

ЗАТВЕРДЖУЮ  
Директор Інституту хімії поверхні  
ім.О.О. Чуйка НАН України



## АНОТОВАНИЙ ЗВІТ

про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проекту  
із виконання наукових досліджень і розробок  
«Нові функціональні матеріали, що використовують можливість керування фазовим  
станом речовин в граничному шарі»

**Назва конкурсу:** «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»

**Реєстраційний номер Проєкту:** 2020.02/0057

**Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок**  
(реєстраційний номер та назва Проєкту) 2020.02/0057 «Нові функціональні матеріали, що  
використовують можливість керування фазовим станом речовин в граничному шарі»

**Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення  
переможця конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»**  
протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21

### 1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проєкту

Початок – 05 листопада 2020 року;

Закінчення – 2022 рік

Загальна вартість Проєкту, грн.12 000 тис.грн

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 2 000 тис грн

2-й рік 5 000 тис.грн

3-й рік 5 000 тис.грн

### 2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проєкту буде залучено 6 виконавців, з них:

доктори наук 2;

кандидати наук 2;

інші працівники 2.

### 3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(І) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ 03291669

Код КВЕД 72.19

Директор Картель Микола Тимофійович

вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна

(+380-44) 422-96-04, (+380-44) 422-96-32

[andriy.datsyuk@nas.gov.ua](mailto:andriy.datsyuk@nas.gov.ua)

[www.isc.gov.ua](http://www.isc.gov.ua)



## 4. ОПИС ПРОЄКТУ

**4.1 Мета Проєкту:** (до 200) Розробка наукових підходів до створення концентрованих сумішей гідрофобних та гідрофільних речовин у водному середовищі. Створення стійких концентрованих суспензій на основі сумішей гідрофобного та гідрофільного кремнеземів.

### 4.2. Основні завдання Проєкту (до 400)

1. Дослідження методами ЯМР-спектроскопії структури водних комплексів при різних ступенях гідратації. Визначення залежностей міжфазної енергії від кількості дисперсійного середовища.

2. Співставлення розподілів за розмірами агрегатів кремнезему в суспензіях сумішей гідрофобного та гідрофільного кремнеземів одержаних методами реології та ЯМР-спектроскопії.

3. Дослідження методів механічного впливу (механоактивація, екструдкування, швидкісне перемішування) на суміші гідрофобного та гідрофільного кремнеземів, що дозволяють одержувати гомогенні системи.

4. Вивчення залежностей стійкості композитних колоїдних систем від концентрації інгредієнтів та методу механічного впливу. Визначення реологічних властивостей колоїдних систем.

### 4.3. Детальний зміст Проєкту:

- Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

Актуальність проєкту обумовлена необхідністю створення нових матеріалів, які можуть виступати носіями біологічно активних речовин в композитних лікарських системах і забезпечують можливість програмованого вивільнення адсорбованих на їх поверхні речовин, здатних до адсорбції гідрофобних речовин з водного середовища, тих, що знижують температуру випаровування легко киплячих рідин, придатних для утворення на поверхнях тканин та конструкційних матеріалів гідрофобних плівок, які слугують захисним бар'єром від вологого середовища. В результаті будуть розроблені нові типи екологічно чистих багатофункціональних медичних препаратів, доступних для широких верств населення, розроблені фізико-хімічні підходи до побудови нових типів адсорбційних накопичувачів горючих вуглеводнів, гідрофобізуючих агентів з унікальними поверхневими властивостями.

- Новизна Проєкту (до 400 знаків)

Наукова новизна забезпечується використанням знайдених нами раніше нанорозмірних ефектів структурування адсорбованих речовин під дією молекулярних взаємодій з поверхнею регульованої гідрофобності. При розробці композитних систем медичного призначення будуть зокрема використані ефекти заміщення води гідрофобними речовинами в мезопорах гідрофільного кремнезему, кластероутворення води на поверхні як гідрофільного, так і гідрофобного кремнеземів, вторинної адсорбції активних речовин на поверхні кремнеземів, десорбованих з рослинної сировини та ін.

- Методологія дослідження (до 400 знаків)

Із застосуванням широкого набору фізико-хімічних та спектральних методів дослідження буде вивчено особливості протікання фазових переходів тверде тіло-рідина в міжчастинковому просторі, обмеженому твердими стінками, що складаються з гідрофобних та гідрофільних ділянок. Передбачається в якості рідкої фази використовувати воду та органічні рідини з різною температурою замерзання. Буде встановлено можливість поверхні стабілізувати твердий стан межуючої з нею речовини при температурах вищих за температуру



«об'ємного плавлення». Буде досліджено вплив на процес солідіфікації морфології мінеральної складової композитних систем співвідношенням гідрофобної та гідрофільної частин, розміру пор та наявності деяких типів адсорбованих речовин.

