



Матеріали XXV Міжнародної науково-практичної конференції
«Екологія. Людина. Суспільство»
пам'яті д-ра Дмитра СТЕФАНІШИНА
(12 червня 2025 р., м. Київ, Україна)

Proceedings of the XXV International Science Conference
«Ecology. Human. Society»
dedicated to the memory of Dr. Dmytro STEFANYSHYN
(June 12 2025, Kyiv, Ukraine)

ISSN (Online) 2710-3315

<https://doi.org/10.20535/EHS2710-3315.2025.330353>

ВСТАНОВЛЕННЯ СТРУКТУРНИХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОВУГЛЕЦЕВИХ КАТАЛІЗАТОРІВ ДЛЯ ПОТРЕБ ЗЕЛЕНОЇ ХІМІЇ

Вікторія ДРОЩИНСЬКА¹, Ігор БИЧКО², Олена ІВАНЕНКО¹

¹Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

проспект Берестейський, 37, м. Київ, 03056, Україна

²Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського

проспект Науки, 31, м. Київ, 03028, Україна

e-mail: vikadrocsynska@gmail.com

Анотація:

У роботі розглядається застосування нановуглецевих матеріалів як перспективних каталізаторів у контексті зеленої хімії, що спрямована на зменшення впливу хімічного виробництва на довкілля. Особливу увагу приділено структурним характеристикам наноматеріалів (розмірності, пористості, дефектності, хімії поверхні, легуванню гетероатомами) та їх взаємозв'язку з каталітичною активністю. Показано, що варіація цих параметрів дозволяє цілеспрямовано модифікувати властивості нановуглецевих каталізаторів, зокрема вуглецевих нанотрубок, графену, фулеренів і активованого вугілля, для підвищення їх ефективності в реакціях окиснення, гідрування, дегідрування тощо. Робота має на меті систематизацію знань щодо впливу структурних характеристик нановуглецевих речовин на їх каталітичну дію, що є актуальним для розвитку сталих, ресурсозберігаючих технологій.

Ключові слова: нановуглецеві матеріали, зелена хімія, каталізатори, вуглецеві нанотрубки, графен, фулерени, функціоналізація, пористість, легування, хімічна реактивність, структурні дефекти.

Зі зростанням усвідомлення екологічних проблем та необхідності переходу до сталого розвитку попит набуває напрям зеленої хімії, яка спрямована на розробку хімічних процесів і продуктів, які мінімізують використання і генерацію небезпечних речовин.

"Зелена хімія", концепція, що ставить собі за мету зниження або повне припинення використання і отримання речовин, що становлять небезпеку для навколишнього середовища і людського здоров'я [1].

Нановуглецеві матеріали, завдяки своїм унікальним властивостям, стають одними з найперспективніших каталізаторів в цій області. Їх висока провідність, велика площа поверхні і можливість модифікації дозволяють створювати ефективні і стійкі каталізатори, які можуть використовуватися в різних екологічно чистих процесах, таких як фотокаталітичне розкладання забруднюючих речовин або синтез біопалива.

Одним з основних напрямків у використанні нановуглецевих матеріалів у зеленій хімії є їх використання як каталізаторів у хімічних реакціях. Завдяки своїй великій поверхні та електронній структурі, нановуглецеві матеріали можуть значно підвищити швидкість реакцій та їхню вибірковість. Наприклад, вуглецеві нанотрубки можуть бути використані у процесах окислення або відновлення, зменшуючи кількість відходів і токсичних побічних продуктів [2].

Мета роботи – встановити структурні характеристики нановуглецевих каталізаторів з метою визначення їх впливу на каталіз у реакціях зеленої хімії та зрозуміти їх властивості для екологічно безпечного та енергоефективного хімічного синтезу.

Наукова новизна роботи полягає у встановленні взаємозв'язків між структурними параметрами нановуглецевих матеріалів (розміром пор, ступенем дефектності, функціональними групами) та їх каталітичною активністю в реакціях зеленої хімії, що дозволяє цілеспрямовано модифікувати їх для підвищення ефективності екологічно чистих процесів.

