

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
ІМЕНІ ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
ФАКУЛЬТЕТ АВТОМАТИЗАЦІЇ, ПРОМИСЛОВОЇ ІНЖЕНЕРІЇ ТА ЕКОЛОГІЇ
(повна назва інституту/факультету)
КАФЕДРА ЕКОЛОГІЇ ТА ТЕХНОЛОГІЇ РОСЛИННИХ ПОЛІМЕРІВ
(повна назва кафедри)

«На правах рукопису»
УДК 539.2:537.31

До захисту допущено:
Завідувачка кафедри
_____ Віта ГАЛИШ
«__» _____ 20__ р.

МАГІСТЕРСЬКА ДИСЕРТАЦІЯ
на здобуття ступеня магістра
за освітньо-професійною програмою «Екологічна безпека» зі спеціальності
101 «Екологія»
на тему: «Встановлення структурних характеристик нановуглецевих
каталізаторів для потреб зеленої хімії»

Виконала:
студентка II курсу, групи ЛЕ-41мп
Дрощинська Вікторія Андріївна _____

Науковий керівник:
доктор технічних наук, доцент кафедри Е та ТРП, професор
Іваненко Олена Іванівна _____

Консультант з розділу стартап проєкту:
к.е.н., доцент, доцент кафедри промислового маркетингу,
Юдіна Наталія Володимирівна _____

Рецензент:
кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник
Інституту фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського
Трипольський Андрій Іккійович _____

Засвідчую, що у цій магістерській дисертації
немає запозичень з праць інших авторів
без відповідних посилань.

Студентка _____

Київ – 2025 року

**Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»**

Факультет/ННІ Факультет автоматизації, промислової інженерії та екології
(повна назва)

Кафедра екології та технології рослинних полімерів
(повна назва)

Рівень вищої освіти – другий (магістерський)

Освітня програма – «Екологічна безпека»

Спеціальність 101 Екологія
(код і назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ
Завідувач кафедри
Віта ГАЛИШ
(підпис) (Ім'я, ПРІЗВИЩЕ)
«__» _____ 2025 р.

ЗАВДАННЯ

на магістерську дисертацію студентці

Дрощинській Вікторії Андріївні
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема дисертації «Встановлення структурних характеристик нановуглецевих каталізаторів для потреб зеленої хімії»

науковий керівник дисертації Іваненко Олена Іванівна, професор доктор технічних наук, доцент кафедри Е та ТРП, професор.
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

1. затверджені наказом по університету від «_23» листопад 2025 р. № 4744-С.
2. Термін подання студенткою дисертації «_16_» _грудня_ 2025 р.
3. Об'єкт дослідження: нановуглецеві каталізатори як сучасні матеріали для зелених хімічних технологій.
4. Предмет дослідження: структурні характеристики нановуглецевих каталізаторів та їх зв'язок із каталізаторними властивостями.
5. Перелік завдань, які потрібно розробити:

1. Визначити значення та класифікацію каталізаторів у зеленій хімії.
2. Дослідити структурні характеристики та властивості нановуглецевих матеріалів.
3. Проаналізувати вплив будови на каталізаторну активність.
4. Розглянути методи визначення морфологічних і текстурних характеристик.
5. Встановити залежність структурних параметрів вуглецевих нанотрубок, отриманих за даними раманівської спектроскопії від режимів термообробки у відновній та інертно-відновній атмосферах.
6. Виконати порівняльний аналіз зразків вуглецевих нанотрубок та визначити оптимальні інтервали структурних характеристик, що забезпечують найбільш прийнятний баланс між дефектністю, ступенем впорядкованості й однорідністю структури для подальшого каталітичного застосування у контексті принципів зеленої хімії
7. Оцінити перспективи застосування результатів аналізу у зеленій хімії.

6. Перелік графічного (ілюстративного) матеріалу: 15 слайдів

7. Орієнтовний перелік публікацій:

1. Вікторія ДРОЩИНСЬКА, Ігор БИЧКО, Олена ІВАНЕНКО. ВСТАНОВЛЕННЯ СТРУКТУРНИХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОВУГЛЕЦЕВИХ КАТАЛІЗАТОРІВ ДЛЯ ПОТРЕБ ЗЕЛЕНОЇ ХІМІЇ. Матеріали XXV Міжнародної науково-практичної конференції "Екологія. Людина. Суспільство" пам'яті д-ра Дмитра СТЕФАНІШИНА (12 червня 2025 р., м. Київ, Україна / Укладач Д. Е. Бенатов. – К.: Київський політехнічний інститут ім. Ігоря Сікорського, 2025. – 165-171 с.

8. Консультанти розділів дисертації

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
Розробка стартап-проєкту	Юдіна Н.В., доцент, к.е.н., доцент кафедри промислового маркетингу		

9. Дата видачі завдання «_01_»__вересня__2025 р.

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1.	Отримання завдання магістерської дисертації. Проходження переддипломної практики.	01.09.25 - 26.10.25	Виконано
2.	Збір, аналіз та оформлення науково-технічної літератури за темою роботи.	27.10.25-6.11.25	Виконано
3.	Вибір методик та методів проведення досліджень.	7.11.25-9.11.25	Виконано
4.	Дослідження впливу різних умов синтезу та обробки на характеристики нановуглецевих матеріалів	10.11.25-13.11.25	Виконано
5.	Оцінити перспективи застосування результатів аналізу у зеленій хімії.	14.11.25-19.11.25	Виконано
6.	Розробка стартап-проєкту	20.11.25-29.11.25	Виконано
7.	Оформлення магістерської дисертації	24.11.25-9.12.25	Виконано
8.	Представлення роботи до захисту	08.12.25 - 15.12.25	Виконано

Студентка

(підпис)

Вікторія ДРОЩИНСЬКА

(Ім'я, ПРІЗВИЩЕ)

Науковий керівник дисертації

(підпис)

Олена ІВАНЕНКО

(Ім'я, ПРІЗВИЩЕ)

АНОТАЦІЯ

Магістерська дисертація: 136 ст., 5 рис., 26 табл., 61 використаних літературних джерел, 2 додатки.

Актуальність цієї теми визначається зростаючими потребами хімічної промисловості у впровадженні технологічних рішень, спрямованих на зниження екологічного навантаження та відповідність принципам сталого розвитку. У межах концепції зеленої хімії особливу роль відіграє розробка каталізаторів, здатних підвищувати ефективність хімічних перетворень, знижувати енерговитрати та мінімізувати утворення шкідливих побічних продуктів. Серед сучасних матеріалів для каталізу важливе місце посідають нановуглецеві структури, які завдяки своїй морфології та електронним властивостям відкривають нові можливості для створення ефективних і стійких каталізаторів. Вивчення їхньої будови дозволяє пояснити залежність між фізико-хімічними характеристиками та активністю в різних реакціях. Це дає підґрунтя для цілеспрямованого конструювання нових матеріалів, орієнтованих на потреби зеленої хімії. Таким чином, аналіз структурних параметрів нановуглецевих каталізаторів має як наукове, так і прикладне значення.

Метою дослідження є встановлення структурних характеристик нановуглецевих каталізаторів та виявлення їх впливу на перебіг каталізаторних процесів у контексті зеленої хімії.

Об'єктом дослідження є нановуглецеві каталізатори як сучасні матеріали для зелених хімічних технологій.

Предметом дослідження є структурні характеристики нановуглецевих каталізаторів та їх зв'язок із каталізаторними властивостями.

Завдання дослідження:

- визначити значення та класифікацію каталізаторів у зеленій хімії;
- дослідити структурні характеристики та властивості нановуглецевих матеріалів;
- проаналізувати вплив будови на каталізаторну активність;

- розглянути методи визначення морфологічних і текстурних характеристик;
- охарактеризувати спектроскопічні та мікроскопічні методи дослідження;
- визначити підходи до оцінювання каталізаторних властивостей;
- узагальнити методи для комплексної оцінки нановуглецевих каталізаторів;
- встановити залежність структурних параметрів вуглецевих нанотрубок, отриманих за даними раманівської спектроскопії від режимів термообробки у відновній та інертно-відновній атмосфера;
- оцінити перспективи застосування результатів аналізу в зеленій хімії.

Методи дослідження ґрунтуються на комплексному поєднанні аналітичних, порівняльних та експериментальних підходів. Для визначення структурних параметрів використовуються методи електронної мікроскопії, спектроскопії та фізико-хімічного аналізу, які дозволяють отримати повну характеристику морфології та текстури матеріалів. Для оцінки каталізаторної активності застосовуються моделі реакцій гідрування етилену з використанням різних модифікацій нановуглецевих структур. Аналітичні та статистичні методи забезпечують обробку отриманих результатів і встановлення закономірностей між будовою та активністю. Крім того, теоретичні узагальнення ґрунтуються на вивченні сучасних наукових джерел і результатів попередніх досліджень у цій галузі. Поєднання емпіричних і аналітичних методів дозволяє досягти комплексності та достовірності висновків. Це забезпечує повноцінне вирішення поставлених завдань і досягнення мети дослідження.

Наукова новизна роботи полягає у систематизації підходів до аналізу структурних характеристик нановуглецевих каталізаторів та у визначенні їх впливу на реакції гідрування етилену. Вперше обґрунтовано комплексне поєднання морфологічних, спектроскопічних і каталізаторних досліджень для формування узагальненої моделі оцінки активності. Новим є встановлення

залежності між попередньою обробкою вуглецевих нанотрубок та швидкістю реакцій, що дозволяє більш глибоко пояснити механізм їх дії. Одержані результати розширюють теоретичні уявлення про функціональність нановуглецевих матеріалів у контексті зеленої хімії. Крім того, у роботі уточнено роль металевих компонентів у підвищенні каталізаторної активності. Запропоновано науково обґрунтовану схему взаємозв'язку між структурними параметрами та каталітичною ефективністю. Це формує нове бачення перспектив використання нановуглецевих матеріалів у сучасній хімії. Таким чином, робота робить внесок у розвиток фундаментальних знань про взаємодію будови та функцій каталізаторів.

Практична значущість дослідження полягає у можливості використання встановлених закономірностей для створення нових екологічно безпечних каталізаторів. Знання про взаємозв'язок між структурними параметрами та активністю дозволяє розробляти матеріали з прогнозованими властивостями для хімічних виробництв. Це може сприяти підвищенню ефективності процесів гідрування, зниженню енерговитрат і мінімізації шкідливих відходів. Практичні рекомендації, розроблені на основі дослідження, можуть бути впроваджені у виробництво та сприяти розвитку інноваційних технологій у сфері зеленої хімії. Отримані результати можуть бути корисними для підприємств, що займаються впровадженням екологічних технологій, а також для наукових лабораторій, які розробляють нові типи каталізаторів. Вони можуть стати основою для подальших прикладних досліджень і створення патентних розробок. Таким чином, робота має значний потенціал практичного застосування в різних галузях промисловості.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: НАНОВУГЛЕЦЕВІ КАТАЛІЗАТОРИ, КАТАЛІЗ, НАНОВУГЛЕЦЕВІ МАТЕРІАЛИ, ЗЕЛЕНА ХІМІЯ, КАТАЛІЗАТОРИ, ВУГЛЕЦЕВІ НАНОТРУБКИ, ГРАФЕН, ГІДРУВАННЯ ЕТИЛЕНУ, СТРУКТУРНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ.

ABSTRACT

Master's degree work: 136 pages; 5 figures; 26 tables; 61 sources, 2 appendixs.

The importance of this topic is determined by the growing needs of the chemical industry to implement technological solutions aimed at reducing environmental impact and complying with the principles of sustainable development. Within the concept of green chemistry, the development of catalysts capable of increasing the efficiency of chemical transformations, reducing energy consumption, and minimizing the formation of harmful by-products plays a special role. Among modern materials for catalysis, nanocarbon structures occupy an important place, which, thanks to their morphology and electronic properties, open up new opportunities for the creation of effective and sustainable catalysts. Studying their structure allows us to explain the relationship between physicochemical characteristics and activity in various reactions. This provides a basis for the targeted design of new materials focused on the needs of green chemistry. Thus, the analysis of the structural parameters of nanocarbon catalysts has both scientific and practical significance.

Objective of the research is to establish the structural characteristics of nanocarbon catalysts and to identify their influence on the course of catalytic processes in the context of green chemistry.

The object of the research is nanocarbon catalysts as modern materials for green chemical technologies.

The subject of the research is the structural characteristics of nanocarbon catalysts and their relationship to catalytic properties.

Research objectives:

- to determine the significance and classification of catalysts in green chemistry;
- to investigate the structural characteristics and properties of nanocarbon materials;
- analyze the influence of structure on catalyst activity;

- consider methods for determining morphological and textural characteristics;
- characterize spectroscopic and microscopic research methods;
- determine approaches to evaluating catalyst properties;
- generalize methods for comprehensive evaluation of nanocarbon catalysts;
- establish the dependence of ethylene conversion rate on catalyst parameters;
- evaluate the prospects for applying the results of D green chemistry analysis.

The research methods are based on a comprehensive combination of analytical, comparative, and experimental approaches. To determine the structural parameters, electron microscopy, spectroscopy, and physicochemical analysis methods are used, which allow obtaining a complete characterization of the morphology and texture of materials. To evaluate catalyst activity, models of ethylene hydrogenation reactions using various modifications of nanocarbon structures are applied. Analytical and statistical methods ensure the processing of the results obtained and the establishment of regularities between structure and activity. In addition, theoretical generalizations are based on the study of modern scientific sources and the results of previous research in this field. The combination of empirical and analytical methods allows for comprehensive and reliable conclusions. This ensures the complete solution of the tasks set and the achievement of the research objectives.

The scientific novelty of the work lies in the systematization of approaches to the analysis of the structural characteristics of nanocarbon catalysts and in determining their effect on ethylene hydrogenation reactions. For the first time, a comprehensive combination of morphological, spectroscopic, and catalyst studies has been justified for the formation of a generalized model for assessing activity. A new finding is the establishment of a relationship between the pretreatment of carbon nanotubes and the reaction rate, which allows for a more in-depth explanation of their mechanism of action. The results obtained expand the theoretical understanding of the functionality of nanocarbon materials in the context of green chemistry. In addition, the work clarifies

the role of metal components in increasing catalyst activity. A scientifically sound scheme of the relationship between structural parameters and catalytic efficiency is proposed. This forms a new vision of the prospects for the use of nanocarbon materials in modern chemistry. Thus, the work contributes to the development of fundamental knowledge about the interaction between the structure and functions of catalysts.

The practical significance of the research lies in the possibility of using the established patterns to create new environmentally friendly catalysts. Knowledge of the relationship between structural parameters and activity allows the development of materials with predictable properties for chemical production. This can help improve the efficiency of hydrogenation processes, reduce energy costs, and minimize harmful waste. Practical recommendations developed on the basis of the study can be implemented in production and contribute to the development of innovative technologies in the field of green chemistry. The results obtained may be useful for companies involved in the implementation of environmental technologies, as well as for scientific laboratories developing new types of catalysts. They can serve as a basis for further applied research and the creation of patented developments. Thus, the work has significant potential for practical application in various industries.

**KEYWORDS: NANOCARBON CATALYSTS, CATALYSIS,
NANOCARBON MATERIALS, GREEN CHEMISTRY, CATALYSTS, CARBON
NANOTUBES, GRAPHENE, ETHYLENE HYDROGENATION, STRUCTURAL
CHARACTERISTICS.**

ЗМІСТ

ВСТУП.....	14
РОЗДІЛ 1. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД	16
1.1. Каталізатори у зеленій хімії: значення та класифікація.....	16
1.2. Нановуглецеві матеріали: структурні характеристики та властивості.....	27
1.3. Вплив будови на каталізаторну активність	32
РОЗДІЛ 2. МЕТОДИЧНІ ПІДХОДИ ДО АНАЛІЗУ НАНОВУГЛЕЦЕВИХ КАТАЛІЗАТОРІВ.....	37
2.1. Характеристика об'єктів дослідження.....	37
2.2. Раманівська спектроскопія: теоретичні основи та інструментальне забезпечення	37
2.2.1. Природа резонансного комбінаційного розсіяння у вуглеці	37
2.2.2 Обладнання та умови експерименту	38
2.3. Методологія аналізу спектральних даних	39
2.3.1. Багатокомпонентна деконволюція спектра першого порядку	39
2.3.2. Фізична природа смуг та їх інтерпретація.....	40
2.3.3. Визначення ступеня дефектності	41
2.4. Додаткові методи дослідження.....	41
РОЗДІЛ 3. ОБҐРУНТУВАННЯ МЕТОДИК, УМОВ ЕКСПЕРИМЕНТУ ТА ВИБОРУ ОБ'ЄКТІВ ДОСЛІДЖЕННЯ	44
3.1. Використані реагенти, вихідні матеріали та апаратура	44
3.2. Синтез каталізатора Ni/CaO та багатошарових вуглецевих нанотрубок	46
3.3. Термообробка вуглецевих нанотрубок у відновній атмосфері водню	47
3.4. Термообробка вуглецевих нанотрубок в інертній атмосфері та послідовна інертно-відновна обробка.....	47
3.5. Методика дослідження каталітичної активності в реакції гідрування етилену	48
3.6. Методика раманівської спектроскопії та обробки спектрів	51
3.7. Загальні особливості раманівських спектрів досліджених зразків.....	53
3.8. Параметри деконволюції D- та G-областей раманівських спектрів	54
3.9. Вплив умов термообробки на параметри D- та G-зв'язків.....	57

	13
3.10. Обчислення спектральних параметрів	58
3.11. Перспективи застосування результатів аналізу у зеленій хімії.....	60
РОЗДІЛ 4. РОЗРОБЛЕННЯ СТАРТАП-ПРОЄКТУ	67
4.1 Опис ідеї проекту	67
4.2. Технологічний аудит ідеї проекту.....	74
4.3. Аналіз ринкових можливостей запуску стартап-проекту	77
4.4. Розроблення ринкової стратегії проекту	91
4.5. Розроблення маркетингової програми стартап-проекту	97
ВИСНОВКИ.....	106
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ	108
ДОДАТКИ.....	116
ДОДАТОК А.....	116
ДОДАТОК Б	127
а. Для CNT-350.....	127
б. Для CNT-700.....	127
с. Для CNT-800.....	128
д. Для CNT-ІН-300	130
е. Для CNT-ІН-400	131
ф. Для CNT-ІН-200	132
г. Для CNT-ІН-500	133
х. Для CNT-ІН-600	134
і. Для CNT-ІН-700	134
ї. Для CNT-ІН-800	135

ВСТУП

В умовах сучасної глобальної трансформації хімічної промисловості, зумовленої необхідністю зниження антропогенного навантаження та переходу до технологій з мінімальними екологічними ризиками, ключового значення набуває розвиток ефективних та екологічно безпечних каталізаторів. Принципи зеленої хімії, розроблені Полом Анастасом та Джоном Ворнером, визначають стратегічний підхід до оптимізації синтетичних процесів через зменшення енергоспоживання, скорочення утворення токсичних побічних продуктів і впровадження матеріалів із підвищеною стійкістю та селективністю [1]. У цьому контексті нановуглецеві матеріали – зокрема вуглецеві нанотрубки, нанофібри та графенові структури, демонструють значний потенціал як каталізatori або носії активних фаз. Їх структурні параметри мають прямий вплив на каталітичну активність, стабільність і специфіку поверхневих взаємодій [2; 3].

Морфологія, дефектність, ступінь графітизації, питомі поверхневі властивості та хімічний склад поверхні нановуглецевих структур істотно впливають на їхню функціональність у реакціях гідрування, окиснення, розкладу органічних речовин, а також у процесах, що є ключовими для екологічно орієнтованих технологій [3; 4]. Дослідження, проведені за останнє десятиліття засвідчуюють, що контроль структурних характеристик матеріалів відкриває шлях до цілеспрямованого підвищення селективності й ефективності каталітичних процесів, з одночасним зниженням екологічних ризиків. Особливе значення мають поверхневі дефекти та функціональні групи, які визначають механізми адсорбції реагентів, тоді як текстурні характеристики впливають на процеси дифузії й доступність активних центрів [5; 6].

Попри значний прогрес у синтезі та модифікації нановуглецевих каталізаторів, залишаються актуальними численні завдання, зокрема встановлення комплексних кореляцій між структурними параметрами таких матеріалів і їхньою

каталітичною активністю. Недостатня узгодженість експериментальних даних щодо ролі дефектності, гетероатомного допування, текстури та функціональних груп створює потребу в систематизованих дослідженнях, що інтегрують сучасні методи структурного аналізу – такі як Raman-спектроскопія, рентгеноструктурний аналіз, електронна мікроскопія, BET-адсорбційні дослідження та рентген фотоелектронної спектроскопії (XPS) [3; 6]. Саме тому вивчення структурних характеристик нановуглецевих матеріалів у контексті їх застосування в зеленій хімії становить актуальне наукове завдання, важливе для підвищення ефективності екологічно орієнтованих технологій. Крім того, отримані результати можуть стати теоретичною основою для створення новітніх каталітичних систем, спрямованих на зменшення негативного впливу хімічної промисловості на довкілля, а також на підтримку принципів циркулярної економіки й сталого розвитку.

РОЗДІЛ 1. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1. Каталізатори у зеленій хімії: значення та класифікація

Одним із ключових напрямів сучасної науки, орієнтованих на збереження довкілля та здоров'я людини, є зелена хімія, яку часто називають екологічною хімією. Вона становить собою комплексний підхід, спрямований на створення хімічних продуктів і процесів, що мінімізують або повністю усувають утворення небезпечних речовин. Основу цієї галузі становить прагнення до гармонізації виробництва з природними екосистемами шляхом запровадження новітніх технологій. Зелена хімія базується на принципах охорони навколишнього середовища та здоров'я людини, акцентуючи увагу на розробці методів, які знижують використання шкідливих реагентів та зменшують кількість токсичних відходів. Вона охоплює не лише стадію синтезу, але й повний життєвий цикл речовин – від добування сировини до утилізації кінцевого продукту. При цьому враховується ефективність, стабільність та енергетична доцільність кожного процесу. Завдяки такому підходу зелена хімія є міждисциплінарною сферою, що інтегрує наукові, технологічні та соціальні аспекти.

Формування зеленої хімії як окремого напрямку відбулося в 1990-х роках у відповідь на посилення усвідомлення негативного впливу хімічної промисловості на довкілля і здоров'я людини. Важливу роль у становленні цієї дисципліни відіграв американський учений Пол Анастас, який ініціював програму запобігання забрудненню шляхом впровадження альтернативних технологій під егідою Агенції з охорони довкілля США. У співпраці з Джоном Ворнером у 1998 році він сформулював 12 принципів зеленої хімії, що стали своєрідним етичним та науковим кодексом для розробників хімічних технологій [2]. Ці принципи окреслюють основні шляхи переходу від традиційних підходів до виробництва до екологічно орієнтованих. Їх запровадження дало змогу переглянути підходи до синтезу, зберігання та утилізації речовин, акцентуючи на необхідності мінімізувати небезпеку на всіх етапах. Саме завдяки ним зелена хімія отримала

статус інноваційної парадигми, яка поєднує фундаментальні знання з практичними потребами сталого розвитку. Таким чином, уже на початку ХХІ століття вона стала невід'ємною частиною глобальних екологічних програм.

Серед дванадцяти принципів зеленої хімії чільне місце займає вимога запобігати утворенню відходів, що зменшує потребу у складній та енергоємній переробці продуктів. Інший ключовий принцип передбачає максимальне використання атомів вихідних речовин у кінцевому продукті, що забезпечує так звану «атомну економію». Також наголошується на необхідності розробки менш небезпечних синтезів, у результаті яких утворюються речовини з низькою токсичністю або взагалі безпечні для людини й довкілля. Важливим є й принцип створення хімічних продуктів, які зберігають свої корисні властивості, але мають мінімальний негативний вплив на екосистеми на всіх етапах використання. Значна увага приділяється добору безпечніших розчинників та умов проведення реакцій, що знижує ймовірність виникнення шкідливих викидів. Окремо підкреслюється важливість підвищення енергоефективності процесів за рахунок проведення реакцій у м'яких умовах – при звичайній температурі та тиску. Таким чином, перші шість принципів формують основу, спрямовану на зниження шкоди для довкілля та економне використання ресурсів.

Наступні принципи стосуються вдосконалення технологій шляхом вибору оптимальних сировинних та технологічних підходів. Використання відновлюваної сировини дозволяє зменшити залежність від обмежених викопних ресурсів та забезпечити сталість хімічних процесів. Уникнення непотрібних проміжних сполук і похідних сприяє зменшенню кількості побічних продуктів і, відповідно, відходів. Особливе місце займає використання каталізаторів замість стехіометричних реагентів, адже каталіз дозволяє багаторазово використовувати невелику кількість речовини, забезпечуючи стабільність реакцій і зменшуючи обсяг забруднення. Ще один важливий принцип – розробка хімічних продуктів, які після використання розкладаються на нетоксичні компоненти, що запобігає їх накопиченню у природному середовищі. До того ж принципи включають вимогу проводити аналіз у режимі реального часу, щоб своєчасно виявляти небезпечні

побічні реакції. Нарешті, підкреслюється необхідність мінімізувати ризики аварій, пожеж та вибухів, що робить хімічне виробництво безпечнішим. Сукупність цих підходів забезпечує комплексну екологізацію хімічної промисловості.

Запропоновані принципи сприяють активному розвитку зеленої хімії як самостійної наукової галузі та одночасно як практичного напрямку модернізації промисловості. Її застосування охоплює широкий спектр сфер – від традиційної хімічної та фармацевтичної промисловості до аграрного виробництва, косметології й харчової індустрії. Завдяки цьому стає можливим зменшення рівня забруднення довкілля, покращення якості продукції та підвищення безпеки для кінцевого споживача. Зелена хімія також активно інтегрується у концепцію сталого розвитку, що поєднує екологічні, економічні та соціальні аспекти. Вона пропонує рішення, які водночас є ефективними, безпечними та економічно доцільними. Важливо й те, що ця галузь виступає не лише науковою дисципліною, а й світоглядною платформою, яка змінює підходи до проектування технологій та ставлення до природних ресурсів. У цьому контексті зелена хімія розглядається як етичний виклик, спрямований на формування нової культури виробництва. Саме тому її впровадження у сучасні технології стає не лише бажаним, а й необхідним кроком [4].

Зелена хімія є відносно новим напрямом у наукових дослідженнях, що виник як відповідь на зростаючі екологічні виклики, пов'язані з хімічною промисловістю. Її основна мета полягає у створенні та впровадженні технологій, які мінімізують або повністю усувають використання небезпечних речовин. На відміну від традиційних методів, що часто орієнтуються на результат без урахування наслідків, зелена хімія акцентує увагу на безпеці для людини та довкілля. Вона передбачає оптимізацію процесів із використанням відновлюваних ресурсів і безпечних розчинників, а також упровадження екологічно чистих методів синтезу [2]. Такий підхід сприяє зменшенню кількості відходів і токсичних викидів, що має безпосередній позитивний вплив на стан екосистем.

Формування зеленої хімії як наукової галузі почалося у 1990-х роках у США. Ініціатором стала програма запобігання забрудненню, розроблена

Агентством з охорони довкілля. Американський хімік Пол Анастас разом із Джоном Ворнером у 1998 році сформулювали дванадцять принципів, які визначили рамки розвитку нової дисципліни. Ці принципи охоплюють питання атомної економії, енергоефективності, використання відновлюваних ресурсів, а також безпечного дизайну речовин і процесів. Вони стали підґрунтям для створення стратегії сталого розвитку хімії, яка активно поширюється у світі [14, с. 16005].

Серед головних засад зеленої хімії особливе значення має запобігання утворенню відходів. Цей принцип орієнтує вчених і технологів на створення процесів, у яких відходи взагалі не виникають або їх кількість зводиться до мінімуму. Додатково важливою є концепція максимальної економії атомів, коли вихідні реагенти максимально інтегруються у структуру кінцевого продукту. Це дає можливість скорочувати витрати ресурсів та зменшувати утворення побічних продуктів [6, с. 144]. Реалізація цього підходу підвищує ефективність виробництва і робить його більш екологічно збалансованим.

Іншою важливою складовою є безпечність хімічних синтезів та продуктів. Принципи зеленої хімії вимагають розробляти такі технології, де утворювані сполуки мають низьку токсичність і не завдають шкоди під час використання чи утилізації. Це стосується не лише промислових реакцій, але й фармацевтичних, косметичних і харчових технологій. Використання менш небезпечних реагентів та розчинників знижує ризики для персоналу та кінцевих споживачів. Крім того, у такий спосіб зменшується ймовірність аварій на виробництві [4, с. 112].

Не менш значущим є принцип енергоефективності. У зеленій хімії прагнуть розробляти реакції, які протікають за нормальних температур і тиску, що дає змогу економити енергію. Це особливо актуально для масштабних промислових виробництв, де витрати енергоресурсів є значними. Використання каталізаторів замість стехіометричних реагентів також сприяє зменшенню енергетичних затрат і підвищує селективність реакцій. Таким чином досягається подвійний ефект – зниження витрат та зменшення негативного впливу на природу [10, с. 6372].

Принцип використання відновлюваної сировини орієнтує хіміків на заміну викопних ресурсів біологічними матеріалами. Це дозволяє скорочувати залежність від нафти та газу, зменшувати викиди парникових газів і розвивати біотехнологічні напрями виробництва. Наприклад, біополімери на основі крохмалю або целюлози здатні замінювати традиційні синтетичні пластмаси. Їх розкладання відбувається природним шляхом, без шкідливих залишків [21]. Такий підхід поступово стає основою для створення цілого спектра екологічно безпечних матеріалів.

Ще однією засадничою ідеєю зеленої хімії є розробка продуктів, які після використання повністю розкладаються на нетоксичні складові. Ця концепція особливо важлива в умовах зростання обсягів твердих побутових відходів. Матеріали, створені за принципами зеленої хімії, не накопичуються в довкіллі й не утворюють тривалих забруднень. Поєднання цього підходу з контролем у режимі реального часу дозволяє запобігати утворенню небезпечних побічних продуктів на етапі виробництва [16]. У результаті знижується загальний рівень екологічних ризиків.

Окремо варто наголосити на принципі мінімізації ймовірності аварій та нещасних випадків. Розробка безпечних реакційних умов, зменшення використання вибухонебезпечних або легкозаймистих речовин значно знижують ризики для працівників і навколишнього середовища. Це стосується не лише виробничого процесу, а й усіх етапів життєвого циклу продукту – від синтезу до утилізації [5, с. 287]. Таким чином зелена хімія поєднує у собі не лише екологічні, але й соціально відповідальні аспекти.

