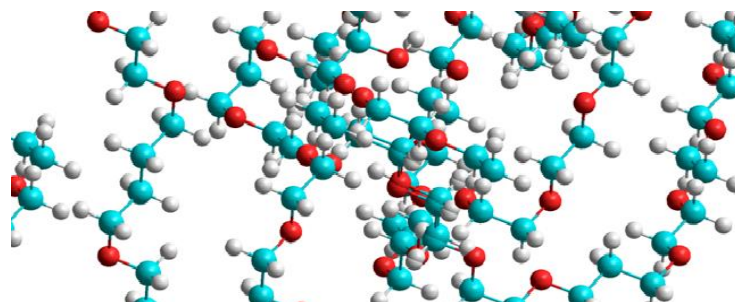


ПОЛІГЕТЕРОЕЛЕМЕНТНІ СПОЛУКИ - НОВЕ ПОКОЛІННЯ ПОЛІМЕРІВ

Віленський В.О.¹, Віленська Л.М.²

¹Житомирський державний Університет ім. Івана Франка

²Інститут ядерних досліджень НАН України



На рис.1 представлено модель ланцюга одного з найбільш поширених за вживанням на планеті Земля полімерів, і в той же час це один з головних забруднювачів довкілля, а значить, становить загрозу для існування в цілому біологічній цивілізації на Землі.[1] До поліетиленів слід додати полівінілхлорид, більш відомий як ПВХ, поліпропілен (ПП), поліетилентерефталат (ПЕТ). І сюди можна додати сотні, тисячі полімерних композитів і їх модифікованих продуктів Хімічної промисловості, виготовлених на потреби всіх напрямків нашої з вами діяльності. Якось не зручно себе цитувати, але в одній з статей, а саме [2], було визначено роль полімерів у цивілізації людей, але ця думка варта, щоб її повторити не тільки через її об'єктивність, і це буде зрозуміло в подальшому. «... варто відмітити, що за весь час існування цивілізації людей не було винайдено сполуки, яка б конкурувала з полімерами по всеосяжному виробництву, застосуванню, розповсюдженню, беззастережному використанню по всьому світу, незалежно від раси і релігії, яку було б прийнято і використано людьми, що живуть на смітниках, і людьми з палаців». Ця роль полімерів достатньо довго переважала над розумінням, що всі супутні процеси органічної хімії по створенню мономерів на основі органічних сполук, неорганічної хімії по створенню каталізаторів процесів полімеризації, в загальному розумінні. І знову ж цими напрямками хімії створювались розчинники, барвники і інші складові все нових і нових полімерних їх синтезів у все більших об'ємах і складних процесах. І все для отримання полімерної сировини. Навіть ця частина виробництва полімерних напівпродуктів вимагала величезних витрат об'ємів розчинників, води та мембран для пурифікації (очистки) полімерів від залишків супутніх складових, що супроводжували його синтез. Але залишалися ще розчини, від вищезазначених препаративних дій, на які часто-густо не було фінансового забезпечення для їх нейтралізації. Що в цьому разі робили недоброзичливі компанії і їх виробники, ми всі з вами здогадуємось.

Наступний етап проблеми полімерів, які витратили свій ресурс вжитку, наступав, коли відходи полімерів доставляли на сміттєзвалище. Зараз нам, хто не байдужий [2] до збереження оточуючого середовища, зрозуміло, що біда від пластику і особливо мікропластику вже не тільки в довкіллі, але й в середині судин і навіть мозку у нас з вами. Але проблема на тепер вже глобальна: відходи пластику на сміттєзвалищах, маса яких визначається в 10^{8-9} тон не можуть бути утилізовані ефективним методом термопіролізу. Проблема в тому що в процесі його перетворення відходів полімерів у вуглеводневу сировину, виділяється у атмосферу практично некероване тепло- і газоскладові. І зрозуміло, що і саму видобуту вуглеводневу сировину, що ми отримали для використання у побуті чи виробництві, знову ж таки потрібно доводити до стандартів *спалення*.