Нанорозмірні вуглецеві структури можуть існувати у нуль-, одно- та двовимірному просторі, що глибоко впливає на характер зв'язку та розташування атомів вуглецю, а також на формування тривимірних нановуглецевих структур. Визначення нановуглецю на основі розміру охоплює широкий спектр матеріалів з різноманітними властивостями. Розмірність, у свою чергу, є фундаментальним способом класифікації та розуміння їх поведінки під час використання.

Порівняння структурних характеристик нановуглецевих каталізаторів з результатами інших досліджень є важливим завданням, яке дозволяє не тільки оцінити ефективність розроблених каталізаторів, але й зрозуміти, як різні фактори впливають на їх каталітичні властивості. Нановуглецеві матеріали, такі як графен, вуглецеві нанотрубки та фулерени, зарекомендували себе як перспективні каталізатори завдяки своїй унікальній мікроструктурі, високій поверхні та можливості модифікації [3].

При порівнянні структурних характеристик нановуглецевих каталізаторів важливо враховувати методи синтезу, так як різні підходи, такі як хімічне осадження з газу, механохімічний синтез або гідротермальний синтез, які можуть призводити до відмінностей в розмірах частинок, формах і ступеня кристалічності каталізаторів.

Так, каталізатори, отримані методом хімічного осадження, частіше мають більш однорідні розміри і форми в порівнянні з тими, що виготовлені природним чином. Це проявляється, наприклад, у дослідженнях, де графенові оксиди демонструють високу реакційну здатність завдяки максимальній доступності активних центрів.

Навіть невеликі зміни в структурі носіїв можуть призвести до значних змін каталітичної ефективності. Це підкреслює важливість вибору матеріалу носія, який буде не тільки стабільним, але і сприяє необхідним кінетичним процесам.

Отримані дані про структурні характеристики нановуглецевих каталізаторів можуть свідчити про їх високу активність і селективність в реакціях [2]. У зеленій хімії використання стійких каталізаторів дозволяє зменшити відходи та знизити споживання ресурсів. Наприклад, якщо нановуглецеві каталізатори демонструють високу ефективність у реакціях гідрування, це може призвести до розробки більш чистих та економічно вигідних технологічних процесів.

Ще одним важливим полем застосування нановуглецевих матеріалів у зеленій хімії є їх використання у розробці нових, безвідходних методів синтезу. Завдяки їхній здатності взаємодіяти з різноманітними молекулами на нано- та мікромасштабі, вуглецеві нанотрубки й графен можуть бути інтегровані в процеси, що дозволяють зменшити потребу в небезпечних реагентах та підвищити ефективність хімічних реакцій [4].

В цілому, нановуглецеві матеріали здатні витіснити традиційні матеріали у багатьох аспектах хімічного виробництва та обробки, надаючи нові можливості для створення екологічно чистих технологій. Впровадження цих матеріалів у зелений хімічний підхід сприяє зниженню негативного впливу на довкілля, енергоефективності, а також покращенню якості та безпеки продукції. Це робить дослідження та розвиток нановуглецевих матеріалів вкрай актуальним у контексті сталого розвитку та збереження екологічного балансу.

Один із прикладів застосування гомогенних каталізаторів в зеленій хімії - використання комплексу перехідного металу для окислення пара-ксилолу до терефталевої кислоти, ефіри якої служать основою виробництва поліефірних волокон [5].

Серед нановуглецевих каталізаторів можна виділити кілька типів: вуглецеві нанотрубки (ВНТ), графен і наночастинки вуглецю, наприклад, фулерени та активоване вугілля.

Вуглецеві нанотрубки (ВНТ) є одновимірними наноматеріалами з порожнистою циліндричною структурою, утвореною згорнутими листами графену. Вони поділяються на одностінні вуглецеві нанотрубки та багатостінні вуглецеві нанотрубки залежно від кількості шарів графену. ВНТ характеризуються високим співвідношенням сторін, великою питомою площею поверхні, відмінною електронною провідністю та механічною міцністю, що робить їх перспективними носіями каталізаторів. Вуглецеві нанотрубки поділяються на одностінні та багато стінні, відмінність між якими є критичною, оскільки призводить до різних фізичних та хімічних властивостей, що впливає на їхню ефективність у конкретних каталітичних реакціях [6].

