

ТЕНДЕНЦІЇ РОЗВИТКУ ФІЗИКО-НЕОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ В УКРАЇНІ

(візна сесія наукової ради НАН України з проблеми “Неорганічна хімія”)

24—26 квітня 2007 року в Миргороді відбулася візна сесія наукової ради НАН України з проблеми “Неорганічна хімія” (сумісно з науковою радою НАН України з проблеми “Електрохімія”), в організації якої прийняли участь Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України, Полтавський національний технічний університет ім. Ю. Кондратюка. Присвячена Всеукраїнському фестивалю науки сесія проходила за тематикою „Розвиток фізико-неорганічної хімії” у форматі дискусійних круглих столів. У роботі сесії взяли участь 36 вчених, у тому числі академік НАН України С.В. Волков, члени-кореспонденти НАН України А.Г. Білоус, В.М. Огенько, В.І. Пехньо, 15 докторів хімічних і технічних наук, а також молоді науковці з академічних установ та університетів.

Із вступним словом по сучасним тенденціям розвитку фізико-неорганічної хімії виступив голова ради з проблеми “Неорганічна хімія” академік НАН України С.В. Волков. Погляди з цього питання він вже висловлював раніше, зокрема, у статті “Современные аспекты и тенденции развития неорганической химии” (С.В. Волков, Укр. хим. журн. -1981. -47, № 11), в якій доведено на багатьох прикладах, що сучасна неорганічна хімія стає переважно фізико-неорганічною за своєю ідеологією, методами дослідження (як теоретичними, так і експериментальними), технологічним напрямком. На підмогу хімічним методам аналізу і дослідженням неорганічних сполук спочатку прийшли фізико-хімічні, а згодом фізичні концепції та заходи. Весь розвиток сучасної науки і техніки переконує нас в тому, що ця тенденція з кожним днем посилюється. С.В. Волков навів приклади з досліджень академіка РАН Ю.Д. Третякова, професора А.Р. Кауля та власних досліджень синтезів неорганічних речовин з використанням різних фізичних заходів, у тому числі високотемпературних, плазмових та кріохімічних синтезів, синтезів при високому тиску, механічних, електросинтезів, направлено синтезу матеріалів тощо. Він сформулював визначення фізико-неорганічної хімії як науки, що пояснює хімічні явища (у неорганічному світі) і встановлює їх загальні закономірності на основі принципів фі-

зики з використанням фізичних синтетичних і технологічних експериментальних методів.

У ряді хімічних досліджень, які включають синтез—склад—будову—властивості—функцію, фізико-неорганічна хімія охоплює майже весь цей ланцюг. Особливу увагу у своєму виступі С.В. Волков зосередив на дослідженнях у нанохімії та нанотехнології, що здатні забезпечити прорив у майбутнє. Найбільш перспективними, за рекомендаціями міжнародної конференції по нанотехнологіям (ФРН, Вісбаден, 2004), є дослідження нанопористих структур (>>100 нм), наночасток (~5—100 нм) [0, або 3Д], нанотрубок і нановолокон [1Д], нанодисперсій (колоїдів), наноструктурованих поверхонь і плівок [2Д], нанокристалів і нанокластерів (1—5 нм) [0, або 3Д]. Прикладні рішення — це сенсори, каталізатори, наноелектроніка, нанолітографія, воднева енергетика, паливні елементи та ін. С.В. Волков навів багато прикладів фундаментальних досліджень у цих напрямках, які ведуться в Інституті загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України.

На трьох круглих столах 18 провідних вчених з Києва, Харкова, Одеси, Львова, Донецька, Дніпропетровська та інших міст виступили з оригінальними повідомленнями, присвяченими різним напрямкам фізико-неорганічної хімії, у тому числі проблемам розвитку нанохімії, сенсорики, хімії координаційних сполук, перспективним над- та напівпровідниковим, люмінесцентним та іншим функціональним матеріалам, сучасній електрохімії неорганічних речовин, квантово-хімічним дослідженням. Кожне засідання закінчувалось дискусією з детальним обговоренням зазначеної тематики.

