

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
МАЛА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
“ПОЛТАВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА
ІМЕНІ ЮРІЯ КОНДРАТЮКА”



МІНІСТЕРСТВО
ОСВІТИ І НАУКИ
УКРАЇНИ



United Nations
Educational, Scientific and
Cultural Organization

М.А.Н.

Мала академія наук
України під егідою
ЮНЕСКО

ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ XVI МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ “АКАДЕМІЧНА Й УНІВЕРСИТЕТСЬКА НАУКА: РЕЗУЛЬТАТИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ”



205

років освітніх традицій

12-13 ГРУДНЯ 2023 РОКУ

етилового спирту, а настойки з квітів чорнобривців - 40% розчину етилового спирту. При приготуванні настоек з листя чорнобривців концентрація етилового спирту в діапазоні 40-96% не впливає на вміст екстрактивних речовин в настойках. Отримані результати можна пояснити тим, що розчини етилового спирту з різними концентраціями вилучають з рослинної сировини різні за природою як БАР, так і різні за природою супутні речовини.

Отож, проведені дослідження показали, що настойки з пелюсток, квітів і листя чорнобривців багаті екстрактивними речовинами і потрібно подальше дослідження для визначення природи БАР та їх кількісного вмісту, а також вивчення біологічної активності настоек.

Література:

1. Traditional uses, Phyto-chemistry and pharmacological activities of *Tagetes Patula* L./ Riaz M., Ahmad R., Rahman N.U. et al. *J. Ethnopharmacology*. 2020. 255. 112718.
2. Дослідження флавоноїдів чорнобривців золотистих (*Tagetes Lucida* Cav.)/ Марцишин С.М., Костишин Л.В., Валько Т.В. та ін. *Медична та клінічна хімія*. 2021. Т. 23. № 4. С.95-102.
3. Державна Фармакопея України. 1-е вид. Доп.4. Харків: Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів». 2011. С. 342.

УДК 544.653.3:546.78-31

ОТРИМАННЯ НОВИХ НАНОРЕЧОВИН ПРИ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОМУ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОМУ СИНТЕЗІ ПРИ БАГАТОЕЛЕКТРОННОМУ ПЕРЕНОСІ ЗАРЯДУ, ВРАХОВУЮЧИ ЧАС ЖИТТЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНО АКТИВНИХ КОМПЛЕКСІВ

Соловійов В.В., Усенко Д.В.,

Національний університет «Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»
dcc_nl_ne@ukr.net

Чергинець В.Л.

Інститут сцинтиляційних матеріалів НАН України

Раніше [1,2] було обґрунтовано можливість отримання нових наноречовин при високотемпературному електрохімічному синтезі (ВЕС). Визначальну роль при цьому належить катіонному складу розплаву, альтернативі б-електронного переносу заряду (одночасному та послідовному), який визначався часом життя електронів $\Delta\tau$ у проміжних станах. В цій роботі приводяться результати впливу часу життя електронів у проміжних станах на процеси багатоелектронного послідовного перенесення заряду при ВЕС для отримання нових поліморфічних наноматеріалів.

За формулою Бора час життя $\Delta\tau$:

$$\Delta\tau = \hbar / \Delta E \tag{1}$$

З іншого боку $\Delta\tau = 1/|\Delta\omega| = 1/(2\pi|\Delta\nu|)$ (розрахунки $\Delta\omega$ за програмою Gamess). $|\Delta\nu|$ - модуль різниці частот коливань в перехідному і кінцевому станах.

Енергетична оцінка переваги одночасного б-електронного переносу заряду, в порівнянні з постадійним, який враховує час життя проміжних інтермедіатів, дозволяє отримати більш повну інформацію при отриманні нових наноматеріалів.

При послідовному б-електронному відновленні результуюча величина часу життя металокомплексів у перехідному стані визначалася алгебраїчною сумою величин часу життя $\Delta\tau_i$ розрахованих для всіх окремих елементарних стадій послідовного приєднання металокомплексом (інтермедіатом) кожного з x електронів:

$$\Delta\tau_{\text{посл}} = \sum_{x=1}^x \Delta\tau_i. \quad (2)$$

Порівняльний аналіз величин часів життя металокомплексів ЕАК при релаксації з перехідного стану в рівноважний в умовах незмінності числа електронів вказав як на пріоритет одночасного перенесення заряду перед послідовним для катіонізованих форм ЕАК, так і дозволив ще раз підтвердити оптимальні склад та форму ЕАК, наприклад: $\{Li_4^+[MoO_4]^{2-}\}^{2+}$, $\{Mg_4^+[MoO_4]^{2-}\}^{2+}$ та $\{Ca_4^+[MoO_4]^{2-}\}^{2+}$.

Таким чином, на підставі аналізу результатів ab initio-розрахунку впливу катіонного складу розплаву на структурні особливості ЕАК виявлено відмінність у будові зовнішніх координаційних сфер при реалізації послідовного та одночасного шестиелектронного переносу, а також обґрунтовано пріоритет одночасного переносу над послідовним для всіх катіонізованих форм ЕАК. Отримані результати, на нашу думку, відкривають перспективи цілеспрямованого створення необхідних умов для управління процесами переносу заряду при отриманні методами ВЕС речовин із заданими властивостями за рахунок зміни виду та форми ЕАК.

Література:

1. Soloviev V.V., Chernenko L.A. Quantum-mechanical simulation of the electronic structure and composition of tungsten metal complexes adsorbed on the electrode surface during high-temperature electrochemical synthesis under conditions of cationic catalysis, - *Nanosystems, nanomaterials, nanotechnologies*, V.12., № 1. - pp. 45–55, 2014.

2. Soloviev V.V., Solyanik L.A., Kuznetsova, T. Yu., Holik, Yu.S., Illyash O.E., Usenko D.V. The effect of multielectron transfer on the direction for the mechanism of heterogeneous reactions during the synthesis for nanomaterials from tungstate melts under the conditions of cationic catalysis, - *Molecular Crystals and Liquid Crystals* Volume 673, Issue 1, Pages 61 – 69, 22 September 2018.