Вуглецеві нанотрубки демонструють високу механічну міцність і термостійкість, що робить їх придатними для використання в умовах високих температур. Це відкриває нові можливості для їх застосування в каталітичних реакціях, де стабільність матеріалу є критично важливою [7].

Графен являє собою двовимірний моношар sp^2 -гібридизованих атомів вуглецю, розташованих у гексагональній кристалічній решітці. Він володіє винятковими властивостями, включаючи велику площу поверхні, високу електричну та теплову провідність, а також механічну гнучкість. Двовимірна структура графену забезпечує максимальну площу поверхні, що робить його високоефективним для каталізу [8].

Фулерени – це нульвимірні кліткоподібні структури, що складаються з атомів вуглецю, потенційно можуть застосовуватися як каталізатори або прекурсори каталізаторів та мають унікальні можливості в гомогенному каталізі [9].

Активоване вугілля є високопористим вуглецевим матеріалом з великою площею поверхні, використовується як носій каталізаторів та відрізняється гнучкістю у налаштуванні фізичних (площа поверхні, пористість) та хімічних (поверхневі функціональні групи) властивостей. Залишається широко використовуваним та економічно вигідним варіантом для носіїв каталізаторів завдяки своїй регульованій пористості та хімії поверхні.

Методи синтезу різних типів нановуглецю включають хімічне осадження з парової фази (CVD), дуговий розряд, лазерну абляцію та піроліз. Спостерігається тенденція до зростання використання відновлюваної та дешевшої сільськогосподарської сировини для синтезу нановуглецевих матеріалів. Метод синтезу значно впливає на структурні характеристики отриманого нановуглецевого матеріалу, що, у свою чергу, визначає його каталітичну ефективність.

Висока площа поверхні є важливою для забезпечення великої кількості активних центрів для каталітичних реакцій. Нанометрові розміри нановуглецевих матеріалів за своєю природою призводять до високого співвідношення площі поверхні до об'єму. Також відіграє важливу роль у збільшенні доступної площі поверхні пористість. Більша площа поверхні зазвичай

призводить до вищої каталітичної активності завдяки збільшенню кількості реакційних центрів. Пористість ще більше це підвищує, забезпечуючи кращий доступ реагентів до цих центрів.

Розподіл пор за розмірами та їхній взаємозв'язок у вуглецевих наноматеріалах впливають на дифузію реагентів та продуктів до/від активних центрів. Різні розміри пор (мікропори, мезопори, макропори) мають переваги для конкретних реакцій. Існує можливість регулювання пористості нановуглецю за допомогою контрольованого синтезу та методів активації. Оптимізована пориста структура забезпечує ефективне масоперенесення, запобігаючи дифузійним обмеженням та максимізуючи ефективність активних центрів.

Структурні дефекти в кристалічній решітці графену нановуглецю, такі як крайові атоми, можуть виступати як активні каталітичні центри. Атоми вуглецю в місцях дефектів мають підвищену реакційну здатність через змінену електронну структуру. Існує можливість навмисного введення та контролю дефектів для підвищення каталітичної ефективності для створення високоефективних каталітичних центрів у даних матеріалах.

Наявність різних функціональних груп на поверхні нановуглецю впливає на їхню хімічну реакційну здатність та каталітичну активність. Хімію поверхні нановуглецевих матеріалів можна модифікувати шляхом функціоналізації конкретними хімічними групами для налаштування їхніх каталітичних властивостей для певних реакцій. Важливу роль у деяких каталітичних процесах відіграють оксигеновмісні функціональні групи, тоді як поверхневі функціональні групи є вирішальними для регулювання хімічної реакційної здатності нановуглецевих каталізаторів, дозволяючи їм ефективно взаємодіяти з реагентами.

Легування нановуглецевих речовин гетероатомами, такими як азот, бор, фосфор, сірка та кисень, може значно змінити їхні електронні властивості та створити активні центри для каталізу. Різні типи легування азотом (наприклад, піридиновий N, пірольний N, графітовий N) мають специфічний вплив на каталітичну активність. Існують приклади нановуглецевих матеріалів, легованих гетероатомами, що демонструють підвищену каталітичну ефективність у різних реакціях. Легування гетероатомами є потужною стратегією для підвищення каталітичної активності шляхом модифікації електронної структури та введення нових типів активних центрів.