Застосування принципів зеленої хімії виходить далеко за межі академічних досліджень. Вони активно інтегруються у фармацевтику, сільське господарство, харчову та косметичну промисловість. У сучасному світі зелена хімія стає не лише науковою дисципліною, а й філософією відповідального ставлення до природи і суспільства [15]. Саме завдяки цьому підходу формується нове бачення ролі хімії у забезпеченні сталого розвитку та покращенні якості життя людей.

Каталізатори відіграють фундаментальну роль у зеленій хімії, оскільки вони дозволяють керувати перебігом реакцій за умов мінімальних витрат ресурсів та енергії. Їхня присутність у реакційних системах сприяє зниженню температури та тиску, необхідних для проведення процесів, що безпосередньо зменшує негативний вплив на довкілля. Застосування каталізаторів дозволяє зменшити утворення побічних продуктів і тим самим підвищити селективність синтезу. Саме тому в сучасних технологіях дедалі більше поширюється орієнтація на каталітичні методи перетворення речовин. Такі підходи не лише підвищують ефективність виробництва, а й узгоджуються з принципами сталого розвитку. Використання каталізу також є одним із ключових шляхів зменшення токсичності процесів і кінцевих продуктів [2].

Зелена хімія як наукова концепція передбачає пріоритетне використання саме каталітичних систем замість стехіометричних реагентів. Каталізатори дозволяють багаторазово брати участь у реакціях, забезпечуючи економію реагентів і зниження собівартості продуктів. Важливим є й те, що каталіз відкриває можливості для оптимізації технологічних схем, роблячи їх більш компактними та енергоефективними. В умовах глобальних викликів щодо охорони довкілля це дає змогу суттєво скоротити викиди шкідливих сполук. Каталізаторні системи також допомагають у впровадженні безвідходних і маловідходних технологій. Їх використання стало базовим підґрунтям для розробки інноваційних методів у галузі органічного та неорганічного синтезу [4, с. 55].

Класифікація каталізаторів у зеленій хімії ґрунтується на їхньому агрегатному стані, структурних характеристиках та механізмі дії. Найбільш поширеним є поділ на гомогенні, гетерогенні та біокаталізатори. Гомогенні каталізатори діють у тій самій фазі, що й реагенти, що забезпечує рівномірність перебігу реакцій. Гетерогенні каталізатори, навпаки, функціонують у відмінній фазі, зазвичай твердому стані, й вирізняються простотою відокремлення від реакційної суміші. Біокаталізатори ж репрезентовані ферментами, які діють у

м'яких умовах і демонструють високу специфічність. Кожен із типів має власні переваги та обмеження залежно від сфери застосування [1, с. 73].

Окрім традиційного поділу, у зеленій хімії розглядають і більш детальні класифікації за природою активних центрів. Наприклад, каталізатори можуть бути кислотно-основними, металокомплексними чи ензимними. Кислотно-основні каталізатори ефективні в реакціях із переносом протонів, тоді як металокомплексні забезпечують широкий спектр органічних перетворень. Біокаталізатори, які базуються на білкових структурах, залишаються незамінними для процесів за низьких температур і у водних середовищах. Такі класифікаційні підходи дозволяють науковцям обирати оптимальні системи для конкретних завдань. Вибір каталізатора значною мірою визначає як економічні, так і екологічні характеристики виробництва [6, с. 144].

Важливою особливістю каталітичних процесів є їхня здатність підвищувати атомну економію. Це означає, що атоми вихідних речовин максимально переходять у склад цільового продукту. Подібна ефективність зменшує обсяги відходів і необхідність у додаткових етапах очищення. Досягнення високої атомної економії розглядається як один із головних принципів зеленої хімії. У цьому контексті каталізатори виступають як універсальний інструмент для досягнення цієї мети. Вони також дозволяють інтегрувати різні стадії реакцій у єдиний процес. Це суттєво скорочує витрати часу і ресурсів, що особливо важливо в умовах промислового виробництва [3, с. 17].

Сучасні дослідження у галузі зеленої хімії активно спрямовані на пошук нових типів каталітичних матеріалів. Особливу увагу приділяють наноструктурованим системам, які мають унікальні поверхневі властивості. Висока питома площа поверхні та наявність активних центрів дозволяють їм демонструвати значно кращу каталітичну активність. Такі каталізатори здатні забезпечувати швидший перебіг реакцій за знижених енергетичних витрат. Це відкриває перспективи для створення більш екологічно безпечних технологій. Водночас розробка наноструктурованих матеріалів потребує комплексних досліджень їхньої стабільності та довговічності [7, с. 64].

Застосування каталізаторів у зеленій хімії поширюється на різні галузі промисловості. У фармацевтичному виробництві вони сприяють одержанню активних речовин із мінімальними домішками, що відповідає суворим стандартам безпеки. У нафтохімії каталітичні процеси дозволяють підвищити вихід цільових продуктів і знизити кількість побічних. У харчовій промисловості каталізатори забезпечують м'які умови перетворень, що зберігає корисні властивості продуктів. Каталіз широко застосовується і в екологічних технологіях, зокрема для очищення викидів і стічних вод. Усі ці приклади демонструють універсальність і ключову роль каталізаторів у досягненні цілей зеленої хімії [5, с. 112].

Серед сучасних тенденцій окреме місце займає поєднання каталітичних методів із принципами відновлюваної енергетики. Використання каталізаторів у процесах перетворення біомаси дозволяє одержувати екологічно безпечні палива та хімічні продукти. Такі технології формують базу для зменшення залежності від викопних джерел і сприяють розвитку економіки замкнутого циклу. Важливим аспектом є також поєднання каталітичних процесів із сонячною та електрохімічною енергією. Це відкриває перспективи для створення нових типів реакцій, що не потребують агресивних умов. Поєднання каталітичних і відновлюваних підходів стає одним із ключових напрямів сучасної науки [21].

Таким чином, каталізатори в зеленій хімії розглядаються не лише як інструмент для оптимізації реакцій, а й як стратегічний фактор у формуванні нових екологічних технологій. Їхня класифікація за різними критеріями допомагає обирати найбільш придатні системи для конкретних завдань. Використання каталітичних методів сприяє досягненню високої атомної економії та зниженню енергетичних витрат. У поєднанні з нанотехнологіями та відновлюваною енергетикою каталіз забезпечує інноваційний розвиток хімічної промисловості. Це створює підґрунтя для широкого впровадження принципів зеленої хімії у виробничу практику. Значення каталізаторів у цьому контексті постійно зростає і визначає напрями подальших наукових досліджень [14].

Сучасна зелена хімія передбачає використання каталізаторів, які дозволяють значно зменшити утворення шкідливих відходів та побічних продуктів у хімічних процесах. Каталізатори забезпечують ефективне протікання реакцій за нижчих температур і тисків, що зменшує енергетичні витрати та вплив на довкілля [2, с. 14]. Однією з ключових вимог у зеленій хімії є застосування безпечних та нетоксичних каталізаторів, що знижує ризик для здоров'я людини та екосистем [4, с. 78]. Крім того, правильний вибір каталізатора дозволяє підвищити селективність реакцій, що забезпечує отримання цільового продукту з мінімальними втратами. Використання каталітичних систем активно підтримує принцип економії атомів та зменшення кількості відходів, що є одними з основних постулатів зеленої хімії [2, с. 21]. При цьому важливу роль відіграє можливість багаторазового використання каталізаторів без значного погіршення їх активності. Наукові дослідження показують, що інноваційні підходи до модифікації каталізаторів відкривають нові шляхи для екологічно чистих процесів [6, с. 144]. Таким чином, каталізатори у зеленій хімії стають не лише технічним, а й екологічним інструментом оптимізації хімічних технологій. Класифікація каталізаторів наведена у табл. 1.1.

Таблиця 1.1 – Класифікація каталізаторів у зеленій хімії

Клас каталізатора	Форма та структура	Приклади застосування	Екологічні переваги
Гомогенні	Розчинні у реакційному середовищі	Кислотні та основні каталізатори у синтезі органічних сполук	Висока швидкість реакцій, контроль селективності
Гетерогенні	Тверді каталізатори на носіях	Металеві каталізатори на оксидах, наноструктуровані носії	Легке відділення та повторне використання, зменшення відходів
Біокаталізатори	Ензими, мікробні системи	Ферментативні синтези, біотрансформації	Мінімальна токсичність, низькі енергетичні витрати
Нанокаталізатори	Наночастинки металів або вуглецю, нанотрубки	Гідрування, окиснення, селективні перетворення	Підвищена активність, селективність, можливість багаторазового використання

Класифікація каталізаторів у зеленій хімії базується на їх фізичній формі, структурі та механізмах дії, що безпосередньо впливає на екологічні властивості процесів. Гомогенні каталізатори розчинні у реакційному середовищі та забезпечують високі швидкості і селективність реакцій, однак їх складно відділяти і багаторазово використовувати. Гетерогенні каталізатори, що знаходяться у відмінній фазі від реагентів, легко відокремлюються після реакції та повторно використовуються, що значно знижує кількість відходів. Біокаталізатори, такі як ферменти, дозволяють проводити реакції за м'яких умов і з мінімальною токсичністю. Нанокаталізатори завдяки високій поверхневій активності та специфічним властивостям наноструктур забезпечують підвищену швидкість, селективність та стабільність процесів, одночасно сприяючи економії реагентів і енергії. Така класифікація допомагає систематизувати знання про каталізатори і оптимізувати їх застосування у виробництві екологічно безпечних хімічних продуктів.

Значну увагу приділяють класифікації каталізаторів за походженням, структурою та механізмом дії. Каталізатори можуть бути гомогенними та гетерогенними, причому кожен тип має свої переваги і обмеження в екологічних процесах [1, с. 102]. Гомогенні каталізатори, розчинні у реакційному середовищі, забезпечують високі швидкості реакцій, але часто складні у відділенні та повторному використанні. Натомість гетерогенні каталізатори, що знаходяться у різній фазі від реагентів, дозволяють легко відділяти їх після реакції та багаторазово використовувати, що знижує кількість відходів [5, с. 212]. Особливу увагу приділяють металевим каталізаторам, підтриманим на носіях з наноструктурованих матеріалів, які забезпечують високу активність та селективність. Крім того, класифікація каталізаторів враховує їх здатність до регенерації та стабільність у тривалих процесах. Такий підхід дозволяє систематизувати знання та оптимізувати вибір каталізаторів для різних технологічних завдань [3, с. 18]. Використання класифікаційних схем сприяє більш ефективному впровадженню принципів зеленої хімії у промислових процесах.

Наноматеріали відіграють важливу роль у створенні каталізаторів нового покоління, оскільки їхня висока поверхнева активність і пориста структура підвищують швидкість та селективність реакцій [4, с. 112]. Нановуглецеві каталізатори, зокрема, забезпечують стабільність процесів та можливість багаторазового використання без втрати активності. Крім того, наноструктури дозволяють модифікувати каталізатор за допомогою функціональних груп або металевих домішок, що оптимізує його поведінку в конкретних реакціях [6, с. 146]. Використання таких систем відповідає принципам зменшення ризику для здоров'я та довкілля, адже процеси можна проводити за м'якших умов. Сучасні дослідження демонструють, що нанокаталізатори дозволяють зменшити утворення побічних продуктів і токсичних відходів. Важливим є також економічний аспект: завдяки підвищеній активності каталізатора зменшується витрата реагентів та енергії [2, с. 23]. Такі інноваційні матеріали стають основою для екологічно безпечних хімічних процесів у різних галузях промисловості. Застосування наноматеріалів у каталізі сприяє розвитку сталої хімії та підвищенню ефективності виробництва.

Таким чином, каталізатори у зеленій хімії виступають ключовим інструментом для зменшення негативного впливу хімічних процесів на довкілля та здоров'я людини. Вони забезпечують реалізацію принципів мінімізації відходів, економії ресурсів і енергії, підвищення селективності та безпечності продуктів. Використання сучасних нанокаталізаторів відкриває нові можливості для створення більш ефективних та стійких технологій. Правильний вибір типу каталізатора, його модифікація та оптимізація процесів є необхідними умовами для практичного впровадження принципів зеленої хімії у промислових та лабораторних умовах. Такі підходи дозволяють інтегрувати наукові дослідження з екологічними вимогами, сприяючи сталому розвитку хімічної промисловості. Крім того, ефективні каталізатори знижують витрати реагентів і енергії, що підвищує економічну ефективність процесів. Важливим є також те, що застосування безпечних каталізаторів зменшує ризики для персоналу і

навколишнього середовища. У результаті каталізатори стають основою для сталого виробництва і забезпечують високий рівень екологічної безпеки.

1.2. Нановуглецеві матеріали: структурні характеристики та властивості

Нановуглецеві матеріали являють собою різновид форм вуглецю, структурні елементи яких мають розмір у нанометровому діапазоні. Вони включають різноманітні алотропні модифікації, що відрізняються своєю будовою та фізико-хімічними властивостями. Завдяки малому розміру частинок і високій питомій площі поверхні ці матеріали демонструють унікальні механічні, електронні та хімічні характеристики. Використання нановуглецевих матеріалів у хімічних процесах дозволяє підвищувати ефективність каталізу та зменшувати екологічне навантаження. Сучасні дослідження вказують на їх значний потенціал у галузі зеленої хімії, оскільки вони можуть служити як самостійні каталізатори, так і носії активних компонентів [3]. Висока стабільність і можливість функціоналізації відкривають широкі перспективи для розробки нових екологічно безпечних технологій.

Вуглецеві нанотрубки (ВНТ) представляють собою циліндричні структури, які формуються шляхом «згортання» листів графену. Існують одношарові (SWNT) та багатшарові (MWNT) нанотрубки, що відрізняються кількістю стінок і внутрішнім діаметром. Через нерівномірний спосіб формування їх електронні властивості можуть бути як металевими, так і напівпровідниковими. Нанотрубки мають надзвичайну механічну міцність, модуль Юнга досягає приблизно 1000 ГПа, при цьому їх щільність значно менша за щільність сталі. Завдяки внутрішній порожнині ВНТ здатні інкапсулювати молекули, метали або гази, що розширює їх застосування в каталізі. Їх поверхня та стінки забезпечують високу електропровідність і термостійкість. Ці властивості роблять нанотрубки перспективними у створенні каталізаторів для екологічно чистих хімічних процесів [3].

Графен являє собою двовимірний моношар атомів вуглецю, сполучених у гексагональну решітку. Він характеризується надзвичайно великою питомою площею, що теоретично сягає $2600 \text{ м}^2/\text{г}$, а також високою електронною рухливістю, яка в сотні разів перевищує показники кремнію. Механічна міцність графену значно перевищує міцність сталі, що робить його стійким до деформацій і розриву. Похідні графену, такі як оксид графену (GO) та відновлений оксид графену (rGO), володіють різноманітними функціональними групами, що забезпечує їх розчинність і можливість диспергування у водних середовищах. GO зазвичай діелектричний, тоді як rGO відновлює частину sp^2 -структури, стаючи провідником. Це дозволяє застосовувати графен як каталізаторний носій або активний матеріал у реакціях зеленої хімії. Використання графену також перспективне для створення сенсорних та електронних пристроїв у високотехнологічних сферах [3].

Фулерени, або вуглецеві кулі, представляють собою замкнені молекули вуглецю, які утворюють сферичні або еліпсоїдні оболонки. Найвідоміший представник цієї групи – C_{60} , який відкрив новий напрямок у дослідженні нановуглецевих матеріалів. Фулерени належать до нульовимірних (0D) наноматеріалів і мають високу симетрію, стабільну sp^2 -структуру та унікальні електронні властивості. Вони проявляють здатність до електронного акцепторства і демонструють відмінні механічні характеристики. Відкриття фулерену стимулювало розвиток досліджень у галузі нанотрубок та нанокул, що дозволило створювати нові каталізатори та матеріали з заданими властивостями. Використання фулеренів у каталізі сприяє підвищенню ефективності реакцій і зменшенню кількості побічних продуктів.

Активоване вугілля та інші пористі карбонові матеріали представляють нерегулярні аморфні структури з високою пористістю. Питома поверхня таких матеріалів може досягати декількох тисяч $\text{м}^2/\text{г}$, що забезпечує високу адсорбційну здатність. Завдяки цьому вони широко застосовуються як адсорбенти та носії каталізаторів у процесах очищення води, повітря та хімічних сумішей. Пористі карбонові матеріали дозволяють регулювати швидкість і селективність реакцій за

рахунок контролю поверхневих характеристик. Їх функціоналізація органічними групами підвищує взаємодію з реактивними молекулами і сприяє більш стабільному каталізу. Сучасні дослідження показують, що такі матеріали активно використовуються у зеленій хімії для створення більш безпечних технологій [3].

Вони володіють величезною питомою поверхнею, що забезпечує високу адсорбційну здатність. Такі матеріали широко застосовуються як носії каталізаторів у процесах очищення води та повітря. Можливість модифікації поверхні дозволяє підвищувати специфічність каталізу та підвищувати ефективність реакцій. Вуглецеві пористі матеріали також характеризуються хімічною стабільністю та термостійкістю. Їх застосування сприяє впровадженню принципів зеленої хімії у промислові процеси. Висока пористість дозволяє створювати каталізаторні системи з контролем доступу реагентів.

Нанодіаманти являють собою кристалічні частинки вуглецю з алмазоподібними властивостями і невеликим розміром у нанометровому діапазоні. Вони мають високу твердість, термостійкість та хімічну стабільність. Часто нанодіаманти функціоналізують органічними групами, що дозволяє їх включати до каталізаторів та адсорбентів. Завдяки великій питомій площі поверхні і високій стабільності вони підвищують ефективність хімічних процесів, зменшуючи енергетичні витрати і утворення побічних продуктів. Нанодіаманти застосовують як у промислових, так і у лабораторних системах, де важлива точність і контроль реакцій. Вони стають перспективними матеріалами для розвитку стійких технологій у хімії [3].

Вони часто функціоналізовані органічними групами для підвищення сумісності з різними середовищами. Нанодіаманти мають високу твердість та стабільність при хімічних і термічних впливах. Вони застосовуються у каталізі для посилення активності та селективності реакцій. Завдяки малому розміру частинок досягається велика питома поверхня, що покращує взаємодію з реагентами. Нанодіаманти можуть використовуватися у комбінації з іншими нановуглецевими матеріалами для створення гібридних каталізаторів. Це забезпечує підвищення ефективності процесів у зеленій хімії.

Вуглецеві квантові точки являють собою наночастинки з розмірами, що дозволяють проявляти квантові ефекти, які відрізняються від властивостей макроскопічного вуглецю. Вони мають високу фотостійкість, електронну мобільність і здатність до функціоналізації. Це відкриває можливості для створення каталізаторів з контрольованою активністю і селективністю. Використання квантових точок сприяє підвищенню ефективності хімічних реакцій та зниженню утворення шкідливих побічних продуктів. Наноматеріали такого типу активно досліджуються для застосування у сфері зеленої хімії, де важлива мінімізація екологічного навантаження та підвищення стабільності технологій [3].

Вони мають специфічні оптичні та електронні властивості, що відкриває можливості для фотокаталізу та сенсорики. Розміри частинок та поверхнева функціоналізація дозволяють контролювати каталізаторну активність. Квантові точки демонструють високу стабільність і низьку токсичність, що відповідає принципам зеленої хімії. Вони використовуються як каталізаторні носії або активні компоненти в органічному та неорганічному синтезі. Комбінування з іншими нановуглецевими формами підвищує їх практичну цінність. Таким чином, квантові точки є перспективним матеріалом для інноваційних екологічно безпечних технологій.

Таблиця 1.2 – Класифікація нановуглецевих матеріалів

Тип нановуглецевого матеріалу	Структурні особливості	Основні властивості	Застосування в зеленій хімії
Вуглецеві нанотрубки (SWNT, MWNT)	Циліндричні «згорнуті» листи графену, одношарові та багатошарові	Висока міцність, низька щільність, електропровідність, термостійкість	Інкапсуляція молекул, каталізаторні носії, реакції гідрування та оксидації
Графен і похідні (GO, rGO)	Двовимірні моношари атомів вуглецю, окисдовані або відновлені	Велика питома поверхня, висока електропровідність, механічна міцність	Носії каталізаторів, сенсори, електронні та фотокаталітичні системи
Фулерени (C ₆₀ , C ₇₀)	Замкнені сферичні або еліпсоїдні молекули, 0D частинки	Стійкі sp ² -структури, акцепторні електронні властивості, механічна	Каталізаторні системи, органічна електроніка, фотокаталіз

Тип нановуглецевого матеріалу	Структурні особливості	Основні властивості	Застосування в зеленій хімії
		стабільність	
Активоване вугілля та пористі карбони	Аморфні структури з високою пористістю	Велика питома поверхня, адсорбційна здатність	Адсорбенти, каталізаторні носії для очищення води та повітря
Нанодіаманти	Кристалічні частинки з алмазоподібною структурою	Висока твердість, термостійкість, можливість функціоналізації	Каталізаторні носії, адсорбенти, біомедичні застосування
Вуглецеві квантові точки	Наночастинки <10 нм	Флуоресценція, хімічна стабільність, водорозчинність	Сенсори, каталізаторні системи, фотокаталітичні реакції

Вуглецеві нанотрубки завдяки внутрішній порожнині та високій міцності використовуються як носії каталізаторів та інкапсулятори реактивних молекул. Графен і його похідні поєднують надзвичайну площу поверхні та електропровідність, що робить їх перспективними для електронних та фотокаталітичних систем. Фулерени мають унікальні електронні властивості, завдяки чому застосовуються в органічній електроніці та фотокаталізі. Пористі карбони, активоване вугілля та нанодіаманти забезпечують високу адсорбційну здатність і термостійкість, що є важливим у технологіях очищення та каталізу. Вуглецеві квантові точки доповнюють перелік наноматеріалів своїми спеціалізованими оптичними властивостями, що розширює спектр застосувань у каталізі та сенсорних системах. Таким чином, різні нановуглецеві матеріали забезпечують широку гаму можливостей для реалізації принципів зеленої хімії, поєднуючи механічну стійкість, електронну активність і функціональні властивості.

Отже, нановуглецеві матеріали охоплюють широкий спектр структур та властивостей, що робить їх незамінними у сучасній зеленій хімії. Вони дозволяють підвищувати ефективність каталізаторів, зменшувати енергетичні витрати та мінімізувати утворення шкідливих побічних продуктів. Використання різних алотропів вуглецю забезпечує гнучкість у проектуванні процесів і

підвищує їх селективність. Комбінування наноматеріалів у гібридні системи відкриває нові перспективи для екологічно безпечного синтезу. Функціоналізація поверхні матеріалів підвищує їх взаємодію з реагентами та стабільність у реакційних середовищах. Ці властивості роблять нановуглецеві матеріали ключовими для впровадження принципів зеленої хімії в промисловості та наукових дослідженнях. Їх застосування сприяє розвитку стійких технологій та зменшенню негативного впливу хімії на довкілля. Нановуглецеві матеріали формують різноманітну групу субстанцій з унікальними фізико-хімічними властивостями, що забезпечують їх широке застосування у сучасній хімії. Вони здатні виконувати функції каталізаторів та носіїв активних компонентів, підвищуючи ефективність і селективність реакцій. Крім того, їх застосування сприяє реалізації принципів зеленої хімії, дозволяючи зменшити кількість відходів, енергетичні витрати та шкідливі викиди. Нановуглецеві матеріали є перспективним напрямком для розвитку стійких і екологічно безпечних технологій, що відповідають сучасним вимогам науки і промисловості.

1.3. Вплив будови на каталізаторну активність

Нановуглецеві матеріали проявляють унікальні каталізаторні властивості завдяки своїй наномасштабній структурі та високій питомій поверхні. Основним фактором, що визначає каталізаторну активність, є співвідношення поверхневих атомів до об'єму матеріалу, яке значно зростає на нанорівні. Це дозволяє ефективно забезпечувати контакт між реагентами та активними центрами, що особливо важливо для хімічних реакцій, які протікають за участі газових або розчинених речовин [1, с. 45]. Одним із ключових аспектів є морфологія матеріалу: циліндричні нанотрубки, плоскі графенові шари та сферичні фулерени забезпечують різні режими адсорбції молекул. Зокрема, внутрішня порожнина одношарових та багатошарових нанотрубок може слугувати природним «контейнером» для інкапсуляції металевих частинок, що підвищує локальну концентрацію активних центрів [7, с. 132]. Структурна регулярність графенових

листів дозволяє формувати однорідні активні ділянки на поверхні, що поліпшує селективність реакцій. Крім того, електронні властивості нановуглецевих матеріалів впливають на механізми переносу електронів у каталізі, що особливо помітно при окисно-відновних процесах [4, с. 88]. Ефективність каталізу безпосередньо корелює з розміром частинок та рівнем дефектності сполук. Наявність структурних дефектів у наноматеріалах часто сприяє формуванню високоефективних каталізаторів, забезпечуючи додаткові активні центри [2].

Вуглецеві нанотрубки демонструють високий потенціал для підтримки металевих каталізаторів завдяки своїй пористості та механічній міцності. Одношарові нанотрубки мають менший внутрішній діаметр, що дозволяє контролювати доступ молекул до активних центрів, а багатошарові структури забезпечують більшу стабільність і триваліший термін експлуатації каталізаторів [1, с. 47]. Внутрішня поверхня нанотрубок може бути функціоналізована органічними групами, що поліпшує адсорбцію металів та стабілізує їх у нанорозмірному стані [3]. Такі модифікації дозволяють отримувати каталізатори з підвищеною селективністю та стійкістю до деактивації. Крім того, нанотрубки демонструють унікальні електронні властивості, що впливають на перенесення заряду під час каталітичних реакцій [4, с. 91]. Високий модуль Юнга забезпечує стабільність наноматеріалу під механічним та термічним навантаженням, що дозволяє використовувати його в умовах високих температур. Внутрішня порожнина нанотрубок сприяє утворенню локальних мікросередовищ, що можуть прискорювати реакції. Таким чином, форма та розмір нанотрубок безпосередньо визначають їхню каталізаторну ефективність.

Графен і його похідні надають каталізаторам перевагу завдяки високій питомій площі та електропровідності. Поверхня окисненого графену (GO) має численні функціональні групи, що забезпечують міцну адсорбцію металевих наночастинок та рівномірний розподіл активних центрів [6]. Відновлений графен (rGO) частково відновлює π -електронну мережу, підвищуючи електропровідність та полегшуючи електронний обмін під час реакцій [4, с. 95]. Товщина графенових шарів визначає доступ молекул до активних центрів, а також впливає на

термостійкість каталізаторів. Структурні дефекти у графені створюють додаткові центри адсорбції та полегшують хімічну взаємодію між реагентами та каталізатором. Завдяки цим властивостям графенові носії широко використовуються для підтримки дорогоцінних металів у каталізі, включаючи платину та паладій [7, с. 140]. Розмір пор у графенових структурах можна налаштовувати для оптимізації швидкості реакцій та селективності. Таким чином, будова графену та його функціоналізація визначають кінетичні та термодинамічні характеристики каталізаторів.

Фулерени забезпечують специфічні каталізаторні властивості завдяки своїй нульовіймерній формі та високій симетрії. Їхня замкнена молекулярна структура дозволяє рівномірно розподіляти електронні щільності по поверхні, що впливає на акцепторні властивості [3]. Фулерени можуть утворювати комплекси з металами, покращуючи стабільність каталізатора та підвищуючи селективність реакцій. Специфічна поверхнева енергія молекул дозволяє точно контролювати взаємодію з реагентами, особливо у фотокаталітичних процесах. Розмір і форма фулеренів визначають доступ реагентів до активних центрів і стабільність наноматеріалу. Важливим фактором є електронна провідність фулеренів, що полегшує перенесення електронів у реакційній зоні [4, с. 99]. Крім того, їхня висока термостійкість дозволяє використовувати фулерени у жорстких умовах реакторів. Використання фулеренів як каталізаторних носіїв сприяє збільшенню активності металевих наночастинок. Специфічна будова цих наноматеріалів робить їх ефективними для окисдно-відновних та фотохімічних процесів.

Активовані пористі вуглецеві матеріали надають каталізаторам високу питому площу та здатність до адсорбції реагентів. Розмір та розподіл пор у матеріалі визначають швидкість дифузії молекул до активних центрів, що безпосередньо впливає на ефективність каталізу [5, с. 210]. Такі матеріали широко застосовують для підтримки металевих наночастинок, забезпечуючи стабільність та тривалість каталізаторного ефекту. Функціоналізація поверхні пористих карбонів дозволяє підвищувати хімічну активність і селективність реакцій. Висока адсорбційна здатність цих матеріалів сприяє утворенню локальних

концентрацій реагентів у порах. Завдяки широкому діапазону пористості активовані вуглеці застосовуються як у гетерогенному, так і у гомогенному каталізі. Механічна міцність матеріалу забезпечує його використання у промислових умовах. Пористі карбони також використовуються у системах очищення води та газів, де каталізаторні функції поєднуються з адсорбційними властивостями.

Нанодіаманти та вуглецеві квантові точки демонструють унікальні каталізаторні характеристики завдяки структурній регулярності та функціоналізації поверхні. Нанодіаманти мають високу термостійкість і хімічну інертність, що робить їх стабільними носіями каталізаторів [7, с. 155]. Функціоналізація органічними групами забезпечує можливість прив'язки металів та підвищує каталізаторну активність. Вуглецеві квантові точки проявляють специфічні оптичні та електронні властивості, що дозволяє їх застосовувати у фотокаталітичних та електрохімічних процесах. Розмір і форма цих частинок визначають доступ реагентів до активних центрів та ефективність каталізу. Застосування нанодіамантів і квантових точок дозволяє отримати каталізатори з високою селективністю та тривалістю експлуатації. Електронна провідність і стабільність таких матеріалів роблять їх перспективними для промислового використання.

Важливим аспектом впливу будови нановуглецевих матеріалів є їх дефектність і функціоналізація. Наявність точкових дефектів, вакансій або додаткових функціональних груп формує нові активні центри та підвищує реакційну здатність [4, с. 105]. Функціоналізація дозволяє адаптувати матеріал під специфічні типи реакцій, контролюючи електронні та стеричні ефекти. Змінюючи товщину, розмір частинок і пористість, можна оптимізувати каталізатор під конкретні процеси. Внутрішні порожнини та структурні дефекти сприяють утворенню локальних концентрацій реагентів, що прискорює реакції. Будова нановуглецевих матеріалів безпосередньо визначає кінетичні характеристики каталізатора. Оптимізація цих параметрів забезпечує баланс між активністю та стабільністю матеріалу [1, с. 52].