Перший круглий стіл (ведучий — член-кореспондент НАНУ В.І. Пехньо) за тематикою аналізу сучасного стану наукової проблематики фізико-неорганічної хімії, ідеології та теоретичних підходів розвитку пріоритетних напрямків розпочато оглядом „Нанонауки і нанотехнології — рубіж досягнень взаємозв'язку та взаємопроникнення природничих наук”, з яким виступив член-кореспондент НАНУ В.М. Огенько (ІЗНХ НАНУ). В історичному ракурсі було представлено розвиток природничих наук і техніки, їх взаємовідносини, які забезпечили прогрес у розвитку людст-

ва. Підкреслено роль фізики і хімії, нових комплексних досліджень у галузі НАНО та космосу, які об'єднують дослідників природи в уявленнях і знаннях про єдину картину світобудови. У виступі наведено приклади досліджень автора по синтезу наноструктур, зокрема, синтезу вуглецю із CCl_4 з використанням ближнього поля, розвитку нових напрямів фізики — нелінійної оптики, нелінійної спектроскопії, лазерної фізики (фемтосекундної лазерної плазми). Висловлено прогноз найближчого часу щодо дефіциту професії вченого-природознавця (з цим пов'язані і проблеми вищої освіти), необхідної для вирішення нових завдань, у тому числі в хімії нанотехнологій, серед яких розробка хімічних комп'ютерів-маніпуляторів, сортування молекул, виготовлення терезів на основі нанотрубок для окремих атомів, дисплеїв з нанотрубок, ДНК-синтетичних машин та ін. Означено перспективні на майбутнє напрями досліджень та технологій: обробка речовин і матеріалів на атомно-молекулярному рівні, створення надміцних матеріалів (розробка на їх основі нового транспорту), мініатюрних комп'ютерів з мультитерабітовим обсягом пам'яті, протиракових препаратів, очищення води, повітря, захист довкілля, безпечна сонячна енергетика.

Професор Є.П. Ковальчук (Львівський національний університет) ознайомив учасників сесії з сучасним станом та перспективами наукового напрямку „сенсорика” (хемосенсорика, біосенсорика, виробництво мікросенсорів та мікročіпів). Хемосенсорика розвивалась на базі тонкоплівкових технологій, які були розроблені для потреб мікроелектроніки. Різні технічні засоби, а останнім часом і нанотехнології, були з успіхом використані (акцептовані) хемосенсорикою і практично реалізовані для створення хемосенсорів. Розвиток біосенсорики відбувався самостійно, з урахуванням досягнень біотехнологій. Завдяки високій чутливості, короткому часу формування відгуку, можливості реактивації активного шару хемо- і біосенсорика знайшли широке використання для моніторингу технологічних процесів, екологічних забруднень довкілля, якості продуктів харчування. Особливе місце займають електрохімічні сенсори, виготовлення яких стало можливим в будь-яких хімічних лабораторіях. Подальший розвиток цього перспективного напрямку відбуватиметься через пошук нових синтетичних і природних матеріалів для виготовлення активних компонентів сенсорних пристроїв.

Перспективам розвитку та проблемам застосування ВТНП-сполук було присвячено виступ

професора С.А. Неділька (Київський національний університет). До основних задач цього напрямку слід віднести фундаментальні дослідження механізму високотемпературної надпровідності, розробку теорій ВТНП, прогнозування пошуку нових сполук з високими критичними параметрами та визначення їх фізико-хімічних властивостей. Ключовими питаннями розробленої наукової програми, в рамках якої працює також і С.А. Неділько, є створення технологічних і стабільних тонкоплівкових структур і приладів на їх основі для використання у слаботочній техніці (детектори слабких магнітних полів для медицини, геології, геофізики, матеріалознавства). Перехід на ВТНП-сполуки зі зниженою робочою температурою дозволить підвищити продуктивність обчислювальної, космічної та НВЧ-техніки, використовувати їх для створення датчиків видимого та ІЧ-діапазону з високою чутливістю. Використання ВТНП у високоточній техніці дозволить створити електроенергетичне обладнання — індуктивні накопичувачі енергії, кабелі, дроти, стрічки з більш високим ККД і значно (в десятки разів) зниженими експлуатаційними затратами. Створення широкої гама таких електротехнічних і електроенергетичних пристроїв також відображено у науковій програмі як важливий стратегічний напрям розвитку паливно-енергетичного комплексу.

Розповідаючи про сучасне й майбутнє фізико-неорганічної хімії сполук лантанідів, професори Н.П. Ефрюшина, Ю.В. Коровін та В.П. Доценко (Фізико-хімічний інститут НАНУ, Одеса) звернули увагу учасників на принципи формування люмінесцентних центрів йонів лантанідів та перспективи використання їх сполук для детектування повільних нейтронів, сонячних нейтрино. Підкреслили, що комплексні сполуки лантанідів з деякими типами органічних лігандів (зокрема, з порфіринами) є перспективними люмінесцентними мітками ближнього ІЧ-діапазону, а також парамагнітними контрастними речовинами у магнітно-резонансній візуалізації.