Що робити? Де спасіння цивілізації Землян?

Були ідеї перенесення Важкої індустрії та Промислової хімії та її технологій на Промислові Хаби, які треба створювати у ближньому космосі. Це потенційний вихід, але

не лише затратний. Земляни зараз не мають Технологій хімії і матеріалознавства в умовах: відсутності Гравітації, Температур, близьких до 5-10К, Атмосферного тиску, що вимірюється в мілібарах, і таке інше. Але вихід завжди є. Там можуть працювати pD-Printers Robotics. Люди-менеджери AI_p повсякчасно спілкуються роботами, які керуються AI_R і далі у такому алгоритмі. І для створення Технологій завтрашнього мають залучатись всі інтелектуальні і людські ресурси Планети. Планети, на якій майже у кожному кутку йдуть цивілізаційні війни з ознаками геноциду за право жити на своїй території.

Тепер відносно полімерних матеріалів, якими ми послуговуємось сьогодні. Останні п'ять років викладання курсу «Модифікація і Молекулярний дизайн» і регулярні заняття квантовим синтезом показали, що на відміну від класичної Хімії полімерів, де кількість реакційноздатних сполук досить обмежена в порівнянні з числом елементів в Періодичній таблиці, яку переслали мені колеги з АХТ, спонукало глибше експериментувати з реакційноздатністю елементів ПТЕ[3]. Першу модель сполуки створювали за принципом, якщо сполука витримає іспит Хвильової механіки в жорстких вихідних умовах, перейдемо до Динамічних і Температурних впливів. На рис.1а представлено лінійну модель гібридної сполуки X-I

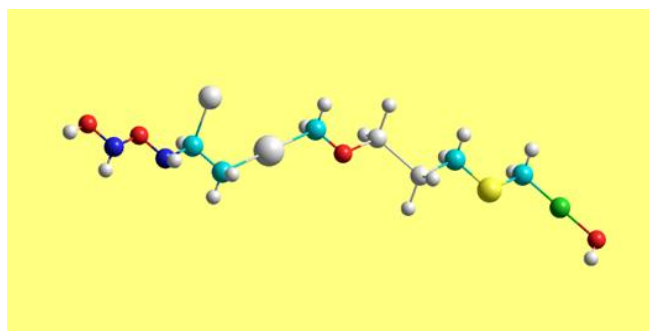


Рис.1.а. Олігогетероелементна сполука X-I. Складається приблизно з 10 різних елементів від водню, металів та неметалів з ПТЕ.

Вперше проведено визначення характеристик синтезованої гібридної сполуки на стійкість її структури в силовому полі програми MM+ пакету NUCHE-8. Результати дослідження наведені на Рис.1b, показали визначну стійкість структури X-I до механічних навантажень у процесі її переходу від вихідного до рівноважного стану. Звертає увагу, що модель створеної нами структури виртимала навантаження з енергією 2×10^{12} kcal/mol. Присутність у складі X-I гетерогенних елементів з різною енергією когезії сприяла зменшенню (погашенню) дії Силового поля (Force field), про що свідчить експоненціальна частина (див. Рис.1.c у складі визначення залежності $E_{\text{optim}} = f(n_{\text{cycl}})$).

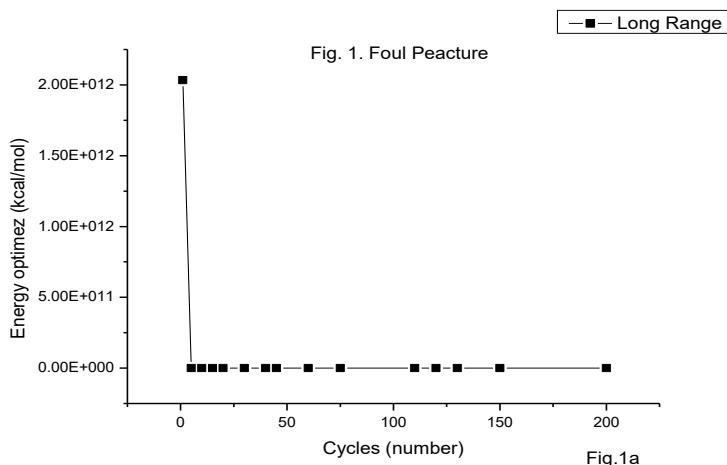


Рис.1b. Дослідження стійкості X-I до силового поля MM+ (повна картина).