Висновки до розділу 1

Вплив будови нановуглецевих матеріалів на їх каталізаторну активність є комплексним і багатофакторним процесом. Розміри частинок, характер хімічних зв'язків, наявність функціональних груп та пористість визначають ефективність адсорбції реагентів та швидкість каталізованих реакцій. Специфічна морфологія, наприклад, циліндрична форма нанотрубок або двовимірна структура графену, створює унікальні електронні та термічні властивості, що прямо впливають на каталіз. Внутрішня порожнина та велика питома поверхня дозволяють не лише інкапсулювати молекули, а й забезпечують високу доступність активних центрів. Функціоналізація поверхні матеріалів відкриває можливості для створення каталізаторів з заданими селективними характеристиками. Порівняння різних типів нановуглецевих носіїв демонструє, що навіть невеликі зміни у структурі суттєво впливають на кінетику реакцій і стабільність каталізаторів. Врахування цих особливостей є критично важливим для оптимізації процесів зеленої хімії та створення високоефективних каталізаторів з мінімальним екологічним впливом. Загалом, нановуглецеві матеріали дозволяють поєднати механічну міцність, електропровідність і каталізаторну ефективність у межах однієї системи, що робить їх перспективними для сучасних технологій.

РОЗДІЛ 2. МЕТОДИЧНІ ПІДХОДИ ДО АНАЛІЗУ НАНОВУГЛЕЦЕВИХ КАТАЛІЗАТОРІВ

2.1. Характеристика об'єктів дослідження

Об'єктами даного дослідження є серія нановуглецевих каталізаторів, синтезованих з метою застосування у процесах зеленої хімії (безметалевий каталіз реакцій окиснення або як носії для наночастинок металів).

Вибір даних об'єктів зумовлений їхньою високою питомою площею поверхні та наявністю поверхневих дефектів, які виступають активними центрами каталізу.

2.2. Раманівська спектроскопія: теоретичні основи та інструментальне забезпечення

Основним методом дослідження структурної впорядкованості та дефектності вуглецевого каркаса було обрано спектроскопію комбінаційного розсіювання світла (Раманівська спектроскопія).

Раманівська спектроскопія є основним методом дослідження у даній роботі, оскільки вона забезпечує пряму інформацію про кристалічну структуру, тип гібридизації вуглецю, наявність та природу дефектів, а також ступінь функціоналізації.

2.2.1. Природа резонансного комбінаційного розсіювання у вуглеці

Для всіх sp^2 -вуглецевих матеріалів Раманівське розсіювання є резонансним процесом. Це пов'язано з особливостями електронної зонної структури графену, де валентна зона і зона провідності дотикаються в точках Дірака (К-точках). Завдяки цьому, видиме світло лазера завжди потрапляє в резонанс з електронними переходами $\pi - \pi^*$. Це призводить до значного підсилення інтенсивності розсіювання і робить метод надзвичайно чутливим навіть до незначних структурних змін.¹

Унікальність спектрів вуглецю полягає в тому, що їхня інтерпретація вимагає врахування не лише фононної дисперсії (залежності частоти коливань від хвильового вектора), але й електронної дисперсії. Багато смуг у спектрі (зокрема D та 2D) є дисперсійними, тобто їхнє положення залежить від енергії збуджуючого лазера (E_{laser}). Це пояснюється механізмом подвійного резонансу (Double Resonance – DR), який є фундаментальним для розуміння походження дефектних смуг у нанотрубках.

2.2.2 Обладнання та умови експерименту

Спектральні дослідження проводилися з використанням конфокальних Раманівських мікроскопів високої роздільної здатності.

Спектрометр RENISHAW inVia, оснащений високочутливими CCD-детекторами та моторизованими столиками для картування поверхні.

Основні вимірювання проводилися з використанням лазера з довжиною хвилі 532 нм (зелений спектр). Вибір цієї довжини хвилі обумовлений тим, що вона забезпечує сильний резонанс для вуглецевих структур і дозволяє отримувати спектри з високим співвідношенням сигнал/шум [58].

Критично важливим параметром є потужність випромінювання на поверхні зразка. Вуглецеві наноматеріали є термочутливими і можуть локально відновлюватися або горіти під дією лазерного променя. Для уникнення лазерно-індукованих змін структури під час вимірювання потужність підтримувалася на рівні 0,5 мВт або менше (до 50 мкВт при використанні об'єтивів з великою числовою апертурою) [59].

Оптичні об'єктиви з кратністю 50x та 100x ($NA = 0,9$) дозволяли фокусувати промінь у ділянку діаметром приблизно 1 мкм, що робило можливим аналіз окремих агломератів чи пластівців матеріалу. Для отримання якісних спектрів тривалість накопичення сигналу зазвичай становила від 100 до 180 секунд залежно від умов.

2.3. Методологія аналізу спектральних даних

«Сирі» спектральні дані піддавалися попередній обробці, що включала видалення фону (baseline correction) та згладжування. Для нівелювання впливу флуоресценції, яка часто виникає у зразках нановуглецю функціоналізованого органічними групами, застосовувалася корекція базової лінії (поліноміальна апроксимація 3-го порядку або алгоритм Asymmetric Least Squares).

Однак, основний аналіз базувався на детальній деконволюції (curve fitting) спектрів на окремі компоненти.

2.3.1. Багатокомпонентна деконволюція спектра першого порядку

Ключовим етапом аналізу є розкладання складного спектрального контуру на окремі компоненти (піки). Спектр першого порядку вуглецевих матеріалів ($1000-1800\text{ cm}^{-1}$) часто розглядається спрощено як сума двох піків: G та D. Проте для хімічно модифікованих матеріалів така модель є недостатньою через наявність значного перекриття смуг та появу додаткових особливостей. У даній роботі застосовано розширену модель, що передбачає розкладання спектра на 7 компонентів [59].

Таблиця 2.1 – Характеристика смуг Раманівського спектра першого порядку для деконволюції [58].

Смуга	Положення ($\sim\text{cm}^{-1}$)	Походження та фізичний зміст	Тип профілю для фітінгу
D*	1150 – 1200	sp ³ -зв'язки на краях, полієнові ланцюги, вібрації атомів вуглецю, обмежені кисневмісними групами.	Гауссіан (Gaussian)
D	1340 – 1350	Активується дефектами (подвійний резонанс). Основний індикатор розупорядкування.	Псевдо-Войт (Pseudo-Voigt)

D''	1500 – 1550	Аморфні фази, інтерстиціальні дефекти, функціоналізовані малі молекули. Інтенсивність корелює з аморфністю.	Гауссіан (Gaussian)
G	1580 – 1590	Характеризує ідеальну графітову структуру.	Псевдо-Войт (Pseudo-Voigt)
D'	1615 – 1625	Процес подвійного резонансу. Пов'язана з поверхневими дефектами.	Псевдо-Войт (Pseudo-Voigt)

Вибір функцій для апроксимації є важливим етапом дослідження. Для вузьких пікових сигналів кристалічної природи таких як G, D, оптимальним є використання профілю Псевдо-Войта (суміш Лоренца і Гауса), що враховує як час життя фонона, так і ефекти неоднорідного розширення. Для широких смуг, пов'язаних з аморфними фазами або розподілом станів (D^* , D''), краще підходить профіль Гауса через його здатність точно описувати таку природу сигналів [59].

2.3.2. Фізична природа смуг та їх інтерпретація

G-смуга є чутливою до процесів допування. Зміщення рівня Фермі (внаслідок хімічної модифікації) викликає зміну частоти та ширини G-смуги через ефект аномалії Кона та порушення адіабатичного наближення. Ця смуга часто зміщується в область вищих частот ($\sim 1590 \text{ cm}^{-1}$), що обумовлено явищами окислення та дією механічних напружень [58].

D-смуга виникає внаслідок процесу подвійного резонансу, що включає розсіяння електрона на дефекті та на фононі поблизу точки К (точка Дірака). Її інтенсивність залежить не лише від кількості дефектів, але й від їх типу.

2D-смуга: (або G') у спектрі другого порядку ($\sim 2700 \text{ cm}^{-1}$) є обертоном D-смуги. Вона активна навіть у відсутності дефектів (через збереження імпульсу двома фононами). Форма та положення 2D-смуги є чутливими до кількості шарів у графені та електронної структури (розщеплення електронних зон) [60].

На основі параметрів, отриманих після деконволюції (інтегральна інтенсивність I , положення максимуму ω повна ширина на половині висоти FWHM), проводилися нижчезазначені розрахунки.

2.3.3. Визначення ступеня дефектності

Ступінь неупорядкованості структури нановуглецевих каталізаторів оцінювався за відношенням інтенсивностей D та G смуг ($R = I_D/I_G$).

Було використано два підходи:

- відношення пікових інтенсивностей ($I_{D, peak}/I_{G, peak}$);
- відношення інтегральних площ (A_D / A_G), що є більш точним для зразків із значним уширенням ліній.

Зростання параметра I_D/I_G свідчить про збільшення концентрації дефектів, які є потенційними каталітично активними центрами в процесах зеленої хімії [60].

2.4. Додаткові методи дослідження

Для верифікації даних Раманівської спектроскопії використовуються також комплементарні методи.

- *Рентгенівська дифракція (XRD)*. Дозволяє визначити міжплощинну відстань та середній розмір кристалітів (областей когерентного розсіяння) за формулою Шеррера.
- *Елементний аналіз (OEA/XPS)*. Визначає точний хімічний склад (співвідношення C/O), що використовується для калібрування спектральних параметрів [61].

Описаний комплекс методів та аналітичних підходів дозволяє отримати інформацію про структурну організацію нановуглецевих каталізаторів, розрізнити типи дефектів та кількісно оцінити ступінь їх функціоналізації, що є необхідним для встановлення кореляцій "структура-властивість" у задачах зеленої хімії.

Висновки до розділу 2

Було сформовано методичну основу для подальшого встановлення структурних характеристик нановуглецевих каталізаторів, синтезованих для застосувань у зеленій хімії. Обґрунтовано вибір об'єктів дослідження як серії нановуглецевих матеріалів із високою питомою площею поверхні та наявністю поверхневих дефектів, що можуть проявлятися як потенційні активні центри каталізу.

Показано, що Раманівська спектроскопія виступає ключовим методом для кількісної оцінки структурної впорядкованості та дефектності sp^2 -вуглецевої матриці, оскільки вона забезпечує безпосередню інформацію про кристалічну організацію, тип гібридизації, природу дефектів і рівень функціоналізації. Поглиблено розглянуті фізичні чинники, що забезпечують високу чутливість методу до sp^2 -вуглецевих матеріалів, включаючи резонансний характер розсіяння та роль механізму подвійного резонансу у формуванні дефектних і дисперсійних смуг. Встановлено оптимальні інструментальні умови для реєстрації спектрів на конфокальному Раманівському мікроскопі з лазерним збудженням 532 нм, що супроводжується регулюванням потужності для запобігання лазерно-індукованим змінам, використанням мікрооб'єктивів $50\times$ і $100\times$ та налаштуванням часу накопичення для досягнення прийняттого співвідношення сигнал/шум.

Сформовані підходи до обробки експериментальних даних, які охоплюють попередню корекцію фонового сигналу, усунення флуоресценції та детальну багатокomпонентну деконволюцію спектра першого порядку. Обґрунтовано ефективність розширеної моделі розкладання спектрального контуру з урахуванням перекриття смуг у модифікованих зразках і визначено принципи вибору апроксимаційних профілів для вузьких кристалічних і широких аморфних компонентів. На основі параметрів після деконволюції (положення піків, інтегральні площі, ширина на піввисоті FWHM) запропоновано кількісні метрики структурного стану. Зокрема, обчислено відношення I_D/I_G та співвідношення

інтегральних площ A_D/A_G , де підвищення цих показників було інтерпретоване як свідчення збільшення концентрації дефектів, що вказує на зростання потенційної кількості каталітично активних центрів.

РОЗДІЛ 3. ОБҐРУНТУВАННЯ МЕТОДИК, УМОВ ЕКСПЕРИМЕНТУ ТА ВИБОРУ ОБ'ЄКТІВ ДОСЛІДЖЕННЯ

3.1. Використані реагенти, вихідні матеріали та апаратура

Основним об'єктом досліджень були багат шарові вуглецеві нанотрубки (ВНТ).

У даному дослідженні як каталізатор для синтезу вуглецевих нанотрубок було використано композиційний матеріал Ni/CaO. Каталізатор являє собою світло-сірий порошкоподібний продукт, одержаний у результаті термічної обробки прекурсорів на основі нітратів нікелю та кальцію з додаванням лимонної кислоти, що виконувала роль комплексоутворювача.

Для приготування каталізатора використовували кристалогідрати нітрату нікелю ($\text{Ni}(\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})$), нітрату кальцію ($\text{Ca}(\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})$), лимонну кислоту ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$) як комплексоутворювач, а також дистильовану воду як розчинник. Концентрація реагентів та співвідношення компонентів обирали відповідно до раніше розробленої на кафедрі методики синтезу системи Ni/CaO, яка забезпечує формування дисперсних частинок нікелю на оксидній матриці кальцію.

Як газові реагенти та середовище термообробки застосовували етилен C_2H_4 (чистота не нижче 99,5 %), водень H_2 , а також інертні гази гелій He та аргон Ar. Етилен використовували як вихідний реагент у процесі синтезу вуглецевих нанотрубок і як субстрат у модельній реакції гідрування. Водень слугував як відновне середовище при термообробці ВНТ та реагент у гідруванні етилену. Гелій і аргон застосовували як інертні гази-носії, що забезпечують видалення побічних продуктів та стабільність температурного режиму.

Термообробку каталізатора та синтез вуглецевих нанотрубок проводили в електричній трубчастій печі з кварцовою реакційною трубкою, усередині якої розміщувався кварцовий човник з каталізатором або ВНТ. Потік газів подавали через систему регулювання витрати та очисні колонки, нагріті до заданої температури. Каталітичні дослідження здійснювали в реакторі проточного типу з

хроматографічним контролем складу газової фази на виході. Для аналізу газових сумішей використовували газовий хроматограф з термокондуктометричним детектором, що дає змогу визначати вміст етилену та етану в широкому діапазоні концентрацій.

Схематичне зображення експериментальної установки, застосованої для термообробки вуглецевих нанотрубок і проведення досліджень, наведено на рисисунку 3.1. До складу установки входять джерела подачі газів, системи їх очищення та стабілізації витрати, електромагнітні запірні елементи, газорозподільна арматура, реактор із системою нагріву, фільтрувальний блок, вузол введення газових зразків, а також прилади контролю температурних режимів і газових потоків, включно з хроматографічною системою аналізу.

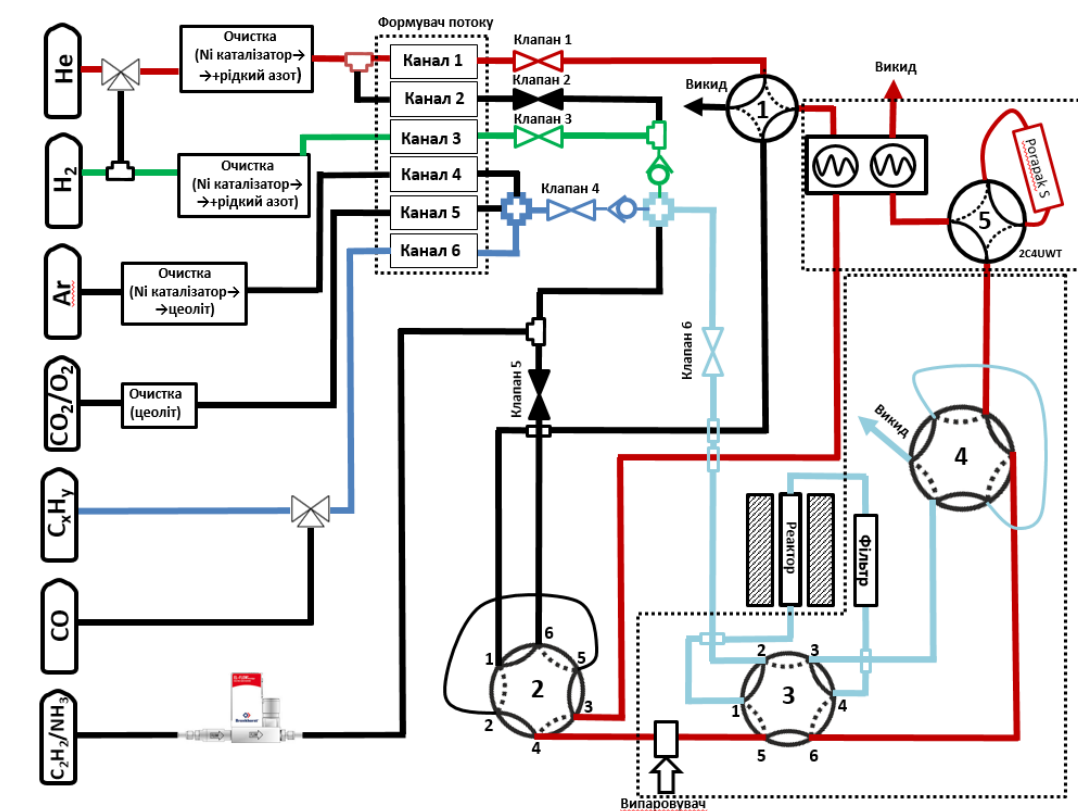


Рис. 3.1. Схематичне зображення лабораторної установки, призначеної для термообробки каталізаторів та їх подальшого хроматографічного аналізу. Цифрами на схемі позначено: 1 – двопозиційний кран, що забезпечує подачу гелію безпосередньо до хроматографа; 2 – двопозиційний кран для пропускання гелію через калібрувальну петлю; 3 – двопозиційний кран для спрямування

газової суміші водню та етилену через реактор; 4 – двопозиційний кран для подачі газової суміші водню та етилену через петлю; 5 – двопозиційний кран, призначений для пропускання газів через адсорбційний блок.

3.2. Синтез каталізатора Ni/CaO та багатошарових вуглецевих нанотрубок

Каталізатор Ni/CaO готували методом співосадження з водних розчинів нітратів нікелю та кальцію за участю лимонної кислоти як комплексоутворювача. Для цього у мірну колбу послідовно вносили розраховані кількості кристалогідратів $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ та $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, розчиняли їх у дистильованій воді й додавали розчин лимонної кислоти при інтенсивному перемішуванні. Отриманий розчин випаровували до утворення гомогенного гелю, який потім висушували при підвищеній температурі та прожарювали в повітрі до повного розкладу нітратів і формування оксидної матриці CaO з дисперсно розподіленими нікелевими сполуками. Після термічної обробки одержаний твердий залишок подрібнювали до порошку із середнім розміром частинок, придатним для завантаження в реактор.

Синтез багатошарових вуглецевих нанотрубок здійснювали шляхом розкладу етилену на Ni/CaO-каталізаторі в проточному кварцовому реакторі. 0,7 г каталізатора завантажували у кварцовий човник і розміщували у центральній ізотермічній зоні трубчастої печі. Після продування системи інертним газом реактор нагрівали до температури 700 °C, після чого через нього пропускали газову суміш, що містила етилен (75 мл/хв) та інертний газ. Тривалість синтезу підбирали так, щоб забезпечити формування суцільного шару вуглецевих нанотрубок на поверхні каталізатора при збереженні його механічної цілісності. По завершенні процесу синтезу (30 хв) реактор охолоджували до кімнатної температури в потоці інертного газу.

Одержані вуглецеві нанотрубки очищали від залишків каталізатора хімічним шляхом. Для цього порошок ВНТ обробляли водним розчином концентрованої азотної кислоти за температури кипіння протягом години, що забезпечувало розчинення металевих та оксидних компонентів Ni/CaO. Потім тверду фазу відфільтровували, ретельно промивали дистильованою водою до нейтрального рН фільтрату та висушували до сталої маси. Отриманий таким чином порошок ВНТ використовували як вихідний матеріал для подальшої термообробки та структурно-каталітичних досліджень.

3.3. Термообробка вуглецевих нанотрубок у відновній атмосфері водню

Для модифікації поверхні та внутрішньої структури вуглецевих нанотрубок проводили їх термообробку в атмосфері водню. Вихідний порошок ВНТ рівномірно розподіляли по кварцовому човнику, який поміщали у центральну частину реакційної трубки. Через реактор пропускали потік високочистого водню, попередньо пропущеного через очисні колонки, нагріті до температури 250 °C, з подальшим регулюванням витрати газу формувачем потоку. Температуру термообробки змінювали в інтервалі 300-800°C, а тривалість витримки становила 2 години для кожного режиму. Після закінчення стадії відновлення зразки охолоджували до кімнатної температури в потоці інертного газу. Термооброблені таким чином зразки позначали як CNT-350, CNT-700 та CNT-800 відповідно до температури відновлення у водні.

3.4. Термообробка вуглецевих нанотрубок в інертній атмосфері та послідовна інертно-відновна обробка

Додаткову модифікацію структури ВНТ здійснювали за рахунок термообробки в інертній атмосфері гелію та послідовної інертно-відновної обробки. На першій стадії порошок ВНТ завантажували у кварцовий човник та

витримували в потоці гелію при температурах 300-800°C протягом 2 годин. Гелій попередньо пропускали через очисні колонки для видалення домішок вологи та кисню. Після високотемпературної обробки в гелії реактор охолоджували до 200 °C, переводили газову систему на водень і здійснювали додаткову відновну обробку при 200°C протягом 1 години. Така послідовна обробка сприяє видаленню нестійких поверхневих функціональних груп, реорганізації графітоподібних доменів та формуванню активних центрів на дефектних ділянках стінок ВНТ. Зразки, одержані за описаною схемою, позначали як CNT-IH-300, CNT-IH-400, CNT-IH-500, CNT-IH-600, CNT-IH-700 та CNT-IH-800, де числовий індекс відповідає температурі високотемпературної обробки в атмосфері гелію.

3.5. Методика дослідження каталітичної активності в реакції гідрування етилену

Каталітичну активність вуглецевих нанотрубок оцінювали в реакції гідрування етилену до етану в проточному реакторі з фіксованим шаром каталізатора. У кварцовий човник вносили навішування порошку ВНТ, значення маси якої для кожного зразка обирали таким чином, щоб забезпечити порівнянність умов проведення реакції; маси наважок та відповідні їм параметри подачі реагентів. Після завантаження зразка реактор продували інертним газом, нагрівали до температури проведення реакції та переводили газову систему на реагентну суміш.

Як реагентну суміш застосовували двокомпонентний газовий потік, що складався з етилену та водню у мольному співвідношенні близько 10 % C_2H_4 до 90 % H_2 . Сумарну витрату газів регулювали в межах 20-100 мл/хв, що забезпечувало режим проточного реактора без помітних дифузійних обмежень. Температуру проведення реакції обирали в діапазоні 150-200°C залежно від типу попередньої термообробки зразка.

Склад газової фази на виході з реактора аналізували газовим хроматографом. Для кожного режиму роботи визначали вміст етилену та етану, на основі чого розраховували конверсію етилену X , швидкість його перетворення на одиницю маси каталізатора r_m та швидкість, нормовану на одиницю питомої поверхні r_{c2} .

$$X = \frac{\int(C_2H_6)}{\int(C_2H_4) + \int(C_2H_6)} \quad (3.1)$$

де, $\int(C_2H_6)$ – площа піку етану; $\int(C_2H_4)$ – площа піку етилену;

$$r_{c2} = \frac{r_m}{150 \cdot 10^6} \quad (3.2)$$

де, r_m – швидкість перетворення етилену на одиницю маси за одиницю часу, моль*с⁻¹*г⁻¹;

Для розрахунків використовували співвідношення, які враховують мольну долю витрати реагенту, концентрацію продукту в потоці та масу наважки каталізатора; алгебраїчні вирази відповідних залежностей наведено нижче (формули 3.3-3.6).

$$r_m = \frac{M \cdot V \cdot 10}{m} \quad (3.3)$$

де, M – мольна доля етану на виході, моль; v – швидкість потоку етилену, моль/с; m – маса наважки ВНТ, г.

Мольну долю етану M визначали за формулою:

$$M = \frac{2,24 \cdot X / 100}{22,4 - (2,24 \cdot X / 100)} \quad (3.4)$$

M – мольна доля етану на виході, моль.

Швидкість потоку етилену (v) визначали за формулою:

$$V = \frac{\Pi_{\Pi}}{10 \cdot 60 \cdot 22400} \quad (3.5)$$

де, Π_{Π} – початкова швидкість потоку, мл/хв.

Для зручності подальшого аналізу введено номенклатуру зразків, яка відображає умови їхньої термообробки. У таблиці 3.1 наведено позначення зразків та відповідні їм режими обробки.

Таблиця 3.1 – Перелік синтезованих зразків вуглецевих нанотрубок

Позначення зразка	Атмосфера обробки	Температурний режим	Короткий опис
CNT-350	H ₂	350 °C, 2 год	ВНТ, відновлені у водні при 350 °C
CNT-700	H ₂	700 °C, 2 год	ВНТ, відновлені у водні при 700 °C
CNT-800	H ₂	800 °C, 2 год	ВНТ, відновлені у водні при 800 °C
CNT-IH-300	He → H ₂	He: 300 °C, 2 год; H ₂ : 200 °C, 1 год	ВНТ після послідовної обробки в гелії та водні
CNT-IH-400	He → H ₂	He: 400 °C, 2 год; H ₂ : 200 °C, 1 год	ВНТ після послідовної обробки в гелії та водні
CNT-IH-500	He → H ₂	He: 500 °C, 2 год; H ₂ : 200 °C, 1 год	ВНТ після послідовної обробки в гелії та водні
CNT-IH-600	He → H ₂	He: 600 °C, 2 год; H ₂ : 200 °C, 1 год	ВНТ після послідовної обробки в гелії та водні
CNT-IH-700	He → H ₂	He: 700 °C, 2 год; H ₂ : 200 °C, 1 год	ВНТ після послідовної обробки в гелії та водні
CNT-IH-800	He → H ₂	He: 800 °C, 2 год; H ₂ : 200 °C, 1 год	ВНТ після послідовної обробки в гелії та водні

3.6. Методика раманівської спектроскопії та обробки спектрів

Структурні характеристики вуглецевих нанотрубок після різних режимів термообробки досліджували методом раманівської спектроскопії з використанням конфокального мікрораманівського спектрометра RENISHAW inVia (Renishaw plc, Велика Британія) (рисунок 3.1). Вимірювання проводили у стандартній зворотній (backscattering) геометрії через мікрооб'єктив з кратністю збільшення $\times 100$, що забезпечувало аналіз ділянки поверхні діаметром порядку кількох мікрометрів. Як джерело збудження застосовували лазер із довжиною хвилі 514 нм у поєднанні з notch-фільтром та дифракційною ґраткою з густиною 2400 штр/мм у видимому діапазоні. Зразки для вимірювань готували у вигляді сухого порошку, рівномірно розподіленого тонким шаром на чистому предметному склі без використання додаткових зв'язуючих речовин.

Сpektри реєстрували в діапазоні $100\text{--}1500\text{ см}^{-1}$ за шкалою зсуву Рамана, що охоплює область основних D- та G-смуг вуглецевих матеріалів, а також низькочастотні супутні моди. Крок дискретизації сигналу відповідав спектральній роздільній здатності близько 1 см^{-1} . Для кожної точки вимірювання час експозиції становив 12-15 с, при цьому виконували 15-20 послідовних накопичень сигналу з подальшим усередненням, що забезпечувало прийнятне відношення сигнал/шум без помітного локального перегріву зразка. Для кожного зразка реєстрували декілька спектрів у різних мікрообластях поверхні, після чого отримані криві усереднювали і використовували для подальшого аналізу.



Рисунок 3.1 – Конфокальний раманівський спектрометр для хімічної та структурної характеристики матеріалів

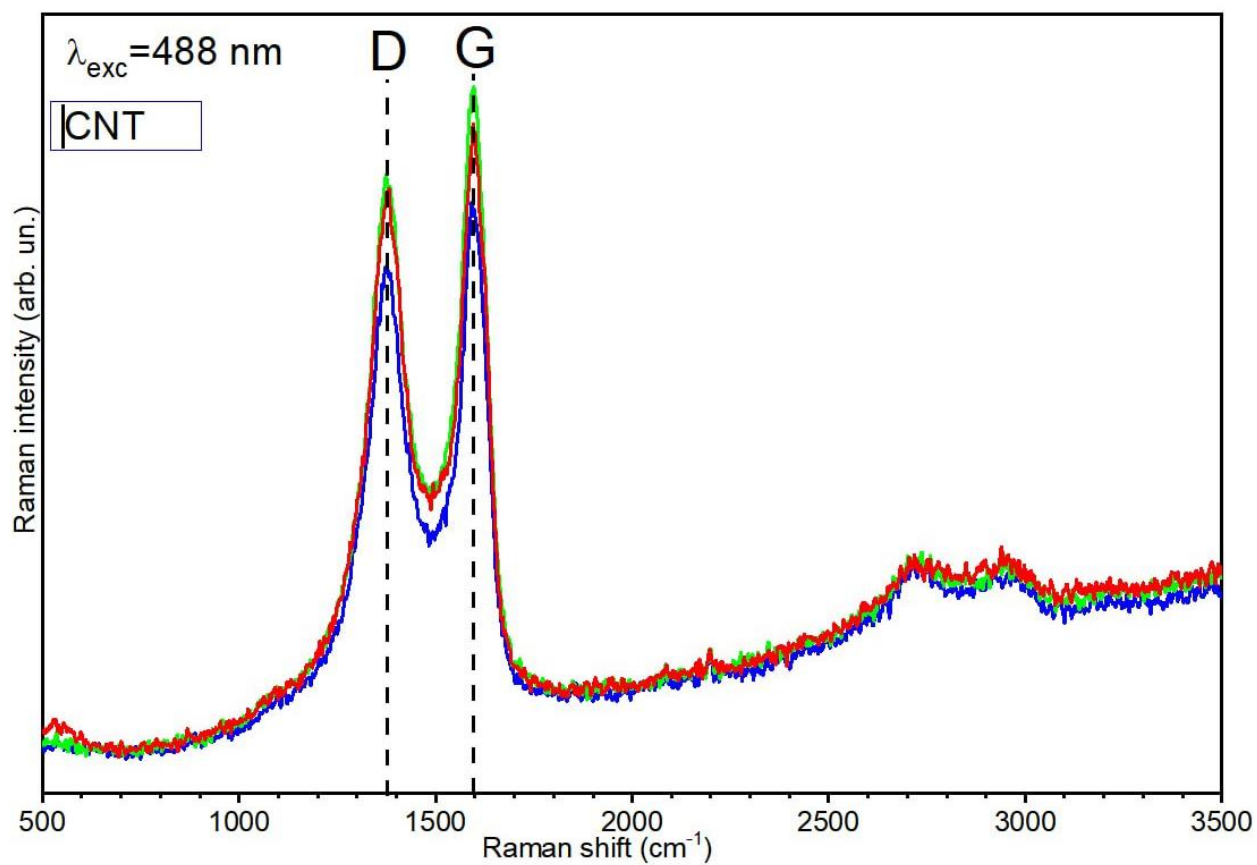


Рисунок 3.2 – Раманівський спектр зразка вуглецевих нанотрубок

Обробку раманівських спектрів здійснювали методом багатопікової апроксимації у програмному середовищі OriginPro з використанням симетричних гаусово-лоренцівських (Voigt) та лоренцівських функцій. У ділянці D-смуги (приблизно 1100-1500 cm^{-1}) виділяли центральну смугу D поблизу 1350 cm^{-1} та супутні компоненти, розташовані у лівій та правій частині спектра (D_l та D_r). Додатково на лівому схилі спектра враховували низькочастотні смуги, що описують внесок більш аморфних областей вуглецевої структури. У ділянці G-смуги (близько 1500-1650 cm^{-1}) апроксимацію здійснювали за допомогою однієї або декількох компонент, які відповідають коливанням sp^2 -зв'язаних атомів вуглецю в графітоподібних доменах різного ступеня впорядкованості. За результатами апроксимації визначали положення максимумів, напівширину на половині висоти (FWHM) та площу окремих смуг. На основі цих параметрів розраховували відношення інтегральних інтенсивностей ID/IG та інші спектральні індикатори, що характеризують ступінь дефектності, розмір упорядкованих доменів і ступінь графітизації вуглецевих нанотрубок.