У гетерогенному каталізі є важливою взаємодія між металевими наночастинками та нановуглецевим носієм, адже він може впливати на дисперсію, стабільність та електронні властивості нанесених металевих наночастинок. Вибір нановуглецевого носія та характер його взаємодії з металевими наночастинками є критичними факторами, що визначають загальну ефективність та стабільність нанесених металевих каталізаторів.

Останні дослідження та приклади доводять взаємозв'язок між певними структурними характеристиками нановуглецевих каталізаторів та їхньою ефективністю в ключових реакціях зеленої хімії. Так, регулювання розміру пор та площі поверхні пористих вуглецевих матеріалів впливає на їхню ефективність в адсорбції та каталізі. Легування гетероатомами, таке як легування азотом ВНТ та графену, підвищує їхню електрокаталітичну активність для реакції відновлення кисню та інших реакцій. Дефекти та функціональні групи на поверхнях нановуглецевих речовин сприяють їхній каталітичній активності в реакціях окиснення, гідрування та дегідрування. Нановуглецеві носії відіграють важливу роль у підвищенні активності та стабільності металевих наночастинок у таких реакціях, як гідрування нітроароматичних сполук та відновлення CO₂.

Для визначення та аналізу структурних характеристик нановуглецевих каталізаторів використовують різноманітні методи та інструменти.

Сканувальна електронна мікроскопія (SEM) та просвічувальна електронна мікроскопія (TEM) використовуються для візуалізації морфології, розміру та розподілу нановуглецевих матеріалів. TEM високої роздільної здатності (HRTEM) дозволяє досліджувати атомну структуру та виявляти дефекти. Енергодисперсійна рентгенівська спектроскопія (EDX), що поєднується з електронною мікроскопією, застосовується для визначення елементного складу. Електронна мікроскопія надає прямі візуальні докази наноструктури вуглецевих матеріалів, що є вирішальним для розуміння їхньої морфології та ідентифікації структурних особливостей, важливих для каталізу [10].

Рентгенівська дифракція (XRD) використовується для визначення кристалічної структури, ідентифікації фаз та оцінки розміру кристалітів нановуглецевих матеріалів. XRD також може бути використана для виявлення дефектів та аналізу ступеня графітизації вуглецевих матеріалів. У цілому XRD надає цінну інформацію про об'ємну кристалічну структуру нановуглецю, доповнюючи локалізовану інформацію, отриману за допомогою мікроскопії. Тоді як раманівська спектроскопія є високочутливою до коливальних мод вуглецевих матеріалів і надає інформацію про їхню структуру, дефекти та ступінь графітизації (рис. 1).

Рентгенівська фотоелектронна спектроскопія (XPS) використовується для визначення елементного складу поверхні нановуглецю, ідентифікації хімічних станів елементів та аналізу наявності функціональних груп.

