BO_2^- , BO_3^{3-} , що є ізоелектронними з молекулами CO_2 і CO_3^{2-} . Аналіз взаємодій кластера BO_2^- і BO_3^{3-} , свідчить про те, що під час контакту алмазу з борвмісними розплавами відбувається перенесення заряду з молекул розплаву на атоми алмазу та перерозподіл електронної густини за σ -механізмом, що, відповідно до запропонованої схеми, свідчить про неможливість виникнення поверхневої провідності алмазу в борвмісних розплавах.

Добра кореляція отриманих результатів з експериментом, на фоні широкого практичного застосування синтетичних алмазів, стимулювали проведення розрахунків взаємодії кластера синтетичного алмазу на основі нітриду бору з молекулами CO_2 і BO_2^- .

Відповідно до схеми для взаємодії $(\text{BN})_4 \dots \text{CO}_2$ і $(\text{BN})_4 \dots \text{BO}_2^-$ спостерігається відтік електронної густини вглиб борозону (кластера нітриду бору), проте сумарне перенесення негативного заряду на атоми кластера залишає дискусійним питання про можливість металізації боразона в оксидних розплавах, які містять як основні молекули CO_2 і BO_2^- .

Таким чином, виконаний комплекс квантовохімічних розрахунків дав змогу пояснити на електронному рівні виникнення поверхневої провідності алмазу, зануреного в юнний розплав, і на основі розробленої схеми прогнозувати можливість таких ефектів при контакті діелектрика з юнним розплавом, без попередньої металізації діелектриком.

Список використаних джерел

1. Schlegel H.B. Combining Synchronous Transient and Quasi-Newton Methods to Find Transition States. *Israel Journal of Chemistry*. 1993. Vol. 3. P.449–454
2. Press W. H. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press. 1986. Vol. 13. P.449–456.

ІСТОРІЯ ХІМІЇ ЯК АСПЕКТ ВИХОВАННЯ ГУМАНІСТИЧНОГО СВІТОГЛЯДУ

В. В. Соловйов¹, А. В. Деркач¹, Т. Ю. Кузнецова¹, Н. В. Соловйова²

¹ Полтавський національний педагогічний університет імені В. Г. Короленка

² Полтавський державний медичний університет

Одним із найважливіших завдань закладів вищої освіти є виховання гуманної, творчої особистості, здатної до самовдосконалення як в інтелектуальному, так і в моральному плані. Хімія, як одна з основних природничих наук, покликана сформувати культуру фізико-хімічного мислення, дати студентам цілісне уявлення про методологію пізнання оточуючого світу та визначити ефективні і разом із тим етично прийнятні шляхи взаємодії людини з навколишнім середовищем. Важливу роль в процесі виховання духовно розвинутої, творчої й відповідальної особистості повинна відіграти історія хімії - історія розвитку людської думки, пошуку шляхів до істини, до чого має приєднатися майбутня інтелектуальна еліта.