Результати деконволюції досліджуваних зразків наведені в Додатку Б.

3.7. Загальні особливості раманівських спектрів досліджених зразків

Раманівські спектри першого порядку для досліджених зразків вуглецевих нанотрубок характеризуються наявністю комплексу зв'язків у ділянці 1000-1700 cm^{-1} , які відповідають коливанням sp^2 -зв'язаних атомів вуглецю в доменах різного ступеня впорядкованості. У низькочастотному діапазоні спектра (близько 1100-1500 cm^{-1}) простежується так звана D-область, яка включає дефектно-індуковану смугу D (приблизно 1340-1350 cm^{-1}), а також додаткові компоненти, взаємопов'язані з більш аморфними або дефектними зонами карбонової структури. Високочастотний діапазон спектра (1500-1650 cm^{-1}) формує G-область, де головну роль відіграє смуга G, характерна для ідеальних графітоподібних доменів. Окрім того, тут присутні додаткові компоненти, що пов'язані з

доменами, які мають різний рівень впорядкованості та локальні напруження у кристалічній ґратці.

Після термічної обробки у водні та послідовної обробки в інертній атмосфері з наступним відновленням усі зразки демонструють виражений комплекс D-G зв'язків з різною інтенсивністю та формою зв'язків. Це свідчить про важливу роль структурних дефектів, краєвих ділянок і нанокристалітів різних розмірів у формуванні загальної загальної реакції Рамана. Зміни у відносних площах області D і G, а також у положеннях і ширині основних смуг при варіації умов термообробки виступають чутливими індикаторами структурної зміни карбонової структури.

3.8. Параметри деконволюції D- та G-областей раманівських спектрів

Для визначення кількісних характеристик структурного стану вуглецевих нанотрубок було виконано багатопікову деконволюцію спектрів Рамана у діапазоні 1000-1650 cm^{-1} . У кожному спектрі зона D (1100-1500 cm^{-1}) моделювалася як сума кількох компонентів, зокрема основного піка D в інтервалі 1340-1350 cm^{-1} та додаткових піків у діапазоні 1200-1450 cm^{-1} , що характеризують внесок дефектних і аморфних доменів. Зона G (1500-1650 cm^{-1}) була описана як комбінація однієї або кількох смуг у межах 1560-1620 cm^{-1} , пов'язаних із коливаннями sp^2 -доменів, які мають різні ступені впорядкованості та локального напруження.

Для кожного зразка визначали сумарні площі D- та G-областей (A_D та A_G). Співвідношення інтегральних інтенсивностей $I_D/I_G = A_D/A_G$ разом із положенням і шириною основної смуги G слугувало набором спектральних показників для оцінки щільності дефектів, розміру та впорядкованості sp^2 -доменів, а також ступеня графітизації нанотрубок.

Узагальнені параметри деконволюції досліджуваних зразків наведено в таблиці 3.2.

Таблиця 3.2 – Підсумкові значення I_D/I_G , положення $\nu(G)$ та $FWHM(G)$, отримані для серій CNT (H_2) та CNT-IH ($He \rightarrow H_2$)

Зразок	Серія	T, °C	I_D/I_G	$\nu(G)$, cm^{-1}	$FWHM(G)$, cm^{-1}
CNT-350	CNT (H_2)	350	1.241	1586.00	44.21
CNT-700	CNT (H_2)	700	1.254	1578.84	32.16
CNT-800	CNT (H_2)	800	1.019	1565.00	45.00
CNT-IH-200	CNT-IH ($He \rightarrow H_2$)	200	1.089	1570.40	36.03
CNT-IH-300	CNT-IH ($He \rightarrow H_2$)	300	1.024	1573.36	37.23
CNT-IH-400	CNT-IH ($He \rightarrow H_2$)	400	0.954	1570.72	35.23
CNT-IH-500	CNT-IH ($He \rightarrow H_2$)	500	0.939	1573.87	36.47
CNT-IH-600	CNT-IH ($He \rightarrow H_2$)	600	1.138	1584.91	50.63
CNT-IH-700	CNT-IH ($He \rightarrow H_2$)	700	0.739	1571.01	36.88
CNT-IH-800	CNT-IH ($He \rightarrow H_2$)	800	0.740	1572.63	36.65

Параметри I_D/I_G , $\nu(G)$ та $FWHM(G)$, зведені в табл. 3.2, далі подано графічно для наочного порівняння впливу температури термообробки на дефектність і ступінь впорядкованості ВНТ.

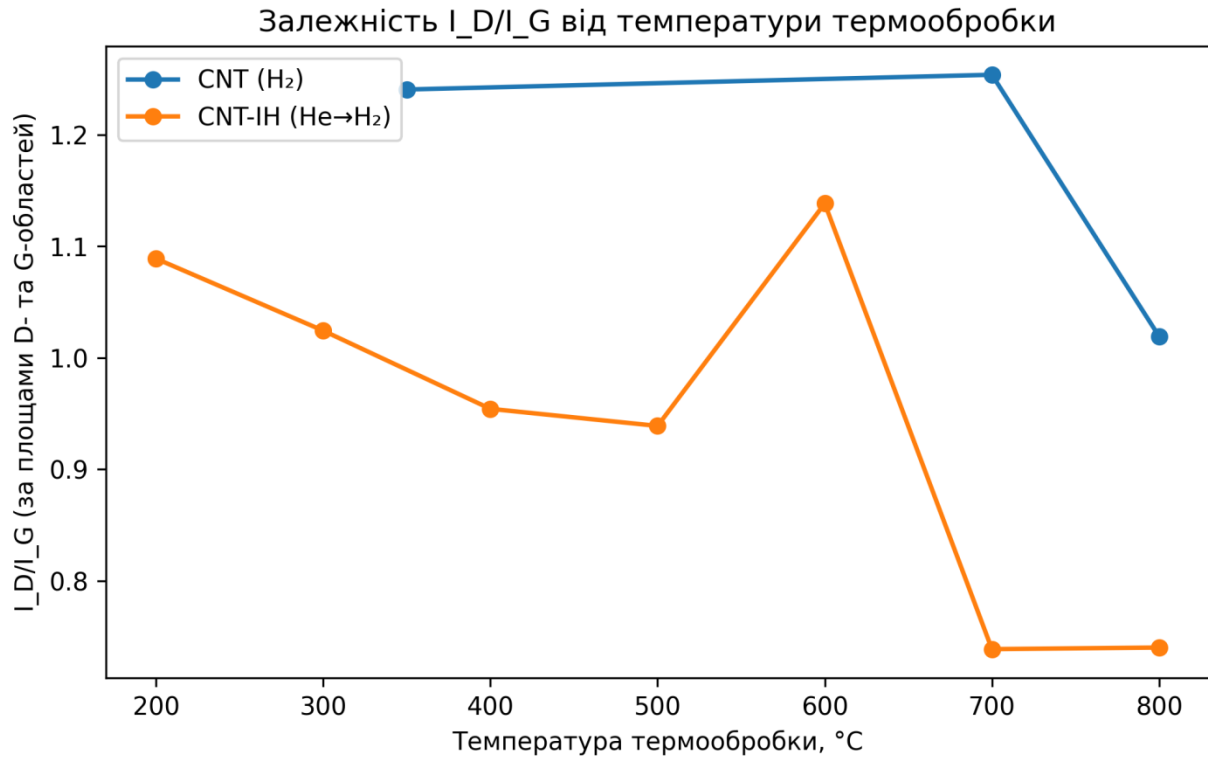


Рисунок 3.3 – Залежність I_D/I_G від температури термообробки для серій CNT (H₂) та CNT-IH (He→H₂) (розрахунок за площами D- та G-областей).

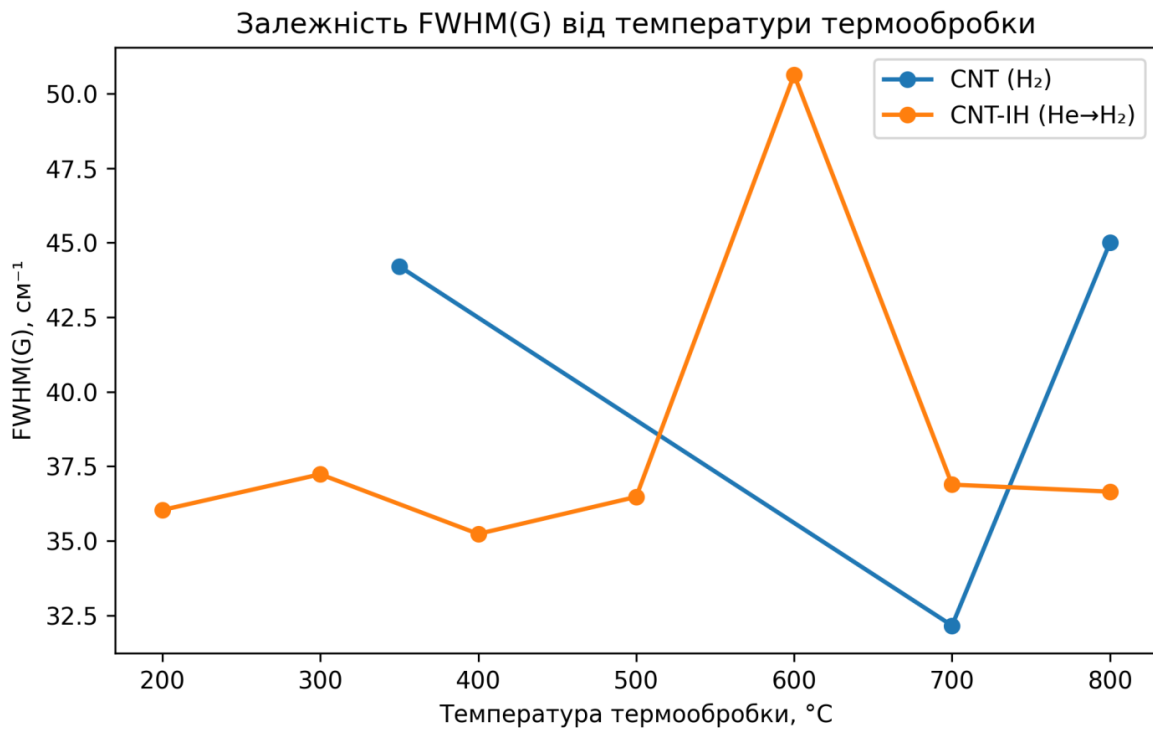


Рисунок 3.4 – Залежність FWHM(G) від температури термообробки для серій CNT (H₂) та CNT-IH (He→H₂).

3.9. Вплив умов термообробки на параметри D- та G-зв'язків

Аналіз отриманих параметрів показує, що для серії зразків, відновлених виключно у водневому середовищі (серія CNT-350, CNT-700, CNT-800), співвідношення ID/IG перевищує одиничне значення і знаходиться в межах 1,02-1,25.

Це підкреслює, що дані зразки виявляють виражену дефектність: інтегральна площа області D дещо перевищує аналогічний параметр для області G. Такий результат свідчить про присутність значної кількості неідеальних графітових ділянок або аморфного вуглецю.

Найвищі значення ID/IG спостерігаються для зразків CNT-350 та CNT-700, що свідчить про підвищену частку структурних дефектів і/або аморфних компонентів у порівнянні з більш високотемпературним зразком CNT-800, для якого ID/IG наближається до одиниці. Разом із тим положення максимальної G-смуги для цієї серії зразків залишається в типовому для графітоподібних структур діапазоні 1565-1586 cm^{-1} , тоді як ширина FWHM(G) зменшується зі зростанням температури обробки, що є ознакою певного підвищення ступеня впорядкованості sp^2 -доменів.

Для серії зразків після послідовної інертно-відновної обробки (CNT-ІН-200-800) значення ID/IG також концентруються навколо одиниці, проте демонструють більш складну, немонотонну залежність від температури високотемпературної стадії в інертному середовищі (He). Відносно високі значення ID/IG ($\sim 1,09$ - $1,14$) зареєстровані для зразків CNT-ІН-200 та CNT-ІН-600 можуть бути пов'язані з формуванням значної кількості дефектних ділянок і/або появою додаткових аморфних компонентів на ранніх або надто інтенсивних стадіях термообробки. Натомість для зразків CNT-ІН-700 та CNT-ІН-800 спостерігається зменшення значення ID/IG до $\sim 0,74$, може бути свідченням домінування процесів усунення дефектів і графітизації стінок нанотрубок на високотемпературному етапі обробки.

Водночас положення основної G-смуги для зразків CNT-IH-300-500 залишається в діапазоні, $1570\text{-}1585\text{ см}^{-1}$, тоді як ширина FWHM(G) помітно змінюється залежно від умов термічної обробки. Зразкам з нижчим значенням I_D/I_G (наприклад, CNT-IH-700 та CNT-IH-800) властиве менше значення FWHM(G) , що свідчить про вищий ступінь впорядкування sp^2 -доменів. Натомість розширення області G у зразках, таких як CNT-IH-600, вказує на наявність ширшого розподілу локальних структурних деформацій і неоднорідності розмірів доменів, характерних для структур із більшою кількістю дефектів.

Таким чином, багатопікова деконволюція раманівських спектрів дозволяє кількісно простежити зміни структурного стану вуглецевих нанотрубок багатопікова деконволюція спектрів. Отримані параметри ID/IG, положення та ширини G-зв'язку є чутливими індикаторами зміни дефектності й ступеня графітизації та можуть бути безпосередньо зіставлені з каталітичною активністю досліджених зразків у реакції гідрування етилену.

3.10. Обчислення спектральних параметрів

Для визначення кількісних характеристик структурного стану вуглецевих нанотрубок на основі результатів деконволюції раманівських спектрів розраховували сукупні площі зв'язків у D- та G-областях та їх співвідношення. Інтегральні площі піків, отримані в процесі підгонки в OriginPro (Area Intg), слугували базовими величинами для кожного окремого спектра.

Загальна площа D-області A_D визначали визначалася як сума площ усіх компонентів із центрами, що розташовані в діапазоні $1100\text{-}1500\text{ см}^{-1}$:

$$A_D = \sum A_i(D),$$

де $A_i(D)$ – площа i -ої пікової компоненти в D-області.

Аналогічно сумарну площу G-області A_G обчислювали як суму площ компонент, центри яких розташовані в діапазоні $1500\text{-}1650\text{ см}^{-1}$:

$$A_G = \sum A_j(G),$$

де $A_j(G)$ – площа j -ої пікової компоненти в G -області.

Відношення інтенсивностей D - та G -областей визначали як відношення відповідних сумарних площ:

$$I_D/I_G = A_D / A_G.$$

У ряді випадків для оцінки внеску дефектних областей використовували також нормовану частку площі D -зв'язків:

$$f_D = A_D / (A_D + A_G),$$

що дозволяє порівнювати зразки з різним загальним рівнем сигналу.

Положення основного G -зв'язку $\nu(G)$ для кожного зразка визначалося як центр тієї компоненти, яка мала максимальну площу серед усіх піків у діапазоні $1560\text{--}1595\text{ см}^{-1}$. Відповідну напівширину на половині висоти $\text{FWHM}(G)$ прийнято рівною параметру FWHM цієї ж компоненти, отриманому під час апроксимації у OriginPro. Таким чином, $\nu(G)$ та $\text{FWHM}(G)$ виступають узагальненими характеристиками положення та ступеня уширення G -області для кожного зразка.

Для нановуглецевих каталізаторів у зеленій хімії структурні параметри мають прикладне значення, оскільки визначають баланс між кількістю активних центрів і стабільністю матеріалу. Підвищене I_D/I_G відображає більшу концентрацію дефектів (країв доменів, вакансій, порушень шестивуглецевої сітки), які можуть виступати як місця адсорбції та активації молекул або як точки закріплення каталізаторних наночастинок. Однак надлишкова дефектність і значне уширення G -смуги (високе $\text{FWHM}(G)$) часто корелюють із нижчою однорідністю та потенційною деградацією в реакційних умовах. Відповідно, для практичного використання доцільно розрізняти два оптимізаційні сценарії: якщо пріоритетом є максимальна стабільність і електронна провідність каркаса, раціональними є зразки з мінімальним I_D/I_G (переважно CNT-IH-700/800). Якщо ж пріоритетом є збереження достатньої кількості реакційно-активних дефектних центрів при прийнятній однорідності, найкращий компроміс демонструють зразки CNT-IH-400/500.

3.11. Перспективи застосування результатів аналізу у зеленій хімії

У практичному сенсі ВНТ найчастіше є не прямим замінником активного металу, а більш ефективною вуглецевою матрицею або носієм, який дозволяє замінити традиційні носії та зменшити завантаження дорогих компонентів. Зокрема, у процесах гідрування органічних сполук широко застосовують системи Pd/C та Pt/C на активованому вугіллі; у таких каталізаторах ВНТ можуть замінювати активоване вугілля як носій, підвищуючи дисперсність металу і стійкість до агрегації, що потенційно дає змогу зменшити витрату Pd або Pt при збереженні активності. Аналогічно, для нікелевих систем гідрування, де як носії традиційно використовують Al_2O_3 або SiO_2 ($\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3$, Ni/SiO_2), ВНТ можуть виступати альтернативним електропровідним та хімічно інертним носієм, спрощуючи регенерацію каталізатора та підвищуючи його довговічність. У більш широкому контексті зеленої енергетики та електрокаталізу перспективним напрямом є метал-вільні або малометалеві каталізатори на основі дефектних/легованих ВНТ (наприклад, N-легованих), які розглядають як альтернативу платиновим матеріалам у реакціях відновлення кисню.

Перспективними є також замінники традиційних нікелевих каталізаторів гідрування на оксидних носіях. ВНТ, будучи електропровідними та хімічно стійкими, можуть слугувати альтернативним носієм для нікелю, спрощуючи регенерацію каталізатора та підвищуючи його довговічність. Наприклад, 20 % $\text{Ni}/\text{ВНТ}$, одержаний просоченням, ефективно гідрує фенол до циклогексанолу в умовах переносу водню (без подачі газоподібного H_2). У цьому процесі ізопропанол виступає донором водню, що усуває потребу в високому тиску газового водню – важлива перевага з точки зору безпеки та «зелених» принципів. Каталізатор $\text{Ni}/\text{ВНТ}$ показав практично повне перетворення фенолу при 220°C за 60 хв та може багаторазово використовуватися: його магнітні властивості (зумовлені Ni) дозволяють легко відокремлювати частинки і повертати їх в процес без суттєвої втрати активності щонайменше в чотирьох циклах [58]. Таким чином, нанотрубки як носій для Ni не лише забезпечують ефективність гідрування при

помірних умовах, але й сприяють багаторазовому використанню каталізатора, зменшуючи кількість відходів і витрати на каталізатор.

ВНТ у електрокаталізі для зеленої енергетики

В електрохімічних процесах, таких як реакція відновлення кисню у паливних елементах, традиційно використовуються платинові каталізатори, що є дорогими та чутливими до отруєння (наприклад, оксидом вуглецю). Вуглецеві наноматеріали відкривають шлях до здешевлення й підвищення стійкості електрокаталізаторів. Зокрема, N-леговані вуглецеві нанотрубки здатні каталізувати реакція відновлення кисню без участі металів, демонструючи активність, порівнянну чи навіть вищу за Pt/C в лужних середовищах. У дослідженнях було доведено, що вертикально вирівняні N-доповані ВНТ забезпечують більш позитивний потенціал початку і більшу густину струму в реакції відновлення O_2 , ніж комерційний платиновий каталізатор на вуглеці. Більше того, азот-доповані ВНТ виявилися значно стабільнішими: на відміну від Pt, їх електрокаталітична активність практично не деградує в присутності CO або метанолу. Висока стійкість до отруєння та відсутність дорогоцінних компонентів робить такі метал-вільні каталізатори на основі ВНТ надзвичайно привабливими для зелених енергетичних технологій (паливні елементи, метало-повітряні батареї тощо) [59]. Окрім дефектні або гетероатом-леговані ВНТ успішно застосовують і в інших електрохімічних реакціях – наприклад, у реакції виділення водню та окиснення води – де вони слугують або каталізаторами, або струмопідводними матрицями для нанесення малих кількостей недорогоцінних металів (Co, Fe, Ni та ін.). Загалом, інтеграція ВНТ в електрокаталітичні системи дає змогу знизити залежність від платини та інших критичних матеріалів, одночасно підвищуючи довготривалу продуктивність і відповідність принципам сталого розвитку.

ВНТ у фотокаталізі та фотоокисненні

Фотокаталітичне окиснення забруднень на композитах TiO_2 /ВНТ. Одним із підходів «зеленої» хімії є використання сонячного світла для проведення окисно-відновних реакцій, зокрема для очищення води та повітря від органічних забрудників. Нанокompозитні каталізатори на основі діоксиду титану, допованого

або підтриманого на ВНТ, продемонстрували підвищену ефективність фотоокиснення порівняно з чистим TiO_2 . Вуглецеві нанотрубки відіграють роль електронного провідника і «резервуару» для електронів, який запобігає рекомбінації фотогенерованих електрон-діркових пар. За рахунок утворення на інтерфейсі TiO_2 –CNT так званого бар'єру Шотткі, електрони збудженого TiO_2 швидко перетікають на графітоподібну поверхню ВНТ, накопичуються там і не рекомбінують з дірками. Це дозволяє більшій кількості носіїв заряду брати участь у реакціях окиснення органічних молекул. Наприклад, показано, що нанесення коротких одностінних нанотрубок на наночастинки TiO_2 суттєво подовжує час життя зарядів та підвищує швидкість розкладання летких органічних сполук (ацетальдегіду) у газовій фазі порівняно з чистим TiO_2 . Подібні композити також ефективно деградують органічні барвники у водних розчинах під дією УФ та видимого світла, демонструючи вищі ступені очистки за менший час, ніж оксид титану без ВНТ. Важливо, що нанотрубки не лише підвищують фотоактивність завдяки ефективному розділенню зарядів, але й покращують адсорбцію органіки на каталізаторі, оскільки гідрофобна поверхня ВНТ добре взаємодіє з багатьма органічними забрудниками [58]. Отже, поєднання напівпровідникових фотокаталізаторів з ВНТ дозволяє розробляти більш дієві процеси фотоокиснення для очищення довкілля, які відповідають принципам енергозбереження та відсутності токсичних реагентів.

ВНТ у каталітичному перетворенні CO_2

Каталітичне гідрування CO_2 на нанотрубкових каталізаторах. Перетворення двоокису вуглецю на корисні продукти (паливо чи хімічну сировину) – одна з центральних задач зеленої хімії у контексті боротьби зі зміною клімату. Вуглецеві нанотрубки успішно застосовують як компоненти каталізаторів для гідрування CO_2 воднем у метанол, вуглеводні та інші сполуки. Зокрема, розроблено каталізатор Pd-ZnO/VNT для синтезу метанолу з CO_2 , який продемонстрував високу активність при помірних умовах. Також перспективними є залізо- або кобальтвмісні каталізатори на ВНТ для реакції Фішера–Тропша з CO_2 : додавання нанотрубок як носія впливає на розподіл продуктів, зміщуючи селективність в бік

цінних олефінів і важчих вуглеводнів. Так, показано, що за наявності одностінних ВНТ у залізо-калієвому каталізаторі селективність утворення CO_5^+ олефінів досягає $\sim 40\%$, тоді як на багатошарових ВНТ більше утворюється легких CO_2 – CO_4 олефінів. Одночасно каталізатор на одностінних ВНТ дає значно менше побічного метану та CO , що пояснюється сильнішою взаємодією вигнутих графенових стінок SWNT з олефіновими молекулами (запобігаючи їх подальшому гідруванню). Оскільки ВНТ хімічно інертні, вони не взаємодіють з активними металевими центрами, що дозволяє зберігати активну фазу у карбідному стані, потрібному для ефективного відновлення CO_2 до вуглеводнів. В цілому, вуглецеві наноструктури розглядаються як багатообіцяючі носії для промислового каталізу перетворення CO_2 , оскільки вони термічно стійкі та не призводять до утворення небезпечних відходів, на відміну від деяких оксидних носіїв [60].

Електрокаталітичне відновлення CO_2 на ВНТ-матеріалах.

Іншим підходом є електрохімічне перетворення CO_2 у присутності поновлюваної електроенергії – наприклад, електровідновлення до монооксиду вуглецю, мурашиної кислоти, вуглеводнів чи спиртів. У цій галузі вуглецеві нанотрубки виступають ключовим матеріалом як самостійні метал-вільні каталізатори, так і провідні матриці для розподілу одиночних атомів або нанокластерів металів. Азот-леговані ВНТ здатні адсорбувати та активувати молекули CO_2 на дефектних сайтах (пиридинових N) і вибірково відновлювати їх до CO при порівняно низьких перенапругах. Модифікація поверхні нанотрубок полімерними шарами або сполуками (наприклад, поліетиленіміном) дозволяє стабілізувати проміжні види ($^*\text{COO}^-$) і спрямувати реакцію до утворення формату або мурашиної кислоти навіть при незначному перенапруженні. Додавання перехідних металів до складу ВНТ приводить до утворення композиційних каталізаторів з покращеною продуктивністю. Зокрема, нанотрубки, доповані азотом, з осадженими атомарними або нанокластерними центрами Ni, Co, Fe демонструють високі швидкості електровідновлення CO_2 . Такий успіх пов'язаний із синергією між наночастинками металу та допованим вуглецем: нанотрубки забезпечують високий струмоперенос і розподілення активних центрів, а

присутність металу змінює електронну структуру сусідніх атомів N і C, посилюючи адсорбцію ключових проміжних (наприклад, *COOH) і полегшуючи подальше перетворення до продуктів. В цілому, нанотрубкові матеріали в електрокаталізі CO₂ дозволяють отримати ефективні, селективні й стабільні електроди для перетворення парникового газу на цінні речовини, що є важливим кроком до вуглецево-нейтральних технологій [61].

Процеси піролізу відходів пластиків

Вуглецеві нанотрубки є перспективними матеріалами для застосування в процесах піролізу відходів пластиків у контексті зеленої хімії та циркулярної економіки. На відміну від традиційних металовмісних каталізаторів (Ni-, Co-, Fe-вмісних систем), активність яких у піролізі полімерів часто супроводжується інтенсивним коксоутворенням і швидкою дезактивацією, ВНТ демонструють підвищену стійкість до вуглецювання поверхні. Це зумовлено їхньою стабільною sp²-вуглецевою матрицею та високою термічною стійкістю, що дозволяє уникати формування суцільної пасивуючої вуглецевої плівки, характерної для металевих активних центрів.

У процесах термокаталічної переробки полімерних відходів, таких як поліетилен, поліпропілен або полістирол, на поверхні металовмісних каталізаторів неминуче накопичується кокс, який блокує активні центри та вимагає періодичної регенерації шляхом окиснювального випалювання. Така регенерація супроводжується утворенням значних кількостей CO₂, що знижує екологічну ефективність процесу та збільшує його вуглецевий слід. У випадку використання вуглецевих нанотрубок як каталізаторів або функціональних каталізаторних носіїв, інтенсивність коксоутворення є значно меншою, а сама структура матеріалу менш чутлива до поверхневої карбонізації.

Крім того, дефектні ділянки та крайові сайти ВНТ можуть виступати активними центрами для ініціювання розщеплення C–C зв'язків у полімерних ланцюгах, сприяючи селективному утворенню легких вуглеводнів та ароматичних сполук без необхідності використання металевих компонентів. Це відкриває можливості для розроблення безметалевих або малометалевих каталізаторів

піролізу, які характеризуються підвищеною довговічністю, зниженими викидами CO₂ на стадії регенерації та кращою відповідністю принципам зеленої хімії.

Висновки до розділу 3

Проведений Raman-аналіз з використанням багатопікової деконволюції підтвердив, що режим термообробки істотно впливає на дефектність і ступінь впорядкованості sp²-матриці вуглецевих нанотрубок. Для зразків серії CNT (H₂) значення I_D/I_G залишаються високими і становлять 1.019-1.254; зокрема, для CNT-350 I_D/I_G = 1.241 при FWHM(G) = 44.21 см⁻¹, тоді як для CNT-700 I_D/I_G = 1.254 при найвузчій G-смузі FWHM(G) = 32.16 см⁻¹. Високотемпературна воднева обробка до 800 °C знижує дефектність до I_D/I_G = 1.019, однак супроводжується відносно широкою G-смугою (FWHM(G) = 45.00 см⁻¹), що свідчить про збереження структурної неоднорідності.