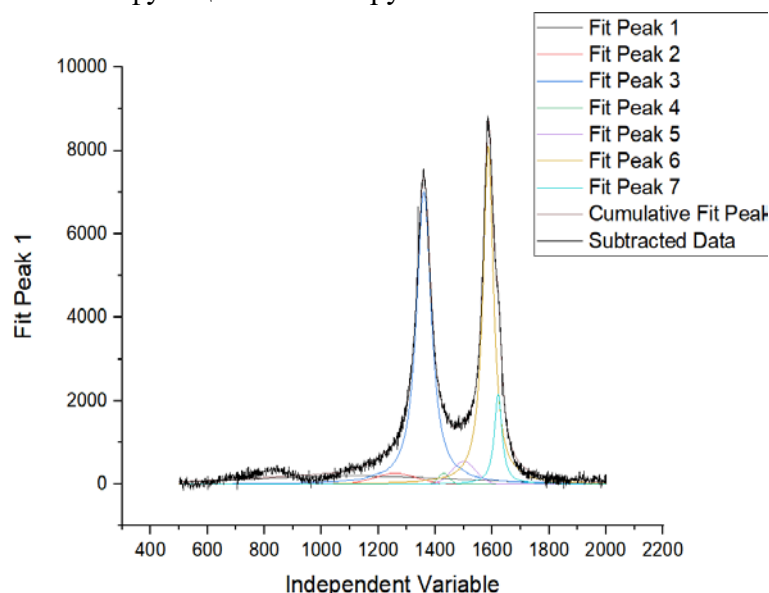


Рис. 1. Раманівський спектр зразку вуглецевих нанотрубок

Фур'є-спектроскопія в інфрачервоній області (FTIR) застосовується для ідентифікації типів функціональних груп, присутніх на поверхні наноструктурованих вуглецевих матеріалів. Ці спектроскопічні методи надають детальну інформацію про хімію поверхні, зв'язки та дефектну структуру нановуглецевих каталізаторів, що є важливим для розуміння їхньої каталітичної поведінки.

Аналіз за методом Брунауера-Еммета-Теллера (BET) використовується для визначення питомої площі поверхні та розподілу пор за розмірами нановуглецевих матеріалів. Аналіз BET надає кількісні дані про площу

поверхні та пористість, які є критичними параметрами для оцінки потенціалу нановуглеців як каталізаторів та носіїв каталізаторів.

Існують також інші методи, як нейтронна дифракція, рентгенівська абсорбційна спектроскопія (XAS), сканувальна тунельна мікроскопія (STM) та атомно-силова мікроскопія (AFM), які можуть надати додаткові відомості про структуру нановуглецевих каталізаторів. Для отримання вичерпного розуміння складної структури нановуглецевих каталізаторів часто необхідне поєднання різних методів характеристики [11].

При порівнянні структурних характеристик нановуглецевих каталізаторів важливо враховувати методи синтезу, такі як хімічне осадження з газу, механохімічний синтез або

гідротермальний синтез, які можуть призводити до відмінностей в розмірах частинок, формах і ступеня кристалічності каталізаторів. Каталізатори, отримані методом хімічного осадження, частіше мають більш однорідні розміри і форми в порівнянні з тими, що виготовлені природним чином. Це проявляється, наприклад, у дослідженнях, де графенові оксиди демонструють високу реакційну здатність завдяки максимальній доступності активних центрів.

Навіть невеликі зміни в структурі носіїв можуть призвести до значних змін каталітичної ефективності. Це підкреслює важливість вибору матеріалу носія, який буде не тільки стабільним, але і сприяє необхідним кінетичним процесам.

Залишаються певні виклики у розробці, синтезі та застосуванні нановуглецевих каталізаторів для потреб зеленої хімії. Існують можливості для подальшої оптимізації структурних характеристик даних каталізаторів для досягнення ще вищої активності, селективності та стабільності. Потенційні напрямки для подальших досліджень включають: розробку більш точних методів контролю синтезу вуглецевих наноматеріалів з конкретними структурними особливостями; глибше розуміння природи активних центрів у безметалевих нановуглецевих каталізаторах; розробку ефективніших та довговічніших одноатомних каталізаторів, нанесених на нановуглець; дослідження використання нових нановуглецевих структур та композитів для синергетичних каталітичних ефектів; розробку методів характеристики для кращого розуміння структурних змін нановуглецевих каталізаторів в умовах реакції; використання комп'ютерного моделювання та машинного навчання для прогнозування та розробки нових нановуглецевих каталізаторів з бажаними властивостями.

Майбутні дослідження повинні бути зосереджені на досягненні більшого контролю над структурними характеристиками нановуглецевих каталізаторів, отриманні фундаментальних знань про їхні каталітичні механізми та дослідженні нових матеріалів і підходів для ще більш ефективних та стійких зелених хімічних процесів.

Універсальність та потенціал нановуглецевих каталізаторів у вирішенні різноманітних екологічних та енергетичних проблем за допомогою стійких хімічних перетворень є очевидними. Подальші дослідження та розробки в цій галузі залишаються надзвичайно важливими для досягнення більш екологічного та стійкого майбутнього.

