

Національний технічний університет України  
“Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського”  
ХІМІКО - ТЕХНОЛОГІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
Кафедра технології неорганічних речовин, водоочищення  
та загальної хімічної технології

"На правах рукопису"  
УДК \_\_\_\_\_

«До захисту допущено»  
в/о завідувача кафедри

\_\_\_\_\_ Толстопалова Н.М.  
(підпис) (ініціали, прізвище)  
“ ” 201\_ р.

МАГІСТЕРСЬКА ДИСЕРТАЦІЯ

зі спеціальності 161 Хімічні технології та інженерія

(код та назва спеціальності)

спеціалізації Хімічні технології неорганічних речовин та водоочищення

на тему: \_\_\_\_\_

Виконала студентка групи ХН – 81мп Біла Катерина Олександрівна \_\_\_\_\_

(шифр групи)

(прізвище, ім'я, по батькові)

(підпис)

Науковий керівник к.х.н., доц. Донцова Т.А. \_\_\_\_\_

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

(підпис)

Консультанти:

з економіко-організаційних рішень доц., к.т.н. Підлісна О.А. \_\_\_\_\_

(назва розділу)

(посада, вчене звання, науковий ступінь, прізвище, ініціали)

(підпис)

з охорони праці \_\_\_\_\_

(назва розділу)

доц., к.т.н. Полукаров Ю.О. \_\_\_\_\_

(посада, вчене звання, науковий ступінь, прізвище, ініціали)

(підпис)

Рецензент \_\_\_\_\_

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

(підпис)

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

Студент \_\_\_\_\_

(підпис)

Київ – 2019

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

Факультет хіміко-технологічний  
 (повна назва)

Кафедра технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології  
 (повна назва)

Рівень вищої освіти – другий (магістерський) за освітньо-професійною програмою

Спеціальність (спеціалізація) 161 Хімічні технології та інженерія (Хімічні технології неорганічних речовин та водоочищення)  
 (код і назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ  
 в/о завідувача кафедри ТНР, В  
 та ЗХТ

\_\_\_\_\_ Н.М Толстопалова  
 (підпис) (ініціали, прізвище)

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**ЗАВДАННЯ**  
**на магістерську дисертацію студенту**  
Білої Катерини Олександрівни  
 (прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема дисертації

науковий керівник дисертації \_\_\_\_\_,  
 (прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ р. № \_\_\_\_\_

2. Строк подання студентом дисертації \_\_\_\_\_

3. Об'єкт дослідження \_\_\_\_\_ -

4. Вихідні дані:

5. Перелік завдань, які потрібно розробити

6. Орієнтовний перелік ілюстративного (графічного) матеріалу результати експериментальних досліджень; розроблена технологічна схема викладені в презентації

7. Орієнтовний перелік публікацій – \_\_\_\_\_

8. Консультанти розділів дисертації

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
Економічний	Підлісна О.А.		
Охорона праці	Полукаров Ю.О.		

9. Дата видачі завдання 01 листопада 2019

## РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка 38 стор.; 11 рис.; 6 табл.; 21 посилання.

Об'єкт дослідження – титан (IV) оксид з допущенням станумом.

Предмет дослідження – умови синтезу нанокристалічного титану оксиду та фізико-хімічні його характеристики.

Мета роботи – полягає в синтезі зразків різними методами, охарактеризувати фотокаталітичні властивості отриманих зразків.

Проведено літературний огляд щодо необхідності модифікації титану оксиду і методи синтезу покращеного фотокаталізатора. Отримано зразки титану (IV) оксиду і стануму оксиду гідротермальним методом та проведено їх характеристичну.

ГЕТЕРОГЕННИЙ ФОТОКАТАЛІЗ, НАНОЧАСТИНКИ, ТИТАН (IV) ОКСИД, СТАНУМ (II) ОКСИД, АНАТАЗ, РУТИЛ, НАНОКОМПОЗИТ, ГІДРОТЕРМАЛЬНИЙ СИНТЕЗ.

## ABSTRACT

Explanatory note: 38 p.; 11 figures; 6 tables; 21 references.

The object of the study - titanium (IV) oxide with Sn doping.

Subject of research - synthesis of nanocrystalline of titanium (IV) oxide with Sn doping and its physico-chemical properties characterization.

The purpose of the work is to synthesize specimens by various methods and further characterization of photocatalytic properties of the obtained samples.

A literature review on the need for modification of titanium oxide and methods of synthesis of photocatalyst with doping was carried out. The titanium (IV) oxide with Sn doping was obtained and characterized.

HETEROGENEOUS PHOTOCATALYSIS, NANOPARTICLES,  
TITANIUM (IV) OXIDE, STANNUM (II) OXIDE, ANATASE, RUTILE,  
NANOCOMPOSITE, HYDROTHERMAL.

## ЗМІСТ

ВСТУП.....	8
1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД.....	9
1.1 Характеристика $\text{TiO}_2$ .....	9
1.2 Фотокаталітичні властивості $\text{TiO}_2$ .....	11
1.3 Використання $\text{TiO}_2$ .....	15
1.4 Модифікації $\text{TiO}_2$ .....	15
1.5 $\text{TiO}_2$ з допуванням зі Sn.....	20
1.6 Синтез нанокompозиту $\text{TiO}_2\text{-SnO}_2$ .....	22
1.6.1 Золь-гель метод.....	22
1.6.2 Гідротермальний метод синтезу .....	23
2 ОБ'ЄКТИ, МЕТОДИКИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ .....	25
2.1 Реактиви та матеріали .....	25
2.1.1 Реактиви для синтезу.....	25
2.1.2 Допоміжні матеріали .....	29
2.1.3 Продукти синтезу .....	29
2.2 Методики синтезу $\text{TiO}_2\text{-SnO}_2$ .....	30
2.2.1 Синтез нанокompозитів $\text{TiO}_2\text{-SnO}_2$ одноетапним гідротермальним методом.....	31
2.2.1 Синтез нанокompозитів $\text{TiO}_2\text{-SnO}_2$ двоетапним гідротермальним методом.....	32
2.3 Метод дослідження фотокаталітичних та сорбційних властивостей .....	33
2.4 Рентгенофлюоресцентний аналіз.....	34
2.4 Рентгенофлюоресцентний аналіз.....	35

2.5 Дослідження кислотності .....	35
3 ЕКСПЕРЕМЕНТАЛЬНА ЧАСТИНА .....	36
3.1 Результати рентгенофазового аналізу .....	36
3.2 Результати хімічного аналізу .....	42
3.3 Результати дослідження кислотності .....	43
3.4 Характеристика фотокаталітичних властивостей зразків .....	44
4 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ .....	56
4.1 Охорона праці .....	56
4.1.1 Виявлення і аналіз шкідливих і небезпечних виробничих факторів. Заходи з охорони праці .....	56
4.2 Безпека в надзвичайних ситуаціях.....	62
4.2.1 Атестація робочих місць .....	62
4.2.2 Пожежна безпека .....	64
4.2.3 Безпека проведення експерименту .....	66
4.2.4 Аналіз небезпеки об'єкта .....	68
5 ЕКОНОМІЧНА ЧАСТИНА МАГІСТЕРСЬКОЇ ДИСЕРТАЦІЇ .....	72
5.1 Розрахунок ціни інноваційної пропозиції на ринку .....	73
5.1.2 Матеріальна, документальна та організаційно-технічна підготовка виробництва.....	74
5.1.3 Персонал та аналіз відповідальних осіб .....	80
5.2 Ключові фактори успіху проекту методом Шонфільда .....	83
5.3 Розрахунок точки беззбитковості підприємства .....	85
5.4 Економічний ефект від підвищення якості сировини .....	86
ВИСНОВКИ .....	89
СПИСОК ПОСИЛАНЬ .....	90

## ВСТУП

Технології окислення для очищення стічних вод широко досліджуються для очищення органічних забруднень. Для цього використовували озонацію, методи, засновані на  $\text{H}_2\text{O}_2$ , тощо. Гетерогенний фотокаталіз - один з найсучасніших процесів окислення, застосовний для знезараження води. Фотокаталізатор - це твердий матеріал, який здатний утворювати, поглинаючи легкі кванти, хімічні перетворення учасників реакції, неодноразово вступаючи з ними в проміжні хімічні взаємодії та регенеруючи його хімічний склад після кожного циклу таких взаємодій. Основними перевагами фотокаталізу в очисних спорудах є, що умови реакції для фотокаталізу є м'якими, час реакції невеликий, і потрібен менший хімічний внесок і фотокаталізатор залишається хімічно незмінним під час і після фотокаталізу і може бути використаний кілька разів.

Фотокаталітичне окислення з використанням титану (IV) оксиду в якості фотокаталізатора останнім часом привертає до себе значну увагу завдяки економічній ефективності та можливості проведення процесу за умов навколишнього середовища, а також високій каталітичній стабільності  $\text{TiO}_2$ . Проте, практичне застосування титану (IV) оксиду обмежене через його низьку ефективність, обумовлену надто швидкою рекомбінацією фотозбуджених електронів і дірок, що призводить до низького квантового виходу. Для збільшення фотокаталітичної активності титану його видозмінюють шляхом додавання до нанокompозитів металів чи неметалів.

Завданням практики було синтезувати сполуки титану (IV) оксиду з додаванням модифікатора - стануму і характеризувати їх фотокаталітичну активність в порівнянні з чистим оксидом титану.



## 1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

### 1.1 Характеристика $\text{TiO}_2$

Титан (IV) оксид є одним з найбільш досліджених наноматеріалів протягом останніх десятиліть, приділяючи основну увагу в галузі енергетики та навколишнього середовища. Основний прорив відбувся у 1972 році, коли Фуджісіма та Хонда виявили ефект фотосенсибілізації електроду  $\text{TiO}_2$  для електролізу води на водень та кисень при опроміненні ультрафіолетовим світлом. Починаючи з 1972 р. Про каталізatori на основі  $\text{TiO}_2$  повідомляється багато фотокаталітичних досліджень через його високу поверхню, біологічну та хімічну стійкість, низьку вартість, низьку токсичність та високу фотокаталітичну активність. Як правило,  $\text{TiO}_2$  існує у чотирьох різних фазах: анатаз (тетрагональний), рутил (тетрагональний), брукіт (орторомбічний) і  $\text{TiO}_2$  (моноклінічний).  $\text{TiO}_2$  в анатазній формі проявляє високу фотокаталітичну активність порівняно з рутилом та брукітом. Усі споруди є октаедрами  $\text{TiO}_6$ , але відрізняються своєю ґрадкою. На рисунку 1.1 наведено структуру ґрадки, а на малюнку 1.2 наведено кристалічну структуру.

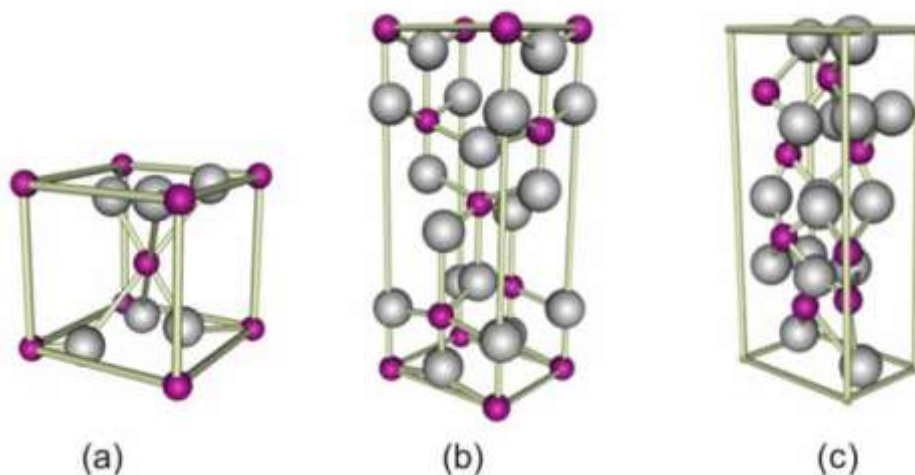


Рисунок 1.1 – Одиничні градки (А) рутилу, (В) анатазу та (С) брукіта.  
Сіра і червона сфери представляють кисень і титан відповідно [1].

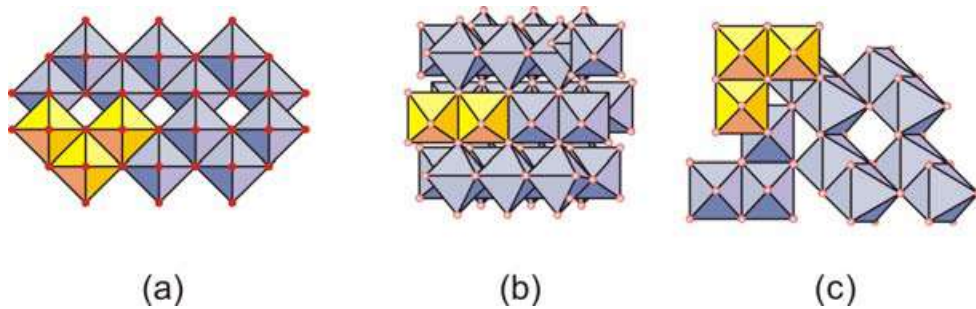


Рисунок 1.2 – Кристалічна структура (А) анатазу, (В) рутилу та (С) брукіта [2].

Загалом, вивчали характеристики фотокаталізатора та методи отримання наночастинок діоксиду титану з структурою анатазу і рутилу. Перш за все, існує різниця в діапазоні діпазону, анатаз має приблизно 3,2 еВ смуги діпазону, а рутил має близько 3,0 еВ смуги діпазону. Оскільки абсорбція обернено пропорційна зазору, рутил може поглинати більше світла, ніж анатаз. Згідно з вимірюваннями фотопровідності, час життя електронно-дірової пари в анатазі довший, ніж один у рутилі, тому більше носіїв заряду в анатазі бере участь у поверхневих реакціях. Крім того, існують дослідження з токсикології наночастинок діоксиду титану діоксиду титану. Результати показують, що анатаз є більш токсичний, ніж рутил.

## 1.2 Фотокаталітичні властивості $\text{TiO}_2$

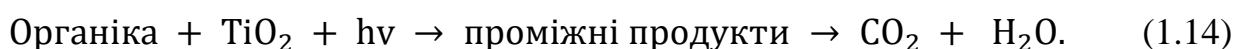
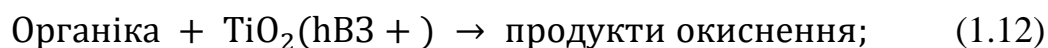
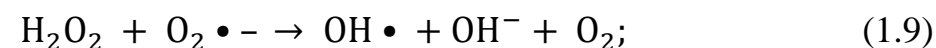
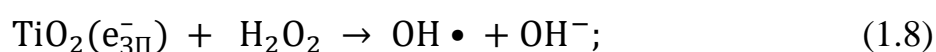
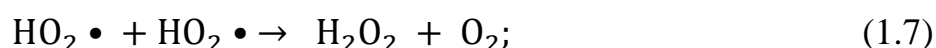
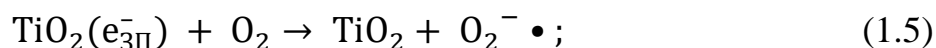
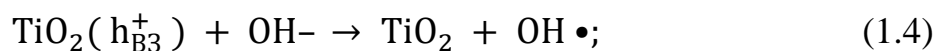
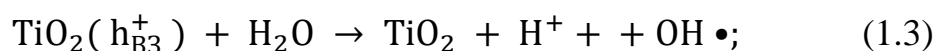
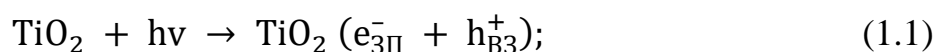
Серед альтернативних методів очищення води, фотокаталіз на основі  $\text{TiO}_2$  привернув велику увагу завдяки стійкості матеріалу, нетоксичності та високій активності. У цьому матеріалі пари електрон-дірка, що утворюються потоком фотонів, відокремлюються один від одного і мігрують до каталітично активних ділянок на поверхні фотокаталізатора. Фотогенеровані носії здатні викликати реакцію розщеплення води та розкласти органічні забруднювачі. Залежно від реакційного шляху в розчині можуть бути створені високореактивні радикали ( $\text{OH}\cdot$ ,  $\text{O}\cdot$ ) і  $\text{H}_2\text{O}_2$ . Ці реагенти здатні розкласти та мінералізувати більшість органічних забруднюючих речовин у розчині, а також знищувати бактерії.

Фотокаталітичні реакції завжди є результатом складних і одночасних процесів, що відбуваються на поверхні нанорозмірного покриття [3]:

Етапи фотокаталізу:

- 1) дифузія поллютантів з основного розчину до поверхні фотокаталізатора;
- 2) внутрішня дифузія поллютантів до активних груп на поверхні каталізатора;
- 3) адсорбція поллютантів;
- 4) взаємодія з органічними або неорганічними молекулами, розташованими на цій поверхні, шляхом реакцій окислення та відновлення. Ці процеси зображені на рисунку 2.3. На цьому малюнку енергійний фотон генерує пару  $e^-/h^+$ .
- 5) десорбція продуктів реакцій;
- 6) перенесення продуктів реакцій з поверхні каталізатора в основний розчин.

Механізм фотокаталітичного окиснення органічних речовин під дією ультрафіолетового випромінювання представлений наступними реакціями:



Коли напівпровідник поглинає фотон світла, енергія якого перевищує ширину забороненої зони ( $h\nu \geq E_g$ ), то електрон ( $e^-$ ) може переміститися з валентної смуги (ВЗ) до зони провідності (ЗП) з вакантного місця - "дірки" ( $h^+$ ). Електрон і "дірка" можуть переміщуватись до поверхні фотокаталізатора, де вони беруть участь у реакціях. Дірки реагують з  $\text{H}_2\text{O}$  або  $\text{OH}^-$  - використовуючи гідроксильні радикали  $\text{OH}^\bullet$  для реакцій (1.3) та (1.4), електрони реагують з киснем і використовують супероксидні радикали  $\text{O}_2^{\bullet -}$  для реакції (1.5). Гідроксильні радикали також можуть утворюватися у реакціях (1.6) - (1.10) і є основними окислювачами в фотокаталітичних окисних процесах. Загальна схема фотокаталітичного руйнування органічних речовин представлена в реакціях (1.14). Зображення процесу наведено на рисунку 1.3.

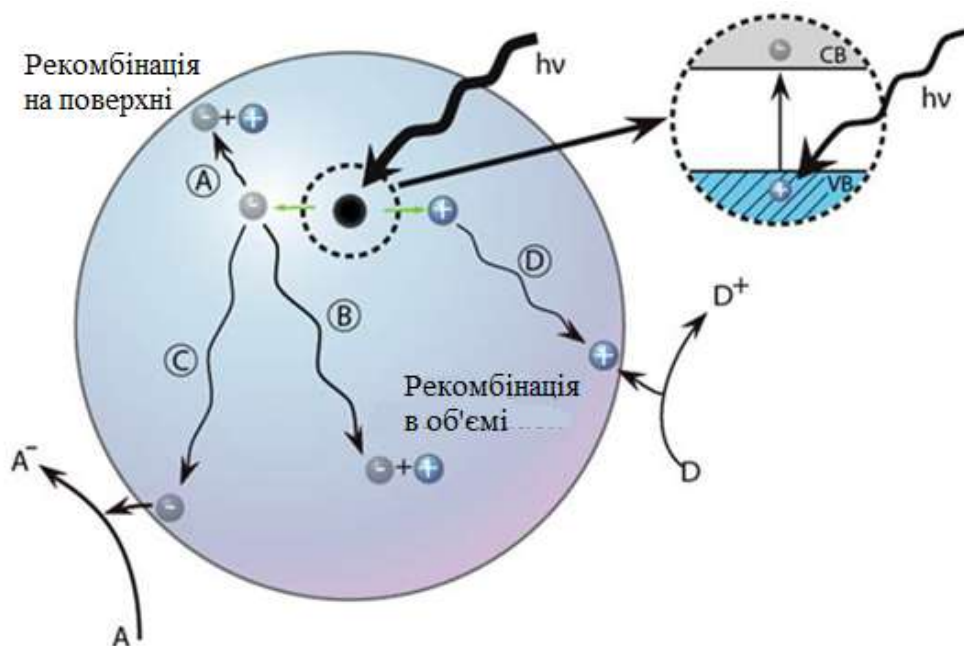


Рисунок 1.3 – Схематичне зображення явищ, що відбуваються в напівпровідниковому фотокаталізаторі. Фотогенеровані носії можуть рекомбінувати в поверхневій пастці (A) або в масі (B); в іншому випадку вони можуть взаємодіяти за акцепторською (C) або донорською (D) взаємодією з речовинами, які адсорбувалися на поверхні [4].

Оскільки відновлення або окислення за допомогою фотоіндукованих зарядів передбачає перенесення електронів, ці окислювально-відновні процеси зазвичай відбуваються з сполуками, адсорбованими на поверхні. У конкурентній боротьбі з процесами передачі носіїв заряду відбувається рекомбінація. Затримка процесів рекомбінації може ефективно підвищити фотокаталітичну активність. Тим самим наявність неглибоких центрів пасток на поверхні може продовжити середній термін служби пар  $e^- / h^+$ . Типовий часовий інтервал фотокаталітичних реакцій представлений на рисунку 1.4.

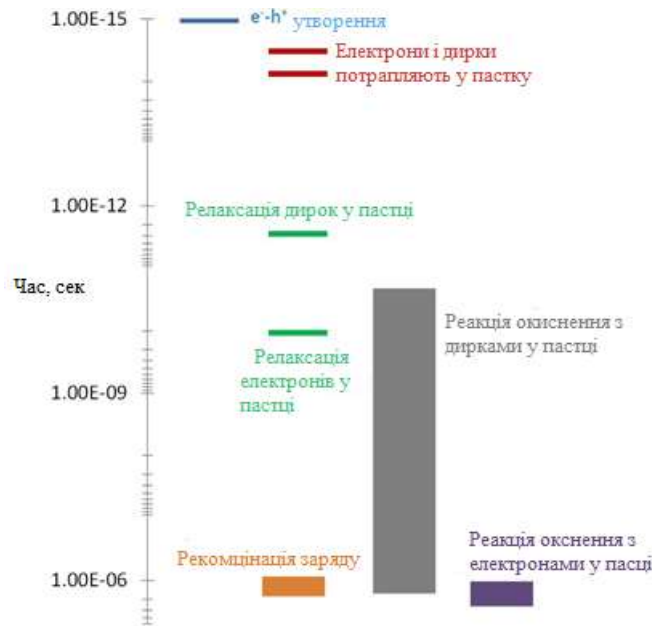


Рисунок 1.4 – Часова шкала фотокаталізу [5].