Показано, що зразки, відновлені виключно у водневому середовищі (серія CNT (H₂)), характеризуються підвищеною дефектністю (I_D/I_G = 1,02–1,25). Зокрема, для CNT-350 та CNT-700 значення I_D/I_G перевищують 1,24, що свідчить про значну частку дефектних та аморфних ділянок. Водночас високотемпературна воднева обробка (CNT-800) призводить до зниження I_D/I_G до 1,02, однак супроводжується уширенням G-смути (FWHM(G) ≈ 45 см⁻¹), що вказує на збереження структурної неоднорідності.

Подальше підвищення температури інертної стадії до 700–800 °C приводить до формування найбільш впорядкованої графітоподібної структури. Для зразків CNT-ІН-700 та CNT-ІН-800 значення I_D/I_G зменшуються до ≈0,74 при відносно вузькій G-смузі (FWHM(G) ≈ 36–37 см⁻¹), що свідчить про мінімальну дефектність та високу однорідність sp²-матриці. Такі зразки доцільно розглядати як оптимальні у процесах, де пріоритетом є довговічність каталізатора, електронна провідність та стійкість до дезактивації.

Найбільш керований структурний стан ВНТ досягається за умов послідовної інертно-відновної обробки (серія CNT-ІН, He→H₂). У температурному діапазоні 400–500 °C сформовано оптимальне співвідношення

між кількістю дефектних центрів та впорядкованістю sp^2 -каркаса. Для зразків CNT-IH-400 та CNT-IH-500 отримано $I_{D/I_G} = 0,954$ та $0,939$ відповідно при $FWHM(G) \approx 35\text{--}36 \text{ см}^{-1}$. Такі параметри є найбільш сприятливими для каталітичних застосувань, оскільки забезпечують наявність активних центрів адсорбції за одночасної структурної стабільності матеріалу. Аномальні значення, отримані для зразка CNT-IH-600 ($I_{D/I_G} = 1,138$; $FWHM(G) = 50,63 \text{ см}^{-1}$), імовірно пов'язані з експериментальною похибкою, зумовленою локальною неоднорідністю зразка, особливостями фокусування лазера або наявністю поверхневих домішок. Це вимагає обережної інтерпретації та додаткової верифікації результатів.

У контексті потреб зеленої хімії отримані дані дозволяють сформулювати практичний висновок: якщо метою є баланс між активністю і стабільністю, найбільш доцільними є режими двостадійної обробки при $400\text{--}500 \text{ }^\circ\text{C}$ ($I_{D/I_G} \approx 0,94\text{--}0,95$; $FWHM(G) \approx 35\text{--}36 \text{ см}^{-1}$). Якщо ж пріоритетом є максимальна структурна впорядкованість і довговічність каталізатора, оптимальними є зразки після обробки при $700\text{--}800 \text{ }^\circ\text{C}$ ($I_{D/I_G} \approx 0,739\text{--}0,740$; $FWHM(G) \approx 36\text{--}37 \text{ см}^{-1}$).

Отримані структурні параметри мають безпосереднє прикладне значення для потреб зеленої хімії. Зокрема, ВНТ із контрольованою дефектністю можуть ефективно використовуватися як метал-вільні каталізатори або як носії активних фаз у реакціях гідрування, електрокаталізу, фотокаталізу та перетворення CO_2 . Окремо слід відзначити перспективність ВНТ у процесах піролізу відходів пластиків. На відміну від традиційних металовмісних каталізаторів, які швидко дезактивуються внаслідок коксоутворення та потребують окиснювальної регенерації з утворенням CO_2 , вуглецеві нанотрубки демонструють високу стійкість до вуглецювання завдяки стабільній sp^2 -матриці. Це дозволяє зменшити частоту регенерації, знизити викиди CO_2 та підвищити екологічну ефективність процесу переробки полімерних відходів.

РОЗДІЛ 4. РОЗРОБЛЕННЯ СТАРТАП-ПРОЄКТУ

4.1 Опис ідеї проекту

Стартап-проект BioCatalux спрямований на розробку та впровадження інноваційної технології екологічного синтезу біопластиків на основі нановуглецевих структур із іммобілізованими біокаталізаторами.

Актуальність проекту відповідає кільком ключовим глобальним тенденціям: стрімкому збільшенню споживання полімерних матеріалів, посиленню регуляторного тиску щодо скорочення пластикових відходів і декарбонізації хімічної промисловості, а також переходу на відновлювану сировинну базу. Традиційні технології виробництва масових полімерів, таких як поліетилен чи поліпропілен, базуються на енергоємних нафтохімічних процесах, які супроводжуються високими викидами парникових газів, використанням токсичних розчинників і металовмісних каталізаторів. Ці проблеми вимагають нових технологічних рішень, що дозволять отримувати функціональні біополімери за м'яких умов із біологічних джерел.

Основна ідея проекту полягає у створенні наноструктурованих вуглецевих носіїв із закріпленими ферментами, які виконують роль високоселективних біокаталізаторів для синтезу біопластиків із відновлюваних мономерів. Наноструктури, такі як модифіковані вуглецеві нанотрубки, графенові матеріали й мезопористий вуглець, забезпечують велику питому поверхню, контрольовану пористість і стабільне мікрооточення для ферментів. Це підвищує їхню активність і довговічність у порівнянні з традиційними гомогенними біокаталізаторами. Іммобілізовані ферменти каталізують реакції формування полімерного ланцюга (поліестерифікація, поліуретанування тощо) при низьких температурах, у водних або малотоксичних розчинниках і з мінімальним утворенням побічних продуктів. Такий підхід дозволяє суттєво знизити енергоспоживання, відмовитися від важких металів і скоротити токсичний вплив на довкілля.

Комерціалізація стартап-проєкту BioCatalux передбачає поетапне просування технології від лабораторної розробки до промислового застосування з орієнтацією на підприємства, які зацікавлені у переході до екологічно орієнтованого полімерного виробництва. На початковому етапі планується створення пілотної виробничої лінії для випуску обмежених партій біокаталізаторів та тестових зразків біополімерів, що дасть змогу підтвердити технологічну ефективність, отримати сертифікацію та забезпечити демонстраційні випробування на підприємствах харчової, фармацевтичної, пакувальної та хімічної промисловості.

У подальшому передбачається масштабування проєкту, зокрема запуск серійного виробництва наноструктурованих біокаталізаторів з їх наступним постачанням промисловим виробникам полімерної продукції. Для компаній, що бажатимуть інтегрувати цю технологію у власні виробничі процеси, буде запропоновано модель ліцензування інтелектуальної власності. Вона включатиме технічний супровід, інжинірингові послуги, навчання персоналу та адаптацію технологій до специфічних особливостей використовуваної сировини.

У середньостроковій перспективі можлива організація спільних виробничих потужностей чи контрактного виробництва біопластиків відповідно до потреб корпоративних замовників. Це дозволить мінімізувати їхні капітальні витрати та прискорити вихід готової продукції на ринок. Таким чином, комерціалізація проєкту базується не лише на реалізації матеріалів, а й на створенні комплексної технологічної платформи. вона сприятиме формуванню довгострокових партнерських відносин, забезпечить стаке зростання та стимулюватиме трансформацію полімерної галузі у напрямку декарбонізації та циркулярної економіки.

Зміст ідеї стартап-проєкту наведено в таблиці 4.1.

Таблиця 4.1. Опис ідеї стартап-проєкту

Зміст ідеї	Напрямки	Вигоди для користувача
------------	----------	------------------------

	застосування	
Розробка нановуглецевих структур з іммобілізованими біокаталізаторами (ферментами) для зеленого синтезу біопластиків. Технологія забезпечує значне зниження токсичних відходів, скорочення енергоспоживання та підвищення ефективності ферментативного каталізу.	1. Зелена хімія – екотехнології синтезу біополімерів.	• Екологічно безпечні процеси виробництва. • Значне зниження токсичних викидів. • Менше енергоспоживання та менші експлуатаційні витрати.
	2. Нанотехнології – використання наноструктур як високоефективних каталізаторів.	• Підвищена швидкість та точність каталізу. • Стабільність ферментів завдяки іммобілізації. • Можливість масштабування без втрати продуктивності.
	3. Біополімери – виробництво екологічного	• Отримання біопластику з покращеними властивостями.

	пакування на біологічній основі.	- Відповідність міжнародним «зеленим» стандартам. - Зниження вартості виробництва біопакування у довгостроковій перспективі.
	4. Харчова промисловість – біорозкладне пакування для продуктів.	- Безпечний матеріал для контакту з їжею. - Зменшення залежності від нафтохімічних пакувальних матеріалів.
	5. Переробка біомаси – перетворення органічних відходів у сировину для синтезу біопластиків.	- Оптимізація ланцюга переробки. - Додаткова економічна цінність від відходів.

Стартап-проект BioCatalux має значний потенціал як у технологічному, так і в ринковому аспекті, адже він об'єднує три ключові науково-технічні парадигми сучасної хімії: зелені синтетичні підходи, нанокаталіз і біополімерні матеріали. Використання наноструктур вуглецю як основи для іммобілізованих ферментів сприяє підвищенню активності та стабільності каталізаторів. Це забезпечує можливість значного зниження енерговитрат, скорочення утворення токсичних побічних продуктів і одночасно збільшення виходу цільового біополімеру. Один з важливих аспектів проекту – він відповідає не лише на екологічні, але й економічні виклики. Перехід до біорозкладних пакувальних матеріалів, створених на основі відновлюваної сировини, зменшення залежності від нафтохімічних

ресурсів та ефективне використання біомасових відходів як цінного ресурсу сприяють підвищенню доданої вартості в умовах циркулярної економіки.

Широкий спектр можливих напрямків застосування – від екологічної упаковки для харчової промисловості до інноваційних рішень у переробці біомаси – підкреслює потенціал інтеграції цієї розробки в різні галузеві ланцюги. Це відкриває перспективи для створення стійкої мережі міжпідприємницьких співпраць, у межах якої BioCatalyx постачатиме високотехнологічні каталізатори компаніям, що прагнуть зменшити вуглецевий слід і токсичний вплив своїх виробничих процесів на навколишнє середовище. Логотип майбутньої фірми зображено на рисунку нижче.



Рисунок 4.1 – Логотип стартап-проєкту

У контексті формування ринково орієнтованої концепції стартап-проєкту важливим етапом є кількісне та якісне зіставлення його техніко-економічних характеристик із параметрами продуктів потенційних конкурентів. Таке порівняння дає змогу не лише виявити сильні та слабкі сторони ідеї, а й оцінити реалістичність її комерціалізації в сегменті біополімерів та зеленої хімії.

Структурування показників за ключовими критеріями – вартістю технології, ефективністю процесу, екологічними характеристиками, доступністю сировини та рівнем інноваційності – дозволяє окреслити межі конкурентної переваги стартапу, визначити критичні зони для подальшого вдосконалення та сформувати підґрунтя для вибору оптимальної ринкової стратегії. У зведеному вигляді відповідні зіставлення відображаються в таблиці 4.2, де систематизовано сильні, слабкі та

нейтральні характеристики проекту BioCatalux відносно існуючих компаній на ринку.

Таблиця 4.2. Визначення сильних, слабких та нейтральних характеристик ідеї

№ п/ п	Техніко- економіч ні характери стики ідеї	(потенційні) концепції конкурентів				W (сла бка стор она)	N (нейтр альна сторон а)	S (сил ьна стор она)
		Мій проект (BioCataly x)	Конку- рент 1 (Biospher e Corporati on)	Конку- рент 2 (Enzym Group)	Конку- рент 3 (ЕкоПак)			
1	Екологіч ні параметр и технологі ї	Фермента тивний синтез без вторинни х токсични х сполук	Частково екологічн і процеси, використ ання полімерн их добавок	Біоінгре дієнти, але без екологіч ної полімер изації	Біоупако вка з мінімаль ною модифіка цією матеріалі в			+
2	Інновацій ність технологі чного підходу	Імобіліз овані ферменти на нановугле цевих носіях, каталіз нового покоління	Стандарт ні полімерні процеси, без наномоди фікацій	Біотехно логічні процеси без наномат еріалів	Низький рівень технологі чних інновацій			+
3	Собіварті сть виробниц тва одиниці продукту	Середня, потребує оптимізац ії каталізу і масштабу вання	Низька завдяки масовому виробниц тву	Стабільн а собіварті сть	Низька собіварті сть завдяки простим процесам	+		

4	Можливість масштабування технології	Потребує інженерного доопрацювання для промислових біореакторів	Повна масштабованість	Висока адаптивність	Локальна масштабованість	+		
5	Стабільність каталітичної системи	Висока, ферменти стабілізовані іммобілізацією	Середня стабільність полімерних систем	Не застосовується у виробництві	Середня			+
6	Позиціонування на ринку	Високотехнологічний екологічний матеріал нового покоління	Масове виробництво споживчих товарів	Біотехнологічні інгредієнти для харчової і ферментаційної промисловості	Проста екоупаковка для широкого використання		+	

Отримані результати аналізу концепції BioCatalux у контексті порівняння з існуючими ринковими рішеннями свідчать, що запропонований підхід демонструє вищий рівень технологічної інноваційності та екологічної спрямованості. Використання нановуглецевих носіїв із іммобілізованими ферментами дозволяє інтегрувати селективність біокаталізу з перевагами розвиненої поверхні та стабільністю наноструктур. Це, своєю чергою, сприяє зниженню енергетичних витрат, мінімізації утворення побічних продуктів та підвищенню якості одержуваних біополімерів. У цьому контексті традиційні виробники екологічних пакувальних матеріалів і біопродукції, здебільшого зосереджені на вдосконаленні кінцевого продукту, часто залишають поза увагою

самі процеси синтезу, які здебільшого залишаються близькими до класичних нафтохімічних або лише частково модифікованих технологій.

Незважаючи на виявлені обмеження, серед яких особливо виділяються вищі початкові інвестиції та необхідність у масштабуванні процесів, ці аспекти не зменшують інноваційного потенціалу розробки. Навпаки, вони визначають перспективні напрями для подальшої оптимізації, включаючи вдосконалення рецептури, зниження собівартості виробництва та адаптацію каталізаторів до промислових умов. Узагальнюючи позитивні характеристики, такі як екологічність, інтелектуальна адаптивність та здатність до гнучкого налаштування властивостей біополімерів, можна стверджувати, що ця розробка має потенціал для виходу у вищий технологічний сегмент у порівнянні з існуючими аналогами.

4.2. Технологічний аудит ідеї проекту

В умовах динамічного розвитку нанотехнологій, біокаталізу та екологічно орієнтованих виробничих систем важливим етапом оцінки інноваційного проекту є проведення технологічного аудиту. Такий аналіз дозволяє встановити ступінь готовності технологій, необхідних для реалізації розробки, оцінити їх відповідність сучасним науковим стандартам і визначити можливості практичного впровадження. Ідея проекту BioCatalyx, що передбачає синтез біополімерів за допомогою іммобілізованих ферментів на нановуглецевих структурах, базується на поєднанні високоефективних процесів ензиматичного каталізу та функціональних властивостей наноматеріалів. Саме це потребує аналізу доступності технологічної інфраструктури, наявних прототипів, рівня технологічної зрілості існуючих рішень та можливості інтеграції компонентів у єдиний виробничий комплекс. Здійснення такого аудиту є необхідною умовою для обґрунтування реалістичності впровадження інноваційної платформи та визначення подальших напрямів її технічного вдосконалення.

В умовах активного розвитку індустрії біотехнологій та підвищених вимог до ефективності виробничих процесів важливим етапом підготовки проєкту є оцінка технологічних рішень, здатних забезпечити стабільність, результативність і економічну доцільність майбутнього продукту. Тому для подальшого обґрунтування технологічної моделі стартапу здійснюється аналіз ключових технічних параметрів та умов реалізації обраної технології, які систематизовано у таблиці 4.3.

Таблиця 4.3 – Технологічна здійсненність ідеї проєкту

№ п/п	Ідея проєкту	Технології її реалізації	Наявність технологій	Доступність технологій авторам
1	Синтез біопластику на основі нановуглецевих структур з іммобілізованими ферментами	Ензиматичний синтез біополімерів; іммобілізація ферментів на вуглецевих нанотрубках; оптимізація біореакторів для полімеризації	Базові технології існують, потребують адаптації під специфічні субстрати та параметри ферментативного каталізу	Частково доступні: лабораторні можливості забезпечують синтез і тестування, промислової адаптацію потрібно доопрацювати
2	Виробництво нановуглецевих носіїв	Хімічне осадження з газової фази для вирощування вуглецевих нанотрубок на металевому	Технологія доступна на ринку, потребує стандартизації для біокаталітичного	Доступна через партнерські лабораторії та постачальників наноматеріалів

		каталізаторі з вуглеводневого газу; модифікація поверхні для підвищення біосумісності та адгезії ферментів	застосування	
3	Інтеграція каталітичної системи у пілотний біореактор	Проектування модульного біореактора; контроль масопереносу та стабільності ферменту на наноструктурах	Концептуально доступно, але потребує інженерного доопрацювання	Може бути реалізовано командою із залученням зовнішніх інженерних консультантів
Обрана технологія реалізації ідеї проєкту: інтегрований технологічний ланцюг, що поєднує синтез біополімерів із використанням нановуглецевих носіїв та модульних біореакторів, який є доступним для впровадження в умовах стартап-проєкту.				

На сучасному ринку вже наявні значущі базові технології, необхідні для синтезу нановуглецевих носіїв, іммобілізації ферментів та проведення ферментативної полімеризації. Однак для досягнення стабільних промислових параметрів потрібне інженерне доопрацювання модульних біореакторів, стандартизація умов іммобілізації та оптимізація масопереносу в реакційній системі. Доступність технологій на лабораторному рівні забезпечує можливість проведення фундаментальних і прикладних досліджень, тоді як промислове

масштабування вимагатиме додаткових інвестицій, технічної інтеграції та співпраці з виробничими партнерами. Узагальнюючи результати, можна стверджувати, що проєкт характеризується високим потенціалом технологічної здійсненності за умови послідовної адаптації та вдосконалення технічних елементів, що формують єдиний виробничий комплекс для синтезу біополімерів нового покоління.

4.3. Аналіз ринкових можливостей запуску стартап-проєкту

Розвиток ринку біополімерів та екологічних матеріалів визначається глобальними тенденціями декарбонізації, впровадженням циркулярної економіки та переходом до зеленої хімії. За даними аналітичних досліджень OECD та EU Bioplastics [12, 13], сегмент створення та використання різних видів біопластику демонструє стійке зростання та високий рівень інноваційної активності, що створює сприятливі умови для реалізації проєктів на зразок BioCatalyx.

Таблиця 4.4 – Попередня характеристика потенційного ринку стартап-проєкту

№ п/п	Показники стану ринку (найменування)	Характеристика
1	Кількість головних гравців	5-7 виробників біополімерів
2	Загальний обсяг продаж	≈ 1,3 млрд грн/рік [3]
3	Динаміка ринку	Ринок демонструє стабільне щорічне зростання на рівні 12-15 % [2]
4	Наявність обмежень для входу	Високотехнологічне обладнання, сертифікація,

		патенти
5	Специфічні вимоги	ISO 17025, ISO 14001, EN 13432
6	Середня рентабельність	12–18 % [4]

Аналіз характеристик потенційного ринку свідчить, що категорія біополімерів є перспективною для запуску стартап-проєкту. Обмежена кількість провідних гравців, стійка позитивна динаміка розвитку ринку та прийнятний рівень рентабельності галузі створюють сприятливі умови для впровадження інноваційних технологій. Утім, існування технологічних та регуляторних бар'єрів, пов'язаних із сертифікацією та дотриманням міжнародних стандартів, акцентує необхідність науково-технічної компетенції команди та якісного опрацювання проєкту. Загальні результати дослідження показують, що за умов успішного подолання стартових перешкод цей ринок здатен забезпечити високий рівень доходності від інвестицій у розробки BioCatalyx.

Для розуміння необхідності розроблення стартап-проєкту важливо провести детальний аналіз потенційних споживачів та їхніх потреб [50]. Дані фактори наведено в таблиці 4.5.

Таблиця 4.5 – Характеристика потенційних клієнтів стартап-проєкту

№	Потреба	Цільова аудиторія	Відмінності у поведінці	Вимоги
1	Екологічне пакування та біорозкладні полімери	Пакувальні компанії, харчова промисловість, екомагазини	Орієнтація на екосертифікацію, чутливість до цін та стабільності властивостей	Екологічність, відповідність стандартам, безпечність

Характеристика потенційних груп клієнтів демонструє, що цільова аудиторія BioCatalux проявляє високу екологічну свідомість та акцентує увагу на довгостроковій відповідності актуальним ринковим тенденціям. Виробники пакування, підприємства харчової промисловості та екомагазини очікують від постачальників не лише базові функціональні характеристики матеріалу, але й підтверджену екологічність, стабільність якості, прозорість походження сировини та можливість інтеграції продукту в наявні технологічні процеси. Аналіз особливостей поведінки споживачів вказує на те, що такі клієнти відкриті до впровадження інноваційних рішень, проте залишаються недовірливими до питань вартості та можливих операційних ризиків. Це підкреслює важливість для BioCatalux позиціонувати себе як науково обґрунтоване та технологічно прогресивне рішення із прозоро задекларованими перевагами, а не просто як «екологічний продукт».

У процесі формування ринкової стратегії важливо всебічно оцінити зовнішні умови, у яких впроваджуватиметься проєкт, а також визначити ключові чинники, що можуть як сприяти його розвитку, так і обмежувати потенціал. Тому на цьому етапі здійснюється аналіз факторів можливостей та загроз для стартап-проєкту (табл. 4.6), що дозволяє окреслити стратегічні переваги, виявити ризики та сформувані обґрунтовані напрями подальшого позиціонування на ринку.

Таблиця 4.6 – Аналіз факторів загроз та можливостей розробленого проєкту

№	Фактор	Зміст загрози	Можлива реакція компанії
1	Висока собівартість біокаталізаторів та сировини	Зростання вартості ферментів, носіїв і енергоносіїв може зменшити рентабельність.	Оптимізація технології, локалізація постачання.
2	Конкуренція традиційних полімерних	Низька собівартість і сталі ринки збуту у конкурентів.	Фокус на екологічних нішах, демонстраційні проєкти.

	технологій		
3	Воєнні ризики та логістична нестабільність	Порушення постачання, затримки обладнання, зростання логістичних витрат.	Альтернативні маршрути, запаси сировини, часткова локалізація.
4	Енергетична нестабільність	Перебої електропостачання та коливання тарифів збільшують собівартість.	Резервні джерела живлення, енергоефективні режими.
5	Кадровий дефіцит через мобілізацію	Втрата кваліфікованих спеціалістів, затримки в науково-дослідній та конструкторській діяльності.	Автоматизація, залучення іноземних експертів, співпраця з вищими навчальними закладами.
6	Нестабільність законодавства	Затримки сертифікації, зміни екологічних вимог.	Юридичний супровід, адаптивні документи.
7	Зниження інвестиційної спроможності підприємств	Клієнти відкладають впровадження інновацій.	Гнучкі моделі впровадження, сервісний супровід.

Аналіз факторів загроз свідчить, що основні ризики для проєкту зосереджені навколо економічної ефективності процесу та специфіки ринку полімерних матеріалів. На початкових етапах розробки інноваційні біополімери мають вищу собівартість, що знижує їхню цінову конкурентоспроможність порівняно з традиційними полімерними матеріалами на основі нафтопродуктів. До того ж ринок звичайного пластику вже має сформовану інфраструктуру, яка забезпечує його низьку вартість і високу доступність. Крім того, зовнішнє середовище характеризується високим рівнем невизначеності, зокрема через воєнні умови, енергетичну нестабільність і кадрові ризики.

Проте ці загрози не є непереборними: вони радше визначають напрямки, де проєкт потребує зосередження зусиль. Це стосується оптимізації технологічних процесів, підвищення ефективності каталітичних систем, вдосконалення

масштабування виробництва та створення обґрунтованої ринкової пропозиції. Остання має компенсувати недоліки в ціні завдяки екологічним і функціональним перевагам.

Таблиця 4.7 – Фактори можливостей

№	Фактор	Зміст можливості	Можлива реакція компанії
1	Попит на біорозкладні матеріали	Промисловість переходить до екологічних альтернатив.	Позиціонування BioCatalyx як платформи зеленої хімії.
2	Міжнародні та державні програми підтримки	Гранти на декарбонізацію та біополімери.	Участь у програмах, партнерства.
3	Імпортозаміщення в умовах війни	Підприємства потребують локальних технологій.	Локалізація виробництва, довгострокові контракти.
4	Попит на енергозбереження	Підприємства шукають зниження енергоспоживання.	Акцент на низькотемпературних процесах.
5	Посилення контролю за токсичними полімерами	Заборони стимулюють перехід на безпечні технології.	Сертифікація біокатализаторів, вихід у чутливі сегменти.
6	Цифровізація та автоматизація R&D	Скорочення експериментальних циклів, нові форми співпраці.	Цифрові моделі, онлайн-техпідтримка.

Аналіз факторів загроз свідчить, що основні ризики для проєкту BioCatalyx переважно пов'язані з економічною ефективністю процесів, особливостями ринкової структури полімерних матеріалів та поточною військовою ситуацією в країні. Утім, ці загрози не можна вважати неподоланими. Вони визначають ті

напрямки, у яких доцільно сконцентрувати зусилля: удосконалення технологічних параметрів, оптимізації каталітичних систем, поліпшенні процесу масштабування виробництва та розробленні ефективної ринкової стратегії. Ця стратегія має компенсувати цінові обмеження за допомогою акценту на екологічних і функціональних перевагах продукції.

Таблиця 4.8 – Ступеневий аналіз конкуренції на ринку

Особливості конкурентного середовища	В чому проявляється дана характеристика	Вплив на діяльність підприємства (можливі дії компанії, щоб бути конкурентоспроможною)
1. Тип конкуренції – олігополістична	На ринку присутня обмежена кількість виробників екологічних полімерів, які пропонують диференційовану продукцію	Необхідність розробки та впровадження інноваційних рішень для забезпечення конкурентних переваг
2. За рівнем конкурентної боротьби – національний / міжнародний	Конкуренція формується між українськими виробниками та імпортованими видами біополімерів	Потреба міжнародної сертифікації та адаптації продукту до глобальних вимог
3. За галузевою ознакою – внутрішньогалузева	Основні конкуренти працюють у сегменті екологічних матеріалів	Підвищення якості процесів та вдосконалення характеристик продукту
4. Конкуренція за видами товарів – товарно-видова	Змагання між альтернативними видами пакувальних матеріалів	Поглиблення унікальності продукту через інноваційні властивості
5. За характером конкурентних переваг – нецінова	Переваги визначаються екологічністю, біорозкладністю, технологічністю	Забезпечення відповідності стандартам екологічної безпеки
6. За інтенсивністю –	Формується конкуренція між	Активне позиціонування бренду BioCatalyx і підтримка

марочна	брендами екологічних матеріалів	високої репутації
---------	---------------------------------	-------------------

Ступеневий аналіз конкурентного середовища демонструє, що галузевий контекст для компанії BioCatalyx характеризується високим рівнем структурної складності, проте створює сприятливі умови для впровадження інноваційного продукту. Конкуренція здебільшого обмежується внутрішньогалузевою взаємодією, у якій домінують товарно-видові та брендові аспекти. Це спонукає учасників ринку концентруватися на нецінових перевагах, таких як екологічність, технологічна ефективність, інноваційний характер і репутація бренду. Подібна структура конкурентного середовища формує сприятливі умови для реалізації складних, науково обґрунтованих рішень, що, у свою чергу, створює простір для розвитку проєктів на кшталт BioCatalyx, які базуються на суттєвих науково-технологічних засадах. Водночас зростають вимоги до якості комунікаційної стратегії, прозорості маркетингового позиціонування та можливості підтвердження заявлених переваг через експериментальні дослідження та сертифікаційні документи.

Далі було проведено поглиблений аналіз конкуренції у галузі за моделлю М. Портера (табл. 9), що дає можливість отримати структурований огляд галузевих сил ринку [47]. Застосування цього підходу дає змогу структуровано оцінити сукупний вплив прямих конкурентів, потенційних нових учасників ринку, постачальників, споживачів та товарів-замінників на перспективи реалізації стартап-проєкту. Такий аналіз є важливим інструментом для розуміння не лише поточного стану конкурентної взаємодії, а й тих стратегічних викликів і можливостей, які можуть визначати траєкторію розвитку проєкту в середньо- та довгостроковій перспективі.

Таблиця 4.9 – Аналіз конкуренції в галузі за М. Портером

	Прямі конкуренти в галузі	Потенційні конкуренти	Постачальники	Клієнти	Товари-замінники
Складові аналізу	Основні виробники екологічної упаковки та біополімерів: Biosphere Corporation; Enzym Group; ЕкоПак; GreenPack; BioBag Ukraine	Визначити бар'єри входження в ринок: науково-технологічна складність; високі інвестиції; патентні обмеження	Визначити фактори сили постачальників: невелика кількість постачальників ферментів і наноматеріалів; залежність від імпорту; висока вартість реагентів	Визначити фактори сили споживачів: вимоги до екологічності; чутливість до ціни; необхідність сертифікації	Фактори загроз із боку замінників: дешевші традиційні полімери (ПЕ, ПП, ПЕТ); ПЛА; крохмальні та паперові матеріали
Висновки	Інтенсивність конкуренції середня, з тенденцією посилення у найближчі 3–5 років	Імовірність появи нових гравців висока через грантові програми та активність науково-дослідних та інноваційних розробок	Постачальники мають середню силу впливу; потрібні довгострокові контракти та диверсифікація джерел	Споживачі диктують умови входу на ринок: вимагають стабільності властивостей і підтвердження екологічності	Загроза висока; BioCatalyx має запропонувати унікальні властивості, що перевищують традиційні матеріали

Поглиблений аналіз конкуренції за моделлю М. Портера свідчить про активний розвиток ринку екологічних матеріалів в Україні. Серед провідних конкурентів виділяються Biosphere Corporation, Enzym Group, ЕкоПак, GreenPack та BioBag Ukraine, які вже мають усталені виробничі можливості й міцні позиції на ринку. Проте жодна з цих компаній не застосовує технологію іммобілізованих

ферментів на нановуглецевих матеріалах, що відкриває перед BioCatalyx унікальну інноваційну перспективу. Високий рівень загрози з боку товарів-замінників наголошує на важливості забезпечення унікальних властивостей продукту та конкурентної собівартості. Успішний вихід на ринок залежатиме від здатності зменшити витрати на виробництво, встановити ефективну співпрацю з ключовими постачальниками та показати продукт як передове та екологічно чисте рішення.