Повідомлення, які стосувались розвитку досліджень з хімії комплексних сполук, були розглянуті з різних аспектів. Зокрема, професор В.В. Павліщук (Інститут фізичної хімії НАНУ, Київ) зупинився на проблемах фізико-неорганічної хімії поліядерних комплексів, а саме на тому, що фізичні методи дослідження часто не дають адекватної інформації про стан поліядерних часток у розчинах; недостатньо досліджені кінетичні закономірності утворення поліядерних часток і реакції за їх участю; мало вивчені реакції, які каталізують-

ся поліядерними комплексами, електрохімічна поведінка поліядерних систем. Навів приклади утворення непередбачених поліядерних комплексів завдяки тому, що координовані групи лігандів, що виступають як містки між йонами металів, активуються і вступають у реакції з розчинником. Замислився над питанням, чи існує направлений синтез/дизайн поліядерних комплексів і координаційних полімерів. На прикладах власних досліджень підтвердив, що при синтезі таких складних сполук треба враховувати кінетичний фактор (можливе попадання у локальний мінімум енергії системи), температуру проведення процесу, вплив розчинника, а також те, що аналітичні дані, так само як і дані мас-спектрометрії, не завжди дозволяють зробити однозначний висновок про склад утвореного комплексу.

Тематика другого круглого столу (ведучий — член-кореспондент НАНУ В.М. Огенко) була розгорнута навколо методів рішення та експериментальних підходів, апаратного оформлення, операцій в синтетичних та вимірювальних дослідженнях.

У виступі професора І.Й. Сейфулліної (Одеський національний університет) йшла мова про проблеми синтезу та фізико-хімічного дослідження гомо- і гетерометальних поліхелатів германію (IV) і олова (IV) з гідразонами та багатоосновними кислотами, що одержуються вперше. Метою дослідження було виявлення факторів, які є визначальними для складу, особливостей будови, комбінації різних типів хімічного зв'язку, міжмолекулярної взаємодії. Було наведено багато прикладів досліджених комплексів, особливості їх будови, властивостей, функцій (зокрема, біологічна активність) та можливості використання. Особливо було підкреслено позитивну роль кооперації з різними науковими та навчальними центрами, які, маючи сучасне цінне устаткування, допомогли розібратися з будовою та кристалічною структурою нових комплексів.

Професор І.О. Фрицький (Київський національний університет) розповів про застосування найновіших методів мас-спектрометрії (йонізації) для вивчення нанорозмірних об'єктів у координаційній хімії, серед яких електронний удар EI, хімічна йонізація CI, польова десорбція FD/ польова йонізація FI, бомбардування прискореними атомами FAB, лазерна десорбція/йонізація з матриці MALDI, електроспрей ESI. Він навів приклади застосування мас-спектрометрії та ЯМР-спектроскопії для аналізу великих біомолекул (нобелівська премія 2002 р. з хімії), для досліджен-

ня поліядерних обмінних кластерів у сучасній хімії, приклади використання ESI та MALDI мас-спектрометрії для ідентифікації поліядерних сполук. Особливості ESI мас-спектрів координаційних сполук полягають у наявності характеристичних ізотопних патернів (профілів сигналу), можлива реєстрація асоціатів $[M + H]^+$, $[2M + H]^+$, $[M + Na]^+$, $[2M + Na]^+$, $[3M + Na]^+$. Вчений провів порівняльну характеристику методів йонізації. Окреслив проблеми і можливості ESI поліядерних сполук, серед яких ідентифікація високоядерних дискретних комплексів, дослідження координаційних полімерів, ідентифікація комплексів з низькою стійкістю, вивчення комплексоутворення у розчинах, конкурентного комплексоутворення, дослідження низькомолекулярних полімерів (біомолекул, фулеренів, нанотрубок).