Більшість органічних забруднюючих речовин у воді можуть розкладатися та мінералізуватися на поверхні  $\text{TiO}_2$  при УФ-опроміненні. Очевидно, що на процеси мінералізації впливають декілька факторів: інтенсивність світла, рН, іони, дисперговані в розчині, тощо. Фотокаталітичні реакції  $\text{TiO}_2$  відповідають кінетиці першого порядку відносно концентрації адсорбованої органічної сполуки та  $\alpha$  порядку відносно інтенсивності світла [6]:

$$r = k\Gamma I^\alpha \quad (1.15)$$

де  $r$  - швидкість реакції,  $k$  константа першого порядку,  $\Gamma$  концентрація органічної сполуки для єдності поверхні та  $I$  інтенсивність світла. При високій інтенсивності  $0 < \alpha < 1$ , тоді як при низькій інтенсивності  $\alpha = 1$ .

Завдяки широкій смузі дії,  $\text{TiO}_2$  (рутил і анатаз) поглинає лише УФ-діапазон електромагнітного спектру. Однак сонячне світло містить невелику кількість ультрафіолетових фотонів ( $\sim 5\%$ ) [7]. Таким чином, за останні 20 років було розроблено кілька стратегій, які присвятили підвищення ефективності діоксиду титану при видимому (сонячному) опроміненні. Серед найбільш широко вивчених методів – це допування з перехідними металами та С.

### 1.3 Використання $\text{TiO}_2$

Існує багато областей застосування для наночастинок  $\text{TiO}_2$ , такі як очищення повітря, очищення води, знезараження, антибактеріальні засоби, зубну пасту, захист від УФ, для нанесення фарби (рис. 1.5).

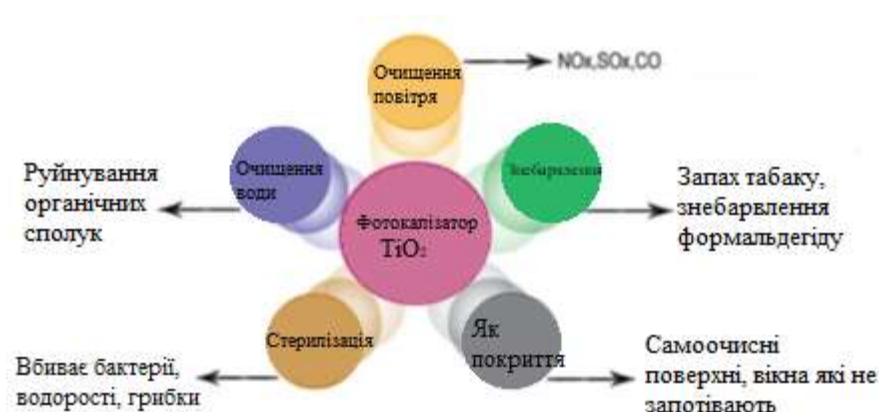


Рисунок 1.5 – Застосування  $\text{TiO}_2$  [8].

### 1.4 Модифікації $\text{TiO}_2$

$\text{TiO}_2$  страждає від низки недоліків, які обмежують її практичне застосування у фотокатализі. По-перше, фотогенеровані електрони та дірки співіснують у частинці титану та ймовірність їх рекомбінації висока. Це призводить до низьких швидкостей бажаних хімічних перетворень. Відносно велика енергія зазору в діапазоні ( $\sim 3,2$  eV) вимагає ультрафіолетового світла для фотоактивації, що призводить до дуже низької ефективності використання сонячного світла. УФ-світло займає лише близько 5% сонячного спектру порівняно з видимим світлом (45%) [9]. Більш того, оскільки структура  $\text{TiO}_2$  непориста і має полярну поверхню, вона виявляє низьку здатність до поглинання неполярних органічних забруднювачів. Наночастинки  $\text{TiO}_2$  також

страждають від агрегації та агломерації, які впливають на фотоактивність, а також на поглинання світла.

Використовують декілька технологій для підвищення ефективності  $\text{TiO}_2$ . Ці стратегії спрямовані на розширення довжини хвилі фотоактивації  $\text{TiO}_2$  у видиму область спектру, тим самим збільшуючи використання сонячної енергії; запобігання рекомбінації пари електрон / дірка і, що дозволяє більшій кількості носіїв заряду успішно дифундувати на поверхню; збільшуючи спорідненість поглинання  $\text{TiO}_2$  до органічних забруднюючих речовин, а також запобігаючи агрегації та агломерації частинок  $\text{TiO}_2$ , одночасно полегшуючи їх відновлення з очищеної води [10].

#### 1.4.1 Допування металом

Металеве допування широко застосовується у розробці модифікованих фотокаталізаторів  $\text{TiO}_2$  для ефективної роботи під видимим світлом. Фотоактивність фотокаталізаторів  $\text{TiO}_2$ , легованих металом, значною мірою залежить від природи іона легуючої речовини та її природи, її рівня, методу, що використовується в легуванні, типу  $\text{TiO}_2$ , а також реакції, для якої використовується каталізатор та умови реакції. Механізм пониження енергії зазору  $\text{TiO}_2$  з металевим легуванням показаний на рисунку 2.6 [11]. Вважається, що легування  $\text{TiO}_2$  металами призводить до перекриття орбіталей  $\text{Ti } 3d$  з рівнями  $d$  металів, викликаючи зсув у спектрі поглинання до більших довжин хвиль, що, в свою чергу, сприяє використанню видимого світла для фотоактивації  $\text{TiO}_2$ .



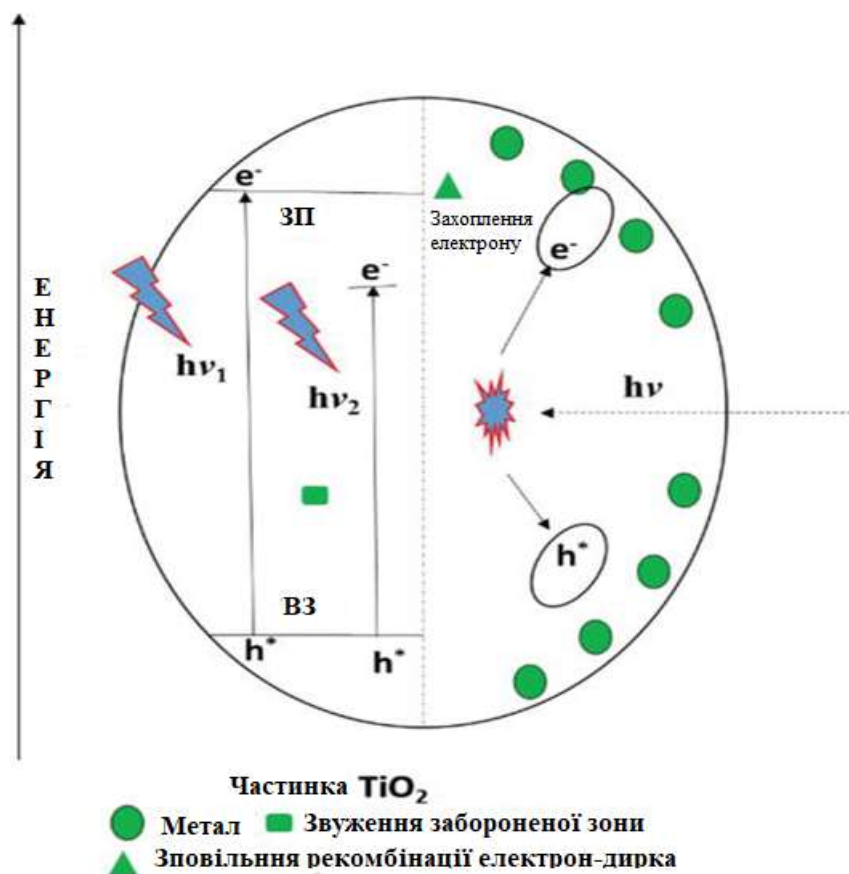


Рисунок 1.6 – Механізм пониження смуги зазору металевого  $\text{TiO}_2$ , легованого металом [11].

Було встановлено, що легування наночастинок  $\text{TiO}_2$  з Li, Na, Mg, Fe та Co шляхом високоенергетичного кульового помелу з нітратами металу розширює діапазон реакції видимого світла  $\text{TiO}_2$ . У зразку, легованому Na, Ti існував як  $\text{Ti}^{4+}$  і  $\text{Ti}^{3+}$ , і конверсія між  $\text{Ti}^{4+}$  і  $\text{Ti}^{3+}$  була встановлена для запобігання рекомбінації електронів та ( $e^-$ ) та дірок ( $h^+$ ). Допування іонів металу сприяв перетворенню кристалічних фаз, які генерували електрони ( $e^-$ ) та дірки ( $h^+$ ). Мезопористий  $\text{TiO}_2$ , приготований методом золь-гелю та легований різними рівнями Pt (1-5 мас.%), призвів до високої поверхні поверхні  $\text{TiO}_2$  з підвищеними каталітичними характеристиками у фотокаталітичному розщепленні води. Pt- $\text{TiO}_2$  показали оптимальні каталітичні показники та зменшення енергії зазору  $\text{TiO}_2$  з 3,00 до 2,34 eV при підвищеній ємності накопичення електронів, що призвело до мінімізації швидкості рекомбінації електронної дірки. Наночастинки благородних металів, такі як Ag, Pt, Pd, Rh

та Au, також були використані для модифікації  $\text{TiO}_2$  для фотокаталізу. Наночастинки благородного металу виступають посередником для зберігання та транспортування фотогенерованих електронів з поверхні  $\text{TiO}_2$  до акцептора. Фотокаталітична активність збільшується зі зниженням швидкості рекомбінації носіїв заряду.

#### 1.4.2. Неметалічний допущання

Наночастинки  $\text{TiO}_2$  були леговані неметалами, такими як C, B, I, F, S та N. Повідомляється, що неметалевий допущання є більш підходящими для поширення фотокаталітичної активності  $\text{TiO}_2$  у видиму область порівняно з металевим. Це можна віднести до домішкових станів, що знаходяться біля краю валентної зони, однак вони не виступають носіями заряду, і їх роль як рекомбінаційних центрів може бути зведена до мінімуму. Як показано на рисунку 1.7 [12], змішування р-станів легованого неметалу зміщує край валентної зони вгору і звужує енергію смуги зазору легованого фотокаталізатора  $\text{TiO}_2$ . Повідомлялося, що наночастинки  $\text{TiO}_2$ , леговані азотом та вуглецем, виявляють більшу фотокаталітичну активність при опроміненні видимим світлом порівняно з іншими неметалевими допантами.

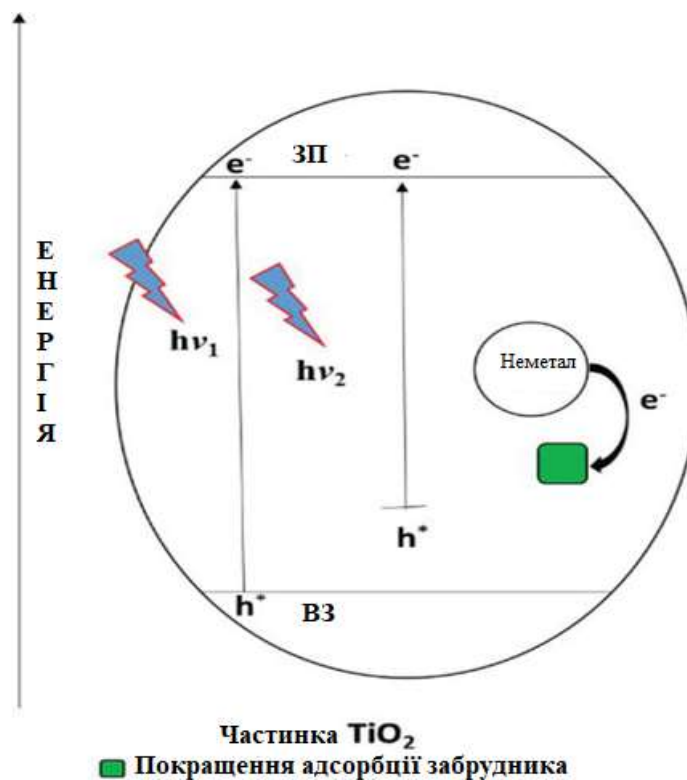


Рисунок 1.7 – Механізм звуження енергетичної смуги для неметалевого допування  $\text{TiO}_2$  [11].

#### 1.4.3 Наноструктурований $\text{TiO}_2$

Серед різних стратегій, які використовувались для посилення фотокаталітичної активності  $\text{TiO}_2$ , покращення морфології, кристалічної структури та поверхні також вважався важливим та широко дослідженим підходом для досягнення кращих фотокаталітичних показників. Для досягнення різної морфології та більшої площі поверхні вивчали різні впорядковані структури. Нанотрубки  $\text{TiO}_2$ , нанопроводи, наносферита ін. Повідомлялося, що анодні нанотрубки  $\text{TiO}_2$  дозволяють забезпечити високий контроль за поділом фотогенерованих носіїв заряду у фотокаталітичних реакціях. Масив нанотрубок є ключовою перевагою в тому, що модифікації нанотрубок можуть бути вбудовані ділянки спеціально у стінку трубки або у визначені місця уздовж стінки трубки. Це дозволяє визначати активні зони, що призводять до підвищення фотокаталітичної ефективності та селективності.

### 1.5 $\text{TiO}_2$ з допуванням зі Sn

Змішані оксиди титану та олова вивчали для різних сфер застосувань, таких як газочутливість, антибактеріальна активність, тристоронній каталізатор та фотокаталіз.  $\text{TiO}_2$  широко використовується як екологічно чистий фотокаталізатор через різні його якості, такі як оптичні властивості, низька вартість, висока фотокаталітична активність, хімічна стійкість та нетоксичність. Однак його практичне застосування видається обмеженим з кількох причин, серед яких одна - низька ефективність використання фотонів, а інша - використовувати ультрафіолетове випромінювання як джерело збудження. Для вирішення цих проблем модифікація цих каталізаторів також була здійснена шляхом допування та з'єднання з різними оксидами металів. За останні кілька років було проведено ряд досліджень, пов'язаних з  $\text{TiO}_2$ , поєднаними з оксидами металів, такими як  $\text{SnO}_2$ ,  $\text{ZnO}$ ,  $\text{WO}_3$  та  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ . Серед інших оксидів металів  $\text{SnO}_2$  відіграє дуже важливу роль у фотокаталітичному застосуванні завдяки виробництву підвищених гідроксильних радикалів. Для синтезу оксидів металів були адаптовані різні методи синтезу, такі як золь-гель, гідротермальний, тощо.

Оксид титану (IV) та оксид станів (IV) мають близькі значення зони провідності ( $0,68 \text{ \AA}$  для  $\text{Ti}^{4+}$  та  $0,71 \text{ \AA}$  для  $\text{Sn}^{4+}$ ) та мають схожі структурні (тетрагональна структура рутилового типу) та електронні властивості. Розрив смуг  $\text{SnO}_2$  і  $\text{TiO}_2$  (анатаза),  $\text{TiO}_2$  (рутил) становить  $3,8 \text{ eV}$  і  $3,2 \text{ eV}$ ;  $3,0 \text{ eV}$  відповідно, а потенціал зони провідності оксидного стану (IV) приблизно на  $0,5 \text{ В}$  більш позитивний, ніж у титанового (IV) оксиду. На малюнку 1.8 показаний механізм фотогенерації носіїв заряду в анатазо-рутильній модифікації композиційного фотокаталізатора  $\text{TiO}_2\text{-SnO}_2$ .

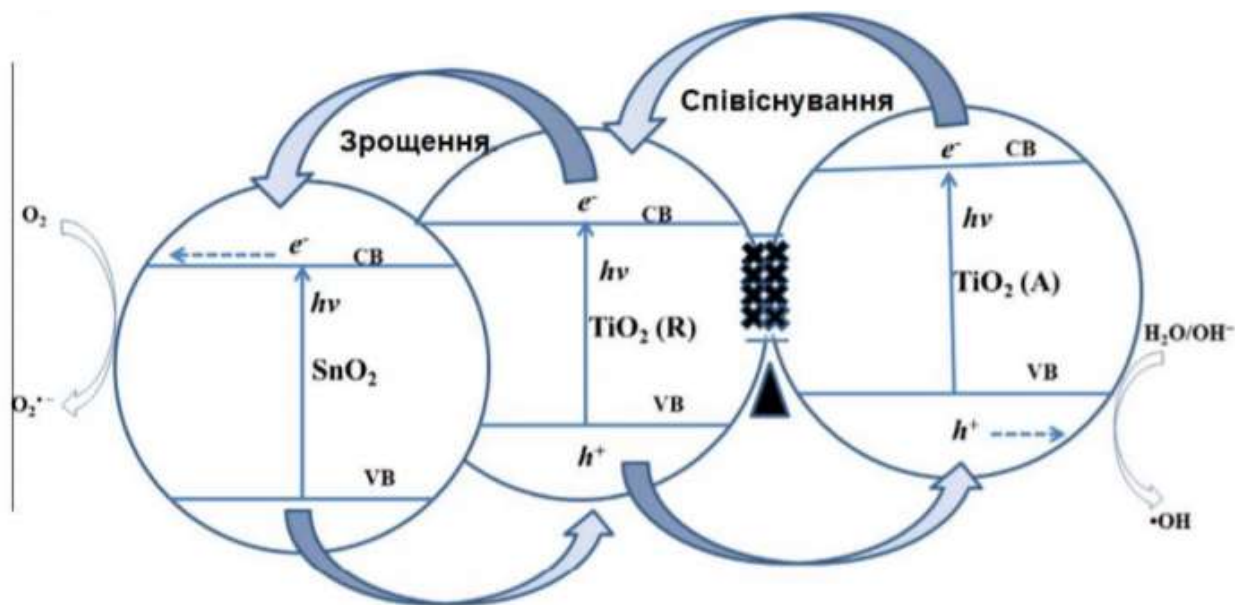


Рисунок 1.8 – Механізм фотогенерування носіїв зарядів в композитному фотокаталізаторі  $\text{TiO}_2\text{-SnO}_2$  анатазно-рутильної модифікації:  $\text{TiO}_2$  (R) – рутил;  $\text{TiO}_2$  (A) – анатаз [13].

На рисунку 1.8 видно, що при поєднанні двох напівпровідникових частинок  $\text{TiO}_2$  (R) і  $\text{SnO}_2$  провідникова смуга  $\text{SnO}_2$  діє як "пастка" для фотогенерованих електронів. Коли фотогенеровані отвори рухаються у зворотному напрямку, вони накопичуються у валентній смузі частинок  $\text{TiO}_2$  (R), тим самим збільшуючи ефективність розподілу носіїв заряду, збільшуючи їх термін експлуатації та зменшуючи ймовірність рекомбінації. Аналогічно відбувається розподіл заряду між анатазом та рутилом: електрони рухаються від  $\text{TiO}_2$  (A) до  $\text{TiO}_2$  (R) і далі в  $\text{SnO}_2$ , а отвори - у зворотному напрямку, утворюючи каскад. Як наслідок, електрони локалізуються в зоні провідності оксиду олова (IV), а отвори - у валентній зоні модифікацій анатази титану (IV) оксиду. Тому одночасна комбінація двох різних напівпровідників і двох фаз з різними рівнями енергії може значно збільшити передачу носіїв заряду, запобігаючи їх рекомбінації, що в цілому сприяє підвищенню фотоактивності такого композитного фотокаталізатора.

## 1.6 Синтез нанокompозиту $\text{TiO}_2\text{-SnO}_2$

Існує багато методик синтезу нанокompозитів, одні із них:

- Золь-гель
- Гідротермальний синтез
- Метод хімічного осадження
- Електроспінінг (метод електричного формування хімічних волокон)
- Полумєневий синтез

Кожен із методів має свої переваги та недоліки і дає можливість синтезувати різні структури нанокompозитів. Метод золь-гелю дозволяє рівномірно розподіляти реагенти, отримувати наночастинки різної пористості. Гідротермальний метод дозволяє отримувати оксиди без додаткової термічної обробки.

### 1.6.1 Золь-гель метод

Золь-гелевий процес - це волого-хімічна техніка, яка здебільшого застосовується в галузі матеріалознавства та керамічної інженерії. Це можна визначити як перетворення розчину-попередника в неорганічну тверду речовину через реакції полімеризації, викликані водою. Гідроліз утворює золь, який в основному є дисперсією колоїдних частинок у рідині, а конденсація призводить до утворення гелю. Золь-гелевий процес є дуже перспективним для синтезу та отримання неорганічних та органічно-неорганічних гібридних наноматеріалів, оскільки дозволяє використовувати низькі температури обробки ( $<100^\circ\text{C}$ ) та однорідність складу молекулярного рівня. Розмір і форма частинок легко контролювати, використовуючи метод золь-гелю.

Золь-гелевий процес дозволяє одержувати дрібні кулясті порошки однакового розміру і широко застосовується для синтезу матеріалів  $\text{TiO}_2$  і

зазвичай протікає на стадії каталізації кислотою алкоксидів титану (IV) [14]. Однією з найпривабливіших особливостей процесу золь-гелю є можливість формувати отриманий матеріал у потрібні форми, такі як волокно, плівка та монодисперсний порошок. У процесі золь-гелю застосовується кілька етапів та умов для контролю кінцевої морфології, як це запропоновано Мехротрою та Сінгхом на рисунку 1.9.

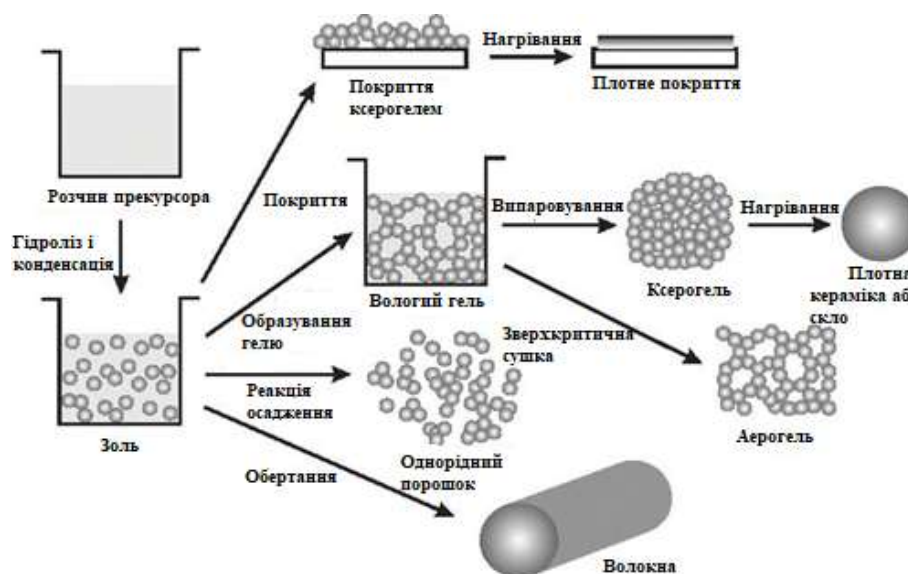


Рисунок 1.9 – Різні етапи процесу золь-гелю для контролю кінцевої морфології продукту [15].

