

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ ТА НАУКИ УКРАЇНИ

Полтавська державна аграрна академія
Корпорація MICRO TRACERS Inc. Сан-Франциско (USA)
KTH Royal Institute of Technology,
School of Engineering Sciences in Chemistry,
Biotechnology and Health Division of Theoretical Chemistry
and Biology Stockholm, Sweden.
N. Gumilyov Eurasian National University,
Chemistry Department, Astana, Kazakhstan
Лабораторія ALAB'' Uczelnia Warszawska im. Marii Sklodowskiej-Curie,
м. Варшава, Польща
Plant and Soil Sciences Department University of Delaware, (USA)
Institute of Science and Technology for Ceramics, National Research Council, Faenza , Italy
University of Torino, Department of Chemistry & Nanostructured Interfaces, Turin, Italy

IV МІЖНАРОДНА НАУКОВО-ПРАКТИЧНА ІНТЕРНЕТ-КОНФЕРЕНЦІЯ

«ХІМІЯ, ЕКОЛОГІЯ ТА ОСВІТА»

ЗБІРНИК МАТЕРІАЛІВ

21-22 травня 2020 року



Полтава - 2020

V. 141. – P. 155–164. 8. Никитин Е. Д. Обзор. Критические свойства термонестабильных веществ: методы измерений, некоторые результаты, корреляции / Е. Д. Никитин // TVT. – 1998. – V. 36, № 2. – P. 322–337. 9. Wilson L. DIPPR Project 851 – Thirty Years of Vapor–Liquid Critical Point Measurements and Experimental Technique Development / L. Wilson, L. Jaspersen, D. Von Niederhausern, N. Giles, C. Ihmels // J. Chem. Eng. Data. – 2018. – V. 63, № 9. – P. 3408–3417. 10. Darwish N.A. Application and Performance of Neural Networks in the Correlation of Thermophysical Properties of Long-Chain n-Alkanes / N.A. Darwish // Ind. Eng. Chem. Res. – 2007. – V. 46. – P. 4717 – 4725. 11. Bychinsky V.A. Methods for Calculating the Critical Constants of Hydrocarbons (Using the n-Alkane Series as an Example) / V.A. Bychinsky, A.A. Tupitsyn, K.V. Chudnenko and A.V. Mukhetdinova. // J. Chem. Eng. Data 2013, 58, 11, 3102-3109. 12. McCabe C. and Jackson G. SAFT-VR modeling of the phase equilibrium of long-chain n-alkane. // Phys. Chem. Chem. Phys. – 1999. – V. 1. – P. 2057–2064. 13. Papaioannou V. A molecular-based group contribution equation of state for the description of fluid phase behaviour and thermodynamic derivative properties of mixtures (SAFT- γ). – London: Department of Chemical Engineering Imperial College, P. 2012. – 241. 14. Kumar A. Critical parameters optimized for accurate phase behavior modeling for heavy n-alkanes up to C100 using the Peng–Robinson equation of state / A. Kumar, R. Okino // Fluid Phase Equilibria. – 2012. – V. 335. – P. 46–59. 15. Лобурець А.Т. Вивчення критичних характеристик важких алканів за результатами низькотемпературних досліджень паро-рідинної рівноваги / А.Т. Лобурець, С.О. Заїка, Н.С. Ульченко // Академічна й університетська наука: результати та перспективи: зб. наук. пр. XII Міжнар. наук.-практ. конф., 6 груд. 2019 р. – Полтава: Нац. ун-т імені Юрія Кондратюка, 2019. – С. 111-116. 16. Zayika S.O., Loburets A.T. Application of statistical methods for modeling of "liquid-gas" thermodynamic systems of real substances // Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС 2018: міжнар. наук.-практ. конф., 25 - 29 черв. 2018 р.: тези доп. – Чернігів, 2018. – P. 106 –108.

ФІЗИКО-ХІМІЧНІ АСПЕКТИ ПІДГОТОВЧИХ СТАДІЙ ФОРМУВАННЯ САМООЧИЩУЮЧИХСЯ ФОТОКАТАЛІТИЧНО- АКТИВНИХ ПОКРИТТІВ КОНСТРУКЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ

**Дрючко О.Г., Стороженко Д.О., Бунякіна Н.В., Іваницька І.О.,
Китайгора К.О., Ханюков В.О., Горобець Д.О. (м. Полтава)**

Дана робота спрямована на пошук нових комплексних рішень для створення нового покоління флоат-скла для будівельної індустрії (як зовнішнього, так і інтер'єрного - дизайн-скління), покриття конструкцій сонячної фотоелектричної енергогенерації та інших спеціалізованих галузей: виробів з покриттям комплексної дії - з фотокаталітичними і гідрофільними властивостями за розробленими інноваційними технологіями та використанням

композицій діоксиду титану. Реалізація наведених непростих рішень дозволяє також одночасно вирішувати завдання підвищення ефективності роботи перетворювачів відновлювальних форм енергії в електроенергетиці, енергозбереження та сонцезахисту, забезпечуючи ефектний зовнішній вигляд фасаду споруд і створюючи комфортний мікроклімат для людей, що знаходяться у внутрішніх приміщеннях.

Нині впровадження інноваційних рішень пов'язують з:

- розробкою методів синтезу тонких плівок, функціональних покриттів і нанорозмірних неорганічних оксидних наповнювачів з хімічно модифікованою поверхнею;
- розробкою нанохімічних рідкофазних і піролітичних методів синтезу тонких оксидних плівок на поверхні твердих тіл;
- дослідженням особливостей протікання реакцій хімічного модифікування і утворення наночасток в тонких оксидних плівках і композиційних системах;
- створенням плівкових структурованих фотокаталізаторів; функціональних, спеціальних, захисних, антикорозійних і декоративних покриттів на поверхні неорганічних матеріалів;
- розробленням захисного супергідрофільного покриття на поверхні композицій $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$, TiO_2/Si , яке полегшує очищення від пилу, полярних і неполярних забруднювачів, а також захищає від негативного впливу атмосферних чинників.