Література

1. Cai W., Zhang H. Functional Nanomaterials for Sensing and Detection (2nd Edition). *Nanomaterials*. 2025. Vol. 15, no. 8. P. 588.
URL: <https://doi.org/10.3390/nano15080588> (дата звернення: 25.04.2025).
2. Nanostructured Carbon Materials for Catalysis. Cambridge : Royal Society of Chemistry, 2015.
URL: <https://doi.org/10.1039/9781782622567> (дата звернення: 15.04.2025).
3. Surface and Interfacial Engineering for Multifunctional Nanocarbon Materials / Y. Sun et al. *ACS Nano*. 2025.
URL: <https://doi.org/10.1021/acsnano.4c14128> (дата звернення: 01.05.2025).
4. Carbon Nanostructured Materials: Synthesis, Characterization, and Industrial Applications / A. Khovavko et al. Springer, 2024.
5. Basiuk E. V., Basiuk V. A. Green Chemistry of Carbon Nanomaterials. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*. 2014. Vol. 14, no. 1. P. 644–672.
URL: <https://doi.org/10.1166/jnn.2014.9011> (дата звернення: 05.05.2025).

6. M. Filchakova, V. Saik. Single-walled Carbon Nanotubes: Structure, Properties, Applications. Carbon nanotube supplier – 97% of the global SWCNT market. URL: <https://tuball.com/articles/single-walled-carbon-nanotubes> (дата звернення: 20.04.2025).
7. Charged Carbon Nanomaterials: Redox Chemistries of Fullerenes, Carbon Nanotubes, and Graphenes / A. J. Clancy et al. *Chemical Reviews*. 2018. Vol. 118, no. 16. P. 7363–7408. URL: <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00128> (дата звернення: 01.05.2025).
8. Navalón S., Ong W.-J., Duan X. Sustainable Catalytic Processes Driven by Graphene-Based Materials. *Processes*. 2020. Vol. 8, no. 6. P. 672. URL: <https://doi.org/10.3390/pr8060672> (дата звернення: 15.04.2025).
9. Structural Studies of Giant Empty and Endohedral Fullerenes / S. Wang та ін. *Frontiers in Chemistry*. 2020. Vol. 8. URL: <https://doi.org/10.3389/fchem.2020.607712> (дата звернення: 25.04.2025).
10. Preparation and characterization of nanocarbons from *Nicotiana tabacum* stems / C. Chivimbiso Musuna-Garwe et al. *AIMS Materials Science*. 2018. Vol. 5, no. 6. P. 1242–1254. URL: <https://doi.org/10.3934/matensci.2018.6.1242> (дата звернення: 05.05.2025).
11. Belin T., Epron F. Characterization methods of carbon nanotubes: a review. *Materials Science and Engineering: B*. 2005. Vol. 119, no. 2. P. 105–118. URL: <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2005.02.046> (дата звернення: 05.05.2025).

DETERMINATION OF STRUCTURAL CHARACTERISTICS OF NANOCARBON CATALYSTS FOR GREEN CHEMISTRY NEEDS

Viktoriia DROSHCHYNSKA

Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute, Ukraine

<https://orcid.org/0009-0002-0595-0323>

Igor BYCHKO

L. V. Pisarzhevskii Institute of Physical Chemistry, Ukraine

<https://orcid.org/0000-0002-4164-3024>

Olena IVANENKO

Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute, Ukraine

<https://orcid.org/0000-0001-6838-5400>

Abstract

The paper discusses the use of nanocarbon materials as promising catalysts in the context of green chemistry, which is aimed at reducing the environmental impact of chemical production. Particular attention is paid to the structural characteristics of nanomaterials (dimensionality, porosity, defectivity, surface chemistry, heteroatom doping) and their relationship with catalytic activity. It has been shown that the variation of these parameters allows for the purposeful modification of the properties of nanocarbon catalysts, in particular carbon nanotubes, graphene, fullerenes, and activated carbons, to improve their efficiency in oxidation, hydrogenation, dehydration, etc. reactions. The work aims to systematize the knowledge on the influence of the structural characteristics of nanocarbon substances on their catalytic action, which is relevant for the development of sustainable, resource-saving technologies.

Keywords: nanocarbon materials, green chemistry, catalysts, carbon nanotubes, graphene, fullerenes, functionalization, porosity, doping, chemical reactivity, structural defects.