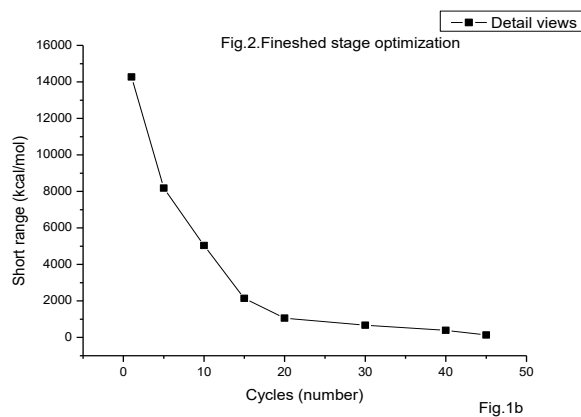


Рис.1с. Дослідження пружної складової структури X-I (Кінцева складова дії силового поля).

Пошуки майбутніх нових технологій вимагають залучення нових елементів з ПТЕ до модифікації полімерів, які зараз використовуються у безпосередньому контакті з людиною.

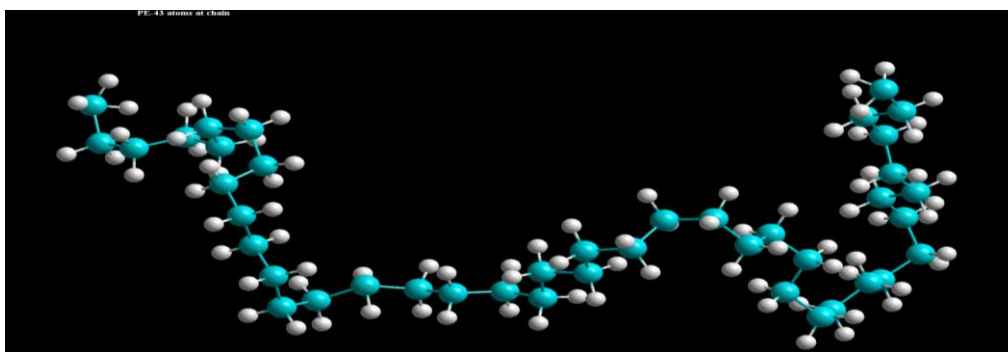


Рис.2а. Зразок олігоетилену досліджували методом ММ+

Для такого дослідження було обрано олігомерний зразок ПЕ з ММ=630g/mol, який складається з 106 атомів (його наведено на Рис.2а.).

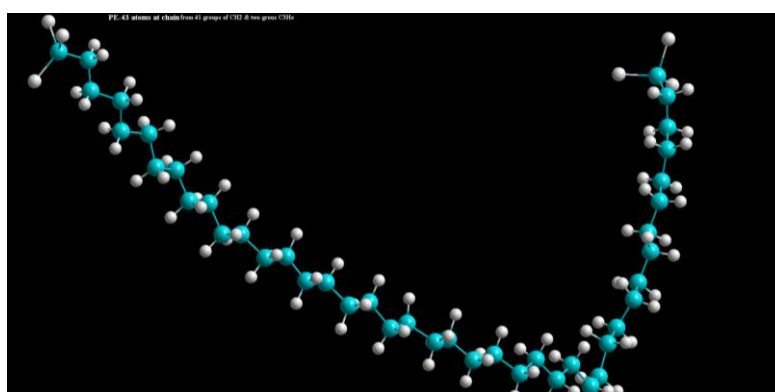


Рис.2б. Поліолефін з заміщенням кінцевих групи CH_3C на CNe_3 .