### 1.6.2 Гідротермальний метод синтезу

Гідротермальний метод - це процес кристалізації речовини при високій температурі та високому тиску пари з використанням водного розчину матеріалу. Зазвичай його зображують як синтез кристалів або зростання кристалів із речовин, нерозчинних у звичайній температурі (100 °C) та тиску (<1 атм) [16]. Процес здійснюється в автоклавах під контрольованою температурою і тиском. Це дозволяє використовувати температури вище температури кипіння води / органічного розчин. Гідротермальний синтез характеризується як реакція на здуття, що виникає при розчиненні при

температурі над точкою розриву і при тиску вище бар Гідротермальна стратегія використовує, що за рахунок підвищення температури і тиску істотні властивості води і, як наслідок, змінюються її ємності як розчинника. Важливі характеристики, такі як іонна щільність продукту, теплопровідність, в'язкість, теплоємність та діелектрична константа, залежать від високого тиску та температури, і, настраюючи параметри синтезу, можна отримати конкретні властивості розчинника [17].

Переваги гідротермального методу полягають у тому, що це простий метод отримання морфології нанотрубок, варіація способу синтезу може бути реалізована для посилення властивостей різних властивостей  $\text{TiO}_2$ . Однак до недоліків можна віднести велику тривалість синтезу, необхідність висококонцентрованого розчину  $\text{NaOH}$  або кислоти. Крім того, гідротермальні методи утримуються від високої вартості обладнання та неможливості контролювати кристали в процесі їх зростання. На гідротермальний синтез не можна впливати як при температурі, так і під тиском нижче критичної точки для конкретного розчинника, над яким різниці між рідиною і паром зникають, і може відбуватися лише в надкритичних умовах. На гідротермальний метод впливають концентрація лугу, температура та час реакції. Температура важлива для сприяння росту кристалів та зародженню наночастинок. Як правило, у міру підвищення температури вихід, довжина та ступінь кристалічності нанотрубок також збільшуються і при оптимальній температурі між 100 і 200 °C. Зі збільшенням часу інкубації вихід також збільшується, але тривалий час призводить до морфологічних змін наночастинок, наприклад, нанотрубок на нановолокон [18].



## 2 ОБ'ЄКТИ, МЕТОДИКИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

### 2.1 Реактиви та матеріали

#### 2.1.1 Реактиви для синтезу

Титан (IV) ізопропоксид ( $C_{12}H_{28}O_4Ti$ ) – безбарвна (іноді жовтувата) рідина. Характеристику титану (IV) ізопропоксиду наведено в таблиці 2.1.

Таблиця 2.1 – Характеристика титану (IV) ізопропоксиду [19].

Показник	Розмірність	Величина
Молярна маса	г/моль	284,22
Температура кипіння	°C	232
Температура плавлення	°C	17,0
Густина при 20 °C	г/см <sup>3</sup>	0,96

У роботі використовувався титану (IV) ізопропоксид Titanium (IV) isopropoxide 98+% виробництва ACROS ORGANICS, Китай.

Ізопропіловий спирт ( $C_3H_7OH$ ) – прозора безбарвна рідина з різким запахом. Характеристику н-бутилового спирту наведено в таблиці 2.2

Таблиця 2.2 – Характеристика ізопропілового спирту [19].

Показник	Розмірність	Величина
Молярна маса	г/моль	60,09
Температура кипіння	°C	82,4
Температура плавлення	°C	– 89,5
Густина при 20 °C	г/см <sup>3</sup>	0,7851
Температура кипіння азеотропу з водою	°C	80,37
Вміст спирту у складі азеотропу	% мас.	87,7

Станум (II) хлорид ( $\text{SnCl}_2$ ) – безбарвна (іноді жовтувата) рідина, що димить на повітрі. Характеристику стануму (II) хлориду наведено в таблиці 2.3.

Таблиця 2.3 – Характеристика стануму (II) хлориду [19].

Показник	Розмірність	Величина
Молярна маса	г/моль	189,6
Температура кипіння	°C	670
Температура плавлення	°C	247
Густина при 20 °C	г/см <sup>3</sup>	3,95

Титан (IV) оксид ( $\text{TiO}_2$ ) – білий порошок. У роботі використовувався AEROXIDE®  $\text{TiO}_2$  P25. Характеристику  $\text{TiO}_2$  P25 наведено в таблиці 2.4.

Таблиця 2.4 – Характеристика титану (IV) оксиду [20].

Показник	Розмірність	Величина
Склад $\text{TiO}_2$	%	$> 99.5$
Вологість	%	$\leq 1.5$
pH		3.5 – 4.5
Густина при 20 °C	г/дм <sup>3</sup>	130

Нітратна кислота ( $\text{HNO}_3$ ) – прозора безбарвна рідина, що димить на повітрі. Характеристику нітратної кислоти наведено в таблиці 2.5.

Таблиця 2.5 – Характеристика нітратної кислоти [19].

Показник	Розмірність	Величина
Молярна маса	г/моль	63,012
Температура кипіння	°C	82,6
Температура плавлення	°C	– 41,59
Густина при 20 °C	г/см <sup>3</sup>	1,513
Температура кипіння азеотропу з водою	°C	120,7
Вміст спирту у складі азеотропу	% мас.	68,4

Дистильована вода ( $\text{H}_2\text{O}$ ) – прозора безбарвна рідина без смаку і запаху. Характеристику дистильованої води наведено в таблиці 2.6

Таблиця 2.6 – Характеристика дистильованої води [19].

Показник	Розмірність	Величина
Молярна маса	г/моль	18,020
Температура кипіння	°С	100,0
Температура плавлення	°С	0,0
Густина при 20 °С	г/см <sup>3</sup>	0,9982

Ітрій (III) нітрат ( $Y(NO_3)_3$ ) – безбарвні кристали. Характеристику  $Y(NO_3)_3$  наведено в таблиці 2.7.

Таблиця 2.7 – Характеристика ітрію (III) нітрату.

Показник	Розмірність	Величина
Молярна маса	г/моль	274,92
Густина при 20 °С	г/см <sup>3</sup>	2,682
Розчинність у воді при 20 °С	г/100 см <sup>3</sup>	96,7

Ніобій (III) нітрат ( $Nb(NO_3)_3$ ) – безбарвні кристали. Характеристику  $Nb(NO_3)_3$  наведено в таблиці 2.8.

Таблиця 2.8 – Характеристика ніобію (III) нітрату.

Показник	Розмірність	Величина
Молярна маса	г/моль	216.92
Густина при 20 °С	г/см <sup>3</sup>	3,54
Розчинність у воді при 20 °С	г/100 см <sup>3</sup>	86,7

### 2.1.2 Допоміжні матеріали

Метиленовий блакитний ( $C_{16}H_{18}ClN_3S$ ) – темно-зелена кристалічна речовина з бронзовим блиском; органічний барвник, що використовується для тестування сорбентів. Характеристику метиленового блакитного наведено в таблиці 2.9.

Таблиця 2.9 – Характеристика метиленового блакитного [19].

Показник	Розмірність	Величина
Молярна маса	г/моль	319,85
Температура кипіння	°C	100-110
Розчинність у воді при 20 °C	г/100 см <sup>3</sup>	4,36

### 2.1.3 Продукти синтезу

Титан (IV) оксид ( $TiO_2$ ) – безбарвна кристалічна речовина, що в роздробленому стані являє собою білий порошок. Характеристику титану (IV) оксиду наведено в таблиці 2.10.

Таблиця 2.10 – Характеристика титану (IV) оксиду [19].

Показник	Розмірність	Величина
Молярна маса	г/моль	79,866
Температура кипіння	°C	2972
Температура плавлення	°C	1843
Густина рутилу при 20 °C	г/см <sup>3</sup>	4,235
Густина анатазу при 20 °C	г/см <sup>3</sup>	4,05
Густина брукіту при 20 °C	г/см <sup>3</sup>	4,1

Станум (IV) оксид ( $\text{SnO}_2$ ) – безбарвна кристалічна речовина, що в роздробленому стані являє собою білий порошок. Характеристику стануму (IV) оксиду наведено в таблиці 2.11.

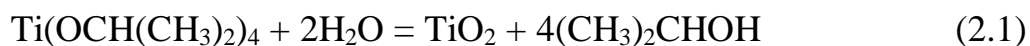
Таблиця 2.11 – Характеристика стануму (IV) оксиду [19].

Показник	Розмірність	Величина
Молярна маса	г/моль	150,71
Температура кипіння	°C	2500
Температура плавлення	°C	2000
Густина при 20 ° C	г/см <sup>3</sup>	7,01

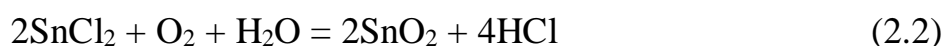
### 3.2 Методики синтезу $\text{TiO}_2\text{-SnO}_2$

Зразки синтезували гідротермальним методом, двома способами, а саме одноетапним та двоетапним. У двоетапному синтезі спочатку синтезували титан (IV) оксид, і потім на поверхню частинок наносили станум. У одноетапному методі синтезували титан (IV) оксид у присутності стануму, що дозволить стануму вкраплюватися в структуру титану оксиду.

Рівняння реакції гідролізу ізопропоксиду титану:



Рівняння реакції окиснення стануму (II) хлориду:



Рівняння реакції гідролізу стануму (IV) хлориду:



Перед проведенням синтезу готували спочатку робочий розчин А, таким способом: змішували 75 см<sup>3</sup> ізопропілового спирту та 25 см<sup>3</sup> дистильованої води і витримували при перемішуванні з допомогою магнітної мішалки 10 хв,

потім по краплях додавали нітратну кислоту до досягнення рН 1,5 і тримали ще 5 хв перемішуючи.

#### 2.2.1 Синтез нанокompозитів $\text{TiO}_2\text{-SnO}_2$ одноетапним гідротермальним методом

Синтез нанокompозитів титану (IV) оксиду та стануму (IV) оксиду проводили таким чином: у тефлоновий реактор, зображений на рисунку 2.1, наливали  $10\text{ см}^3$  робочого розчину А. При перемішуванні за допомогою магнітної мішалки вносили в розчин А по краплях і  $5\text{ см}^3$  розчину титану (IV) ізопропоксиду і протягом 5 хв тримали при перемішуванні. Потім вносили  $0,2\text{ г SnCl}_2$  і 20 хв інтенсивно перемішували. Отриманий розчин мав рН 2-3. Потім тефлоновий реактор поміщали в сталевий автоклав (рисунок 2.1) і вели гідротермальну обробку розчину при  $180\text{-}200\text{ }^\circ\text{C}$  12 годин.



Рисунок 2.1 – Сталевий автоклав з тефлоновим реактором.

Після гідротермальної обробки тефлонові реактори природнім шляхом охолоджувалися до кімнатної температури. Отримані порошки нанокompозитів титану (IV) оксиду та стануму (IV) оксиду промивали водою 5 разів для досягнення рН 5,0, відокремлюючи осад за допомогою центрифугування при  $5000\text{ об/хв}$  протягом 10 хв. Потім не кислі зразки сушили

в чашці Петрі протягом 12 годин за температури 80 °С, потім подрібнювали агрегати у порцеляновій ступці.

#### 2.2.1 Синтез нанокompозитів $\text{TiO}_2\text{-SnO}_2$ двоетапним гідротермальним методом

Синтез нанокompозитів титану (IV) оксиду та стануму (IV) оксиду проводили наступним чином.

У тефлоновий реактор наливали 10 см<sup>3</sup> робочого розчину А. При перемішуванні за допомогою магнітної мішалки вносили в розчин А по краплях і 5 см<sup>3</sup> розчину титану (IV) ізопропоксиду і протягом 5 хв тримали при перемішуванні. Потім вносили 20 хв інтенсивно перемішували. Отриманий розчин мав рН 2-3. Потім тефлоновий реактор поміщали в сталевий автоклав і вели гідротермальну обробку розчину при 180- 200 °С 12 годин.

Після гідротермальної обробки тефлонові реактори природнім шляхом охолоджувалися до кімнатної температури. Отримані порошки нанокompозитів титану (IV) оксиду промивали водою 5 разів для досягнення рН 5,0, відокремлюючи осад за допомогою центрифугування при 5000 об/хв протягом 10 хв. Потім не кислі зразки сушили в чашці Петрі протягом 12 годин за температури 80 °С, потім подрібнювали агрегати у порцеляновій ступці.

Потім у тефлоновий реактор, вклали 1,32 г синтезованого  $\text{TiO}_2$  на першому етапі та 10 см<sup>3</sup> робочого розчину А перемішуючи на магнітній мішалці. При постійному перемішуванні вносили 0,2 г  $\text{SnCl}_2$  і тримали протягом 20 хв. Отриманий розчин мав рН 2,5. Потім тефлоновий реактор вносили в сталевий автоклав і вели гідротермальну обробку протягом 12 годин за температури 180-200 °С.

Після гідротермальної обробки тефлонові реактори природнім шляхом охолоджувалися до кімнатної температури. Отримані порошки нанокompозитів титану (IV) оксиду промивали водою 5 разів для досягнення

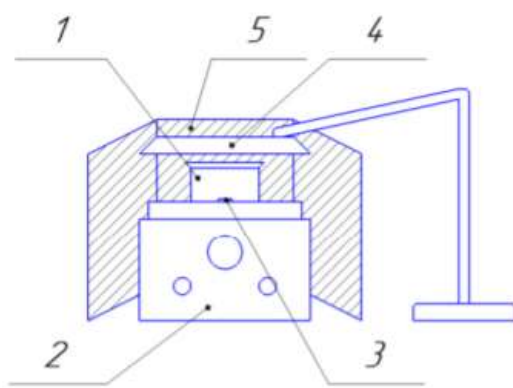


pH 5,0, відокремлюючи осад за допомогою центрифугування при 5000 об/хв протягом 10 хв. Потім не кислі зразки сушили в чашці Петрі протягом 12 годин за температури 80 °С, потім подрібнювали агрегати у порцеляновій ступці.

### 2.3 Метод дослідження фотокаталітичних та сорбційних властивостей

Для дослідження фотокаталітичних та сорбційних властивостей отриманих зразків використовували установку періодичного типу.

Установка періодичного типу працює таким чином: досліджуваний розчин знаходиться у скляному стакані 1 об'ємом 70 см<sup>3</sup>, перемішування якого відбувається за допомогою магнітного перемішувача 2 та магнітної мішалки 3. Над скляним стаканом 1 є УФ- лампа 4. Захисний екран 5 використовується для захисту реактора від світла в кімнаті.



а



б

а – принципова схема лабораторної установки періодичного типу;

б – фотографія лабораторної установки періодичного типу; 1 – скляний стакан; 2 – магнітний перемішувач; 3 – магнітна мішалка; 4 – УФ-лампа;  
5 – захисний екран

Рисунок 2.2 – Лабораторна установка періодичного типу для дослідження сорбційно-фотокаталітичних властивостей.

Дослідження фотокаталітичних властивостей отриманих зразків таким чином: наважку синтезованого зразка масою 0,05 г внесли у 50 см<sup>3</sup> розчину барвника метиленового блакитного з концентрацією 10 мг/дм<sup>3</sup> або конго червоного з концентрацією 40 мг/дм<sup>3</sup> вели ультразвукову обробку (42 кГц, 30 Вт) в ультразвуковому диспергаторі Ya Xun YX-3030, заповненому водою, протягом 5 хв для диспергації частинок. Потім отриману суспензію перемішували магнітним перемішувачем 20 хв, а потім вмикали УФ-лампу на 20 хв. Після завершення експерименту наночастинки досліджуваного зразка відділяли від розчину барвника центрифугуванням за 5000 об/хв протягом 20 хв. Залишкову концентрацію модельного розчину барвника визначали за допомогою спектрофотометра.

Спектрофотометричний метод визначення концентрації барвника полягає в одержанні спектрів поглинання модельного розчину барвника за допомогою спектрофотометра UV-5800(PC), Shanghai Metash Instruments (Китай). Ступінь знебарвлення розчину барвника визначали за відносною зміною оптичної густини розчину за довжини хвилі 664 нм для розчину барвника метиленового блакитного та 505 нм для розчину конго червоного, %:

$$X = \frac{A_0 - A_1}{A_0} \times 100 \quad (2.4)$$

де  $A_0$  – оптична густина вихідного розчину барвника;

$A_1$  – оптична густина розчину після експерименту.

## 2.4 Рентгенофлюоресцентний аналіз

Хімічний склад синтезованих зразків визначали вимірюванням масової частки хімічних елементів в зразках методом неруйнівного енергодисперсійного рентгенофлюоресцентного аналізу використовуючи мобільний прецизійний аналізатор EXPERT 3L, ІНАМ (Україна). Діапазон хімічних елементів (діапазон контролю), що виявляються: від магнію (12Mg)

до урану ( $^{92}\text{U}$ ). Об'єкти контролю (проби) – тверді, порошкоподібні, рідкі. Діапазон вимірювання масових часток (концентрацій) елементів – від 0,005 % до 100 %.

#### 2.4 Рентгенофлюоресцентний аналіз

Аналіз фазового складу одержаних зразків здійснювали рентгенофазовим аналізом (РФА) на рентгенівському дифрактометрі Rigaku Ultima IV (Японія) з  $\text{CuK}\alpha$  випромінюванням (40 кВт, 30 мА). Фазовий склад та середній розмір кристалітів було розраховано автоматично за допомогою програмного додатку PDXL на основі стандартних карток: № 00-021-1276 (Рутил), № 00-021-1272 (Анатаз), № 00-041-1445 (Каситерит) та формули Шерера [21]:

$$d = \frac{K \cdot \lambda}{\beta \cdot \cos \theta} \quad (2.5)$$

де  $d$  – середній розмір кристалітів, нм;

$K$  – константа Шерера (безрозмірний коефіцієнт форми частинок);

$\lambda$  – довжина хвилі рентгенівського випромінювання, нм;

$\beta$  – інтегральна ширина піку на піввисоті, рад;

$\theta$  – дифракційний кут.

#### 2.5 Дослідження кислотності

Синтезований зразок наважкою 0,25 г поміщали в лабораторний стакан з дистильованою водою об'ємом 25 см<sup>3</sup>. В стакані поміщали рН індикатор і правдили вимірювання рН у задані проміжки часу, а саме: 10с, 20с, 30с, 45с, 60с, 2 хв, 3 хв, 5 хв, 10 хв, 20 хв, 30 хв, 45 хв, 60 хв при інтенсивному перемішуванні за допомогою магнітної мішалки.

### 3 ЕКСПЕРЕМЕНТАЛЬНА ЧАСТИНА

Було синтезовано сім зразків з шифрами: HT90P2510Sn(II)s, 1HT90Ti10Sn(II)s, 2HT90Ti10Sn(II)s, P25 (TiO<sub>2</sub>)+Y, TiO<sub>2</sub>+Y, P25 (TiO<sub>2</sub>)+Nb, TiO<sub>2</sub>+Nb. HT90P2510Sn(II)s – зразок синтезований двоетапним методом з використанням AEROXIDE® TiO<sub>2</sub> P25. 1HT90Ti10Sn(II)s – зразок синтезований одноетапним методом з титану (IV) ізопропоксиду. 2HT90Ti10Sn(II)s – зразок синтезований двоетапним методом з титану (IV) ізопропоксиду.

#### 3.1 Результати рентгенофазового аналізу

На рисунку 3.1 приведені рентгенограми отриманих зразків HT90P2510Sn(II)s, 1HT90Ti10Sn(II)s, 2HT90Ti10Sn(II)s у порівнянні з AEROXIDE® TiO<sub>2</sub> P25, які були автоматично проаналізовані пакетом програм PDXL з використанням баз даних ICDD/PDF-2 і COD.

Всі зразки були ідентифіковані, як сполуки TiO<sub>2</sub> з анатазною або рутиловою модифікацією у зразках HT90P2510Sn(II)s, 1HT90Ti10Sn(II)s, 2HT90Ti10Sn(II)s був інфікований SnO<sub>2</sub>. У всіх цих зразків зміст SnO<sub>2</sub> становить приблизно 10%, що відповідає розрахованим результатам. Розмір кристалічної ґрадки SnO<sub>2</sub> має майже однаковий розмір а становить приблизно 4,7 – 4,9 Å, а b і c розміром 4,7 – 4,9 і 3,1 – 4,9 відповідно. Більш детальна характеристика наведена для зразків в таблицях 3.1 – 3.5.

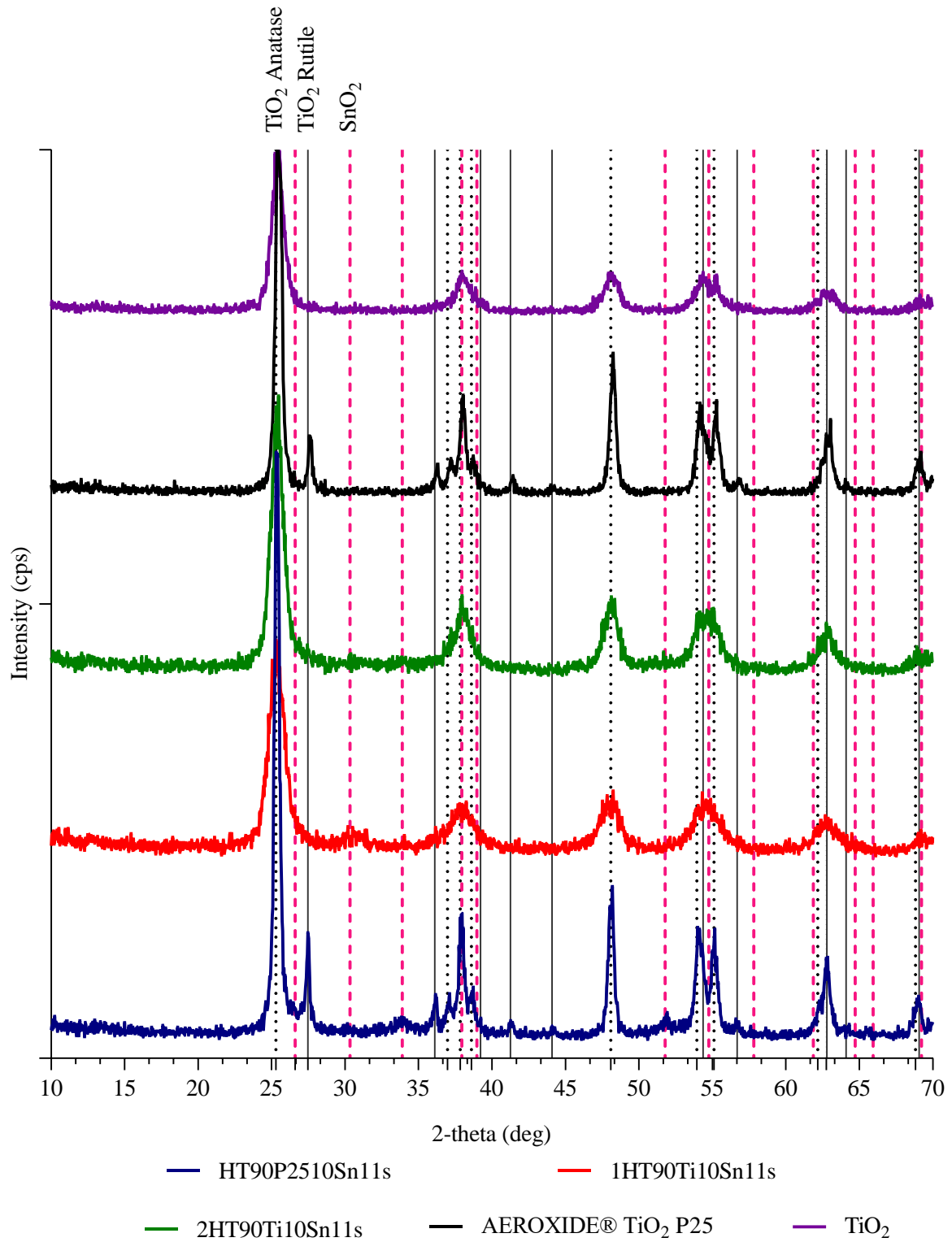


Рисунок 3.1 – Дифрактограми зразків  $\text{TiO}_2$  з допущанням Sn.