Повідомлення професора В.С. Кублановського та А.В. Кравченка (ІЗНХ НАНУ) було присвячене низькотемпературній плазмовій електрохімії, напряду, що виник на стику наук — хімії високих енергій і класичної електрохімії. Суть низькотемпературної плазмової електрохімії полягає в тому, що один електрод винесений у газову фазу, а другий знаходиться в об'ємі електроліту і при певній напруженості поля у ланцюзі виникає фарадєвський струм. Оскільки роль електрохімічного протиелектроду виконує поверхня розділу рідина/газ (біполярна поверхня), то при цьому стає можливим проведення таких окиснювально-відновних реакцій, які неможливо здійснити в інших умовах. Показані шляхи практичної реалізації низькотемпературного плазмового електролізу в процесах очищення води різного походження.

Своїм досвідом і перспективами застосування засобів штучного інтелекту для аналізу електрохімічних систем поділилися з присутніми науковці з Національного технічного університету „Харківський політехнічний інститут” (М.Д. Сахненко, М.В. Ведь). На прикладі організації наукових розробок інституту з цілеспрямованого синтезу каталітичних матеріалів, прогнозування корозійної стійкості та наводнювання металів і сплавів досвід застосування штучних нейронних мереж поширено на процедуру встановлення кількісних параметрів ланцюга склад—структура—властивості—функції. Показано перспективи використання засобів штучного інтелекту для гнучкого керування перебігом процесів в електрохімічних системах.

Виступ О.М. Калугіна (Харківський національний університет) стосувався аналізу можливостей спільного використання експериментальних

(ЯМР-, ІЧ-, КР-спектроскопії та ін.) і методів комп'ютерного моделювання для вивчення мікроструктури і динаміки часток у молекулярних рідинах та електролітних розчинах. Успішність поєднання методів була продемонстрована на багатьох прикладах. Цінність такого підходу для дослідження неупорядкованих конденсованих систем полягає в побудові адекватних мікроскопічних моделей будови і динаміки часток у цих системах в термінах просторово-часових кореляційних функцій, а також у передбаченні макроскопічних властивостей молекулярних рідин та електролітних розчинів на основі цих моделей.

Проблематика третього круглого столу (ведучий — член-кореспондент НАНУ А.Г. Білоус) — формування науково-технічних програм різного рівня, принципи оновлення і прогнозування науково-технічного розвитку. Серед виступів на цьому засіданні слід відмітити декілька. Перший стосувався проблем синтезу нових неорганічних матеріалів, а саме стану вивчення та перспектив застосування інтерметалічних сполук (професор Р.Є. Гладішевський, Б.Д. Белан, Львівський національний університет). На сьогодні синтезовано понад 50000 інтерметалічних сполук, в тому числі 3000 бінарних із рідкісноземельним елементом. Понад 2000 сполук мають реальне або потенційне застосування (конструкційні матеріали, магнітокалоричні пристрої, термоелектричні і резистивні матеріали, надпровідники, акумулятори водню, постійні магніти). Магнітокалоричний ефект полягає в зміні температури магнітного матеріалу при його намагнічуванні та розмагнічуванні в зовнішньому магнітному полі. Серед магнітних речовин, найбільш перспективних для магнітного охолодження, можна виділити інтерметалід $Gd_5Ge_2Si_2$. Завдяки магнітокалоричному ефекту при зміні магнітного поля на 1 Т матеріал охолоджується на 3—10 К. Важливим є те, що цей матеріал може працювати при кімнатній температурі. Розміщення магнітного охолоджувального приладу, наприклад, в автомобілях, поїздах для створення мікроклімату є дуже вигідним.

Нові методи інтенсифікації реакцій твердофазного синтезу були темою виступу професора В.В. Приседського (Донецький національний технічний університет). Складність будови та геометричної картини взаємодії в дифузійній реакційній зоні визначається багатьма факторами — різноманіттям форм і розмірів частинок у реакційній суміші, їх фазовим і хімічним складом, коефіцієнтами дифузії рухомого компоненту тощо. Автором при вивченні взаємодії в системах $PbO—$

Nb_2O_5 , $CuO—Y_2O_5—BaO$ та інших запропоновані нові методи, які дозволяють інтенсифікувати процеси синтезу, серед яких „винос” компоненту з реакційної зони з оптимальним вибором прекурсору, відновлення оксидів у неводних розчинах, газовій і конденсованій фазах.

Розгорнутий аналіз стратегії розвитку високотехнологій в електрохімії було представлено ще в одному виступі М.Д. Сахненка, М.В. Вєдь, Б.І. Байрачного. Запропоновано визначення терміну „високі технології” стосовно систем електрохімічних технологій (СВЕХТ) та класифікацію їх системоутворюючих ознак. Визначено роль електрохімічних технологій у створенні наукоємних матеріалів і виробів, на прикладі наукових розробок НТУ „ХПІ” у галузі СВЕХТ проаналізовано сучасні тенденції електрохімічних виробництв. Надано прогнозну оцінку розвитку досліджень у цій галузі та перспективи їх реалізації у промисловому виробництві.