Рівень впливу постачальників на діяльність компанії залишається значним через обмежену кількість виробників спеціалізованих ферментів і наноматеріалів, а також високу залежність від імпорту. Це акцентує увагу на важливості диверсифікації джерел ресурсного забезпечення та укладення довгострокових контрактів для стабільності постачання. Щодо клієнтів, спостерігається суттєва переговорна сила з їх боку, оскільки промислові споживачі орієнтуються як на екологічні параметри продукції, так і на її економічну доцільність. Основний конкурентний тиск здійснюють товари-замінники, зокрема традиційні нафтохімічні полімери, які характеризуються значно нижчою собівартістю виробництва та добре розвинуеною логістичною інфраструктурою.

Рівень впливу постачальників на діяльність компанії залишається значним через обмежену кількість виробників спеціалізованих ферментів і наноматеріалів, а також високу залежність від імпорту. Це акцентує увагу на важливості диверсифікації джерел ресурсного забезпечення та укладення довгострокових контрактів для стабільності постачання. Щодо клієнтів, спостерігається суттєва переговорна сила з їх боку, оскільки промислові споживачі орієнтуються як на екологічні параметри продукції, так і на її економічну доцільність. Основний конкурентний тиск здійснюють товари-замінники, зокрема традиційні нафтохімічні полімери, які характеризуються значно нижчою собівартістю виробництва та добре розвинуеною логістичною інфраструктурою.

Беручи до уваги результати аналізу конкурентного середовища (табл. 4.9), специфічні характеристики проєкту BioCatalyx (табл. 4.6), вимоги потенційних споживачів до продукції (табл. 4.5) та вплив факторів маркетингового середовища

(табл. 4.6 і 4.7), було здійснено комплексне визначення ключових факторів конкурентоспроможності даного стартапу. Сукупність цих чинників дозволяє сформувати узагальнену оцінку стратегічних можливостей проєкту, що детально представлено в таблиці 4.10.

Таблиця 4.10 – Обґрунтування факторів конкурентоспроможності

№ п/п	Фактор конкурентоспроможності	Обґрунтування (наведення чинників, що роблять фактор для порівняння конкурентних проектів значущим)
1	Екологічність технології та продукту	Визначає конкурентність на ринку, що регулюється стандартами EN 13432, ISO 14001.
2	Інноваційність технології	Унікальна комбінація наноматеріалів і біокаталізу забезпечує бар'єри входу.
3	Собівартість виробництва	Ціна визначає здатність конкурувати з нафтохімічними матеріалами.
4	Стабільність каталітичної системи	Впливає на якість і повторюваність властивостей продукту.
5	Можливість масштабування	Критично важлива для промислових клієнтів і ринкового зростання.

Проект BioCatalyx вирізняється важливими складовими конкурентоспроможності, такими як екологічність, технологічна унікальність та надійність каталітичних систем. Факторами для удосконалення визначено зниженні собівартості та забезпеченні можливості масштабування.

У подальшому, на основі визначених факторів конкурентоспроможності (табл. 4.10), проводиться аналіз переваг та недоліків стартап-проекту, результати якого наведені в таблиці 4.11.

Таблиця 4.11 – Порівняльний аналіз сильних та слабких сторін проєкту «BioCatalyx»

№ п/п	Фактор конкурентоспроможності	Бали (1– 20)	Рейтинг товарів- конкурентів у порівнянні з BioCatalyx	–3	–2	–1	0	+1	+2	+3
1	Екологічність технології та продукту	19		B, D, E	A, C					
2	Рівень технологічної інноваційності	18		A, B, C, D, E						
3	Собівартість виробництва	17						A, C	B, D, E	
4	Стабільність властивостей та якості матеріалу	16		B, D	A, C, E					
5	Масштабованість виробництва	15						B, D, E	A, C	
6	Репутація та впізнаваність бренду	14								A, B, C, D, E
7	Відповідність міжнародним екологічним стандартам	16			A, C	B, D, E				

A – Biosphere Corporation

B – Enzym Group

C – ЕкоПак

D – GreenPack

Е – BioBag Ukraine

Сильні сторони проекту BioCatalyx:

- Висока екологічність технології, що перевищує показники всіх конкурентів.
- Унікальна технологічна інноваційність, яка не має аналогів серед Biosphere Corporation, Enzym Group, ЕкоПак, GreenPack та BioBag.
- Стабільність властивостей матеріалу є вищою порівняно з Enzym Group та GreenPack, що забезпечується унікальною каталітичною платформою BioCatalyx.
- Відповідність ключовим міжнародним екологічним стандартам (EN 13432, ISO 14001), що дозволяє BioCatalyx випереджати таких конкурентів, як Enzym Group, GreenPack та BioBag Ukraine, які характеризуються нижчими показниками екологічності.

Слабкі сторони проекту BioCatalyx:

- Собівартість виробництва BioCatalyx наразі є вищою, ніж у Biosphere Corporation та ЕкоПак, які мають масштабні виробничі потужності та оптимізовані ресурси.
- Показники масштабованості значно поступаються можливостям таких компаній, як Enzym Group, GreenPack та BioBag Ukraine, які вже здійснюють свою діяльність на промисловому рівні.
- Репутаційна складова також є слабким аспектом проекту: усі п'ять конкурентів – Biosphere, Enzym Group, ЕкоПак, GreenPack і BioBag Ukraine – вже мають усталену позицію на ринку та впізнаваність своїх брендів. Це вимагає від BioCatalyx розробки активної маркетингової та комунікаційної стратегії.

Проведений порівняльний аналіз демонструє, що проєкт BioCatalyx має виражені технологічні переваги над наявними українськими виробниками екологічного пакування за рівнем екологічності та інноваційності. Водночас, конкуренти мають переваги в аспектах собівартості, масштабованості виробничих

потужностей та популярності бренду на ринку. Ці висновки вказують на необхідність спрямування зусиль команди BioCatalyx на підвищення економічної ефективності технології, а також налагодження стратегічних партнерств із ключовими промисловими суб'єктами, що сприятиме швидшій комерціалізації продукту.

Завершальним етапом оцінювання ринкових перспектив упровадження проєкту є проведення SWOT-аналізу, який дає змогу узагальнити сильні та слабкі сторони, а також наявні можливості й загрози [53]. Матриця SWOT-аналізу (табл. 4.12) формується на основі результатів попереднього визначення ринкових загроз і можливостей та характеристик проєкту, що були систематизовані в таблиці 4.11.

Таблиця 4.12 – SWOT – аналіз стартап-проєкту

Сильні сторони: 1. Екологічність. 2. Інноваційність технології. 3. Висока стабільність каталізу. 4. Відповідність міжнародним екологічним стандартам.	Слабкі сторони: 1. Висока собівартість. 2. Потреба у масштабуванні. 3. Низький рівень впізнаваності.
Можливості: 1. Зростання попиту на біоматеріали. 2. Грантова підтримка. 3. Партнерство з пакувальними компаніями.	Загрози: 1. Конкуренція з нафтохімією. 2. Цінова чутливість ринку. 3. Поява нових інноваторів.

SWOT-аналіз вказує на значний стратегічний потенціал проєкту. Сильні сторони BioCatalyx відповідають актуальним ринковим тенденціям, тоді як

ризика можливо знизити завдяки партнерським співпрацям та технологічному вдосконаленню [51].

Завершальним етапом оцінювання ринкових перспектив упровадження проєкту є проведення SWOT-аналізу, який дає змогу узагальнити сильні та слабкі сторони, а також наявні можливості й загрози. Матриця SWOT-аналізу (табл. 4.12) формується на основі результатів попереднього визначення ринкових загроз і можливостей та характеристик проєкту, що були систематизовані в таблиці 4.11[56,57].

Таблиця 4.13 – Альтернативи ринкового впровадження стартап-проєкту

№	Альтернатива	Ймовірність отримання ресурсів	Строки реалізації
1	Партнерство з виробниками екоупаковки	Висока	2–3 роки
2	Участь у міжнародних грантах Horizon Europe	Середня	3–5 років
3	Створення власної виробничої лінії	Середня–низька	4–6 років

Найперспективнішою альтернативою вбачається співпраця з виробниками упаковки, адже такий підхід вимагає менше ресурсів і сприяє швидшому виходу продукту на ринок.

BioCatalyx має значний потенціал для успішної комерціалізації. Його головними конкурентними перевагами є інноваційність та екологічність, тоді як основними викликами залишаються висока собівартість і складнощі масштабування. Однак ці проблеми можна вирішити шляхом стратегічного партнерства та технологічної оптимізації.

4.4. Розроблення ринкової стратегії проекту

Ключовим етапом формування ринкової стратегії проекту є аналіз цільових груп потенційних споживачів, що дозволяє оцінити їхню зацікавленість у продукті, специфіку потреб та рівень готовності до його впровадження [48]. Такий підхід забезпечує можливість визначити найбільш перспективні сегменти ринку та окреслити пріоритетні напрямки комунікації та позиціонування [49].

Узагальнені результати аналізу цільових груп подано в таблиці 4.14.

№ п/п	Опис профілю цільової групи потенційних клієнтів	Готовність споживачів сприйняти продукт	Орієнтовний попит у межах цільової групи (сегменту)	Інтенсивність конкуренції в сегменті	Простота входу у сегмент
	Виробники біопластиків та екологічного пакування (компанії, що працюють з біорозкладними полімерними матеріалами)	Висока, адже підприємств а активно впроваджують рішення, що знижують вуглецевий слід і підвищують екологічність продукції	Середній-високий; попит зростає завдяки розширенню ринку біополімерів	Висока; значна кількість виробників альтернативних полімерів та матеріалів	Середня; потребує сертифікації, пілотних випробувань і демонстрації технологічної ефективності
	Підприємства харчової промисловості, що	Висока, але обережна; впровадженн я можливе за	Високий у середньому та преміальному	Середня–висока; велика кількість	Середня; потребує дотримання санітарних

	використовують екопакування	умови підтвердження ої безпеки	у сегментах	альтернатив пакувальних матеріалів	норм і авторизованих випробувань
	Компанії, що здійснюють контрактний синтез біополімерів	Середня; орієнтація на технологічні переваги з обережністю щодо зміни виробничих схем	Середній; попит зростає разом із модернізацією технологічних платформ	Висока; традиційні каталізатори доступні та дешевші	Низька– середня; потребує технічних консультацій, пілотних проєктів і наукової взаємодії
	Екомагазини та малі бренди сталого споживання	Висока; сегмент шукає інноваційні та екологічні рішення	Середній; сегмент невеликий, але стабільно зростає	Середня; конкуренція нижча, ніж у промислових сегментах	Висока; нижчі вимоги до обсягів постачання та швидше прийняття рішень

Які цільові групи обрано: 1) Виробники біопластиків та екологічного пакування.

2) Підприємства харчової промисловості.

3) Компанії, що здійснюють контрактний синтез біополімерів.

4) Екомагазини та малі бренди сталого споживання.

Проведений аналіз цільових груп засвідчив, що найбільш перспективними сегментами для впровадження технології BioCatalux є виробники біопластику та екологічного пакування, підприємства харчової промисловості та компанії, що здійснюють контрактний синтез біополімерів. Саме ці групи демонструють

поєднання високої готовності до використання інноваційних каталітичних систем, суттєвого потенціалу попиту та стратегічної зацікавленості у переході до більш екологічних і технологічно ефективних рішень. Додатковим нішевим напрямом виступають екомагазини та малі бренди сталого споживання, які можуть стати платформою для пілотного впровадження та формування репутації інноваційного продукту. Сукупність цих сегментів створює сприятливі умови для подальшого розвитку маркетингової стратегії BioCatalyx і забезпечує цілеспрямоване позиціонування продукту на ринку.

Для забезпечення функціонування в даному сегменті було розроблено наступну стратегію розвитку (табл. 4.15).

Таблиця 4.15 – Визначення базової стратегії розвитку

№ п/п	Обрана альтернатива розвитку	Стратегія охоплення ринку	Ключові конкуренто-спроможні позиції відповідно до обраної альтернативи	Базова стратегія розвитку
1.	Інноваційний розвиток екологічних каталізаторів	Диференційований маркетинг	Екологічність, ефективність, технологічна новизна	Інноваційна диференціація

Базовою стратегією розвитку обрано інноваційну диференціацію, оскільки продукт має унікальні екологічні та технологічні переваги. Стратегія передбачає фокус на якості, безпечності та ефективності. Також було обрано базову стратегію для конкурентної поведінки (табл. 4.16).

Таблиця 4.16 – Визначення базової стратегії конкурентної поведінки

№ п/п	Чи є проєкт «першопрохідцем»	Чи буде компанія шукати нових	Чи буде компанія	Стратегія конкурентної
-------	------------------------------	-------------------------------	------------------	------------------------

	на ринку?	споживачів, або забирати існуючих у конкурентів?	копіювати основні характеристики товару конкурента, і які?	поведінки
1	Так, технологія нановуглецевих біокаталізаторів з іммобілізованими ферментами є новою для українського ринку та не має прямих аналогів.	Компанія орієнтуватиметься на залучення нових споживачів у сегменті біополімерів, поступово відвоюючи частку ринку в постачальників традиційних каталізаторів.	Компанія не копіюватиме технологію конкурентів, але враховуватиме галузеві стандарти: стабільність властивостей, формат постачання, вимоги до безпеки та сервісного супроводу.	Стратегія зайняття конкурентної ніші з орієнтацією на інноваційне лідерство.

На основі проведеного аналізу можна стверджувати, що технологія BioCatalyx є інноваційною та фактично виступає першопрохідцем на українському ринку біокаталізаторів для синтезу біополімерів. Обрана стратегія конкурентної поведінки передбачає орієнтацію на залучення нових споживачів у науково-технологічному та виробничому сегментах, із поступовим відвоюванням ринкової частки у постачальників традиційних каталізаторів. Компанія не копіюватиме рішення конкурентів, проте враховуватиме ключові галузеві

стандарти щодо стабільності, безпечності та формату технологічного супроводу. Стратегія зайняття конкурентної ніші дозволяє BioCatalyx зосередитися на власних унікальних перевагах та забезпечити стійке інноваційне лідерство в сегменті зелених каталізаторів.

Виходячи з вимог цільових споживчих груп до постачальника та характеристик продукції, а також враховуючи обрану базову стратегію розвитку й визначену стратегію конкурентної поведінки, формується стратегія позиціонування стартап-проєкту BioCatalyx. Вона має забезпечити чітке сприйняття технологічної цінності продукту та створити впізнавану ринкову позицію, що відповідатиме очікуванням різних сегментів ринку. Узагальнений варіант стратегії позиціонування наведено в таблиці 4.17.

Таблиця 4.17 – Визначення стратегії позиціонування

№ п/п	Вимоги до товару цільової аудиторії	Базова стратегія розвитку	Ключові конкурентоспроможні позиції власного стартап-проєкту	Вибір асоціацій (три ключових)
1	Висока ефективність каталітичної дії, стабільність властивостей, відповідність екологічним стандартам	Стратегія диференціації	Екологічність, підвищена активність ферментативного синтезу, зниження енергоспоживання	Екологічність; Інноваційність; Технологічна надійність
2	Безпечність харчових застосуваннях, відсутність міграції небажаних	Стратегія диференціації з акцентом на безпечність	Харчова безпечність, відтворюваність параметрів, наукова валідація	Безпечність; Якість: чистота продукту, мінімальна міграція

	компонентів, сертифікованість			небажаних компонентів; стабільність активності біокатализатора в широкому діапазоні умов; Надійність
3	Гнучкість у налаштуванні каталітичних систем, можливість масштабування рішень	Стратегія спеціалізації	Індивідуальне проектування катализаторів, доступ до нановуглецевої платформи, НДДКР у співпраці з клієнтом	Партнерство; Інновації; Гнучкість
4	Екоорієнтованість, та доступність швидке впровадження рішень	Стратегія диференціації для нішевого сегмента	Невисокі вимоги до масштабів постачання, прозорість технології, підтримка клієнтів	Доступність; Екологічність; Прозорість

Узагальнення вимог ключових сегментів ринку та обраних стратегічних підходів дозволило сформувати комплексну стратегію позиціонування стартап-проекту BioCatalux. Вона ґрунтується на поєднанні екологічності, технологічної інноваційності та високого рівня адаптивності продукту до потреб різних груп споживачів. Такий підхід забезпечує чітке розуміння споживачами ціннісної пропозиції проекту та формує стабільну ринкову позицію, орієнтовану на довгострокове партнерство та інноваційне лідерство.

4.5. Розроблення маркетингової програми стартап-проєкту

Першим етапом формування комплексної маркетингової програми стартап-проєкту є визначення маркетингової концепції товару, що має надійти до споживача [52]. Саме на цьому етапі встановлюються ключові властивості продукту, його споживча цінність та базові параметри ринкової пропозиції. Узагальнена маркетингова концепція товару наведена в таблиці 4.18.

Таблиця 4.18 – Визначення ключових переваг концепції потенційного товару

№ п/п	Потреба	Вигода, яку пропонує товар	Ключові переваги перед конкурентами
1	Екологічна заміна нафтохімічним каталізаторам	Зменшення шкідливих викидів, стійкість до деградації	Інноваційність, безпечність, сумісність із харчовою промисловістю
2	Підвищення ефективності виробництва біопластиків	Швидкість реакцій, менша кількість відходів	Біокаталізatori з наноматеріалами працюють за нижчих температур
3	Надійне та стабільне постачання	Можливість ліцензування, адаптація до обладнання клієнта	Гнучка гнучка модель взаємодії з корпоративними клієнтами, техпідтримка, патентний захист

Концепція продукту стартапу BioCatalyx будується на інноваційному, екологічному та високоефективному каталізаторі. Розробка спрямована на задоволення актуальних потреб ринку, включаючи заміну шкідливих

нафтохімічних каталізаторів та підвищення продуктивності у виробництві біопластику.

Далі розробляємо трирівневу маркетингову модель товару, а саме: уточнюємо ідея продукту та/або послуги, його фізичні складові, особливості процесу його надання (табл. 4.19) [55].

Таблиця 4.19 – Опис трьох рівнів моделі товару

Рівні товару	Сутність та складові
I. Товар за задумом	До базової потреби споживача можна віднести забезпечення доступу до інноваційних, екологічно безпечних та високоефективних біокаталізаторів для синтезу біополімерів у харчовій, фармацевтичній, пакувальній та біотехнологічній промисловості. Основною функціональною вигодою є підвищення продуктивності реакцій, зниження енерговитрат, скорочення часу синтезу та підвищення екологічної стійкості виробництва.
II. Товар у реальному виконанні	Властивості/характеристики: 1. Каталітична активність (висока швидкість ферментативних реакцій). 2. Стабільність при коливаннях температури та pH. 3. Рівномірність наноструктури та відтворюваність параметрів. 4. Селективність до цільових біополімерів. 5. Сумісність із харчовою та біоматеріальною промисловістю. Якість: відповідність міжнародним стандартам (ISO, HACCP), наявність протоколів тестування. Пакування: лабораторні ємності, технічні контейнери, індивідуальне маркування. Марка: BioCatalyx – нановуглецеві біокаталізатори нового покоління.

III. Товар із підкріпленням	До продажу: демонстраційні зразки, технічна документація, інструкції з налаштування.
	Після продажу: технічна підтримка, консультації фахівців, адаптація каталізаторів під потреби виробництва, навчання персоналу, гарантія.
За рахунок чого товар буде захищено від копіювання: патентування наноструктур, авторське право на методи синтезу, договір про нерозголошення з персоналом та партнерами.	

Розроблена технологія та продукція BioCatalyx забезпечує комплексну цінність для споживача завдяки поєднанню інноваційних властивостей, високих стандартів якості та розвиненої системи сервісного супроводу. Чітке формування трирівневої моделі товару – від базового задуму до підкріплення після продажу – дозволяє створити конкурентоспроможний продукт, який відповідає вимогам харчової, біотехнологічної та пакувальної промисловості. Захист технології гарантується патентуванням ключових рішень, використанням авторського права та впровадженням механізмів комерційної таємниці, що забезпечує збереження унікальності продукту і стійку позицію стартапу на ринку.

Потім було проведено визначення цінових меж (табл. 4.20) потенційного товару, що передбачає проведення аналізу цінової політики товарів-аналогів у ринковому середовищі, а також порівняння доходів цільової групи споживачів [53].

Таблиця 4.20 – Визначення меж встановлення ціни

№ п/п	Рівень цін на товари-замінники	Рівень цін на товари-аналоги	Рівень доходів цільової групи споживачів	Верхня та нижня межі встановлення цін на товар/послугу

1	Низький–середній (100-120 \$/л). Прості хімічні каталізатори або ферментні системи без нанопідсилення.	Середній–високий (150-200 \$/л). Імпортні біокаталізатори та ферменти преміального сегмента.	Середній та середньо- високий рівень доходів промислових підприємств- споживачів.	Нижня межа: 15-20% вище замінників. Верхня межа: 10-15% нижче імпортних аналогів, 130-180 \$/л.
---	---	--	---	--

Цінова стратегія враховує рівень доходів цільової аудиторії, забезпечуючи гармонійний баланс між конкурентоспроможністю та інноваційністю продукту. Визначено оптимальний ціновий діапазон, який відповідає вимогам сегмента харчової і пакувальної промисловості.

Наступним етапом є визначення оптимальної системи збуту, що сприятиме ефективному прийняттю рішень щодо реалізації продукції (табл. 4.21).

Таблиця 4.21 – Формування системи збуту

№ п/п	Специфіка закупівельної поведінки цільових клієнтів	Функції збуту, які має виконувати постачальник товару	Глибина каналу збуту	Оптимальна система збуту
1	Промислові підприємства та лабораторії, які закупувають каталізатори для виробничих процесів. Основними критеріями	Постачання, логістика, технічна консультація, налаштування використання каталізаторів, супровід у процесі	Переважно прямий канал збуту, можливий непрямий канал через спеціалізованих дистриб'юторів у сфері хімічного та біотехнологічного	Прямий продаж через власні канали, а також партнерська мережа для розширення охоплення ринку; індивідуальний супровід клієнтів

вибору є якість, стабільність поставок, наявність технічної підтримки та можливість швидкого отримання продукту.	інтеграції в технологічні лінії.	обладнання.	та технічна підтримка.
--	----------------------------------	-------------	------------------------

Формування системи збуту для BioCatalyx має базуватися на поєднанні прямого продажу та партнерських каналів, що забезпечить контроль якості сервісу, оперативність поставок і тісну взаємодію зі споживачами. Промислові клієнти потребують високого рівня технічного супроводу, тому найефективнішою моделлю є власна система збуту з можливістю залучення спеціалізованих дистриб'юторів для розширення географії продажів і доступу до нових сегментів ринку.

Останньою складовою маркетингової програми є розроблення концепції маркетингових комунікацій (табл. 4.22), яка опирається на попередньо обрану основу для позиціонування, визначену специфіку поведінки клієнтів [54].

Таблиця 4.22 – Концепція маркетингових комунікацій

№ п/п	Специфіка поведінки цільових клієнтів	Канали комунікацій, якими користуються цільові клієнти	Ключові позиції, обрані для позиціонування	Завдання рекламного повідомлення	Концепція рекламного звернення
-------	---------------------------------------	--	--	----------------------------------	--------------------------------

1	Раціональна поведінка, орієнтація на ефективність	Профільні виставки та конференції; науково-технічні платформи; галузеві онлайн-ЗМІ; прямі технічні презентації (LinkedIn, галузеві конференції)	Інноваційність, екологічність, науковість, надійність, технологічна сумісність із харчовою промисловістю	Сформувати довіру, підкреслити вигоду, зацікавити новизною	«Ефективний каталізатор майбутнього – вже сьогодні»
---	---	---	--	--	---

У результаті проведеного аналізу факторів конкурентоспроможності, специфіки поведінки цільових клієнтів, можливостей збуту та каналів маркетингових комунікацій було сформовано ринкову (маркетингову) програму для стартап-проєкту BioCatalyx, що ґрунтується на інноваційності технології нанокаталітичних систем, стабільному попиті промислових підприємств і динаміці ринкового середовища. Програма включає чітко визначені концепції товару, збуту, просування та попередній аналіз цінових меж.

1) Концепція товару

Продуктом стартапу є високоефективні біокаталізатори на основі наноматеріалів, призначені для інтенсифікації реакцій у харчовій, хімічній та біотехнологічній промисловості. Основна цінність полягає у підвищенні енергоефективності процесів, можливості роботи за нижчих температур, сумісності з харчовими середовищами та безпечності технологічного застосування. Унікальність продукту забезпечується наноструктурованою активною фазою, екологічністю та патентним захистом технології.

2) Концепція збуту

Формування системи збуту ґрунтується на специфіці закупівельної поведінки промислових клієнтів – підприємств, які потребують стабільних, сертифікованих та безпечних технологічних рішень. Оптимальною моделлю визначено комбіновану систему збуту:

- прямий збут (переговори, демонстрації, технічні консультації, довгострокові контракти);
- непрямий збут через технічних дистриб'юторів або партнерські компанії у суміжних галузях.

Така модель забезпечує охоплення різних сегментів ринку, скорочення циклу закупівлі та можливість швидкого масштабування.

3) Концепція просування

Маркетингові комунікації орієнтовано на професійні канали, якими користуються цільові клієнти: галузеві виставки, корпоративні конференції, онлайн-платформи, науково-технічні форуми, технічні вебінари. Ключові повідомлення спрямовані на підкреслення інноваційності, ефективності, точності та економічної вигоди застосування нанокаталізаторів. Концепція рекламного звернення ґрунтується на асоціаціях «надійність, технологічність, безпечність», а використання професійних каналів, таких як LinkedIn, конференції та галузеві ЗМІ, дозволяє точно донести цінність продукту до зацікавлених сторін.

4) Попередній аналіз можливостей ціноутворення

Для визначення діапазону ціни проаналізовано рівні цін на товари-замінники та товари-аналоги.

- Рівень цін на товари-замінники: низький–середній (100-120 \$/л).
- Рівень цін на товари-аналоги: середній–високий (150-200 \$/л).

З урахуванням сприйняття цінності клієнтами та конкурентного середовища встановлено такі межі ціни:

- Нижня межа: 15-20% вище за товари-замінники, що дозволяє підкреслити вищу ефективність та технологічність продукту.

– Верхня межа: 10-15% нижче за імпорتنі аналоги, що формує привабливу ринкову альтернативу.

Оптимальний діапазон: 130-180 \$/л.

Обрана стратегія дозволяє позиціонувати продукт як технологічно досконале, економічно вигідне та екологічно орієнтоване рішення. Вона поєднує елементи диференціації та спеціалізації, що забезпечує можливість зайняти стійку конкурентну нішу серед інноваційних матеріалів для промислових технологічних процесів. Ринкова програма повністю узгоджується з потребами цільових споживачів, тенденціями ринку та перевагами, які створює нанокаталітична технологія BioCatalyx.

Висновки до розділу 4

1. Можливість ринкової комерціалізації проєкту

За результатами комплексного ринкового аналізу встановлено, що проєкт BioCatalyx має високу можливість комерціалізації. Попит на технологічні рішення для оптимізації промислових процесів стабільно зростає, особливо серед підприємств харчової, хімічної та біотехнологічної галузей. Рентабельність підтримується оптимальними межами ціноутворення (130-180 \$/л), що забезпечує конкурентну позицію між товарами-замінниками та імпортними аналогами.

2. Перспективи впровадження

Перспективи впровадження є високими: цільові групи – промислові підприємства, що потребують ефективних і безпечних каталізаторів – демонструють готовність до переходу на наноматеріальні рішення. Бар'єри входження є помірними, а конкурентне середовище не перенасичене. Конкурентоспроможність формується завдяки інноваційній природі продукту, екологічності, високій ефективності, технологічній перевазі та можливості патентного захисту.

3. Оптимальна альтернатива впровадження

Найдоцільнішою є стратегія диференціації із фокусом на спеціалізації. Збут варто формувати за комбінованою моделлю: прямий канал для великих промислових клієнтів та непрямий канал через технічних дистриб'юторів. Позиціонування продукту ґрунтується на асоціаціях «надійність, технологічність, екологічність».

4. Доцільність подальшої імплементації

Проект є доцільним для подальшої реалізації, оскільки відповідає сучасним тенденціям енергоефективності та екологізації промисловості, має стабільний попит і виражені конкурентні переваги. Чітко сформована маркетингова програма (товар, збут, просування, ціна) підтверджує готовність BioCatalyx до виходу на ринок і масштабування.

ВИСНОВКИ

У процесі виконання магістерської дисертації здійснено комплексне дослідження, спрямоване на встановлення взаємозв'язку між структурними характеристиками вуглецевих нанотрубок (ВНТ) та їх проявами у модельній каталітичній реакції, що є необхідною передумовою для обґрунтованого використання нановуглецевих матеріалів у зеленій хімії. На основі аналізу сучасних наукових джерел узагальнено, що ступінь впорядкованості sp^2 -матриці, дефектність і структурна однорідність ВНТ визначають одночасно реакційну здатність (наявність активних центрів адсорбції та активації реагентів) і довговічність каталізатора (стійкість до термічних та хімічних впливів, а також до деактивації).

Було встановлено взаємозв'язок між режимами термообробки вуглецевих нанотрубок і їх структурними характеристиками, визначеними методом раманівської спектроскопії з подальшою деконволюцією спектрів. Отримані кількісні показники I_D/I_G , положення $\nu(G)$ та ширина $FWHM(G)$ підтвердили, що кероване варіювання температури та послідовності газових середовищ дозволяє цілеспрямовано змінювати дефектність, ступінь впорядкованості й структурну однорідність sp^2 -вуглецевої матриці, тобто ті властивості, які визначають придатність ВНТ як каталізаторів або каталізаторних носіїв у зеленій хімії.