Таблиця 3.1 – Аналіз рентгенограми зразка AEROXIDE® TiO<sub>2</sub> P25

Фаза	a(Å)	b(Å)	c(Å)	Розмір кристаліту, (Å)	Вміст, (%)
Анатаз	3.7823(11)	3.7823(11)	9.497(3)	44(7)	92(2)
Рутил	4.5908(13)	4.5908(13)	2.9595(15)	40(3)	8.0(6)

Таблиця 3.2 – Аналіз рентгенограми зразка HT90P2510Sn(II)s

Фаза	a(Å)	b(Å)	c(Å)	Розмір кристаліту, (Å)	Вміст, (%)
Анатаз	3.7866(7)	3.7866(7)	9.500(2)	152(23)	68.9(9)
Рутил	4.595(4)	4.595(4)	2.958(3)	201(23)	10.6(10)
SnO <sub>2</sub>	4.747(10)	4.747(10)	3.190(10)	116(19)	21(4)

Таблиця 3.3 – Аналіз рентгенограми зразка 1HT90Ti10Sn(II)s

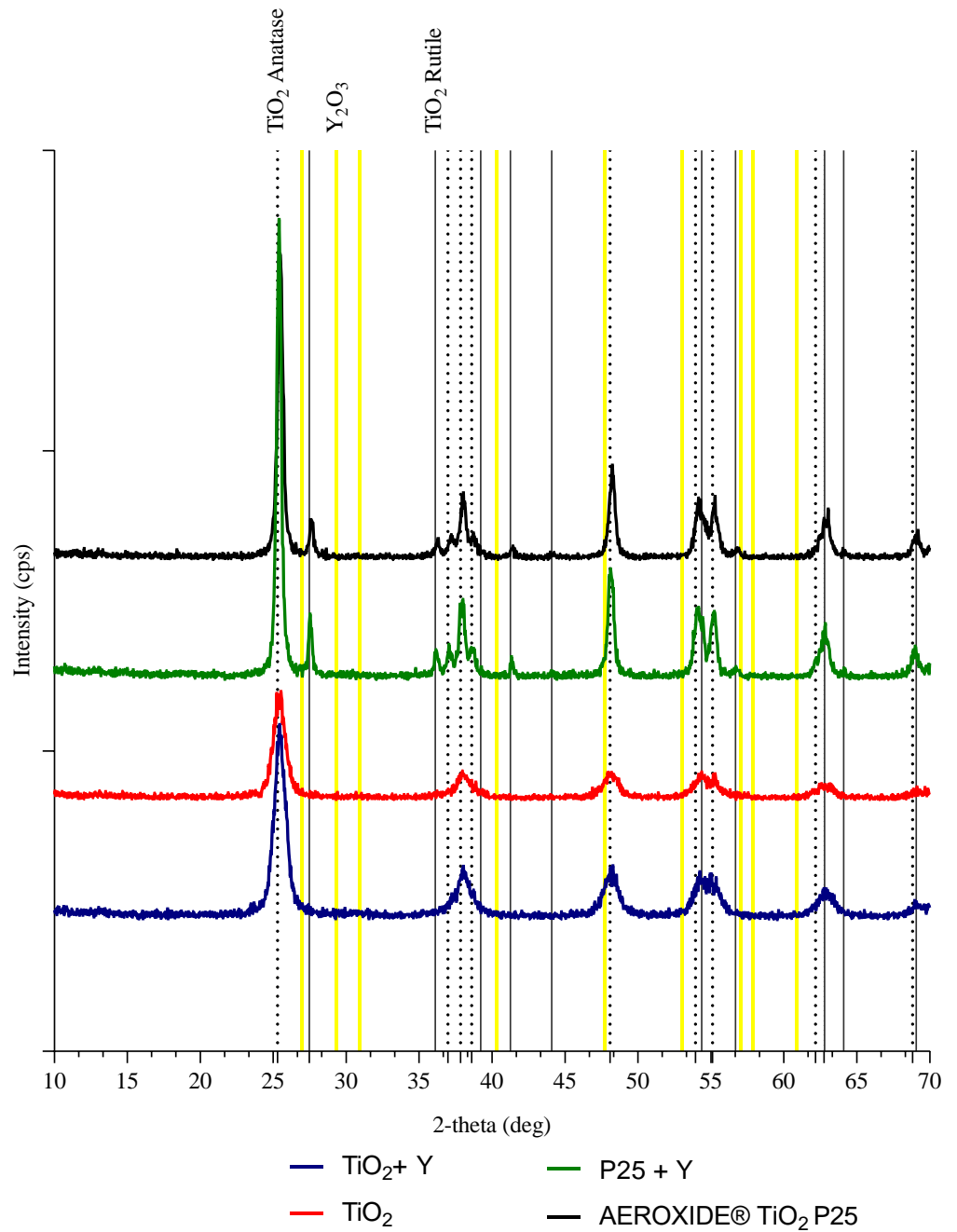
Фаза	a(Å)	b(Å)	c(Å)	Розмір кристаліту, (Å)	Вміст, (%)
Анатаз	3.786(9)	3.786(9)	9.45(2)	57(8)	89(4)
SnO <sub>2</sub>	4.97(2)	4.97(2)	4.97(2)	52(12)	11(3)

Таблиця 3.4 – Аналіз рентгенограми зразка 2HT90Ti10Sn(II)s

Фаза	a(Å)	b(Å)	c(Å)	Розмір кристаліту, (Å)	Вміст, (%)
Анатаз	3.791(2)	3.791(2)	9.485(7)	68(11)	89.1(15)
SnO <sub>2</sub>	4.828(19)	4.828(19)	3.209(16)	70(13)	11(2)

Таблиця 3.5 – Аналіз рентгенограми зразка  $\text{TiO}_2$ 

Фаза	a(Å)	b(Å)	c(Å)	Розмір кристаліту, (Å)	Вміст, (%)
Анатаз	3.775257	3.775257	9.469702	71(11)	100.0(18)

Рисунок 3.2 – Дифрактограми зразків  $\text{TiO}_2$  з допунанням Y.

На рисунку 3.2 зображена рентгенограма зразків P25 (TiO<sub>2</sub>)+Y, TiO<sub>2</sub>+Y у порівнянні зі синтезованим і комерційним TiO<sub>2</sub>. Аналіз рентгенограм наведений в таблицях 3.6 -3.7.

Таблиця 3.6 – Аналіз рентгенограми зразка P25 + Y

Фаза	a(Å)	b(Å)	c(Å)	Розмір кристаліту, (Å)	Вміст, (%)
Анатаз	3.7857	3.7857	9.503	45	89.5
Рутил	4.601	4.601	2.9610	43	10.4
Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.703	3.703	5.91	75	0.1

Таблиця 3.7 – Аналіз рентгенограми зразка TiO<sub>2</sub>+Y

Фаза	a(Å)	b(Å)	c(Å)	Розмір кристаліту, (Å)	Вміст, (%)
Анатаз	3.786	3.786	9.477	74	100.0
Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.743	3.753	5.81	72	0.1

На рисунку 3.3 зображена рентгенограма зразків P25 (TiO<sub>2</sub>)+Nb, TiO<sub>2</sub>+Nb у порівнянні зі синтезованим і комерційним TiO<sub>2</sub>. Аналіз рентгенограм наведений в таблицях 3.8 -3.9.



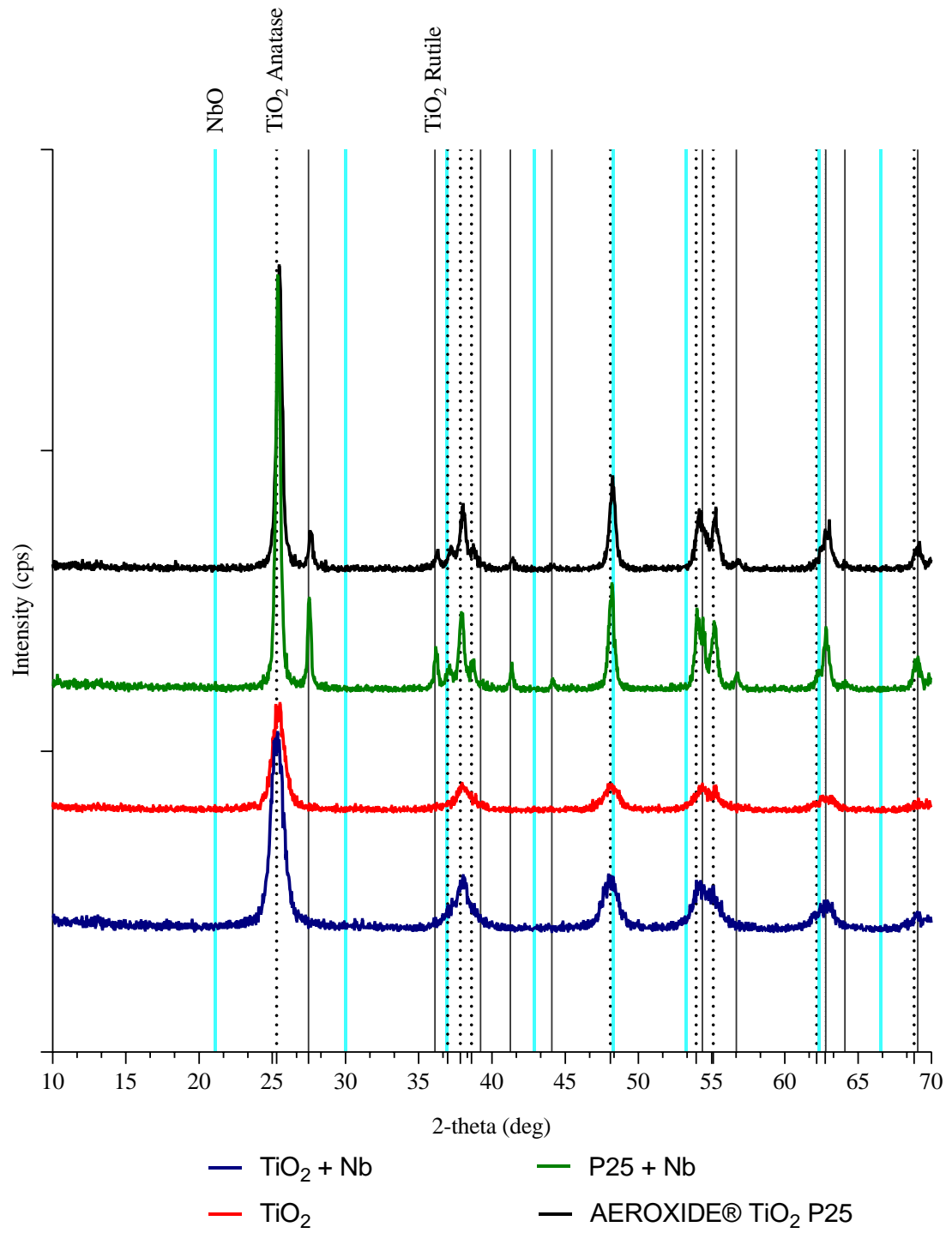


Рисунок 3.3 – Дифрактограми зразків  $\text{TiO}_2$  з допунанням Nb.

Таблиця 3.8 – Аналіз рентгенограми зразка P25 + Nb

Фаза	a(Å)	b(Å)	c(Å)	Розмір кристаліту, (Å)	Вміст, (%)
Анатаз	3.7768	3.776848	9.519397	165	89.5
Рутил	4.5871	4.587190	2.953681	225	9
NbO	4.1887	4.188745	4.188745	131	1,5

Таблиця 3.9 – Аналіз рентгенограми зразка TiO<sub>2</sub>+Nb

Фаза	a(Å)	b(Å)	c(Å)	Розмір кристаліту, (Å)	Вміст, (%)
Анатаз	3.7848	3.7848	9.481	67	99.7
NbO	3.37	3.37	3.37	44.3	0.3

### 3.2 Результати хімічного аналізу

Також був проведений проведений хімічний аналіз зразків. Результати яких представлені в 3.10 – 3.11.

Таблиця 3.10 – Хімічний склад зразків з допунанням Sn

	HT90P2510Sn(II)s	1HT90Ti10Sn(II)s	2HT90Ti10Sn(II)s
Елемент	Масова частка, %		
14Si	-	0,121±0,032	0,136±0,039
15P	-	0,107±0,037	0,157±0,046
22Ti	90,215±0,097	87,300±0,108	88,840±0,130
23V	0,274±0,097	0,499±0,098	0,390±0,092
50Sn	9,512±0,041	11,973±0,050	10,128±0,044

Таблиця 3.11 – Хімічний склад зразків з допущанням Y і Nb

	P25+Y	TiO <sub>2</sub> +Y	P25+Nb	TiO <sub>2</sub> +Nb
Елемент	Масова частка, %			
14Si	0,165±0,026	0,161±0,025	0,072±0,020	0,052±0,019
15P	0,847±0,034	0,647±0,032	0,117±0,023	-
22Ti	95,685±0,044	96,282±0,128	99,344±0,099	99,457±0,093
23V	-	0,360±0,125	0,373±0,094	0,390±0,090
39Y	3,303±0,014	2,550±0,015	0,015±0,002	-
41Nb	-	-	0,007±0,002	0,008±0,002

### 3.3 Результати дослідження кислотності

На рисунку 3.4 і 3.5 представлені результати дослідження кислотності. В таблиці 3.12 наведена зведена кислотність синтезованих зразків.

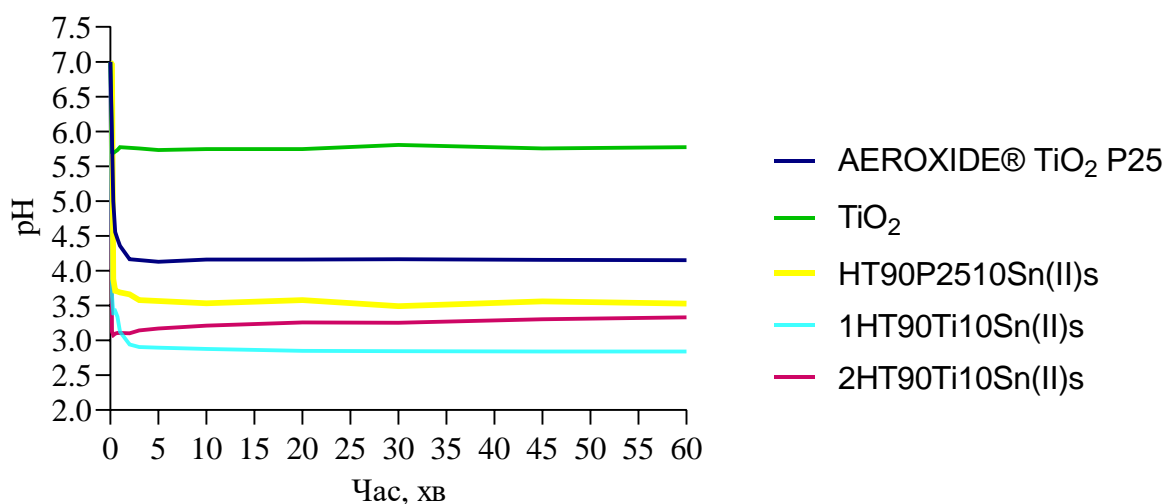


Рисунок 3.4 – Дослідження кислотності.

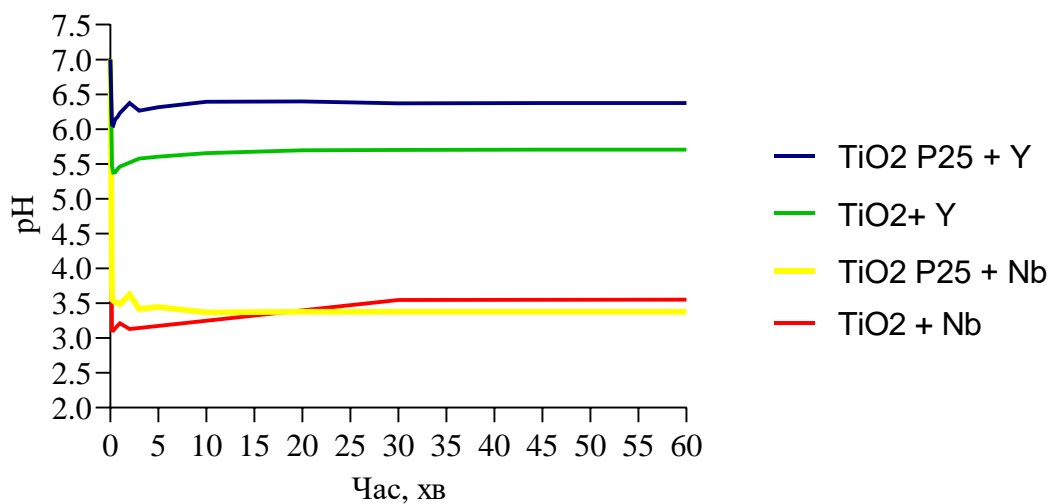


Рисунок 3.5 – Дослідження кислотності.

Таблиця 3.12 – Кислотність зразків

Зразок	pH
AEROXIDE® TiO <sub>2</sub> P25	4,15
TiO <sub>2</sub>	5,78
HT90P2510Sn(II)s	3,53
1HT90Ti10Sn(II)s	2,84
2HT90Ti10Sn(II)s	3,33
TiO <sub>2</sub> P25 + Y	6,376
TiO <sub>2</sub> + Y	5,70
TiO <sub>2</sub> P25 + Nb	3,38
TiO <sub>2</sub> + Nb	3,55

### 3.4 Характеристика фотокаталітичних властивостей зразків

Було досліджено сорбційну та фотокаталітичну активність зразків з вирощанням модельних розчинів барвників метиленового синього та конго

червоного. Результати дослідження сорбції і фотокаталізу з використанням метиленового синього наведені на рисунку 3.6, а конго червоного на рисунку 3.6. Для порівняння зі синтезованими зразками ще наведено комерційний зразок AEROXIDE® TiO<sub>2</sub> P25 і TiO<sub>2</sub> синтезований у лабораторії.

На рисунках 3.8-3.26 наведені спектри барвників після проведення аналізу.

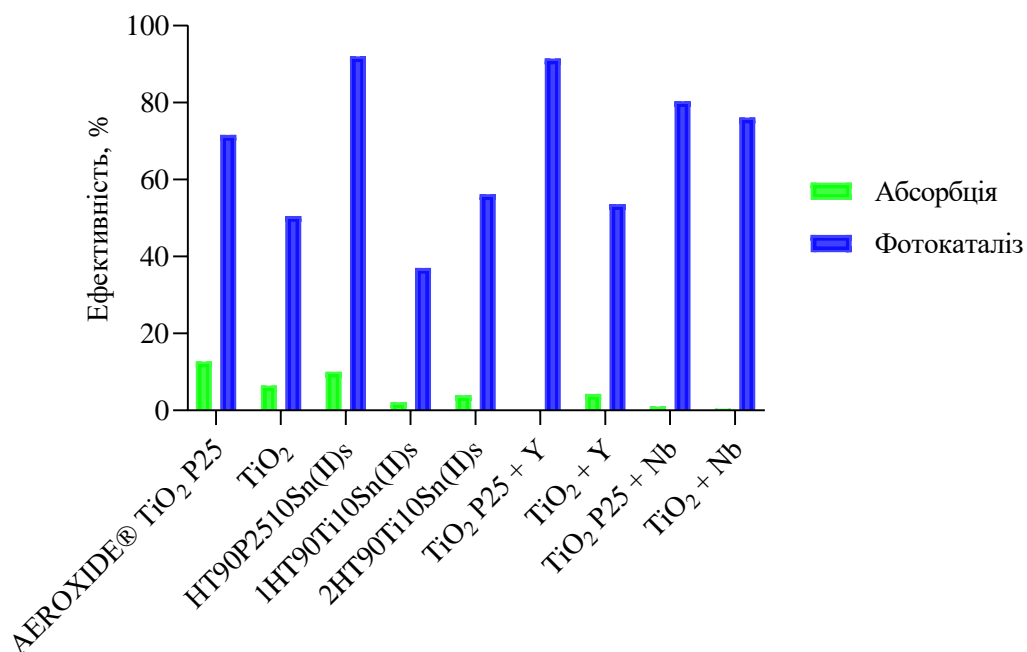


Рисунок 3.6 – Дослідження сорбції і фотокаталізу з використанням метиленового синього.