В якості модифікаційного елементу обрали вперше створену нами сполуку 3HeC , яка має за задумом авторів замінити кінцеві метильні групи у дослідженому зразку ОЕ, що підтверджується присутністю атомів He на моделі (див.Рис.2б).

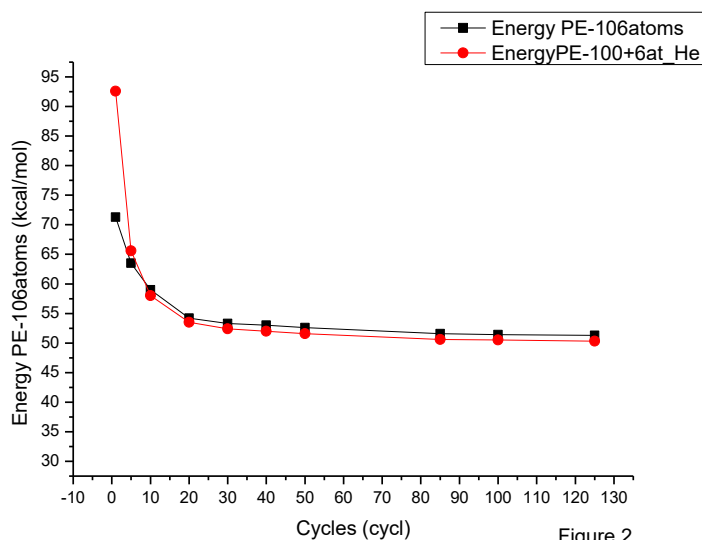


Рис.2с. Результати дослідження впливу модифікації структури зразка Олігоетилену заміною кінцевих метильних груп CH_3 груп на CHe_3 .

Експоненційні криві енергій оптимізації структури модельних зразків олігоетиленів, підданих дії силового поля, несуть дуже багато інформаційного наукового матеріалу, а саме:

1) Вперше легендарний He, залучений до хімічної технології як елемент структури олігомеру, а завтра можна очікувати і в складі інших *ПОЛІРЕТЕРОЕЛЕМЕНТНИХ СПОЛУК*. Я не знаю іншого прецеденту.

2) Порівняльний аналіз експоненціальних кривих поведінки олігоетилену(H) олігоетилену(H+He) про їх загалом тотожній склад, це по-перше; по-друге, інша форма експоненти олігоетилену(H+He) визначається тим, що He, який має більше ядро, докола якого обертаються $2e^-$, володіє не лише більшим стеричним фактором впливу на довколишні атоми, до якого додаються ще і атракційний ефект електронів. Саме ці характерні властивості He, на нашу думку, забезпечують зростання $E_{\text{отим}}$ зразка олігоетилену(H+He) на 20kcal/mol в порівнянні з олігоетилену(H) і цим доводить модифікаційну ефективність присутності He в ланцюгу олігоетилену;

3.) І останнє. Результати, представлені в даному повідомленні, надають нам право, як першими, хто створив ланцюгові сполуки, представленим тут, і ще до десятка нових з більш складною конфігурацією ланцюга дати назву: *POLYHETEROELEMENTAL COMPOUNDS* (PHES) /*ПОЛІГЕТЕРОЕЛЕМЕНТНІ СПОЛУКИ* (ПГЕС).

1. Віленський В.О. XXI-Е СТОЛІТТЯ ХІМІЯ НА РОЗДОРІЖЖІ. Український журнал природничих наук. 2024, №7. С.106-112

2. Vilensky Volodymyr. Warnings regarding the development of scientific, technical and technological processes involving synthetical polymers, which the chemist addresses to colleagues. Proceedings of III International Scientific and Practical Conference. Toronto, Canada. 12-14 January 2023.-P.156-162

3. Speight James. G. Chemical and Process design handbook. McGraw-Hill. Copyright 2002

4. Computer Science Handbook. Allen B Tucker Edditor-in-Chiff. 2004 by Taylor & Francis Group, LLC

4. www.vilensky.info