Порівняння серій CNT (відновна обробка у H_2) та CNT-IH (послідовна обробка $He \rightarrow H_2$) показало, що двостадійна інертно-відновна обробка забезпечує більш кероване формування структури та зниження дефектності порівняно з одностадійним відновленням у водні. Для серії CNT значення I_D/I_G перебували у діапазоні 1,02-1,25, що відповідає підвищеній частці дефектних/аморфних компонентів. Натомість у серії CNT-IH простежується послідовне зменшення I_D/I_G зі зростанням температури інертної стадії: для CNT-IH-400 і CNT-IH-500 отримано $I_D/I_G = 0,954$ та $0,939$ за $FWHM(G)$ 35,23–36,47 cm^{-1} , тоді як для CNT-IH-700 і CNT-IH-800 I_D/I_G зменшується до 0,739–0,740 при $FWHM(G)$

36,65–36,88 cm^{-1} . Такі значення свідчать про перехід до більш впорядкованої графітоподібної структури з відносно високою однорідністю коливань G-смуги. Аномально високі параметри CNT-IH-600 ($I_D/I_G = 1,138$; $\text{FWHM}(G) = 50,63 \text{ cm}^{-1}$) доцільно інтерпретувати обережно, оскільки вони можуть бути обумовлені неоднорідністю проби або умовами зняття спектрів; для цього зразка рекомендована додаткова верифікація повторними вимірюваннями в кількох точках.

З позицій практичного використання у зеленій хімії отримані результати дають змогу обґрунтовано добирати ВНТ під різні класи каталітичних задач. Зразки CNT-IH-400/500, що поєднують помірну дефектність із доброю впорядкованістю, є найбільш придатними для носієвих систем у реакціях гідрування та гідрогенолізу (у тому числі перетворень біомасо-похідних субстратів), оскільки дефектні та крайові ділянки можуть виступати сайтами закріплення активної фази (Pd, Pt, Ni), а достатньо впорядкований sp^2 -каркас забезпечує стабільність і відтворюваність роботи. Більш упорядковані CNT-IH-700/800 доцільно розглядати як платформу для електро- та фотокаталітичних систем, де критичними є провідність, корозійна стійкість і тривала стабільність у циклах; у таких застосуваннях ВНТ можуть працювати як струмопровідна матриця для ORR/HER/OER та електровідновлення CO_2 , а також як компонент фотокаталітичних композитів (наприклад, $\text{TiO}_2/\text{ВНТ}$), де зменшення рекомбінації носіїв заряду підвищує ефективність перетворень.

Окремо обґрунтовано перспективність ВНТ у процесах термокаталітичної переробки органічних потоків, зокрема піролізу пластикових відходів. На відміну від металовмісних каталізаторів, що часто швидко дезактивуються через коксоутворення та потребують регенерації окиснювальним випалюванням із додатковими викидами CO_2 , ВНТ завдяки стабільній sp^2 -матриці характеризуються підвищеною стійкістю до вуглецювання. Це потенційно зменшує частоту регенерації каталізатора, підвищує ресурс роботи й покращує екологічний профіль процесу.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Хімічна технологія каталізаторів та каталітичних процесів: Конспект лекцій з розділу «Технологія каталізаторів». Лабораторний практикум. [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія», спеціалізації «Хімічні технології неорганічних речовин та водоочищення» /уклад. Т.І. Обушенко, Ю.М. Феденко; КПІ ім. Ігоря Сікорського. Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. 300 с.

2. Кропив'янська А. О., Кватернюк С. М., Мандебура А. Ю. Зелена хімія: принципи та методи створення екологічно безпечних речовин. URL: <https://ir.lib.vntu.edu.ua/bitstream/handle/123456789/42336/21002.pdf> (дата звернення 15.09.2025)

3. Методичні вказівки до практичних робіт для курсу «Принципи зеленої хімії», «Принципи “Зеленої” хімії та технологій», а також «Зелена хімія» для студентів спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» денної та заочної форм навчання / уклад.: С.О. Петров, Т.В. Фалалєєва. Харків : НТУ «ХПІ», 2024. 32 с.

4. Василенко І.А., Чупринов Є.В., Іванченко А.В., Скиба М.І., Воробйова В.І., Галиш В.В. Зелені технології у промисловості: Монографія. Дніпро: Акцент ПП, 2019. 366 с.

5. Спеціальне обладнання та процеси неорганічної хімії [Текст] : підручник / Л. Д. Пляцук та ін. ; за ред. Л. Д. Пляцука, І. С. Козія; Сум. держ. ун-т. Суми : Університетська книга, 2022. 389 с.

6. Башлай С., Резніченко В. «Зелена хімія» та інноваційні матеріали: екологічно безпечні продукти. *Вісник Хмельницького національного університету*. 2023. №6 (329). С. 142-149.

7. Небесний Р. В. Наукові основи і технологія каталітичного одержання ненасичених карбонових кислот та естерів. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук за спеціальністю 05.17.04 «Технологія продуктів

органічного синтезу». Національний університет “Львівська політехніка”, Львів, 2019. 373 с.

8. Кичкирук О.Ю., Шляніна А.В., Кусяк Н.В. Аналітична хімія : навчальний посібник. Житомир : ЖДУ імені Івана Франка, ПП «Євро-Волинь», 2022. 240 с.

9. «Зелена» аналітична хімія [Електронний ресурс] : електрон. метод. вказівки до практ. занять для здобувачів третього (освіт.- наук.) рівня вищ. освіти спец. ЕЗ Хімія, ОНП Хімія / уклад.: О. М. Гузенко, Д. В. Снігур, А. В. Демчук. Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2025. 36 с.

10. Petrovic P.V., Anastas P.T. First Do No Harm: A Chemist's Guide to Molecular Design for Reduced Hazard. United Square Singapore: Jenny Stanford Publishing, 2023. P. 263.

11. Martz P., Phan T.T., L'Haridon J., Beausoleil M.H., Lafaye K., Gérard Y., Gallardo C. Environmental profile of the production of fragrance ingredients used in cosmetic products: comparative analysis of results obtained by life cycle assessment and the green chemistry-based eco-design tool GREEN MOTION™. *Green Chemistry*. 2023. Vol. 25, issue 16, pp. 6365-6382

12. Semysim F.A., Hussain B.K., Hussien M.A., Azooz E.A., Snigur D. Assessing the Greenness and Environmental Friendliness of Analytical Methods: Modern Approaches and Recent Computational Programs. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*. 2024.

13. Pena-Pereira F.; Tobiszewski M.; Wojnowski W.; Psillakis E. A Tutorial on AGREE Prepan Analytical Greenness Metric for Sample Preparation. *Adv. Sample Prep.* 2022, Vol. 3, 100025. DOI: 10.1016/j.sampre.2022.100025

14. Wojnowski W., Tobiszewski M., Pena-Pereira F., Psillakis E. AGREEprep – Analytical Greenness Metric for Sample Preparation. *TrAC Trends Anal. Chem.* 2022, Vol. 149, 116553. DOI: 10.1016/j.trac.2022.116553.

15. Anastas P.T. Green Chemistry: Thirty Years of Holding Up Our End of the Bargain. *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2021, Vol. 9, issue 48, pp. 16005–16006 DOI: 10.1021/acssuschemeng.1c07786

16. Hurst G. A.; Farmer T. J.; Jesper S. Green chemistry infographics for research-led instruction. *Sustainable Chemistry and Pharmacy*. 2025, Vol.45, 102007. DOI: 10.1016/j.scp.2025.102007
17. Psillakis E., Pena-Pereira F. The twelve goals of circular analytical chemistry. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2024, Vol.175, 117686. DOI: 10.1016/j.trac.2024.117686
18. Yahya L.A., Vakh C., Dushna O., Kalisz O., Bocian S., Tobiszewski M. Guideline on the proper selection of greenness and related metric tools in analytical chemistry – a tutorial. *Analytica Chimica Acta*. 2025, Vol 1357, 344052. DOI: 10.1016/j.aca.2025.344052
19. Yin L., Yu L., Guo Y., Wang C., Ge Y., Zheng X., Zhang N., You J., Zhang Y., Shi M. Green analytical chemistry metrics for evaluating the greenness of analytical procedures. *Journal of Pharmaceutical Analysis*. 2024, Vol. 14, issue 11, 101013. DOI: 10.1016/j.jpha.2024.101013
20. Kaya S.I., Ozcelikay-Akyildiz G., Ozkan S.A. Green metrics and green analytical applications: A comprehensive outlook from developing countries to advanced applications. *Green Analytical Chemistry*. 2024, Vol. 11, 100159. DOI: 10.1016/j.greeac.2024.100159
21. Alqahtani A., Elbeltagi S. Advancing chemistry sustainably: From synthesis to benefits and applications of green synthesis. *Journal of Organometallic Chemistry*. 2025, Vol. 1027, 123508.
22. Kannaiah K.P., Chanduluru H.K. Exploring sustainable analytical techniques using Gscore and future innovations in green analytical chemistry. *Journal of Cleaner Production*. 2023, Vol. 428, 139297.
23. Azooz E. A., Semysim F. A., Al-Muhanna E. H. B., Mogaddam M. R.A., Tuzen M. Chapter 9 – How to evaluate the greenness and whiteness of analytical procedures? *Green Analytical Chemistry*. 2025, pp.263-356 DOI: 10.1016/j.teac.2023.e00202

24. Hussain C.M., Hussain G., Keçili R. Smart analytical chemistry: Integrating green, sustainable, white and AI-driven approaches in modern analysis. *Tr ACTrends in Analytical Chemistry*. 2025, Vol. 191, 118295.

25. Normal and Resonant Raman Spectra of CuPc-MWCNT Blend / S. Z. Ngah Demon et al. *Key Engineering Materials*. 2018. Vol. 773. P. 113–117. URL: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/kem.773.113> (дата доступа: 15.09.2025).

26. Nanolayered Wavelength-Selective Narrowband Thermal Emitters for Solar Thermophotovoltaics / Q. Wang et al. *ACS Applied Nano Materials*. 2022. URL: <https://doi.org/10.1021/acsanm.2c03123> (дата доступа: 14.09.2025).

27. Carbon-Based Nanomaterials/Allotropes: A Glimpse of Their Synthesis, Properties and Some Applications / S. Nasir et al. *Materials*. 2018. Vol. 11, no. 2. P. 295. URL: <https://doi.org/10.3390/ma11020295> (дата доступа: 14.09.2025).

28. Synthesis Methods of Carbon Nanotubes and Related Materials / A. Szabó et al. *Materials*. 2010. Vol. 3, no. 5. P. 3092–3140. URL: <https://doi.org/10.3390/ma3053092> (дата доступа: 14.09.2025).

29. Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.(APAC) | Product List. *TCIchemicals.com*. URL: <https://www.tcichemicals.com/OP/en/c/12963> (дата доступа: 14.09.2025).

30. Progress in the Raman spectra analysis of covalently functionalized multiwalled carbon nanotubes: unraveling disorder in graphitic materials / S. L. H. Rebelo et al. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2016. Vol. 18, no. 18. P. 12784–12796. URL: <https://doi.org/10.1039/c5cp06519d> (дата доступа: 15.09.2025).

31. Electron Microscope. *Global Health NOW*. URL: <https://globalhealthnow.org/object/electron-microscope> (дата доступа: 11.09.2025).

32. Using Magnetometry to Understand the Relative Role of Magnetic Particles in Co-Based Catalysts for the Oxygen Reduction Reaction / A. M. Esposito et al. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2021. Vol. 125, no. 32. P. 17709–17717. URL: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c04718> (дата доступа: 15.09.2025).

33. Vertically aligned growth of small-diameter single-walled carbon nanotubes by alcohol catalytic chemical vapor deposition with Ir catalyst / T. Maruyama et al. *Applied Surface Science*. 2020. Vol. 509. P. 145340. URL: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.145340> (дата доступа: 15.09.2025).

34. Wu, S.; Wen, G.; Schlögl, R.; Su, D.S. Carbon nanotubes oxidized by a green method as efficient metal-free catalysts for nitroarene reduction. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2015, 17, 1567.

35. Nanocarbon Catalysts: Recent Understanding Regarding the Active Sites / L. Zhang et al. *Advanced Science*. 2020. Vol. 7, no. 5. P. 1902126. URL: <https://doi.org/10.1002/advs.201902126> (дата доступа: 16.09.2025).

36. Hedberg J., Blomberg E., Odnevall Wallinder I. In the Search for Nanospecific Effects of Dissolution of Metallic Nanoparticles at Freshwater-Like Conditions: A Critical Review. *Environmental Science & Technology*. 2019. Vol. 53, no. 8. P. 4030–4044. URL: <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b05012> (дата доступа: 15.09.2025).

37. Structural Design and Fabrication of Multifunctional Nanocarbon Materials for Extreme Environmental Applications / S. Wu et al. *Advanced Materials*. 2022. P. 2201046. URL: <https://doi.org/10.1002/adma.202201046> (дата доступа: 10.09.2025).

38. Energy valorization of cow manure by hydrothermal carbonization and anaerobic digestion / J. D. Marin-Batista et al. *Renewable Energy*. 2020. Vol. 160. P. 623–632. URL: <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.07.003> (дата доступа: 10.09.2025).

39. The catalytic activity of carbon nanomaterials in lauroyl peroxide decomposition reaction / D. M. Haliarnyk et al. *Surface*. 2016. Vol. 8(23). P. 137–146. URL: <https://doi.org/10.15407/surface.2016.08.137> (дата доступа: 10.09.2025).

40. Li J., Pandey G. P. Advanced Physical Chemistry of Carbon Nanotubes. *Annual Review of Physical Chemistry*. 2015. Vol. 66, no. 1. P. 331–356. URL: <https://doi.org/10.1146/annurev-physchem-040214-121535> (дата доступа: 11.09.2025).

41. Коваль, Т. В. Нановуглецеві каталізатори: екологічні. *Екологічна безпека та природокористування*. 2020. Т. 9. С. 44-50.
42. Application of Catalysts in the Conversion of Biomass and Its Derivatives / J. Cai et al. *Catalysts*. 2024. Vol. 14, no. 8. P. 499. URL: <https://doi.org/10.3390/catal14080499> (дата доступу: 11.09.2025).
43. Functionalization and Characterization of MWCNT Produced by Different Methods / A. Tomova et al. *Acta Physica Polonica A*. 2016. Vol. 129, no. 3. P. 405–408. URL: <https://doi.org/10.12693/aphyspola.129.405> (дата доступу: 12.09.2025).
44. Hu, Z-Pan; Chen, C; Ren, J-Tao; Yuan, Z-Yong. Direct dehydrogenation of propane to propylene on surface-oxidized multiwall carbon nanotubes. *Appl. Catal. A*. 2018, 559, 95-93.
45. Arceo E., Ellman J., Bergman R. A Direct, Biomass-Based Synthesis of Benzoic Acid: Formic Acid-Mediated Deoxygenation of the Glucose-Derived Materials Quinic Acid and Shikimic Acid. *ChemSusChem*. 2010. Vol. 3, no. 7. P. 811–813. URL: <https://doi.org/10.1002/cssc.201000111> (дата доступу: 01.12.2025).
46. Nanocarbon-Based Catalytic Ozonation for Aqueous Oxidation: Engineering Defects for Active Sites and Tunable Reaction Pathways / Y. Wang et al. *ACS Catalysis*. 2020. Vol. 10, no. 22. P. 13383–13414. URL: <https://doi.org/10.1021/acscatal.0c04232> (дата доступу: 07.12.2025).
47. Маркетинг стартап-проектів [Електронний ресурс]: навчальний посібник для усіх спеціальностей другого освітнього ступеню «магістр» / С. О. Солнцев, О. В. Зозульов, Н. В. Юдіна, Т. О. Царьова, Н. В. Язвінська ; за заг. ред. С. О. Солнцева; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові данні (1 файл: 3,2 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019. – 218 с. URL : <http://ela.kpi.ua/handle/123456789/27437>
48. Yudina N.V. Methods of the Startup-Project Developing Based on ‘the Four-Dimensional Thinking’ in Information Society // Marketing and Management of innovations. – 3’2017. – P.245-256.-DOI:10.21272/mmi.2017.3-23 Access mode: <http://mmi.fem.sumdu.edu.ua/journals/2017/3/245-256>.

49. .Yudina Nataliya. Business Forecasting of Marketing Activity Riskiness of Companies in Markets. Economic Bulletin of National Technical University of Ukraine "KyivPolytechnic Institute". №17(2020). P. 372-383. URL: <http://ev.fmm.kpi.ua/article/view/216380/>

50. Юдіна Н. В. «Дорожня карта» підприємства у контексті футурології техногенної економіки. Традиції і інновації. [Електронний ресурс] / Н. В. Юдіна // Інновації та фундаментальні науки в умовах техногенної економіки : зб. матеріалів міждисциплінар. наук.-практ. конф., Київ, 25 листоп. 2016 р. / [уклад. Л. І. Юдіна]. – К., 2016. – Режим доступу: <http://futurolog.com.ua/publish/2/Zbirnyk.pdf#page=6>.

51. Standard Management Systems QUALITY MANAGEMENT Textbook for students and post-graduate students on specialty 131 "Applied mechanics"/ S. Fomichov, A.Banin, I. Skachkov, V. Lysak, O. Gaievskiy, N. Yudina, Kiev: KIM, 2018 – P. 266

52. Розроблення стартап-проекту [Електронний ресурс]: Методичні рекомендації до виконання розділу магістерських дисертацій для студентів інженерних спеціальностей / За заг. ред. О.А. Гавриша. – Київ : НТУУ «КПІ», 2016. – 28 с.

53. Юдіна Н. В. Визначення циклічних залежностей в економіці України на основі аналізу окремих макроекономічних показників. Економічний Вісник НТУУ «КПІ». №13(2016). <http://ev.fmm.kpi.ua/article/view/80084/75643>

54. . Nataliya Yudina Future Study Implementation Into Marketing Activity Of Companies. Economic Bulletin Of National Technical University Of Ukraine "Igor Sikorsky KyivPolytechnic Institute". Kyiv: Management And Marketing Faculty Of National Technical University Of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", 2021. №18 (2021). PP. 1-9 URL : <http://ev.fmm.kpi.ua/article/view/240315>

55. Nataliya Yudina, Olena Pidlisna Marketing Perception Of Technological Uncertainty By Decision-Makers. Economic Bulletin Of National Technical University Of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute". Kyiv: Management And Marketing Faculty Of National Technical University Of Ukraine

“Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”, 2021. №18 (2021). PP. 1-10
URL :<http://ev.fmm.kpi.ua/article/view/238105>

56. Yudina N.V. Methods of the Startup-Project Developing Based on ‘the FourDimensional Thinking’ in Information Society // Marketing and Management of innovations. – 3’2017. – P.245-256.-DOI:10.21272/mmi.2017.3-23 Access mode: <http://mmi.fem.sumdu.edu.ua/journals/2017/3/245-256>.

57. Yudina Nataliya. Business Forecasting of Marketing Activity Riskiness of Companies in Markets. Economic Bulletin of National Technical University of Ukraine "KyivPolytechnic Institute". №17(2020). P. 372-383. URL :<http://ev.fmm.kpi.ua/article/view/216380/>

58. Disentangling contributions of point and line defects in the Raman spectra of graphene-related materials / L. Gustavo Cançado та ін. *2D Materials*. 2017. Т. 4, № 2. С. 025039. URL: <https://doi.org/10.1088/2053-1583/aa5e77> (дата звернення: 01.12.2025).

59. Progress in the Raman spectra analysis of covalently functionalized multiwalled carbon nanotubes: unraveling disorder in graphitic materials / S. L. H. Rebelo та ін. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2016. Т. 18, № 18. С. 12784–12796. URL: <https://doi.org/10.1039/c5cp06519d> (дата звернення: 09.12.2025).

60. Towards Understanding the Raman Spectrum of Graphene Oxide: The Effect of the Chemical Composition / D. López-Díaz та ін. *Coatings*. 2020. Т. 10, № 6. С. 524. URL: <https://doi.org/10.3390/coatings10060524> (дата звернення: 09.12.2025).

61. Raman study of D* band in graphene oxide and its correlation with reduction / A. Y. Lee та ін. *Applied Surface Science*. 2021. Т. 536. С. 147990. URL: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.147990> (дата звернення: 10.12.2025).

ДОДАТКИ ДОДАТОК А

Вікторія ДРОЩИНСЬКА, Ігор БИЧКО, Олена ІВАНЕНКО.
ВСТАНОВЛЕННЯ СТРУКТУРНИХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОВУГЛЕЦЕВИХ
КАТАЛІЗАТОРІВ ДЛЯ ПОТРЕБ ЗЕЛЕНОЇ ХІМІЇ. Матеріали XXV Міжнародної
науково-практичної конференції "Екологія. Людина. Суспільство" пам'яті д-ра
Дмитра СТЕФАНІШИНА (12 червня 2025 р., м. Київ, Україна / Укладач Д. Е.
Бенатов. – К.: Київський політехнічний інститут ім. Ігоря Сікорського, 2025. –
165-171 с.



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 25th International Scientific and Practical Conference
"Ecology. Human. Society"
dedicated to the memory of Dr. Dmytro STEFANYSHYN
(June 12, 2025, Kyiv, Ukraine)



УДК 574 (063)

Рецензенти:	Тетяна ШАБЛІЙ, д-р тех. наук, проф. Валерія ВЕМБЕР, канд. біол. наук, доц. Юлія ЛУЧАКІВСЬКА, к.б.н. Юлія НОСАЧОВА, канд. тех. наук, доц. Ярослав РАДОВЕНЧИК, канд. тех. наук, доц.
Укладач та відповідальний за випуск:	Данило БЕНАТОВ, канд. тех. наук, доц.
Дизайн і верстка:	Ілона БЕНАТОВА, Данило БЕНАТОВ
Обкладинка	Яна ГЕРУК

Матеріали XXV Міжнародної науково-практичної конференції «Екологія. Людина. Суспільство» пам'яті д-ра Дмитра СТЕФАНІШИНА (12 червня 2025 р., м. Київ, Україна) / Укладач Д. Е. Бенатов. — К.: Київський політехнічний інститут ім. Ігоря Сікорського, 2025. — 420 с.

Збірка містить статті, присвячені питанням розробки та впровадження безвідходних технологій, очистки природних і стічних вод від забруднень антропогенного характеру, знешкодження газових викидів, рекуперації промислових відходів, розробки, проектування та впровадження екологічно чистих технологій та обладнання, екологічного моніторингу, екології популяції, охорони рослинного та тваринного світу, впливу стану навколишнього середовища на здоров'я населення, застосування методів математичного моделювання та прогнозування у промисловій екології, а також управлінням, соціально-економічним і правовим аспектам раціонального природокористування та екологічної безпеки. Для студентів, аспірантів, науковців і всіх, хто цікавиться проблемами захисту навколишнього середовища та раціонального використання природних ресурсів.

- Подані матеріали пройшли рецензування і публікуються у кінцевій авторській редакції.
- Організаційні внески учасників конференції були передані на благодійні потреби.
- Збірку підготовлено та видано за підтримки Патентного бюро "Д-р Еміль Бенатов та Партнери".

Proceedings of the XXV International Science Conference «Ecology. Human. Society» dedicated to the memory of Dr. Dmytro STEFANYSHYN (June 12, 2025, Kyiv, Ukraine) / Compiled by D. Benatov. — K.: Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute, 2025. — 420 p.

This edition includes articles devoted to development and introduction of wasteless technologies, natural waters and sewage purifying from anthropogenic pollution, gas emission neutralization, industrial waste recuperation, development, design and introduction of non-polluting technologies and equipment, ecological monitoring problems, population ecology, flora and fauna protection, environmental influence on people health, methods of mathematical modelling and forecasting application in industrial ecology, administrative, social, economic and law aspects of natural resources rational use and ecological safety. For students, post-graduates, scientists and everyone who is interested in environment protection and natural resources rational use problems.

- The submitted materials were reviewed and published in the final author's version.
- All administrative fees were donated to charity.
- This handbook was prepared and published with the support of the Patent Bureau "Dr. Emil Benatov and Partners".

Київський політехнічний інститут ім. Ігоря Сікорського
03056, м. Київ, пр-т Берестейський, 37, тел. (044) 454-9243
Наклад 150 пр.

ISSN (Online) 2710-3315
© Усі права авторів захищені, 2025

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

ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМПІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ

Данило БЕНАТОВ	канд. тех. наук, доц. КПІ ім. Ігоря Сікорського, <i>голова організаційного комітету конференції</i>
Валерія ВЕМБЕР	канд. біол. наук, доц. КПІ ім. Ігоря Сікорського
Юлія НОСАЧОВА	канд. тех. наук, доц. КПІ ім. Ігоря Сікорського
Ярослав РАДОВЕНЧИК	канд. тех. наук, доц. КПІ ім. Ігоря Сікорського
Дмитро СІДОРОВ	канд. тех. наук, доц. КПІ ім. Ігоря Сікорського
Тетяна ШАБЛІЙ	д-р тех. наук, проф. КПІ ім. Ігоря Сікорського

CONFERENCE ORGANIZING COMMITTEE

Daniel BENATOV	PhD, assoc. prof., Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute, <i>head of the Organizing Committee</i>
Valeriia VEMBER	PhD, assoc. prof., Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute
Yuliia NOSACHOVA	PhD, assoc. prof., Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute
Yaroslav RADOVENCHYK	PhD, assoc. prof., Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute
Dmytro SIDOROV	PhD, assoc. prof., Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute
Tetiana SHABLIY	ScD, prof., Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute



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, гідратування, дегідратування 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.

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

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].

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

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 каталізatori 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 дешевої 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

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

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 високоєфективних 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, гідратування та дегідратування. Нановуглецеві носії відіграють важливу роль у підвищенні активності та стабільності металевих наночастинок у таких реакціях, як гідратування нітроароматичних сполук та відновлення CO₂.

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

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

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.

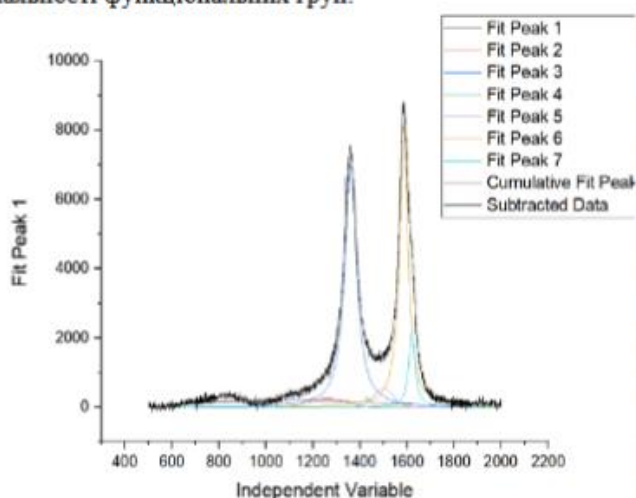


Рис. 1. Раманівський спектр зразку вуглецевих нанотрубок

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

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

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).

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

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/matricsci.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**

Viktorii 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.