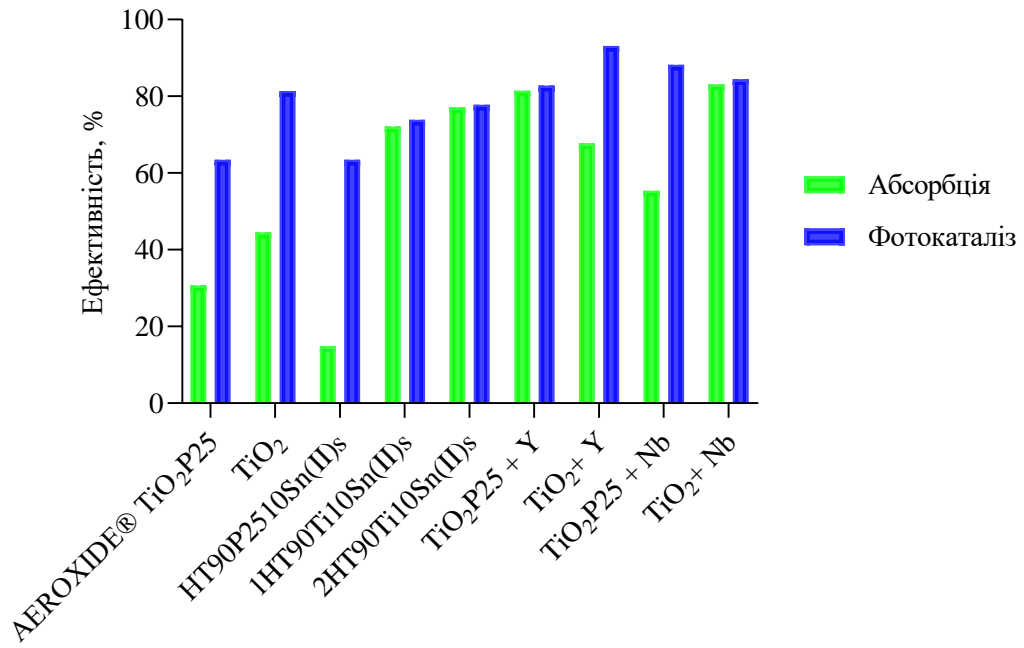


Рисунок 3.7 – Дослідження сорбції і фотокаталізу з використанням конго червоного.

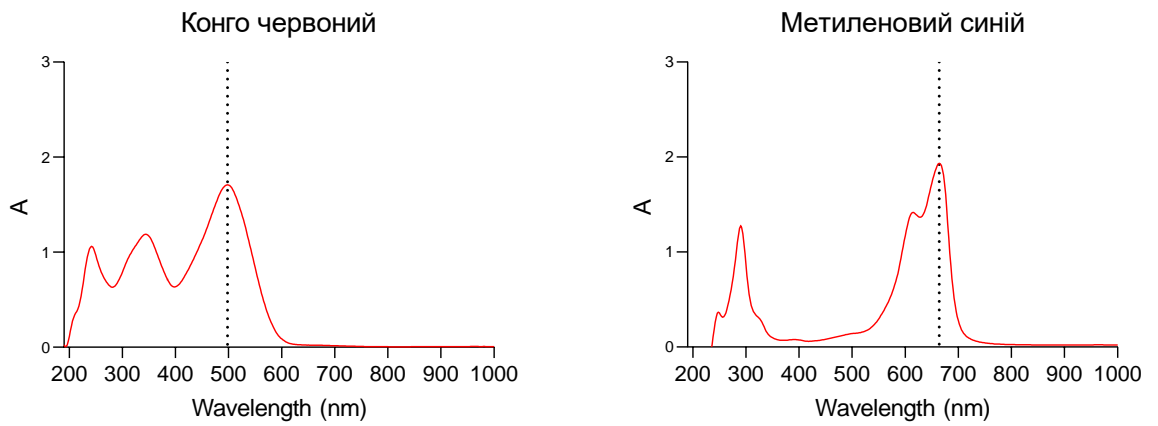


Рисунок 3.8 – Початковий спектр барвників конго червоного і метиленового синього.

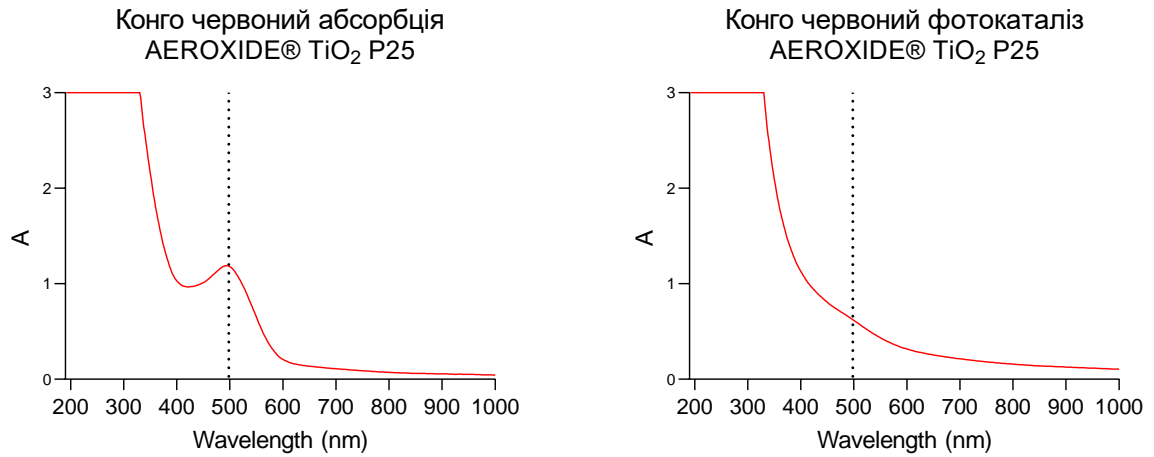


Рисунок 3.9 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку AEROXIDE® TiO<sub>2</sub>P25 з використанням конго червоного.

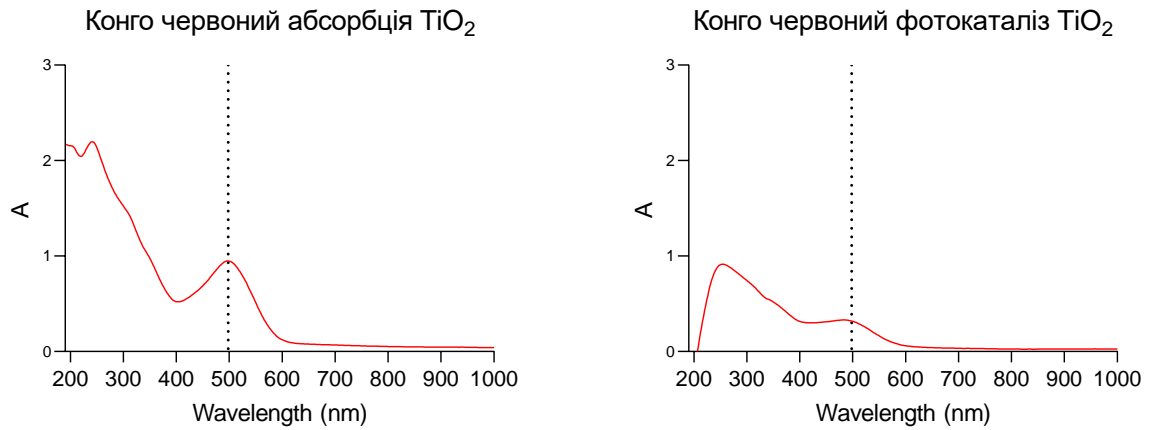
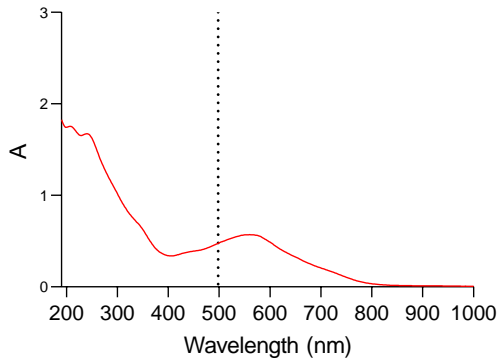


Рисунок 3.10 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку TiO<sub>2</sub> з використанням конго червоного.

Конго червоний абсорбція 1HT90Ti10Sn(II)s



Конго червоний фотокаталіз 1HT90Ti10Sn(II)s

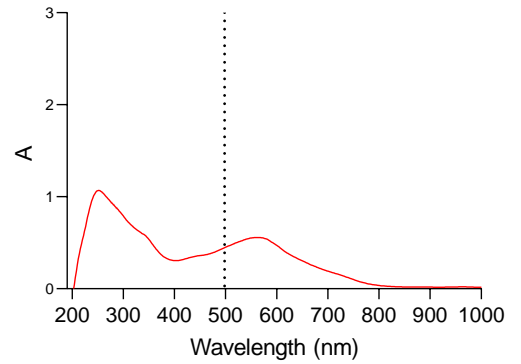
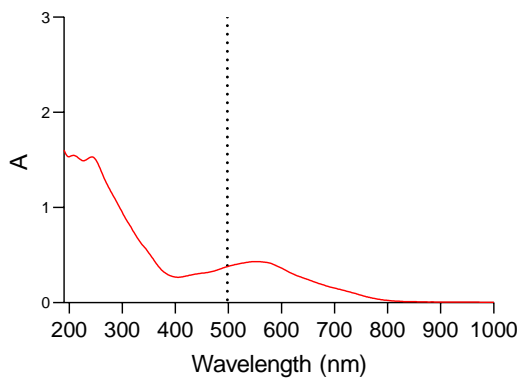


Рисунок 3.11 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку 1HT90Ti10Sn(II)s з використанням конго червоного.

Конго червоний абсорбція 2HT90Ti10Sn(II)s



Конго червоний фотокаталіз 2HT90Ti10Sn(II)s

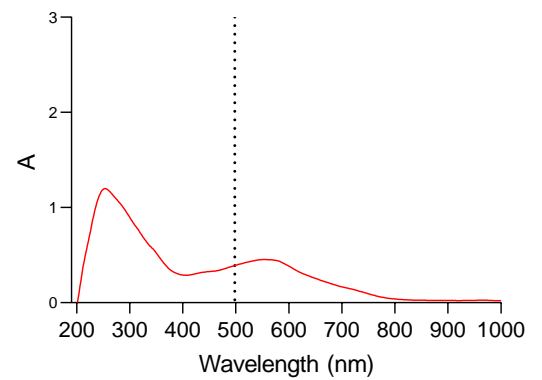


Рисунок 3.12 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку 2HT90Ti10Sn(II)s з використанням конго червоного.



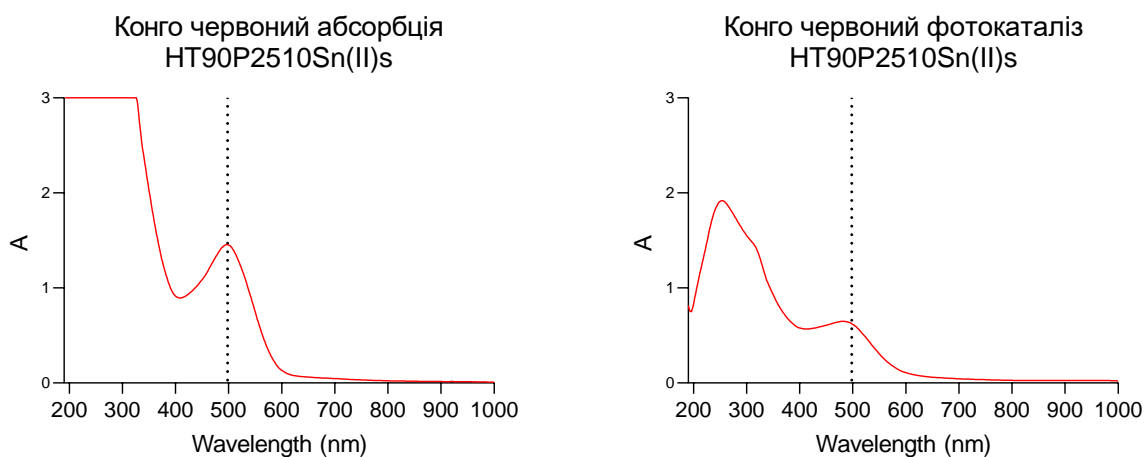


Рисунок 3.13 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку  
HT90P2510Sn(II)s з використанням конго червоного.

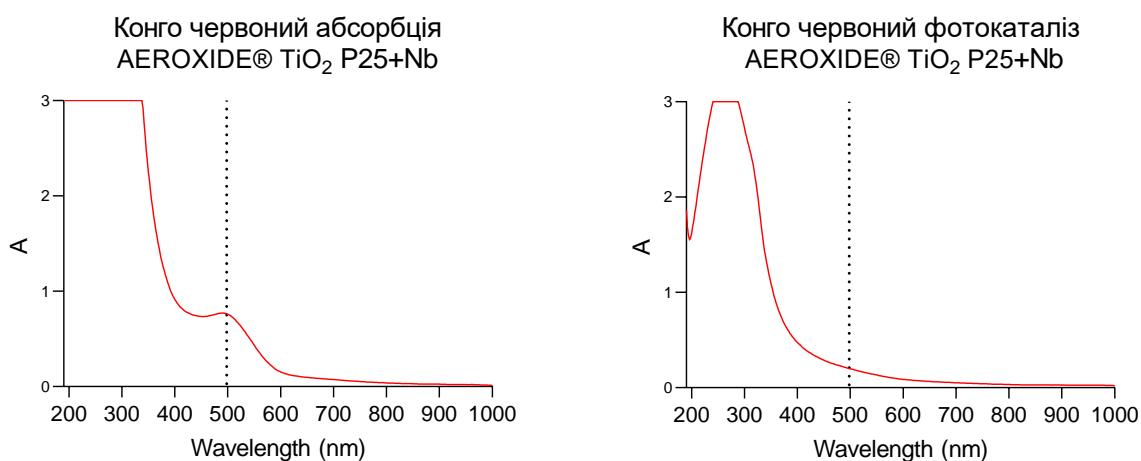


Рисунок 3.14 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку TiO<sub>2</sub> P25 + Nb  
з використанням конго червоного.

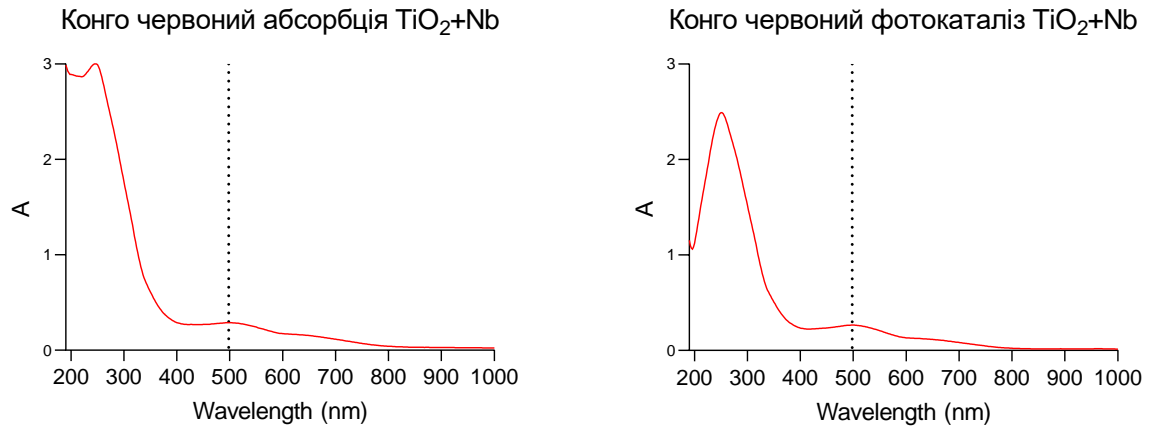


Рисунок 3.15 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку  $\text{TiO}_2 + \text{Nb}$  з використанням конго червоного.

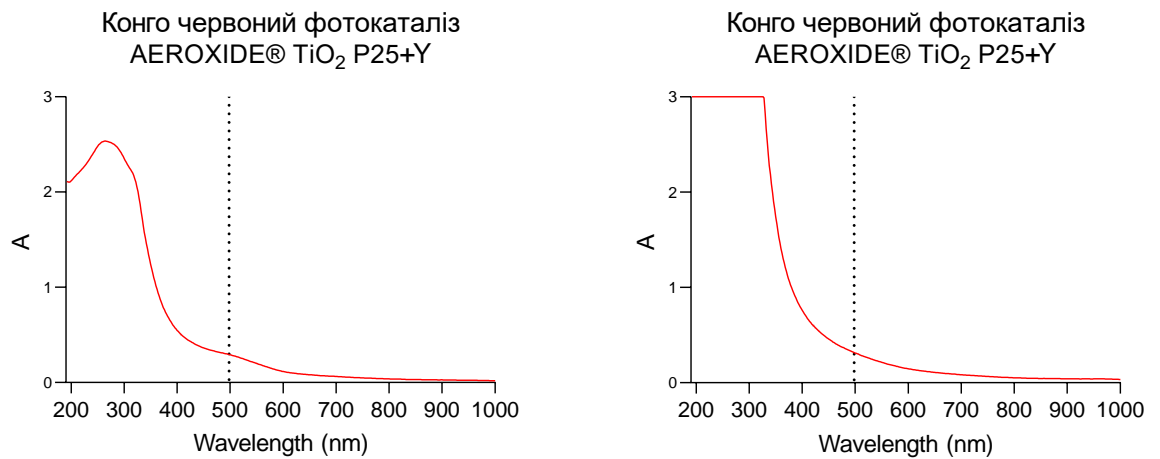


Рисунок 3.16 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку  $\text{TiO}_2 \text{P25} + \text{Y}$  з використанням конго червоного.

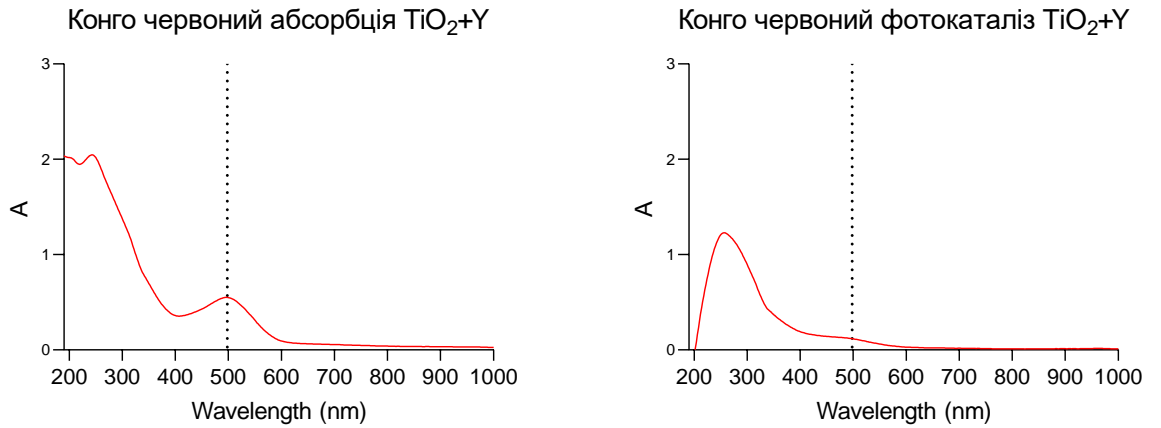


Рисунок 3.17 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку  $\text{TiO}_2 + \text{Y}$  з використанням конго червоного.

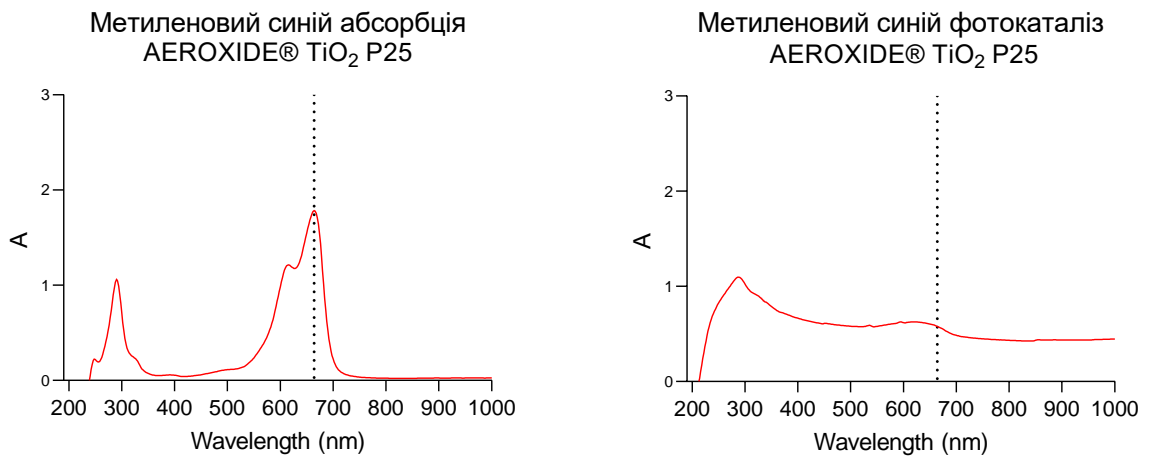


Рисунок 3.18 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку AEROXIDE®  $\text{TiO}_2\text{P25}$  з використанням метилового синього.

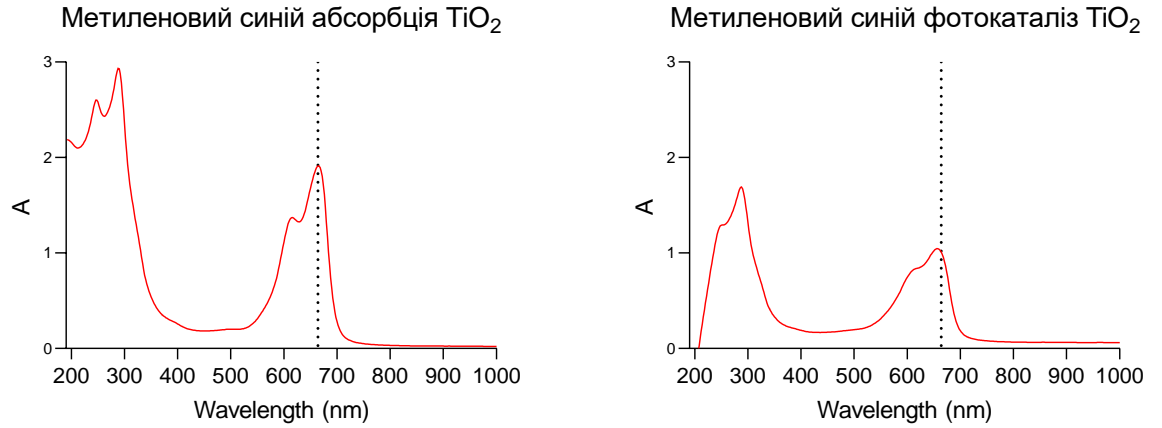


Рисунок 3.19 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку  $\text{TiO}_2$  з використанням метилового синього.