Про пошук нових матеріалів з перспективами застосування в якості нелінійно-оптичних матеріалів, сонячних елементів, електрохімічних сенсорів йшла мова у виступі професора І.Д. Олексюка, наукового співробітника В.П. Сачанюка (Волинський національний університет, Луцьк) „Тетрарні халькогеніди в системах $A_2X—B^{III}_2X_3—C^{IV}X_2$ ”.

Деякі виступи були присвячені більш конкретним дослідженням: „Квантово-хімічне моделювання в електрохімічних дослідженнях” (професор В.Ф. Варгалюк, Дніпропетровський національний університет); „Метод Рітвельда у вивченні структури твердих розчинів” (професор Е.І. Гетьман, ДонНУ); „Поведінка нерівноважних фізико-хімічних систем” (професори Я.Ю. Тевтуль, В.В. Нечипорук, Чернівецький національний університет); „Рівноваги йонізації галогенводнів у спиртах” (В.І. Булавін, НТУ „ХПІ”). У повідомленні професора В.В. Соловйова і Є.Т. Бута (Полтавський національний технічний університет) мова йшла про перспективи використання сучасних теорій процесу переносу заряду при гетерогенних реакціях в йонних розплавах.

До програми сесії було включено два виступи за матеріалами майбутніх докторських дисертацій. У виступі І.А. Новосолової (ІЗНХ НАНУ) представлено результати по синтезу нанорозмірних вуглецевих матеріалів (графіту, трубок, волокон, аморфного вуглецю) новим, розробленим автором, електрохімічним методом, а також по вивченню електрохімічних властивостей електродів на основі компактів з порошків нанорозмірних алмазів.

Робота оцінена позитивно і визнана актуальною. Г.Г. Тульський (НТУ “ХПІ”) розповів про композиційні електродні матеріали в електросинтезі неорганічних речовин (фрагмент докторської дисертації). По матеріалу, який доповідався, важко було оцінити всю роботу в цілому.

При обговоренні заслуханих виступів на круглих столах та в загальній дискусії було відзначено високий сучасний рівень всіх досліджень і отриманих важливих результатів, що представляють як науковий, так і практичний інтерес. Оцінено перспективність і актуальність напрямків подальшого розвитку фізико-неорганічної хімії, серед яких нанохімія, дослідження з хімії твердого тіла і координаційної хімії, сучасна електрохімія і технологія, хемосенсорика. Було рекомендовано науковим колективам продовжити дослідження пріоритетних напрямів, узагальнити теоретичні результати з метою вибору найбільш перспективних систем дослідження, цілеспрямованого синтезу нових сполук; підсилити вивчення саме хімічних і функціональних властивостей сполук, націлених на кінцевий практичний результат. Виступи оглядового характеру з розкриттям проблем та можливостей нових напрямів (наприклад таких, як зібраний колосальний за об’ємом ма-

теріал по сенсориці Є.П. Ковальчука, „Перспективи розвитку ВТНП” С.А. Неділька, чесний погляд на проблеми досліджень полімерних комплексів В.В. Павліщука, доповіді І.О. Фрицького, Б.Д. Белан і багато інших) варто опублікувати в Українском химическом журнале. Разом з тим учасники звернули увагу на те, що вони мало інформовані про комплексні програми та спільні проекти, які виконуються в НАН України, наших вузах та у наукових центрах інших країн, хотіли б не тільки почути, хто з ким працює, але й стати співучасниками таких програм. Знову йшла мова про труднощі з використанням нового обладнання для сучасних фізико-хімічних досліджень через недостатню його кількість в Україні. Як і раніше, наприклад, переважна більшість структурних досліджень (РСА) нашими науковцями виконується за кордоном. Вирішено розповсюдити загальну інформацію про центри колективного користування унікальними науковими приладами, які останнім часом з’явилися в наукових установах НАН України. Учасники сесії підтвердили ефективність спільних зустрічей, мета яких — налагодження нових контактів і співпраці, живе спілкування, обговорення нових ідей і важливих проблем, координація досліджень.

Л.Б. Коваль, Т.С. Глуцук