Одним із найбільш перспективних класів фотокаталітично активних складних оксидних матеріалів рідкісноземельних елементів і титану, що можуть виступати альтернативами вже існуючим розробкам, є наноструктуровані шаруваті перовскітоподібні сполуки і тверді розчини на їхній основі. Залежно від складу і структури, вони мають широкий спектр фізико-хімічних властивостей. Представлені в даній роботі перовскітоподібні шаруваті титанати належать гомологічному ряду $(\text{Me}, \text{Ln})_{n+1}\text{Ti}_n\text{O}_{3n+1}$ – фаз Раддлесдена-Поппера, де Me – H, Li, Na, K, Rb, Cs; Ln – La, Nd, n – число наночасток перовскіта, з товщиною одного шару приблизно 0,5 нм; відповідно,

MeLnTiO_4 у своїй структурі містить один наночар перовскіту, $\text{Me}_2\text{Ln}_2\text{Ti}_3\text{O}_{10}$ – три.

Особливості застосування методів «м'якої хімії» у ході формування наносистем полягають у можливості синтезу нових фотокаталітичноактивних покриваючих матеріалів з високою хімічною однорідністю багатоконпонентних систем за рахунок рівномірного (на молекулярному рівні) розподілу компонентів у вихідному розчині, істотному зниженні температури їх формування, можливості управління властивостями одержуваних цільових продуктів в процесі синтезу, а простота і доступність цього методу сприяють застосуванню його в промислових масштабах. Але що стосується механізмів формування нанокомпозитів з плівкоутворюючих розчинів за наведеними технологіями, впливу умов формування на структуру, фізико-хімічні та цільові властивості, то ці питання практично не вирішені. Тому для успішного використання наноматеріалів в масовій технології необхідне системне фундаментальне дослідження зазначених аспектів.

У роботі комплексним системним дослідженням взаємодії структурних компонентів у системах нітратів лантаноїдів церієвої підгрупи і представників ІА групи (Li, Na, K) елементів періодичної системи [1-2] – прекурсорів сучасних багатоконпонентних оксидних поліфункціональних матеріалів на їх основі – встановлено утворення представницького класу лужних координаційних нітратів Ln. Їхній склад, умови утворення, атомно-кристалічну будову, форми координаційних поліедрів Ln, типи координації лігандів, ряд їхніх властивостей досліджено з використанням комплексу фізико-хімічних методів: хімічним, рентгенофазовим, рентгеноструктурним, ІЧ-спектроскопічним, кристалооптичним, термографічним, ГДГ лазерного випромінювання. З'ясовані об'єктивні закономірності поведінки цього типу сполук поглиблюють розуміння про хімічні і фізичні властивості Ln, їх комплесуотворюючу здатність; можливість утворення й існування в аналогічних системах асоційованих нових фаз і їх стійкість; вплив природи

лантаноїдів і лужних металів на структуру комплексних аніонів і сполук у цілому; індивідуальність Ln комплексів; існування ізотипних за складом і структурою груп сполук за природними рядами лантаноїдів і лужних металів; роль NO₃⁻-груп в стереохімії цього класу нітратів; роль води у формуванні найближчого оточення іонів Ln³⁺- комплексоутворювачів. Одержані дані є основою для виявлення, ідентифікації, контролю фазового стану об'єктів перероблення у підготовчих стадіях при формуванні самоочищуючихся шарів покриття конструкційних матеріалів за інноваційними технологіями з використанням наноструктурованих композиційних систем лантаноїдів і перехідних елементів з фотокаталітичноактивними і гідрофільними властивостями, різних комбінованих способів їх активації та встановлення технологічно-функціональних залежностей, керованого модифікування властивостей одержуваних продуктів.

Список використаних джерел:

I. Dryuchko, O., Storozhenko, D., Vigdorich, A., Bunyakina, N., Ivanytska, I., Kytaihora, K., Khaniukov, V. Features of transformations in REE-containing systems of nitrate precursors in preparatory processes of formation of multifunctional oxide materials. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 672(1), 199-214 (2019). doi:10.1080/15421406.2018.1542066. 2. Дрючко О. Г., Стороженко Д.О., Бунякіна Н.В. та ін. Фізико-хімічне охарактеризування координаційних нітратів РЗЕ і лужних металів – прекурсорів оксидних поліфункціональних матеріалів. // Вісник національного технічного університету «ХПІ», серія: Хімія, хімічна технологія та екологія. – Х.: НТУ «ХПІ». – 2018. – № 39 (1315). – С. 3–13. doi: 10.20998/2079-0821.2018.39.01.

РЕПАРАТИВНІ ВЛАСТИВОСТІ ДЕЯКИХ ПОХІДНИХ 1,2,3-ТРИАЗОЛА

Звенігородська Т.В. (м. Полтава)

Похідні 1,2,4-тріазолів останнім часом привертають увагу багатьох дослідників. Причиною цього слугує можливість на етапі циклізації тріазольного кільця вводити різні замісники в залежності від використання вихідних речовин [1]. На сьогодні дуже актуальною залишається спроба хімічного поєднання різних органічних фрагментів із гетероциклом 1,2,4-тріазолу [2]. Ряд похідних має біологічну активність: на їх основі створено антибактеріальні, нейролептичні, спазмолітичні фармакологічні препарати[8,