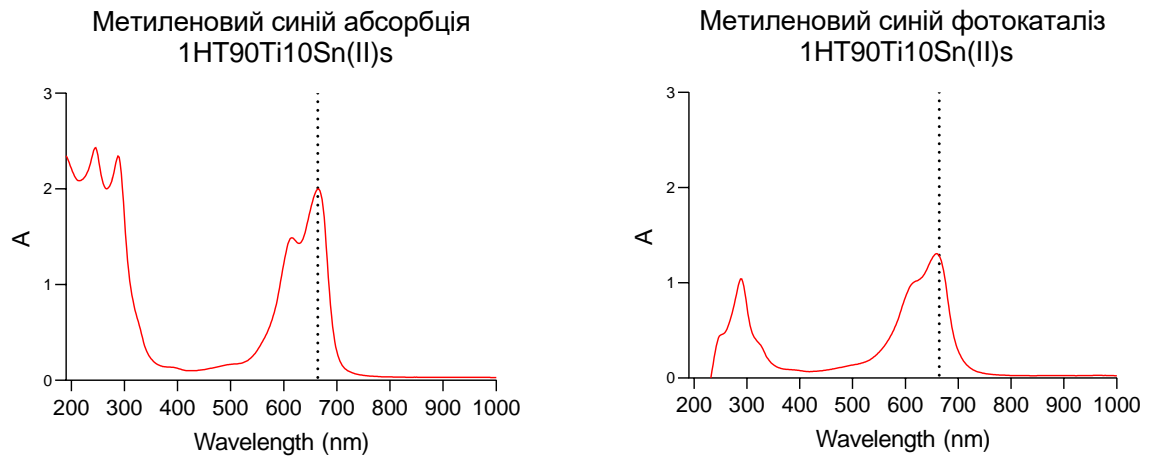


Рисунок 3.20 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку 1HT90Ti10Sn(II)s з використанням метилового синього.

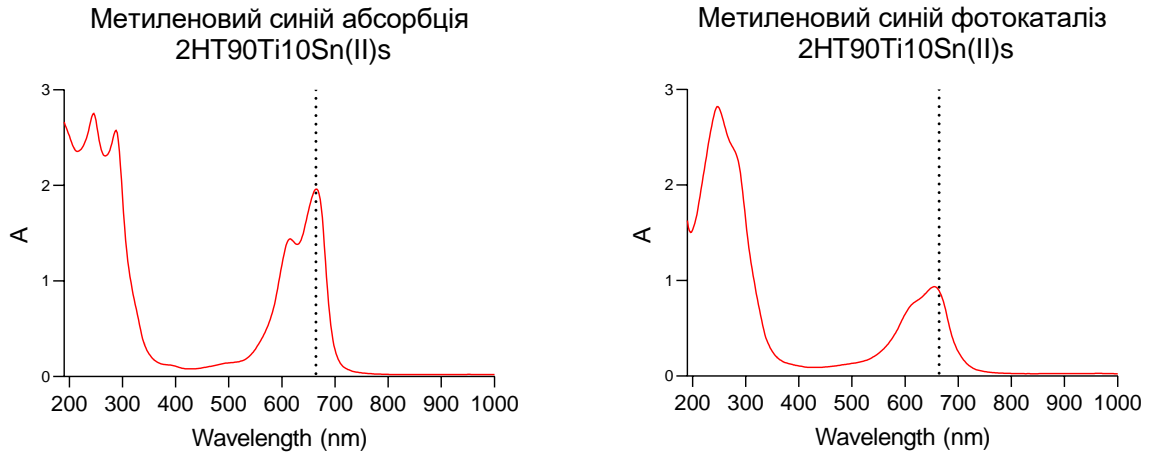


Рисунок 3.21 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку з 2HT90Ti10Sn(II)s з використанням метилового синього.

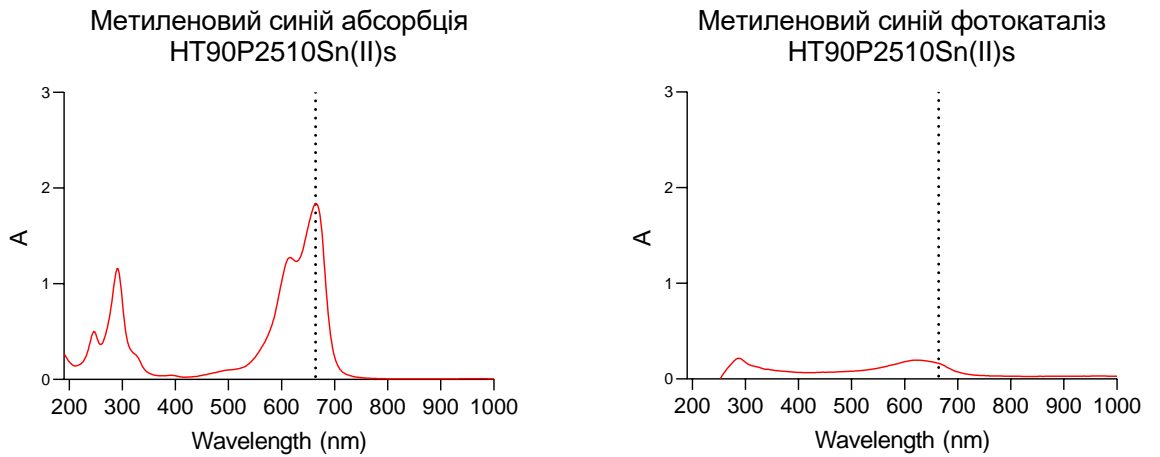


Рисунок 3.22 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку HT90P2510Sn(II)s з використанням метилового синього.

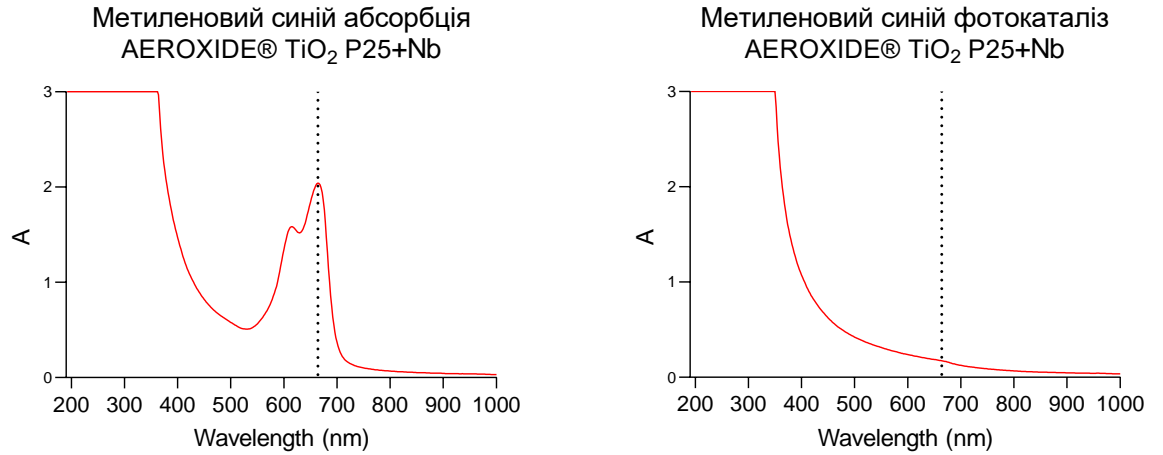


Рисунок 3.23 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку TiO<sub>2</sub> P25 + Y з використанням метилового синього.

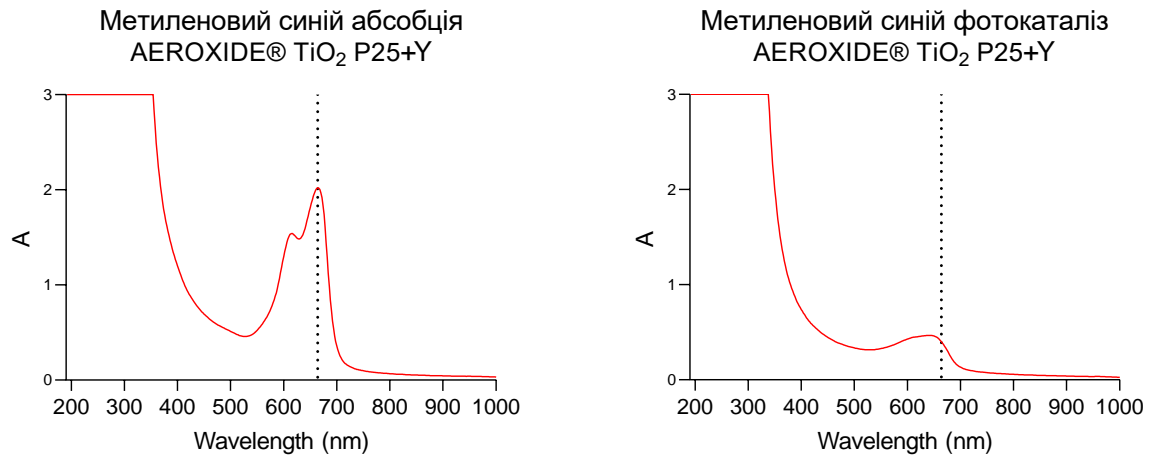


Рисунок 3.24 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку TiO<sub>2</sub> P25 + Y з використанням метилового синього.

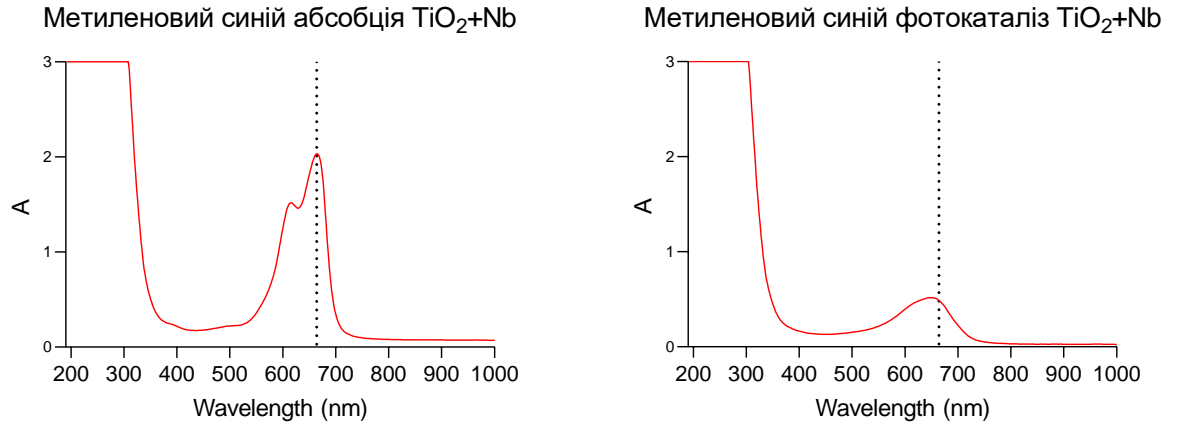


Рисунок 3.25. – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку  $\text{TiO}_2 + \text{Nb}$  з використанням метилового синього.

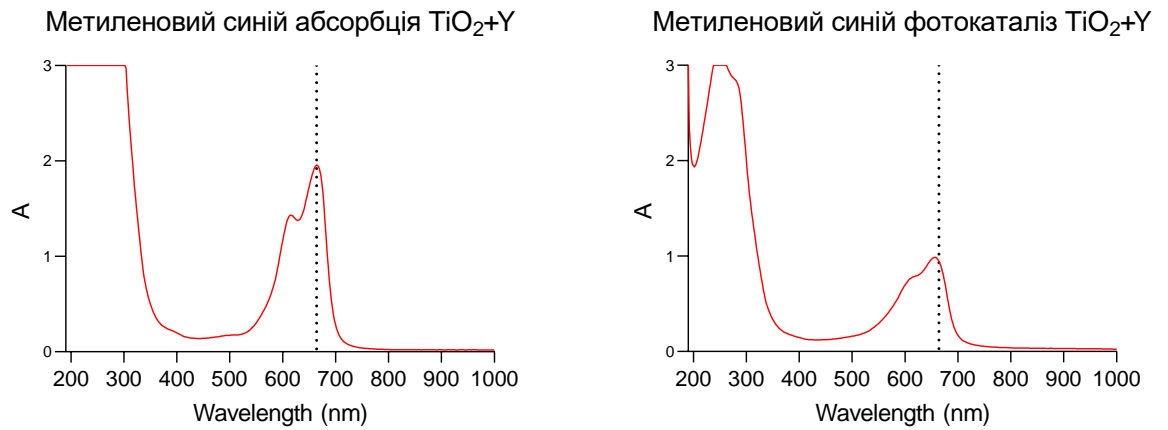


Рисунок 3.26 – Дослідження сорбції і фотокаталізу зразку  $\text{TiO}_2 + \text{Y}$  з використанням метилового синього.

## 4 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ

У лабораторії присутні шкідливі, подразнюючі, пожежо- і вибухонебезпечні речовини та матеріали; використовується теплова, електрична енергія та енергія хімічних реакцій.

Науково-дослідна робота виконувалася з урахуванням вимог охорони праці.

При виконанні роботи прийняті інженерні рішення, які відповідають вимогам охорони праці та пожежної безпеки. На основі аналізу шкідливих та небезпечних виробничих факторів розроблено заходи щодо оптимізації умов праці на робочому місці та безпеки в надзвичайних ситуаціях.

### 4.1 Охорона праці

4.1.1 Виявлення і аналіз шкідливих і небезпечних виробничих факторів.  
Заходи з охорони праці

#### 4.1.1.1 Повітря робочої зони.

Згідно ДСН 3.3.6.042-99 роботи, що виконуються в лабораторії належать до категорії II б (середньої важкості). У таблиці 4.1. наведено характеристику санітарних норм параметрів мікроклімату для хіміко-технологічної лабораторії.

Температура повітря в приміщенні є оптимальною і становить 18 °С в холодний період року та 21 °С в теплий період року. Відповідають нормі також значення відносної вологості повітря та швидкості руху повітря в лабораторії. Отже мікроклімат приміщення відповідає санітарним нормам. В холодний період року фактичні значення параметрів мікроклімату підтримуються за рахунок використання системи центрального водяного опалення [1].

Таблиця 4.1 – Санітарні норми параметрів мікроклімату в лабораторії

Період року	Параметри мікроклімату	Нормовані значення мікроклімату
-------------	------------------------	---------------------------------



		Оптимальні	Фактичні
Холодний	Температура, °C	17 – 19	18
	Відносна вологість повітря, %	40 – 60	50
	Швидкість руху повітря, м/с	0,2	0,2
Теплий	Температура, °C	20 – 22	21
	Відносна вологість повітря, %	40 – 60	50
	Швидкість руху повітря, м/с	0,3	0,3

У хіміко-технологічній лабораторії використовується вентиляційна система загальнообмінного типу та встановлена витяжна шафа, що представляє собою ковпак великої ємності, всередині якого проводяться роботи зі шкідливими речовинами.

У таблиці 4.2 наведено коротку санітарну характеристику приміщення лабораторії.

Таблиця 4.2 – Коротка санітарна характеристика приміщення хіміко-технологічної лабораторії

Назва лабораторії	Шкідливі речовини, що виділяються, причини їх виділення	Група шкідливої речовини, характеристика шкідливого впливу	ГДК шкідливої речовини у повітрі	Клас небезпечності шкідливої речовини	Засоби індивідуального захисту: тип, марка, стандарт	Засоби долікарняної допомоги	Методи контролю вмісту шкідливих речовин у повітрі робочої зони	Клас лабораторії згідно з СН 245-71	Санітарна група лабораторного процесу згідно зі СНиП 2.09.04-87
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Хіміко-технологічна	HNO <sub>3</sub>	Подразнюючі, викликає хімічні опіки, запалення верхніх органів дихання	1	II	Халат ГОСТ 12.4.103-83	Промивання водою, потім 5%-м розчином NaHCO <sub>3</sub>	Періодичний контроль за допомогою індикаторних методів хімічного аналізу	V	1a
	Амоній хлорид	Подразнюючі, подразнення верхніх дихальних шляхів	1	II	Халат ГОСТ 12.4.103-83, напівмаска ГОСТ 12.4.034-85	Вийти на свіже повітря			

#### 4.1.1.2 Освітлення робочої зони.

Згідно ДБН В.2.5-28-2006, в лабораторії виконуються зорові роботи IVa розряду. Використовується система природного бокового освітлення, що здійснюється через світлові отвори (вікна) в зовнішній стіні та система штучного загального рівномірного освітлення. Санітарні норми параметрів освітлення наведені в таблиці 4.3.

Таблиця 4.3 – Санітарні норми і фактичні значення параметрів освітлення

Середньої точності	Характеристика зорової роботи	Розряд зорової роботи	Штучне освітлення				Природне освітлення	Суміщене освітлення		
			Освітленість, лк				КПО, $e_n$ , %			
			При системі комбінованого освітлення			При системі загального освітлення	При верхньому або комбінованому освітленні	При боковому освітленні	При верхньому або комбінованому освітленні	При боковому освітленні
			Всього	у т. ч. від загального	Фактичне значення					

Фактичне значення освітленості при використанні штучного освітлення становить 300 лк, що відповідає нормі [4].

В якості джерел штучного освітлення використовуються люмінесцентні світильники ВОД з лампами ЛБ, які розміщені у верхній зоні приміщення для

здійснення загального рівномірного та загального локалізованого освітлення. Дані світильники за своєю будовою є захищеними від пилу, вологи і хімічно активного середовища. Контроль освітленості проводиться один раз на півріччя та після кожного ремонту системи освітлення за допомогою люксметра Ю-116.

#### *4.1.1.3 Захист від шуму і вібрації.*

Джерелами шуму та вібрації в лабораторії є витяжні шафи, мішалки, компресори та центрифуга.

Допустимий рівень звуку при виконанні висококваліфікованої роботи, вимірювальної та аналітичної роботи складає 60 дБА (згідно ДСН 3.3.6.037- 99.) Фактичний рівень шуму при виконанні науково-дослідної роботи складав 52 дБА, і, отже, не перевищував допустимої норми. Таким чином, розробляти додаткові заходи щодо зниження рівня шуму немає потреби.

#### *4.1.1.4 Електробезпека.*

Згідно ПУЕ, у відповідності до ступеня небезпеки ураження електричним струмом лабораторія належить до приміщень 2 категорії – особливо небезпечні приміщення через наявність фактичного агресивного середовища.

У лабораторії використовується електрообладнання, яке живиться від трифазної чотирьохпровідної електромережі змінного струму з частотою 50 Гц та напругою 380/220 В з глухозаземленою нейтраллю.

Ураження людей електричним струмом можливе при порушенні електроізоляції, коли під напругою можуть опинитися струмопровідні елементи обладнання. У цьому випадку заходом запобігання ураження людей електричним струмом є ізоляція струмопровідних частин. Струмопровідною також є підлога. Для захисту від ураження струмом використовується керамічна плитка.

Ураження людини електричним струмом в умовах робочої зони може виникнути з умов дотику до металевих корпусів обладнання та незаземлених металевих предметів, які опинилися під напругою.

Джерелами ураження електричним струмом є випрямлячі, струмопровідники, а також металевий корпус лінії. Причиною ураження може бути перехід напруги мережі 220 В в ланцюг живлення лінії в результаті порушення цілісності ізоляції.

Розраховуємо силу струму, що проходить крізь тіло людини при одно- і двофазному дотику до струмопровідних елементів, що перебувають під напругою:

$$I_{\text{л}} = \frac{U_{\phi} \cdot 10^3}{R_{\text{л}} + R_o} \text{ мА}. \quad (4.1)$$

де  $U_{\phi} = 220$  – фазова напруга, В;

$R_{\text{л}} = 2000$  – опір людини в самих несприятливих умовах, не враховуючи опір підлоги, Ом;

$R_o = 4$  – опір заземлення нейтралі, Ом.

Відповідно до ГОСТ 12.1.038-84, в нормальному режимі роботи електрообладнання  $I = 0.3$  мА,  $U = 2$  В, а при аварійному режимі -  $I = 6$  мА,  $U = 36$  В.

$$I_{\text{л}} = \frac{220 \cdot 10^3}{2000 + 4} = 109,78 \text{ мА}.$$

Напруга дотику:

$$U_o = I_{\text{л}} \cdot R_{\text{л}} = 0,11 \cdot 2000 = 220 \text{ В}. \quad (4.2)$$

Отже, як бачимо розраховані значення  $I_{\text{л}}$  і  $U_{\text{д}}$  значно перевищують наведені вище нормативні значення. Це свідчить про те, що при порушенні вимог правил будови електрообладнання у приміщенні лабораторії можливі електротравми з тяжкими наслідками. Приміщення лабораторії відноситься до приміщення без підвищеної небезпеки, оскільки характеризується відсутністю умов, які створюють підвищену або особливу небезпеку.

Оскільки, в умовах лабораторії небезпечною є дія на людину будь-якого відчутного струму, захисту від випадкового дотику підлягають всі струмоведучі частини обладнання незалежно від напруги. В особливо тяжких умовах знаходиться ізоляція електрообладнання, яке знаходиться у витяжній шафі. Тому мережеві шнури з поліхлорвініловою ізоляцією по всій довжині захищені гумовим шлангом.

Для забезпечення електробезпеки реалізовано окремо чи у поєднанні один з одним такі заходи та засоби:

- електроізоляція струмоведучих частин;
- електрозахисні засоби: діелектричні рукавиці, діелектричне взуття, ізолювальні підставки, плакати та знаки безпеки;
- захисне заземлення;
- захисне відключення електроустановок при виникненні в них небезпеки ураження струмом.

Під час виконання науково-дослідної роботи використовується апаратура з заземленням І класу, тобто заземлення відбувається автоматично при включенні вилки в розетку.

## 4.2 Безпека в надзвичайних ситуаціях

### 4.2.1 Атестація робочих місць

Оцінка фактичного стану праці на робочому місці проводиться за даними атестації робочого місця й спеціальних інструментальних вимірів рівнів факторів виробничого середовища, які відображені на карті умов праці робочого місця дослідника. Дані занесені до таблиці 4.4.

Дата заповнення: 27 вересня 2019 року

Назва дільниці: НТУУ «КПІ», корпус №4, лабораторія №225

Таблиця 4.4 – Карта умов праці на робочому місці в лабораторії

п/п	Фактори виробничого середовища	Норматив ГДК	Фактичне значення	Ступінь шкідливості фактора, бали	Тривалість за зміну, Т	Шкідливість фактична, бали
1	2	3	4	5	6	7
1	Шкідливі хімічні речовини, мг/м <sup>3</sup> :					
	ННОЗ (II клас небезпеки)	1	-	1	0,1	0,1
	Амоній хлорид (II клас небезпеки)	1	-	1	0,1	0,1
2	Мікроклімат у приміщенні:					
	Температура повітря, °С	17 - 19	18	-	1	-
	Швидкість повітря, м/с	0,2	0,2	-	1	-
	Відносна вологість повітря, %	60-40	50	-	1	-
3	Напруженість праці:					
	Увага (% часу зміни)	70	70	-	0,7	
	Час спостереження за ходом лабораторного процесу без активних дій, % тривалості зміни	20	20	-	0,4	

Продовження таблиці 4.4

1	2	3	4	5	6	7
	Освітленість в приміщенні, лк	300	300		0,5	
	Виробнича і локальна вібрація	63	32		0,3	
	Інфразвук, дБ	відсутній		-	-	-
	Ультразвук, дБ	відсутній		-	-	-

Сумарна фактична шкідливість становить 0,2 бали. Розмір доплати до тарифної ставки буде становити 3 %. Згідно з даними карти умов праці на робочому місці інженера воно підлягає раціоналізації. У відповідних підрозділах наведені засоби і заходи для забезпечення здорових і безпечних умов праці та їх покращення [3].