## 5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ

В поточному році в рамках реалізації проекту, зокрема:

### 5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів отриманих в рамках виконання Проекту (із зазначенням їх якісних і кількісних (технічних) характеристик)

Методами низькотемпературної  $^1\text{H}$  ЯМР-спектроскопії досліджено гідратовані порошки та концентровані водні суспензії гідрофобного кремнезему (метилкремнезем) і сумішей 1/1, 2/1 гідрофільного та гідрофобного пірогенних кремнеземів. Вимірювались величина міжфазної енергії ( $\gamma_s$ ), контактуючої з поверхнею води, розподіли за розмірами кластерів міжфазної води, кількості сильно та слабозв'язаної, а також сильно та слабо асоційованої води (завдання 1 та 2). В результаті встановлено, що зі збільшенням кількості води в межах  $h = 0,5 - 4,0$  г/г для гідрофобного кремнезему АМ-1 та суміші 1/1 гідрофобного та гідрофільного кремнезему, їх максимальна енергія взаємодії з водою спостерігається при  $h = 1,0$  та  $3,0$  г/г, відповідно. У випадку суміші А-300/АМ1 (2/1) у всьому діапазоні  $h$  спостерігається зростання величини  $\gamma_s$ . Максимуми на кривій залежності  $\gamma_s(h)$  обумовлені процесами реорганізації будови міжчастинкових агрегатів, які здійснюються за рахунок компактування гідрофобної та гідрофільної складових, а також адсорбції повітря на гідрофобній складовій композитної системи. Зменшення величини  $\gamma_s$  із зростанням  $h$ , обумовлене зростанням середнього значення радіусу кластерів адсорбованої води і зменшенням кількості сильнозв'язаної води. Ці ефекти суттєво впливають на реологічні параметри колоїдної системи, що може бути використано для керування їх тиксотропними властивостями.

Для концентрованих суспензій гідрофобного кремнезему та його сумішей 1/1 та 1/2 з гідрофільним кремнеземом досліджено вплив механічної обробки на в'язкість суспензії та їх стабільність для суспензій в діапазоні  $h = 2,0-8,0$  г/г (завдання 3,4). Використовувались кілька способів створення механічних навантажень: механоактивація (навантаження за рахунок сили між випуклими та вигнутими сферичними, поверхнями) екструдуювання (шляхом продавлювання крізь отвір діаметром 0,2-0,5 мм), швидкісне перемішування в зазорі між двома циліндричними поверхнями. На основі проведених робіт встановлено, що в'язкість та фазовий стан суспензій дуже чутливі до способу створення механічних навантажень, концентрації суспензій та швидкісного режиму навантажуючого пристрою. Всі типи композитних систем виявили значні тиксотропні властивості, що проявляються в залежності в'язкості від часу витримування зразка в стаціонарних умовах. Цей ефект існує як в статичних, так і в динамічних умовах. В статичних умовах після припинення дії механічних навантажень рідка суспензія через 0,2-2 години затвердіває і перетворюється в речовину, що має всі ознаки твердого тіла. В динамічних умовах під дією зростаючих навантажень в'язкість суспензії може зменшуватись в 5-10 разів. Стабілізація навантажень при певному їх значення дозволяє вийти на стаціонарні значення в'язкості. Поступове зменшення навантажень до нуля супроводжується зростанням в'язкості до величини, що в 2-3 рази перевищує в'язкість колоїдної системи до початку дії навантажень. Означені ефекти пов'язані із формуванням багатофазної самоорганізованої супрамолекулярної системи, що складається з гідрофобних та гідрофільних частинок кремнезему, наноструктурованої води в їх міжчастинкових зазорах та мікропухирців повітря, адсорбованого переважно на гідрофобних частинках метилкремнезему.

Композитна система на основі суміші гідрофільного та гідрофобного кремнеземів володіє високими сорбційними властивостями по відношенню до аніонного барвника, порівняно з ущільненими адсорбентами. У випадку катіонного барвника композит А-300/АМ1-300 має в 2 і 3,7 раз має вищу адсорбцію в кислому середовищі, порівняно з ущільненими формами кремнезему (А-300 з  $C_d$  300 г/л та А-300 з  $C_d$  175 г/л, відповідно). Метиленовий синій має в 6 і більше раз вищі значення адсорбції, порівняно з конго червони.



Відповідно до одержаної експериментальної інформації, технологічна схема створення стійких гідрофобних суспензій з різною концентрацією гідрофобних компонентів повинна включати кілька послідовно використовуваних апаратних систем: апарат первинної гідратації гідрофобних порошків в умовах дозованих механічних навантажень, що забезпечує продукування вологих порошків ( $h < 1$  г/г); пристрій для суспендування вологих порошків в воді за рахунок швидкісного перемішування, ультразвукової обробки чи екструзії; систему зважування та дозування готової продукції; розфасовка в тару у вигляді пластикових флаконів, поліетиленових пакетів або саше.

### **5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтувати її переваги у порівнянні з існуючими аналогами**

Переваги розроблюваної в рамках проекту продукції на основі гідроуцілених форм кремнезему в порівнянні з існуючими на ринку полягають в можливості регулювання широких меж об'єму макро- та мезопор, що істотно при використанні кремнеземів в якості носіїв лікарських препаратів та при видаленні з організму токсинів середньої молекулярної маси. Крім того пропонувані матеріали практично не містять вільних наночастинок, що в останні роки є передумовою для їх широкого використання в якості харчових добавок. Тобто розроблені ентеросорбенти та лікувальні композитні системи значно більш ефективні, ніж існуючі, особливо при їх використанні в якості комплексних лікувальних систем, що дозволяють одночасно проводити детоксикацію організму, поставку потрібних лікувальних речовин та активізації процесу їх всмоктування в шлунково-кишковому тракті.

### **5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації проекту для економіки та суспільства (стосується проектів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)**

Знайдені способи регулювання в широких межах об'єму макро- та мезопор розроблюваної в рамках проекту продукції на основі гідроуцілених форм кремнезему дадуть можливість, істотно підвищити якість композитних систем, використовуваних при видаленні з організму токсинів середньої молекулярної маси.

## **Науковий керівник Проекту**

Головний науковий співробітник

(посада)

Гуров В.В.

ПІБ

  
(підпис)