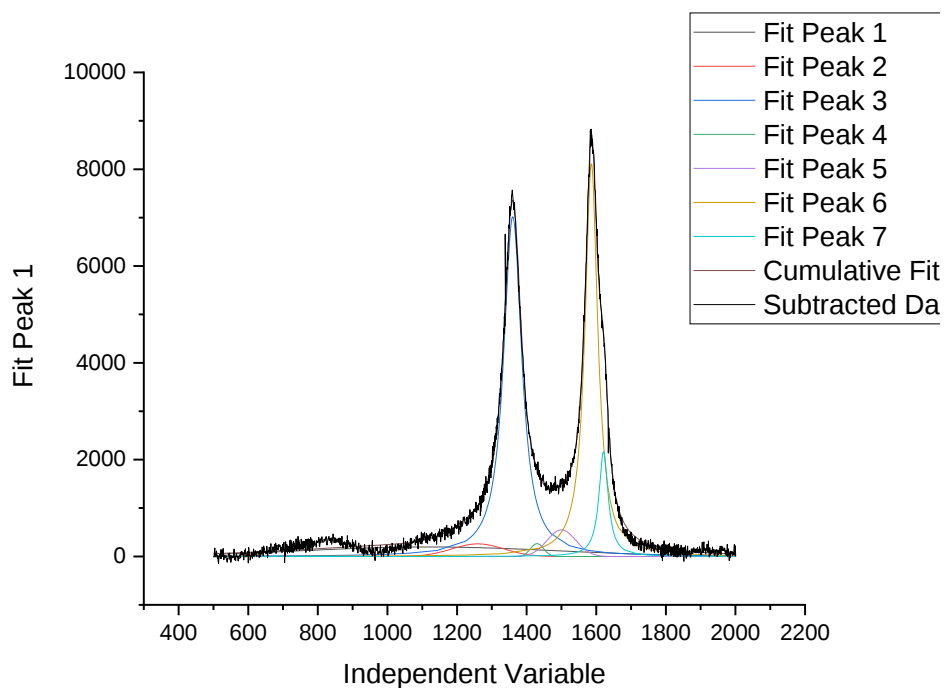
Proceedings of the XXV International Science Conference

**«Ecology. Human. Society» dedicated to the memory of Dr. Dmytro STEFANYSHYN
(June 12 2025, Kyiv, Ukraine)**

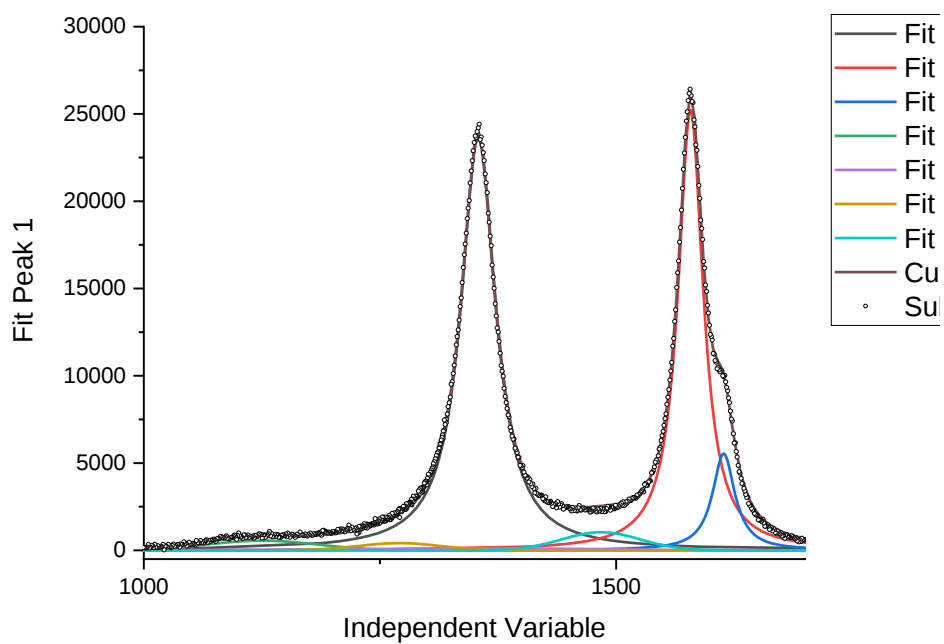
ДОДАТОК Б

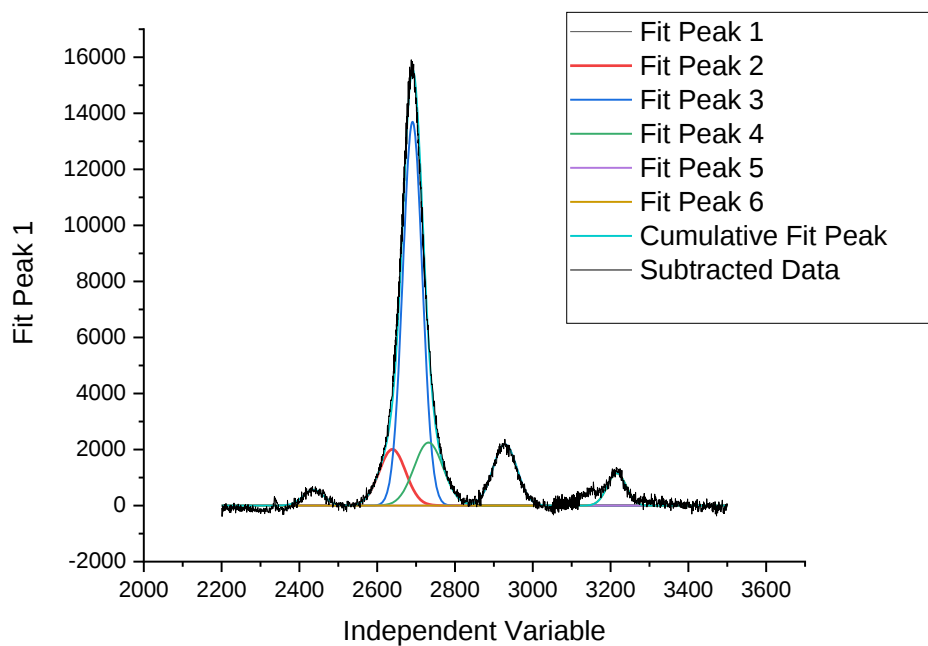
Результати деконволюції отриманих спектрів досліджуваних зразків вуглецевих нанотрубок за допомогою програми OriginPro

а. Для CNT-350

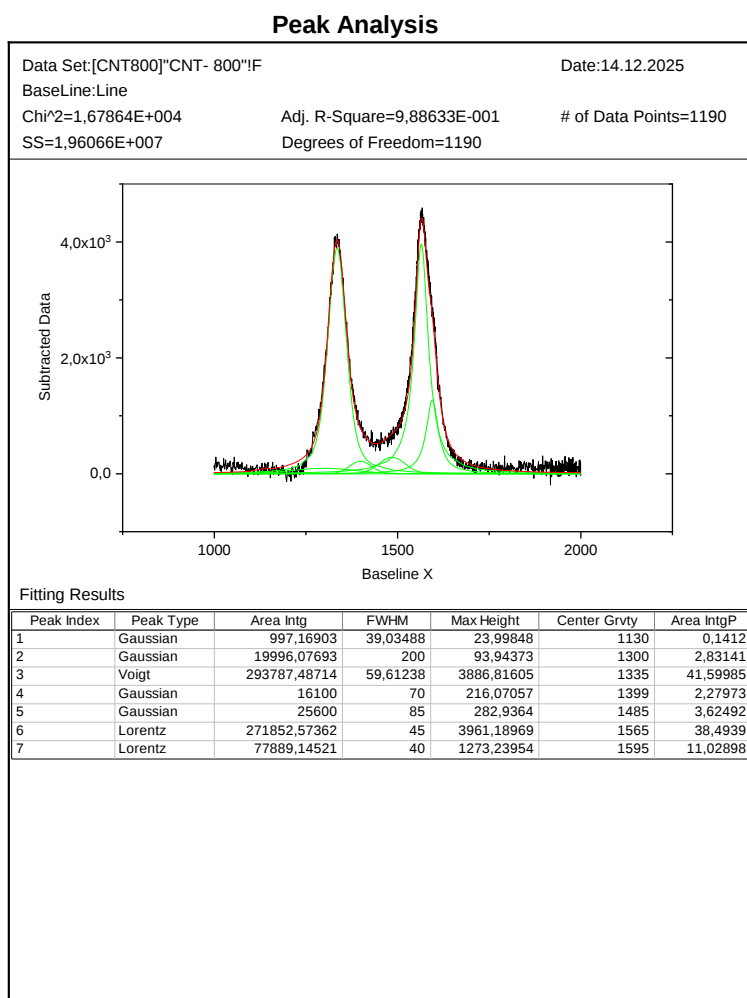


б. Для CNT-700

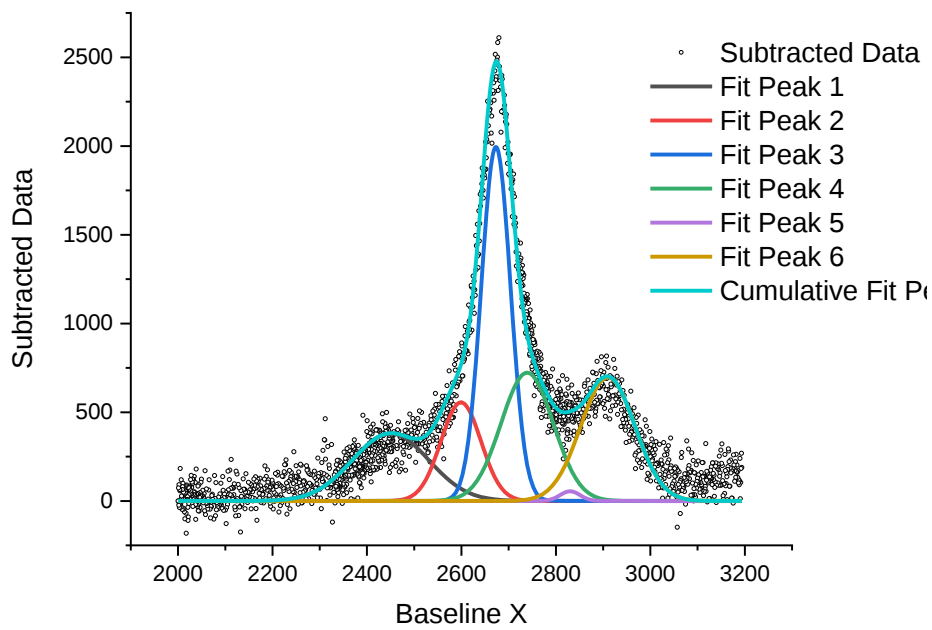
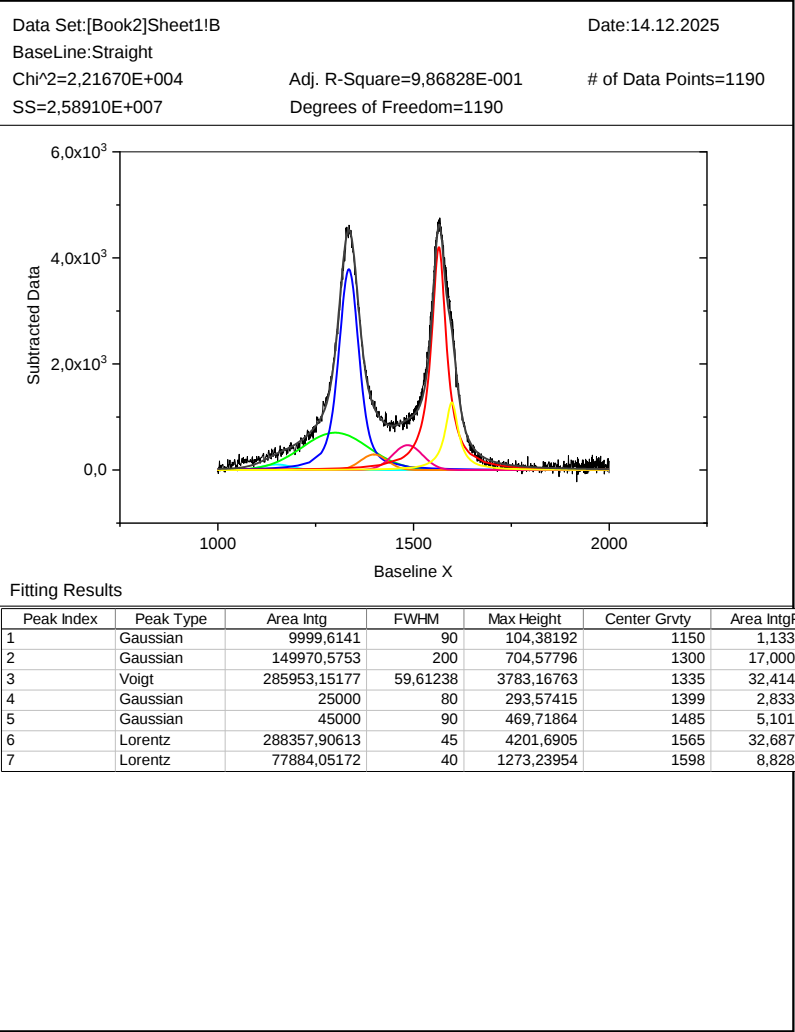




с. Для CNT-800



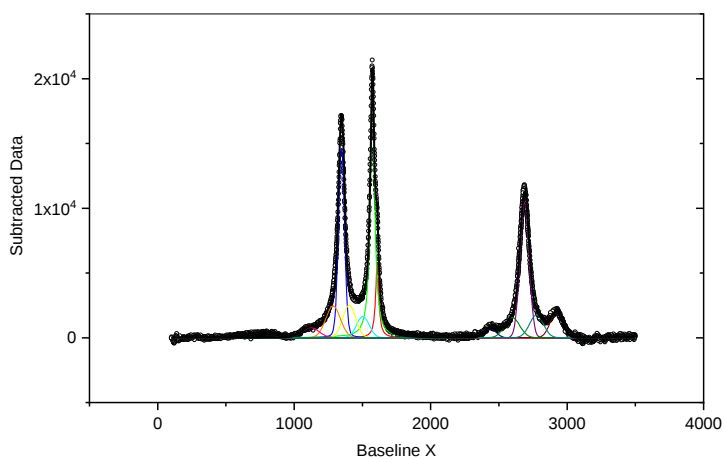
Peak Analysis



d. Для CNT-IH-300

Peak Analysis

Data Set:[cntIH300]cnt-IH-300!B Date:14.12.2025
 BaseLine:Line
 Chi²=4,88997E+004 Adj. R-Square=9,95134E-001 # of Data Points=4016
 SS=1,96283E+008 Degrees of Freedom=4014

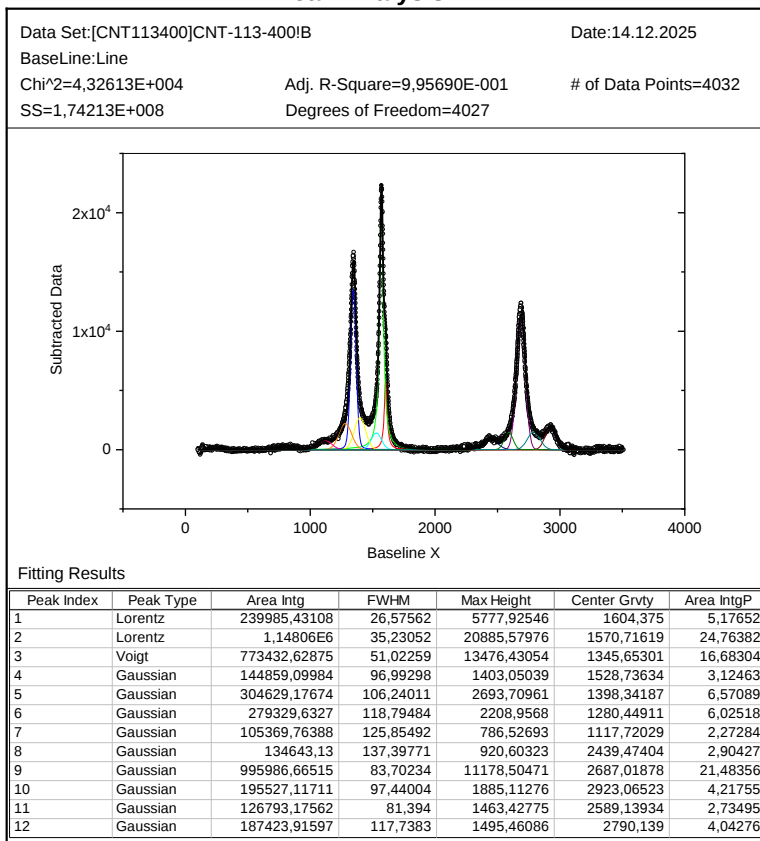


Fitting Results

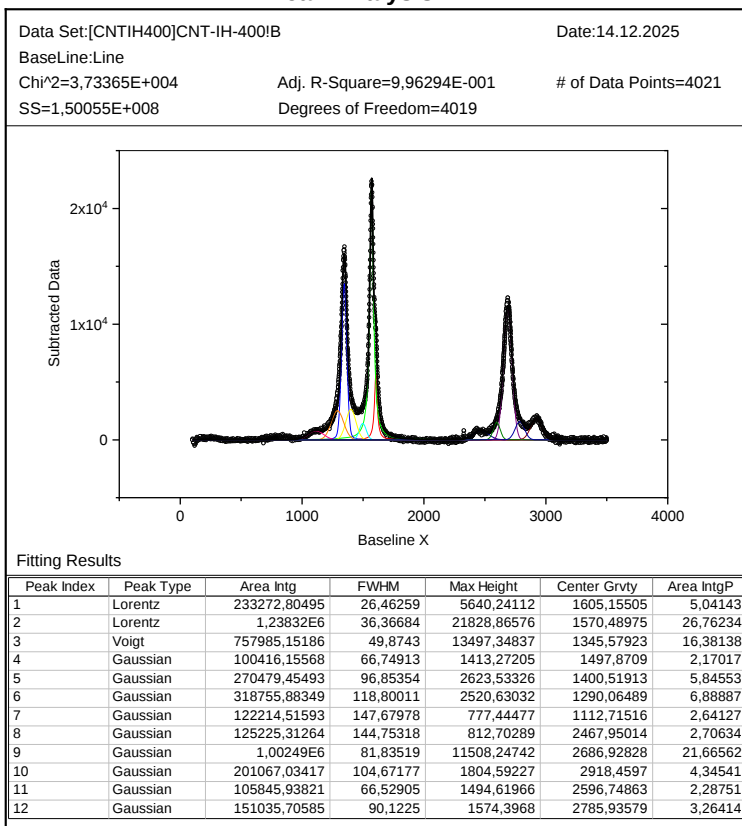
Peak Index	Peak Type	Area Intg	FWHM	Max Height	Center Grvty	Area IntgP
1	Lorentz	250739,06075	28,4283	5645,45413	1608,55225	5,22148
2	Lorentz	1,13305E6	37,23171	19512,3149	1573,36168	23,59502
3	Voigt	859593,47389	52,41328	14609,56969	1346,65301	17,90048
4	Gaussian	189400,57442	108,70032	1636,88534	1503,09085	3,94415
5	Gaussian	298783,97764	112,01387	2505,83974	1403,51913	6,22199
6	Gaussian	329362,31397	126,35143	2448,84633	1284,96755	6,85876
7	Gaussian	123757,71989	146,65023	792,7885	1119,47951	2,57718
8	Gaussian	81885,48217	100,88752	762,49545	2433,82855	1,70521
9	Gaussian	877231,29575	78,85056	10451,46429	2687,84153	18,26778
10	Gaussian	219890,00473	106,14815	1946,08072	2920,06523	4,57907
11	Gaussian	215108,54508	129,23314	1563,69322	2597,3924	4,4795
12	Gaussian	223266,82073	119,60101	1753,70741	2775,21411	4,64939

е. Для CNT-IH-400

Peak Analysis



Peak Analysis



f. Для CNT-IH-200

Peak Analysis

Data Set:[cntIH200]cnt-IH-200!B

Date:14.12.2025

BaseLine:Line

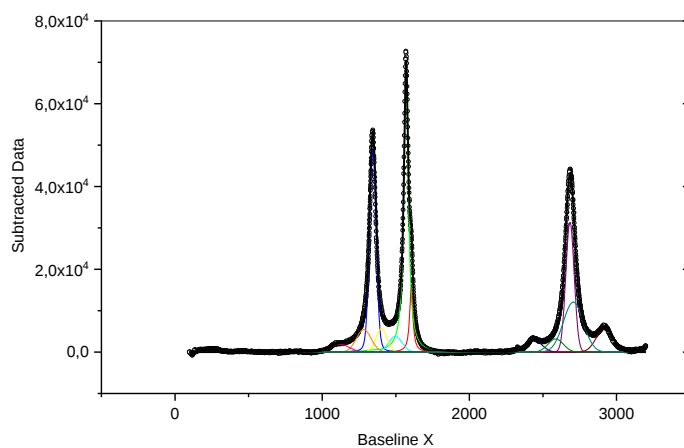
Chi^2=4,74197E+005

Adj. R-Square=9,95835E-001

of Data Points=3441

SS=1,62602E+009

Degrees of Freedom=3429

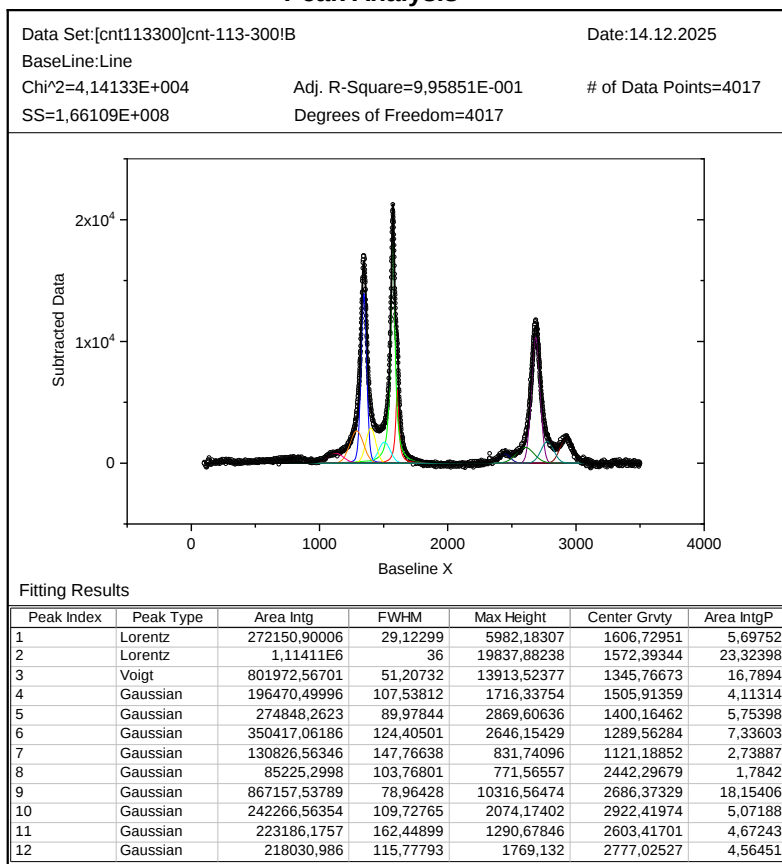


Fitting Results

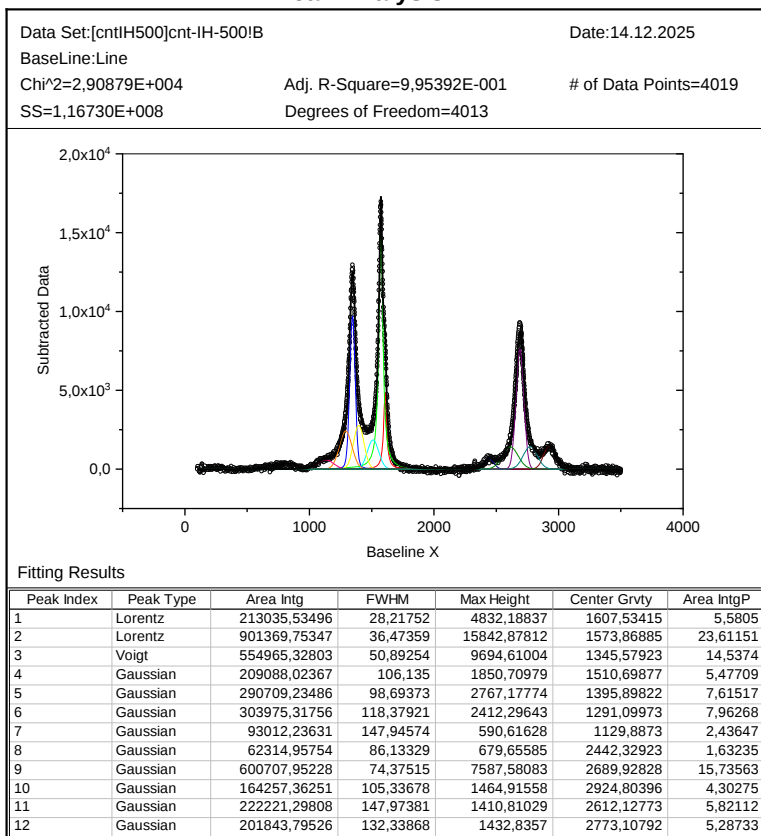
Peak Index	Peak Type	Area Intg	FWHM	Max Height	Center Grvty	Area IntgP
1	Lorentz	636710,94938	26,23676	15533,13119	1605,25533	4,20093
2	Lorentz	3,80801E6	36,03235	67782,42123	1570,39695	25,12471
3	Voigt	2,89525E6	52,72151	48711,85962	1343,98473	19,10244
4	Gaussian	430000	106,69843	3785,97914	1498,15348	2,83708
5	Gaussian	532243,52358	88,7264	5635,40736	1403,05703	3,51167
6	Gaussian	682198,40014	118,03587	5429,55805	1282,23624	4,50105
7	Gaussian	300427,44425	147,31208	1915,88321	1119,55951	1,98218
8	Gaussian	395219,05217	123,62998	3003,18355	2438,40465	2,6076
9	Gaussian	2,2288E6	66,84841	31321,91568	2683,78348	14,70533
10	Gaussian	803032,3703	129,29242	5834,82524	2917,8789	5,2983
11	Gaussian	409131,41097	120,41276	3191,96497	2586,28507	2,69939
12	Gaussian	2,0354E6	158,19783	12086,98501	2706,20265	13,42932

g. Для CNT-IH-500

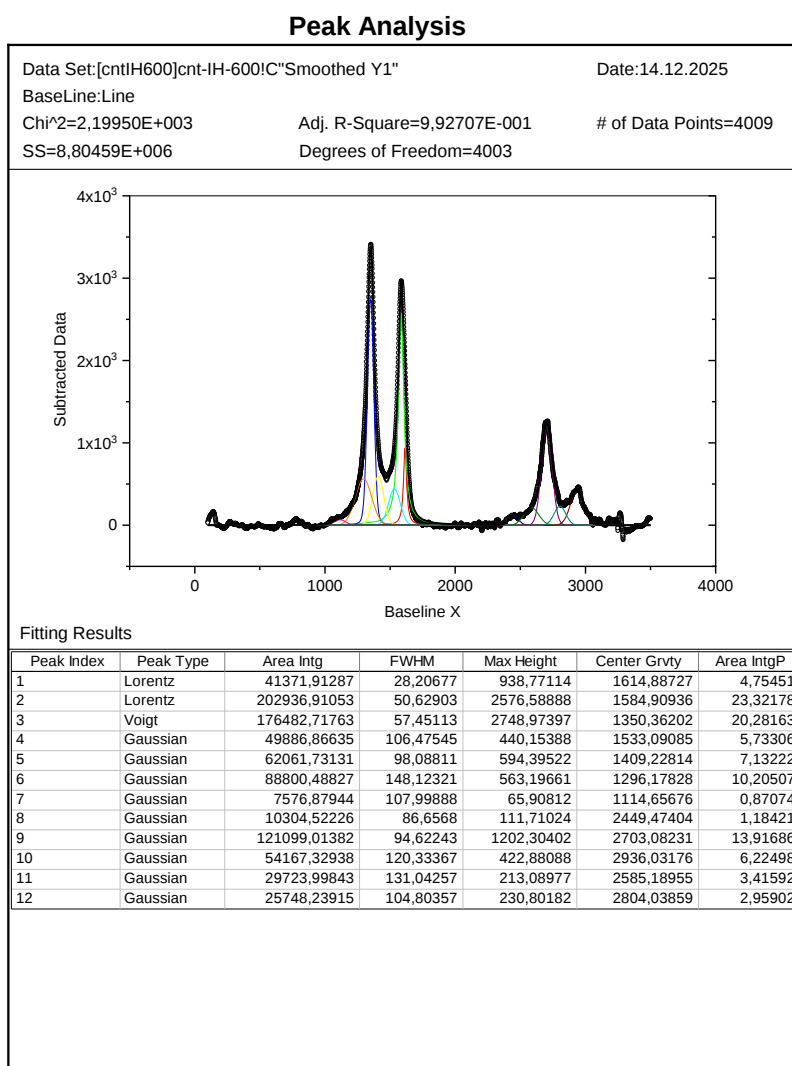
Peak Analysis



Peak Analysis



h. Для CNT-IH-600



i. Для CNT-IH-700

Peak Analysis

Data Set:[cntIH700]cnt-IH-700!B

Date:14.12.2025

BaseLine:Line

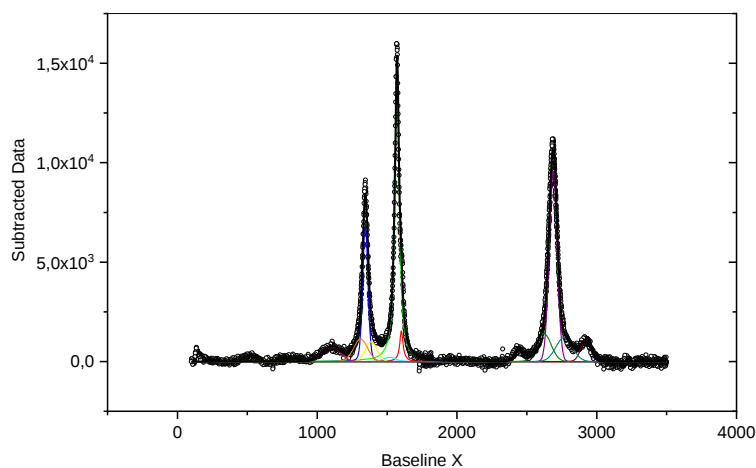
Chi^2=3,00106E+004

Adj. R-Square=9,94252E-001

of Data Points=4018

SS=1,20403E+008

Degrees of Freedom=4012



Fitting Results

Peak Index	Peak Type	Area Intg	FWHM	Max Height	Center Grvty	Area IntgP
1	Lorentz	69334,55105	28,85672	1538,04151	1602,19775	2,43434
2	Lorentz	862934,84082	36,88365	14999,93259	1571,00717	30,2977
3	Voigt	344537,44907	44,43907	6819,96043	1344,00751	12,09673
4	Gaussian	24145,86299	106,63772	212,71576	1517,85007	0,84776
5	Gaussian	104149,4246	98,153	996,82997	1386,4556	3,65669
6	Gaussian	141529,6302	118,03	1126,4781	1310,0444	4,96911
7	Gaussian	116337,7807	147,01212	743,42203	1104,25205	4,08463
8	Gaussian	44811,58666	66,49023	633,14076	2439,36031	1,57334
9	Gaussian	682901,74785	67,09668	9561,47719	2687,84153	23,97672
10	Gaussian	94948,27936	85,40075	1044,46335	2920,88798	3,33364
11	Gaussian	183628,01275	122,59883	1407,08517	2621,3166	6,44719
12	Gaussian	178927,27198	138,96465	1209,59507	2767	6,28215

ј. Для CNT-IH-800

Peak Analysis

Data Set:[CNTIH800]CNT-IH-800!B

Date:14.12.2025

BaseLine:Line

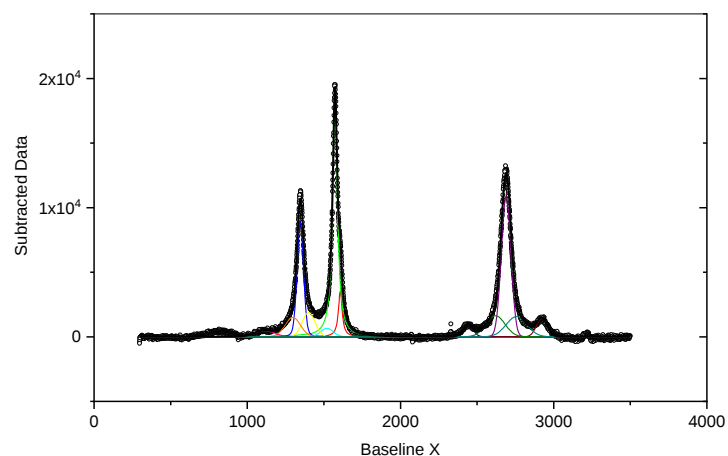
Chi²=3,03946E+004

Adj. R-Square=9,95976E-001

of Data Points=3442

SS=1,04557E+008

Degrees of Freedom=3440



Fitting Results

Peak Index	Peak Type	Area Intg	FWHM	Max Height	Center Grvty	Area IntgP
1	Lorentz	157445,50124	28,79584	3501,54256	1607,02186	4,14872
2	Lorentz	1,05952E6	36,64842	18545,91233	1572,63497	27,91868
3	Voigt	493133,79859	49,45249	8831,81412	1346,2623	12,99419
4	Gaussian	67207,09168	96,39266	654,99642	1520,27322	1,77092
5	Gaussian	196149,75291	98,01226	1880,0749	1400,51913	5,16859
6	Gaussian	189050,93771	118,34337	1500,73045	1296,63934	4,98154
7	Gaussian	72187,51845	147,6	459,4556	1115,87432	1,90216
8	Gaussian	76948,53409	77,31347	935,00294	2439,89071	2,02761
9	Gaussian	842139,30636	72,72074	10879,1118	2689,57377	22,19056
10	Gaussian	124400,28063	82,69139	1413,2821	2922,54645	3,27798
11	Gaussian	251722,00629	145,07675	1630,01331	2620,16393	6,63293
12	Gaussian	265125,54456	158,86743	1567,7777	2757,81421	6,98612