#### 4.2.2 Пожежна безпека

Причинами виникнення загоряння і вибуху в приміщенні лабораторії можуть бути:

- коротке замикання при пошкодженні електроізоляції електрообладнання;
- занесення в приміщення високих потенціалів блискавки через видовжені елементи конструкцій;
- прямий удар блискавки в об'єкт;
- накопичення зарядів статичної електрики.

Для усунення причин виникнення загорання і вибуху у лабораторії вживаються наступні заходи і засоби:

- застосовуються первинні засоби гасіння пожеж – вогнегасники;



- блискавкозахист досягається за допомогою стрижньового блискавковідводу;
- передбачено аварійне відключення установок у випадку виникнення загорання;
- використовуються засоби колективного захисту від статичної електрики, згідно з ГОСТ 12.4.124-83, а саме використовується відвід зарядів за допомогою заземлення.

З метою зменшення пожежної небезпеки всі конструкції виконані на 90 % з негорючих матеріалів. Світильник у витяжній шафі передбачений у вибухозахищеній будові. Електропроводка проведена ззовні витяжної шафи, вимикачі та розетки також знаходяться поза витяжною шафою.

З метою оптимізації процесу пожежогасіння у випадку виявлення полум'я в лабораторії знаходяться первинні засоби пожежогасіння (пожежний інвентар: покривала з негорючого теплоізоляційного полотна, грубововняні тканини або повсті, ящики з піском, бочки з водою, пожежні відра, совкові лопати; пожежний інструмент: гаки, ломы, сокири тощо; вогнегасники ) у спеціально відведеному місці, про місцеположення якого інструктують всіх працівників лабораторії.

Приміщення лабораторії обладнане пожежною сигналізацією, а також в лабораторії розміщено план евакуації при виникненні пожежі. Показники пожежної та вибуховонебезпечних речовин та матеріалів, що знаходяться в лабораторії, наведено в таблиці 4.4.

Таблиця 4.4 – Показники пожежної та вибухової небезпечності речовин та матеріалів. Класифікація виробництва пожежо- та вибухонебезпечності

Назва дільниць, приміщень зовнішніх установок	Речовини, що мають обіг у виробництві	Агрегатний стан речовини в нормальних умовах	Горючість, займистість, вибухонебезпечність	Показники пожежо-вибухонебезпечності			Вогнегасячі засоби	Категорія приміщення за ОНТП 34-02	Клас приміщення (зони) і зовнішніх установок згідно з ПУЕ	Категорія об'єкта і тип зони захисту по влаштуванню грозозахисту згідно з БН 305-77
				Температура	Температура займання	Температура самозаймання				
1	2	3	4	5	6	7	12	13	14	15
Хіміко-технологічна лабораторія	Деревина	тв.	горить	225	225	260	ВВ-2, ВВ-5	В	В-16	ІІ-б
	Текстоліт	тв.	горить, важко спалахувачий	358	363	500	ВВ-2, ВВ-5	В	В- ІІа	ІІ-б
	Природний газ	г	горить вибухонебезпечний	87,8	650	537,8	Об'ємне гасіння	В	В- ІІа	ІІ-б

#### 4.2.3 Безпека проведення експерименту

Експериментальна частина НДР виконувалася в лабораторії №162 корпусу №4 Національного технічного університету України «Київського політехнічного інституту». В лабораторії працювало 4 особи, на кожного працівника припадало: площа 50 м<sup>2</sup> та об'єм 150 м<sup>3</sup>, що відповідає санітарним нормам [2].

В експериментах використовувався скляний лабораторний посуд. При порушенні правил роботи з ним можливі механічні порізи шкіри. Особливо небезпечним є посуд, забруднений сірчаною, соляною та азотною кислотами, оскільки при доторканні їх до шкіри можливі хімічні опіки.

З метою забезпечення безпеки працівника при проведенні експериментів передбачені наступні заходи:

- всі роботи проводяться в спеціальному халаті;
- всі дослід з концентрованими речовинами проводяться в витяжній шафі при наявності спеціального одягу і захисних окулярів, перед початком роботи перевіряється наявність руху повітря у витяжній шафі;
- реактиви та хімічний посуд зберігаються в окремих шафах;
- в кінці робочого дня вимикається електроенергія і вода;
- обов'язково передбачені медичні аптечки.

Порядок допуску персоналу до самостійної роботи в лабораторії неорганічного синтезу: до самостійної роботи в хімічній лабораторії допускаються особи, які досягли 18-річного віку, пройшли медичний огляд, професійно навчені, пройшли вступний первинний інструктаж з охорони праці та пожежної безпеки, засвоїли методики виконання науково-дослідної роботи [3].

Всі хімічні реактиви, що використовуються у науково-дослідній роботі, зберігаються безпосередньо в приміщенні лабораторії. Хімічно чисті реактиви зберігаються в скляній тарі у витяжній шафі. Хімічні реактиви, що піддаються дії світла, зберігаються в склянках, виготовлених з темного скла або обгорнутих чорним папером, в затемненій частині лабораторії. Хімікати в дрібній тарі зберігаються на стелажах відкритого типу. Хімічні реактиви зберігаються в щільно закритих банках та інших сосудах з наклеєними на них етикетками, на яких вказані точна назва речовини та її характеристика (вогнебезпека, концентрація).

#### 4.2.4 Аналіз небезпеки об'єкта

Згідно з Положенням «про план локалізації та ліквідації аварійних ситуацій» лабораторія №225 корпусу №4 Національного технічного університету України «Київського політехнічного інституту» відноситься до категорії потенційно небезпечних об'єктів, рівня «Б». Згідно з класифікацією за пожежонебезпекою, згідно ГОСТ 27331-87, можливі пожежі у лабораторії відносяться до класу В підкласу В2, який характеризується горінням рідких речовин розчинних у воді (спирт, ацетон та ін.).

Аварійні ситуації можуть виникнути в разі: ураження електричним струмом, виходу з ладу водопостачання, витікання газу з балонів, вибуху балонів з киснем, підвищеної загазованості приміщення, розливу розчинів концентрованих реагентів, виходу з ладу механічного та електричного обладнання, займання або самозаймання речовин, виходу з ладу вентиляції та інше.

В разі аварійної ситуації забороняється допускати сторонніх осіб в небезпечну зону, повідомити про те, що сталося керівника робіт. Особи, які зайняті ліквідацією аварій, повинні бути забезпечені індивідуальними засобами захисту. При виникненні пожежі викликати пожежну частину та приступити до гасіння підручними засобами пожежогасіння. Якщо є потерпілі надавати їм першу медичну допомогу; при необхідності викликати швидку допомогу. Виконувати всі вказівки керівника робіт по ліквідації небезпеки [4].

Оцінка надійності захисту робітників і службовців об'єкта з використанням захисних споруд за місткістю та за захисними властивостями

Таблиця 4.5 – Характеристики захисних споруд.

Тип, номер захисної споруди	Площа приміщень, м <sup>2</sup>		Висота приміщень	Аварій-ний вихід
	Людей з санітарним постом	Допоміжні		
		ФВП, санвузли		
Сховище 1	52	12	2,4	є

Наявність основних і допоміжних приміщень:

Сховище 1 відповідає нормам.

Розрахункова місткість захисних споруд за площею:

На одну людину передбачена площа 0,5 м<sup>2</sup> при висоті приміщення 2,4 м.

$$M_1 = \frac{52-2}{0,5} = 100 \text{ ос.}, \text{ де } 2 \text{ м}^2 \text{ виділено на санвузли.}$$

Розрахункова місткість за об'ємом приміщень:

На одну людину передбачений об'єм 1,5 м<sup>3</sup>

$$M_o = \frac{(S_{\text{пр}} + S_{\text{д}}) \cdot h}{1,5} = \frac{(52 + 12) \cdot 2,4}{1,5} = 103 \text{ ос.}$$

Коефіцієнт місткості:

$$K_m = \frac{M}{N} = \frac{100}{100} = 1, \text{ де } N - \text{кількість працівників найбільшої зміни}$$

Визначаємо потрібну кількість двох'ярусних нар у приміщеннях для людей

$$H = \frac{M}{5} = \frac{103}{5} = 21 \text{ нар}$$

Висновок:

$K_m > 1$ , тобто захисні споруди дозволяють розмістити всіх працівників. Слід придбати 24 двох'ярусних нар для захисних споруд.

Вихідні дані для оцінки захисних властивостей споруди :

– віддаленість об'єкта від точки прицілювання  $R_r = 2,5$  км;

– очікувана потужність ядерного боєприпаси  $q = 200$  кт;

- вид вибуху – наземний;
- ймовірне максимальне відхилення центру вибуху боєприпаси від точки прицілювання  $r_{\text{відх}} = 0,5$  км;
- швидкість середнього вітру  $V_{\text{св}} = 100$  км/год;
- напрям середнього вітру – у бік об'єкта;
- конструкції захисних споруд розраховані на надмірний тиск: сховище № 1  $\Delta P_{\text{ф. зах}} = 200$  кПа;
- коефіцієнт ослаблення радіації сховища № 12  $K_{\text{осл. зах}} = 1000$ .

Визначаємо потрібні захисні властивості споруд:

а) для захисту від ударної хвилі:

$$R_{\text{min}} = R_r - r_{\text{відх}} = 2,5 - 0,5 = 2 \text{ км}$$

За значенням  $R_{\text{min}} = 2$  км, потужністю боєприпасу  $q = 200$  кт при наземному вибуху визначаємо  $\Delta P_{\text{ф. max}}$ :

$$\Delta P_{\text{ф. max}} = \Delta P_{\text{ф. потр}} = 60 \text{ кПа}$$

б) для захисту від радіоактивного зараження:

$K_{\text{осл. потр}}$  розраховуємо за формулою

$$K_{\text{осл. потр.}} = \frac{D_{\text{р.з.}}}{D_{\text{доп}}} = \frac{5 \cdot P_{1\text{max}}(t_{\text{п}}^{-0,2} - t_{\text{к}}^{-0,2})}{50}$$

$$t_{\text{п}} = \frac{R_{\text{min}}}{V_{\text{с.в.}}} + 1 = \frac{2}{100} + 1 = 1 \text{ год.}$$

$$t_{\text{к}} = t_{\text{п}} + 96 = 1 + 96 = 97 \text{ год.}$$

$P_{1\text{max}}$  – максимальний рівень радіації, очікуваний на об'єкті на 1 год після вибуху, якщо  $q = 200$  кт  $R_{\text{min}} = 2$  км,  $V_{\text{с. в}} = 100$  км/год,  $P_{1\text{max}} = 10880$  Р/год, тоді

$$K_{\text{осл. потр.}} = \frac{5 \cdot 10880(1^{-0,2} - 97^{-0,2})}{50} = 952,2$$

Визначаємо наявні захисні властивості захисних споруд:

а) від ударної хвилі відповідно до вихідних даних:

$$\Delta P_{\text{ф. зах.}} = 200 \text{ кПа}$$

б) від радіоактивного зараження: відповідно до вихідних даних  $K_{\text{осл.}} = 1000$

Порівнюємо захисні властивості захисних споруд з потрібними:

а) за ударною хвилею: для сховища №1  $\Delta P_{\text{ф. зах}} > \Delta P_{\text{ф. потр.}}$

б) за іонізуючим випромінюванням: для сховища №1  $\Delta P_{\text{ф. зах}} > \Delta P_{\text{ф. потр.}}$

Висновок :

Сховище № 1 забезпечує захист людей, що в ньому перебувають, у максимальній кількості 103 особи.; захисні властивості сховища №1 відповідають вимогам і забезпечують захист всіх робітників.

## 5 ЕКОНОМІЧНА ЧАСТИНА МАГІСТЕРСЬКОЇ ДИСЕРТАЦІЇ

Робота є розробкою стартап-проекту з проектування, виготовлення та продажу лінійки фотокаталізаторів для очищення стічних вод. У роботі проаналізовано ринок виробників фотокаталізаторів, розраховано точку беззбитковості, проаналізований економічний ефект від використання нового виду сировини.

**Бізнес-ідея:** виготовлення та продаж лінійки фотокаталізаторів для очищення стічних вод.

**Мета стартапу:** задоволення потреб промислових підприємств та окремих науковців у дешевому, швидкому і ефективному фотокаталізаторі на основі  $\text{TiO}_2$  для очищення води від забруднювачів. Підприємства проводять діяльність у сфері поводження з відходами за КВЕД секції Е основні розділи 80.30 проведення розслідувань та 82.99 надання інших допоміжних комерційних послуг, а науковці проводять дослідження в сфері водопідготовки і збереження навколишнього середовища, КВЕД секції М, розділ М.72..

**Модель стартапу:** B2B і B2C

**Назва продукту:** SolidPower

**Суб'єкти замовлення:** Ідея к.х.н. доцента Донцової Т. А, співробітника кафедри ТНР та ЗХТ НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського», яка виникла на основі потреби ринку та наявності актуальних досліджень у сфері покращення властивостей фотокаталізаторів.

**Об'єкт дослідження:** Розрахунок необхідних коштів для розробки технології отримання, запуску виробництва та аналіз властивостей існуючих фотокаталізаторів та сорбентів.

**Продукт:** п'ять видів фотокаталізаторів з ефективністю від 60 до 95% та сорбуючою здатністю до 1-15%. Одна партія складає по 10 кг продукту одного виду з індексами: НТ90Р25Sn, 1НТ90Тi10Sn, 2НТ90Тi10Sn,  $\text{TiO}_2 + \text{Y}$ ,  $\text{TiO}_2 + \text{Nb}$ .



### **Загальна технологія виготовлення однієї партії:**

1. Приготування розчину води з необхідною кислотністю.
2. Розміщення в ректор певного об'єму розчину та додавання по краплям титану (IV) ізопропоксиду та елементів для добування Sn, Y, Nb в залежності від індексу кінцевого продукту.
3. Синтез за 180 °С в автоклаві 8 годин.
4. Промивання отриманої суспензії до необхідної кислотності.
5. Сушіння отриманої суспензії в сушильній шафі при 80 °С.

#### **5.1 Розрахунок ціни інноваційної пропозиції на ринку**

Ціноутворення - це процес обґрунтування, затвердження та перегляду цін і тарифів, визначення їх рівня, співвідношення та структури.

Всі методи ціноутворення можна об'єднати в три базові моделі, що визначають цінову політику фірми:

1. Витратні методи ціноутворення.
2. Методи, що спираються на попит.
3. Методи з орієнтацією на конкуренцію .

Методи ціноутворення, що ґрунтуються на врахуванні витрат називаються витратними. До них належать метод повних витрат, метод надбавок, метод цільового прибутку та агрегатний метод.

Розглянемо метод повних витрат. Ціна розраховується, виходячи із суми постійних і змінних витрат на одиницю продукції й запланованого прибутку з урахуванням нижнього порогу ціни.

$$Ц = C + П,$$

де  $Ц$  – ціна одиниці товару, грн;  $C$  – собівартість одиниці товару, грн;

$П$  – величина прибутку, яку бажає отримати підприємство від реалізації одиниці товару, грн.

Для початку проведемо калькуляцію усіх витрат для запуску проекту.

### 5.1.2 Матеріальна, документальна та організаційно-технічна підготовка виробництва

У цьому розділі буде проведений розрахунок втрат на початку виробництва запропонованого асортименту фотокаталізаторів.

Баланс використання основних та оборотних фондів:

Підприємство не залежне від розташування природних ресурсів, тому воно буде розташовуватися на будь-якій території за містом або в межах міста, бо виготовлення не токсичне, отже спочатку виробництво може займати місце в лабораторії 4 корпусу університету або в приміщенні Sikorsky Challenge.

Витрати на обладнання приведені в таблиці 5.1. Слід взяти один автоклав, нутч-фільтр, бак для води, сушильну шафу, насос. Тефлонового реактора необхідного розміру немає в продажі, отже його необхідно виготовити на замовлення.

Таблиця 5.1 - Витрати на обладнання.

Назва	Кількість, шт	Джерело	Ціна, грн
Автоклав	1	<a href="https://russian.alibaba.com">https://russian.alibaba.com</a>	18 000
Нутч-фільтр з мокрим компресором	1	<a href="https://russian.alibaba.com">https://russian.alibaba.com</a>	20 000
Бак для води	2	<a href="https://russian.alibaba.com">https://russian.alibaba.com</a>	1 000
Сушильна шафа	1	<a href="https://russian.alibaba.com">https://russian.alibaba.com</a>	40 000
Тефлоновий ректор	1	Виготовлення на замовлення	2 000
Насос	1	<a href="https://russian.alibaba.com">https://russian.alibaba.com</a>	2 000
Всього			83 000

До основних фондів відносяться:

- Обладнання – 83 000 грн
- Приміщення – 200 000 грн
- Нематеріальні активи – 10 000 грн
- Інструменти, прилади, інвентар – 10 000 грн.
- Транспорт (купівля важного автомобіля з вторинного ринку) – 70 000 грн.

Розрахунок амортизації:

1. Амортизація обладнання 5 років – 16 600 грн/рік;
2. Амортизація приміщення 10 років – 20 000 грн/рік;
3. Амортизація нематеріальних активів 12 років – 833 грн/рік;
4. Інструменти, прилади, інвентар 4 роки – 2 500 грн.
5. Амортизація транспорту 5 років – 14 000 грн/рік;

Загальна амортизація амортизації складає 53 933 грн/рік.

Загальна вартість основних фондів становить 373 000 грн.

До оборотних фондів відносяться:

- Сировина: реагенти для отримання продукту.
- Електроенергія.
- Запасні частини та матеріали.

Аналіз цін конкурентів виробників титану діоксиду представлено в таблиці 5.2. Виявлено, що ціна залежить від чистоти продукту, ефективності, пакування та популярності і авторитету компанії. Порівнявши подібні за своїми характеристиками продукцію конкурентів прийнято встановити ціну на власний продукт – 6 500 грн за кг. При здобутті постійних споживачів та репутації на ринку ціна може бути переглянута. На початковому етапі ціна занижена для того щоб спонукати споживача оцінити ефективність

покращеної продукції. Для початку ціну на всю лінійку продукцію встановлено однакою для визначення потреб споживача.

Таблиця 5.2 - Аналіз цін конкурентів виробників наноструктур стануму діоксиду.

Назва компанії	Ціна за кг продукції, грн
Merck	6 670
American elements	6 500
AEROXIDE®	6 900

В таблицях 5.3 - 5.7 представлений матеріальний баланс на кожну одиницю із партії.

Таблиця 5.3 - Матеріальний баланс на розробку продукту з індексом HT90P25Sn

Завантажено			Отримано		
Назва	Кількість	Ціна, грн	Назва	Кількість	Ціна, грн
Хлорид станума	1 кг по 6 520 грн/кг	6 520	1HT90Ti10 Sn	10 кг по 6500 грн/кг	65 000
Титан (IV) ізопропоксид	11 кг по 3 250 грн/кг	35 750			
Вода очищена	10 дм <sup>3</sup> по 56 грн/дм <sup>3</sup>	560			
Електроенергія	56 кв/год По 2,69 грн/кВт·год	150,8	Втрати при промивці	2 кг	0
Всього		42 980,8	Всього		65 000

Таблиця 5.4 - Матеріальний баланс на розробку продукту з індексом 1НТ90Ti10Sn

Завантажено			Отримано		
Назва	Кількість	Ціна, грн	Назва	Кількість	Ціна, грн
Хлорид станума	1 кг по 6 520 грн/кг	6 520	НТ90P25S п	10 кг по 6500 грн/кг	65 000
Титан (IV) ізопропоксид	11 кг по 3 250 грн/кг	35 750			
Вода очищена	10 дм <sup>3</sup> по 56 грн/дм <sup>3</sup>	560			
Електроенергія	56 кв/год По 2,69 грн/кВт·год	150,8	Втрати при промивці	2 кг	0
Всього		42 980,8	Всього		65 000

Таблиця 5.5 - Матеріальний баланс на розробку продукту з індексом 2НТ90Ti10Sn

Завантажено			Отримано		
Назва	Кількість	Ціна, грн	Назва	Кількість	Ціна, грн
Хлорид станума	1 кг по 6 520 грн/кг	6 520	НТ90P25S п	10 кг по 6500 грн/кг	65 000
Титан (IV) ізопропоксид	11 кг по 3 250 грн/кг	35 750			
Вода очищена	10 дм <sup>3</sup> по 56 грн/дм <sup>3</sup>	560			
Електроенергія	56 кв/год По 2,69 грн/кВт·год	150,8	Втрати при промивці	2 кг	0
Всього		42 980,8	Всього		65 000

Таблиця 5.6 - Матеріальний баланс на розробку продукту з індексом  $\text{TiO}_2 + \text{Y}$

Завантажено			Отримано		
Назва	Кількість	Ціна, грн	Назва	Кількість	Ціна, грн
Титан (IV) ізопропоксид	11 кг по 3 250 грн/кг	35 750	$\text{TiO}_2 + \text{Y}$	10 кг по 6500 грн/кг	65 000
Вода очищена	10 дм <sup>3</sup> по 56 грн/дм <sup>3</sup>	560			
Ітрій нітрат розчин зі вмістом Ітрію 3%	3 дм <sup>3</sup> по 150 грн/дм <sup>3</sup>	450			
Електроенергія	56 кв/год По 2,69 грн/кВт·год	150,8	Втрати при промивці	1 кг	0
Всього		36 910,8	Всього		65 000

Таблиця 5.7 - Матеріальний баланс на розробку продукту з індексом  $\text{TiO}_2 + \text{Nb}$ .

Завантажено			Отримано		
Назва	Кількість	Ціна, грн	Назва	Кількість	Ціна, грн
Титан (IV) ізопропоксид	12 кг по 3 250 грн/кг	39 000	$\text{TiO}_2 + \text{Nb}$	10 кг по 6500 грн/кг	65 000
Вода очищена	10 дм <sup>3</sup> по 56 грн/дм <sup>3</sup>	560			
Ніобій нітрат розчин зі вмістом Ніобій 3%	3 дм <sup>3</sup> по 100 грн/дм <sup>3</sup>	300			
Електроенергія	56 кв/год По 2,69 грн/кВт·год	150,8	Втрати при промивці	2 кг	0
Всього		40 010,8	Всього		65 000

Виходячи з наведених таблиць витрати на виробництво фотокаталізаторів з індексами НТ90Р25Sn, 1НТ90Ti10Sn, 2НТ90Ti10Sn однакові, бо їх компоненти однакові, різниця полягає у додаванні допущання у різні етапи синтезу.

На виготовлення партії зі асортиментом із п'яти фотокаталізаторів буде затрачено 205 866 грн.

За перший рік планується випустити 30 партій. Сумарно на річний випуск продукції необхідно затратити:

Таблиця 5.8 – Калькуляція на вид продукції

Сировина	Ціна	Кількість на рік	Вартість грн./рік
Хлорид станума	6 520,5 грн/кг	90 кг	586 845
Титан (IV) ізопропоксид	3 250 грн/кг	1 680	5 460 000
Ітрій нітрат розчин зі вмістом Ітрію 3%	150 грн/дм <sup>3</sup>	90	13 500
Ніобій нітрат розчин зі вмістом Ніобій 3%	100 грн/дм <sup>3</sup>	90	9 000
Вода	56 грн/дм <sup>3</sup>	12 400 дм <sup>3</sup>	694 400
Всього			<b>6 763 745</b>

Сукупні витрати на електроенергію.

Розрахуємо витрати електроенергії даним підрозділом підприємства за регульованими тарифами, якщо:

- потужність обладнання  $P_{об}^{річ} = 35$  кВт
- обладнання працює 8 год /добу.

$$T = 255 \cdot 8 = 2040 \text{ год.}$$

ставки регульованого тарифу:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{U}_{ел} &= \sum_{i=1}^n (T_{рег} \cdot T) \cdot P_{обл}^{год} = (2,69 \cdot 2040) \cdot 35 + 2,69 \cdot 8760 \cdot 0,2 = \\
 &= 196779 \text{ грн / рік}
 \end{aligned}$$

де  $T_{рег}$  – тарифна ставка за регульованим тарифом:

$$T_{рег} = 2,69 \text{ грн./кВт год.}$$

$P_{об}^{річ}$  – річна потужність обладнання

Загальна вартість оборотних засобів становить 6 960 524 грн/рік.

### 5.1.3 Персонал та аналіз відповідальних осіб



Для реалізації даного проекту збирається команда ініціативних людей, а саме студент Біла Катерина та працівники кафедри ТНР та ЗХТ НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського», які своєю роботою допомагають реалізувати проект, як технологічні консультанти: к.х.н. доцент. Донцова Т. А. та аспірант Кутузова Н. А. Також необхідно долучити до проекту маркетолога та лаборанта.

СЕО – Біла Катерина - сполучна ланка між розробниками і зовнішнім середовищем (науковим суспільством, економікою, технологічними ланцюгами, ринками і споживачами). Таким чином, в область завдань і відповідальності особи, що обіймає цю посаду, входить забезпечення відповідності дій розробників критеріям і нормам усього розмаїття зовнішніх зацікавлених осіб.

СЕО збирає коло довірених і зацікавлених і мотивованих людей, працюють безкоштовно до отримання прибутку, які формують команду для підтримки СЕО з обов'язками:

1. Визначення бізнесу компанії. СЕО повинен проводити постійний аналіз і шукати відповідь на подвійний питання: яким бізнесом займається компанія і яким не займається. Тобто на якому «полі» слід грати, щоб вигравати, а куди і зовсім не слід втручатися. Для цього потрібен широкий погляд, охоплює всю компанію, якою володіє тільки особа на посаді СЕО.
2. Безпосередньо шукає перших постійних клієнтів.
3. Безпосередньо відповідає за якість і тестування.
4. Вироблення організаційних цінностей і стандартів. Цінності визначають обличчя компанії і її поведінка, стандарти пов'язані з очікуваннями, вони означають критерії успіху, які оцінюються з точки зору зовнішнього середовища. СЕО в процесі визначення цінностей і стандартів компанії повинен розуміти, наскільки його компанія успішна з погляду тих, хто має для компанії велику цінність, і наскільки вона успішна в порівнянні з кращими показниками на ринку.

Вимоги до персоналу:

1. Маркетолог – вища освіти, активна життєва позиція. Займається рекламою та просуванням товару.
2. Лаборант – досконале знання технологічного процесу та безпосереднє виконання синтезу.

Таблиця 5.9 – Заробітна плата персоналу

Посада	Кількість	Зарплата грн./міс	Всього грн./міс
Менеджер	1	10 000	10 000
Лаборант	1	10 000	10 000
Біла Катерина	1	10 000	10 000
Донцова Т. А.	1	10 000	10 000
Кутузова Н. А.	1	10 000	10 000
<b>Всього</b>	<b>5</b>		<b>50 000</b>

Заробітна плата за рік:

$$ЗП_{\text{рік}} = 50\,000 \cdot 12 = 600\,000 \text{ грн/рік};$$

Фонд оплати праці становить:

$$ФОП = 600\,000 \cdot 1,22 = 732\,000 \text{ грн/рік}.$$

Таблиця 5.10 – Сукупні витрати на запуск проекту:

Завантажено	
	Затрати на річний випуск, грн/рік
Сировина	6 763 745
Електроенергія	196 779
ФОП	732 000
ОФ	373 000
<b>Всього</b>	<b>8 065 524</b>

Річна собівартість продукції:

$$C = O\text{бз} + A = 6\,960\,524 + 53\,933 = \\ = 7\,014\,457 \text{ грн/рік}$$

Обсяг попиту на запропонований продукт 30 партій на рік.

Собівартість одиниці продукції  $7\,014\,457/30 = 233\,815$  грн/партія.

Очікуваний прибуток з одиниці продукції: 91 185 грн/партія.

Отже, за методом повних витрат прогнозована ціна продукту становитиме:

$$\text{Ц} = \text{П} + \text{С} = 233\,815 + 91\,185 = 325\,000 \text{ грн/партія.}$$

## 5.2 Ключові фактори успіху проекту методом Шонфільда

Оцінка конкурентоспроможності продукту проводилась за методом Шонфільда. Порівняймо властивості синтезованих каталізаторів з комерційним аналогом AEROXIDE® TiO<sub>2</sub> P25.

Метод Шонфільда належить до експертних методів оцінки. Даний метод застосовують для визначення конкурентних переваг продукції підприємства над продукцією конкурентів. Особливістю методу є наявність графіку – візуалізація переваг, що полегшує прийняття керівником наданої інформації.

Послідовність виконання:

1. Формується перелік характеристик продукції, які підприємство вважає важливими для своєї продукції.
2. Методом експертного опитування визначається вагомість кожної характеристики продукції з точки зору споживача. Оцінюють вагомість кожної характеристики цифрою від 0,0 до 1,0.
3. Формується перелік конкурентів, які виготовляють аналогічну продукцію.
4. Методом експертного опитування оцінюють від 1 до 5 балів кожену характеристику для нашої продукції і для конкурентів.
5. Формується зведена таблиця оцінки характеристик продукції.

6. З урахуванням коефіцієнту вагомості характеристики визначається бальна оцінка кожної характеристики для нашої продукції і для конкурентів.

Таблиця 5.11 – Ключові фактори успіху проекту за методом Шонфільда

Показник	Коефіцієнт значущості	Оцінка за п'ятибальною шкалою					
		TiO <sub>2</sub> P25	HT90P25 Sn	1HT90Ti1 0Sn	2HT90Ti 10Sn	TiO <sub>2</sub> +Y	TiO <sub>2</sub> +Nb
Ціна, грн	0,2	3	4	4	4	3	3
		$0,2 \cdot 3 = 0,6$	$0,2 \cdot 4 = 0,8$	$0,2 \cdot 4 = 0,8$	$0,2 \cdot 4 = 0,8$	$0,2 \cdot 3 = 0,6$	$0,2 \cdot 3 = 0,6$
Площа поверхні, мм <sup>3</sup>	0,3	5	3	3	3	2	2
		$0,3 \cdot 5 = 1,5$	$0,3 \cdot 3 = 0,9$	$0,3 \cdot 3 = 0,9$	$0,3 \cdot 3 = 0,9$	$0,3 \cdot 2 = 0,6$	$0,3 \cdot 2 = 0,6$
Фотокаталітичні властивості, %	0,4	3	5	4	3	4	3
		$0,4 \cdot 3 = 1,2$	$0,4 \cdot 5 = 2$	$0,4 \cdot 4 = 1,6$	$0,4 \cdot 3 = 1,2$	$0,4 \cdot 4 = 1,6$	$0,4 \cdot 3 = 1,2$
Абсорбційні властивості, %	0,1	5	4	4	4	3	3
		$0,1 \cdot 5 = 0,5$	$0,1 \cdot 4 = 0,4$	$0,1 \cdot 4 = 0,4$	$0,1 \cdot 4 = 0,4$	$0,1 \cdot 3 = 0,3$	$0,1 \cdot 3 = 0,3$

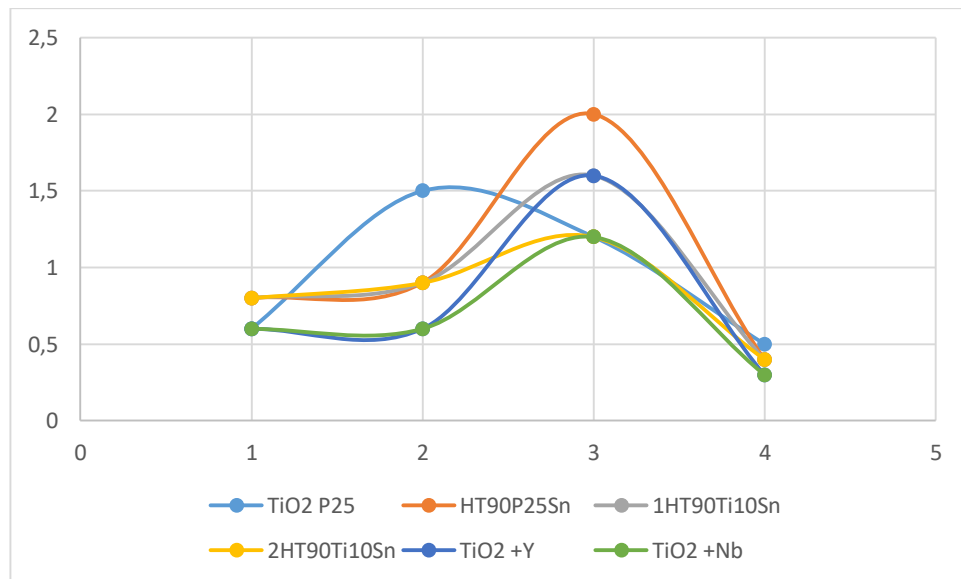


Рисунок 5.1 – Бальна оцінка з урахуванням коефіцієнту вагомості кожної характеристики для нашого додатку і його аналогів

Відповідно до отриманих результатів найважливішим фактором є фотокаталітичні властивості. Таким чином, на першому етапі на ринок будемо просувати продукт з індексом HT90P25Sn, що має найкращі фотокаталітичні властивості, навіть в порівнянні з комерційним трестованим зразком AEROXIDE® TiO<sub>2</sub> P25. На етапі розвитку слід просувати зразки 1HT90Ti10Sn і TiO<sub>2</sub> + Nb. На етапі зрілості слід просувати зразки TiO<sub>2</sub> + Y і 2HT90Ti10Sn.

### 5.3 Розрахунок точки беззбитковості підприємства

Точка беззбитковості — обсяг або рівень операцій, при якому сукупний дохід дорівнює сукупним витратам, тобто це точка нульового прибутку або нульових збитків.

Аналіз беззбитковості чи аналіз витрат, обсягів виробництва і прибутковості підприємства — здійснюється з метою визначення кількості одиниць товару, необхідної для продажу, чи обсягу реалізації послуг, аби окупити всі витрати. Це метод вивчення взаємозв'язку між витратами і доходами при різному рівні виробництва, і саме тому він надзвичайно корисний на стадії підготовки й аналізу майбутнього проекту, а також на стадії його реалізації. Рівень беззбитковості по прибутку досягається при такому обсязі реалізації, виручки від якого досить для покриття всіх операційних витрат, включаючи амортизацію; рівень беззбитковості по грошовому потоці може бути отриманий, якщо замінити суму зносу основних активів на суму, необхідну для погашення заборгованості.

SolidPower спеціалізується на виробництві фотокаталізаторів для очищення води від забруднювачів.

$$\Pi = \Pi - C;$$

$$\Pi = C, \text{ звідси } \Pi = 0.$$

Вирішено, що за перший рік буде випущено 30 партій.

$$B = C_{\text{од}} \cdot N \cdot 1$$

Знайдемо кількість партій, які треба продати, щоб вийти на точку беззбитковості за ціною 325 000 грн/партія.

$$\Pi = C_{\text{од}} \cdot B - (A + \text{ФОП} + \text{ОбФ})$$

Оскільки ФОП погодинна, то вона не залежить від випуску продукції.

$$\text{ОбФ} = 6\,960\,524 \text{ грн/рік}$$

$$\text{ФОП} = 732\,000 \text{ грн/рік}$$

$$A = 53\,933 \text{ грн/рік}$$

Нехай  $N = x$ , тоді:

$$x \cdot 325\,000 \cdot 1 - \left( \begin{matrix} 732\,000 & + & 6\,960\,524 & + \\ & + & 19\,933 & \end{matrix} \right) = 0$$

$$x = 23,86 = 24 \text{ партій.}$$

Отже, для того, щоб  $\Pi = 0$ , необхідно продати 24 партій по 10 кг 5 видів фотокаталізатора.

#### 5.4 Економічний ефект від підвищення якості сировини

Основною задачею даного проекту було вдосконалити існуючий фотокаталізатор за основі титану оксиду за допомогою використання додаткових елементів таких як Sn, Y, Nb для допущання.

Економічний ефект розробки й реалізації заходів щодо підвищення якості сировини, матеріалів і комплектуючих виробів (якості "входу" системи) розраховують за формулою:

$$\mathcal{E}_T = \sum_{t=1}^T [-\Delta C_{\text{ext}} + \Delta C_{\text{npt}} + (C_{\text{nt}} - C_{\text{ct}})] N_t - 3_{\text{вх}},$$

Де  $\mathcal{E}_T$  — очікуваний економічний ефект розробки і реалізації заходів щодо придбання більш якісних сировини, матеріалів і комплектуючих виробів (якості "входу" системи) за термін застосування заходів (T);

$C_{\text{вхт}}$  — надлишок витрат через зростання собівартості одиниці товару в році  $t$  за рахунок придбання більш якісної сировини, матеріалів і комплектуючих виробів (додаткові витрати на підвищення якості "входу", тому вони зі знаком мінус);

$C_{\text{прт}}$  — зниження собівартості одиниці товару в році  $t$  за рахунок підвищення якості процесу при застосуванні якісного "входу";

$C_{\text{нт}}$  — прогноз ціни нового товару (після впровадження заходів) у році  $t$ ;

$C_{\text{ст}}$  — те ж для старого товару;

$N_t$  — прогноз обсягу випуску товару в році  $t$ , (натуральні вимірники);

$Z_{\text{вх}}$  — одноразові витрати (інновації) на підвищення якості "входу" (аналіз ситуації, формулювання проблеми, нові договори, організаційні проекти ).

Метою магістерської роботи було синтезувати нанокompозити на основі  $\text{TiO}_2$ , які проявлять кращі фотокаталітичні властивості. Для порівняння ефективності виготовлених каталізаторів було синтезовано такою звичайний  $\text{TiO}_2$ . До речі не модифікований  $\text{TiO}_2$  проявляє гірші фотокаталітичні властивості. Економічний ефект розраховано у порівнянні з ним.

Таблиця 5.12 – Витрати на розробку однієї партії  $\text{TiO}_2$ .

Назва	Кількість	Ціна, грн
Титан (IV) ізопропоксид	50 кг по 3 250 грн/кг	162 000
Вода очищена	50 $\text{дм}^3$ по 56 грн/ $\text{дм}^3$	2 800
Електроенергія	35 кв/год По 2,69 грн/кВт·год	754
Всього		165 554

Ціна такого  $\text{TiO}_2$  становитиме 6 000 грн за кг. Отже за партію ціна становитиме 300 000 грн.

Обсяг виробництва буде таким же - 30 партій.

Елементи для допущання, а саме Sn, Y, Nb, вносяться у реактор разом з сировиною для синтезу  $\text{TiO}_2$ . Отже, Для внесення допущання під час синтезу  $\text{TiO}_2$  не потрібно вносити змін в технологічний процес, тому немає витрат на вдосконалення процесу синтезу. Виходячи з цього  $C_{\text{вхт}} = 0$ .

Витрати на розробку на аналізи оцінені в 15 000 грн.

Знайдемо економічний ефект:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_T &= ((205\,866 - 165\,554) + (325\,000 - 300\,000)) * 30 - 15\,000 = \\ &= 1\,944\,360 \text{ грн} \end{aligned}$$

Отже, очікуваний економічний ефект розробки і реалізації заходів щодо впровадження допущання до  $\text{TiO}_2$  становить 1 944 360 грн.



## ВИСНОВКИ

Згідно літературним оглядом було обґрунтовано метод синтезу та вибрано прекурсори.

Гідротермальним методом синтезу отримано ефективні наноструктурні композити титану (IV) оксиду зі станумом (II) з відомим та контрольованим хімічним і фазовим складом, які кращі за фотокаталітичною активністю ніж комерційний зразок AEROXIDE® TiO<sub>2</sub> P25.

Також кожен зі синтезованих зразків має власні сорбційно-фотокаталітичні властивості, цим показано, що на сорбційно-фотокаталітичні властивості композитів впливає багато факторів (питома площа поверхні, поруватість, співвідношення розміру пор і розміру молекули політанту тощо).

## СПИСОК ПОСИЛАНЬ

1. Hanaor, D. A. H., & Sorrell, C. C. (2011). Review of the anatase to rutile phase transformation. *Journal of Materials Science*, 46(4), 855–874. doi:10.1007/s10853-010-5113-0
2. Stepanov, A., Xiao, X., & Ren, F. (2013). Implantation of titanium dioxide with transition metal ions. In *Titanium Dioxide: Applications, Synthesis and Toxicity* (pp. 59–83).
3. Mozia, S. (2010). Photocatalytic membrane reactors (PMRs) in water and wastewater treatment. A review. *Separation and Purification Technology*, 73(2), 71–91. doi:https://doi.org/10.1016/j.seppur.2010.03.021
4. Linsebigler, A. L., Lu, G., & Yates, J. T. (1995). Photocatalysis on TiO<sub>2</sub> Surfaces: Principles, Mechanisms, and Selected Results. *Chemical Reviews*, 95(3), 735–758. doi:10.1021/cr00035a013
5. Fujishima, A., Zhang, X., & Tryk, D. A. (2008). TiO<sub>2</sub> photocatalysis and related surface phenomena. *Surface Science Reports*, 63(12), 515–582. doi:https://doi.org/10.1016/j.surfrep.2008.10.001
6. Cacciato, G. (2016). TiO<sub>2</sub> Nanostructures and Nanocomposites for Sustainable Photocatalytic Water Purification. In M. Zimbone (Ed.), (p. Ch. 4). Rijeka: IntechOpen. doi:10.5772/62620
7. Hoffmann, M. R., Martin, S. T., Choi, W., & Bahnemann, D. W. (1995). Environmental Applications of Semiconductor Photocatalysis. *Chemical Reviews*, 95(1), 69–96. doi:10.1021/cr00033a004
8. Mahmoud, W. M. M., Rastogi, T., & Kümmerer, K. (2017). Application of titanium dioxide nanoparticles as a photocatalyst for the removal of micropollutants such as pharmaceuticals from water. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry*, 6, 1–10.

doi:<https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2017.04.001>

9. Dong, H., Zeng, G., Tang, L., Fan, C., Zhang, C., He, X., & He, Y. (2015). An overview on limitations of TiO<sub>2</sub>-based particles for photocatalytic degradation of organic pollutants and the corresponding countermeasures. *Water Research*, 79, 128–146. doi:<https://doi.org/10.1016/j.watres.2015.04.038>
10. Moma, J. (2019). Modified Titanium Dioxide for Photocatalytic Applications. In J. B. E.-S. B. K. E.-K. Akhtar (Ed.), (p. Ch. 3). Rijeka: IntechOpen. doi:10.5772/intechopen.79374
11. Kuvarega, A. T., & Mamba, B. B. (2017). TiO<sub>2</sub>-based Photocatalysis: Toward Visible Light-Responsive Photocatalysts Through Doping and Fabrication of Carbon-Based Nanocomposites. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, 42(4), 295–346. doi:10.1080/10408436.2016.1211507
12. Lee, Heung Chan, Hyun Shik Park, Sung Ki Cho, Ki Min Nam and Allen J. Bard. “Direct photoelectrochemical characterization of photocatalytic H, N. doped T. powder suspensions. . (2017). (n.d.). No Title.
13. Huang, M., Yu, J., Li, B., Deng, C., Wang, L., Wu, W., ... Fan, M. (2015). Intergrowth and coexistence effects of TiO<sub>2</sub>–SnO<sub>2</sub> nanocomposite with excellent photocatalytic activity. *Journal of Alloys and Compounds*, 629. doi:10.1016/j.jallcom.2014.11.225
14. Oskam, G., Nellore, A., Penn, R. L., & Searson, P. C. (2003). The Growth Kinetics of TiO<sub>2</sub> Nanoparticles from Titanium(IV) Alkoxide at High Water/Titanium Ratio. *The Journal of Physical Chemistry B*, 107(8), 1734–1738. doi:10.1021/jp021237f
15. MEHROTRA, R., & Singh, A. (2010). ChemInform Abstract: Recent Trends in Metal Alkoxide Chemistry. *Cheminform*, 28. doi:10.1002/chin.199749321
16. Reis, K. P., Ramanan, A., & Whittingham, M. S. (1990). Hydrothermal

- synthesis of sodium tungstates. *Chemistry of Materials*, 2(3), 219–221. doi:10.1021/cm00009a003
17. Feng, X., Zhai, J., & Jiang, L. (2005). The Fabrication and Switchable Superhydrophobicity of TiO<sub>2</sub> Nanorod Films. *Angewandte Chemie International Edition*, 44(32), 5115–5118. doi:10.1002/anie.200501337
  18. Liu, N., Chen, X., Zhang, J., & Schwank, J. (2014). A review on TiO<sub>2</sub>-based nanotubes synthesized via hydrothermal method: Formation mechanism, structure modification, and photocatalytic applications. *Catalysis Today*, 225, 34–51. doi:10.1016/j.cattod.2013.10.090
  19. Кипер., К. Р. А. С. веществ [Текст]: справочник по химии / Р. А., & – Хабаровск, 2013. – 1016 с. – ISBN 978-5-905463-10-5. (n.d.). No Title.
  20. EVONIK. (n.d.). No Title. *Power to create [Електронний ресурс] / Режим доступу: <http://corporate.evonik.com/en>, вільний. – Загол. з екрана. – Мова англ.*
  21. *Приборы и методы рентгеновской и электронной дифракции [Текст]: учеб. пособие / П. Чижев, Э. Левин, А. Митяев, А. Тимофеев. – М.: Можайский полиграфический комбинат оформление, 2011 г. – 152 с. – ISBN 978-5-8493-0222-5.*