

О. М. Гриценко, О. В. Суберляк, А. В. Похмурська, Н. М. Баран, Б. В. Бережний
Національний університет “Львівська політехніка”,
кафедра хімічної технології переробки пластмас
ogryts@gmail.com

ПРОГНОЗУВАННЯ ТЕХНОЛОГІЧНИХ УМОВ ХІМІЧНОГО ОСАДЖЕННЯ МЕТАЛІВ ОПТИМІЗАЦІЄЮ СКЛАДУ РЕАКЦІЙНОЇ КОМПОЗИЦІЇ ПІД ЧАС ПОЛІМЕРИЗАЦІЇ

<https://doi.org/10.23939/ctas2019.02.171>

Експериментально доведено різносторонній вплив складу вихідної композиції на основні параметри процесу екзотермії кополімеризації 2-гідроксіетилметакрилату (ГЕМА) з полівінілпіролідом (ПВП), які складають технологічний режим хімічного осадження металів. Методом симплекс-градкового планування Шеффе одержано рівняння регресії основних параметрів осадження (індукційний період, максимальна температура, тривалість відновлення) нікелю та срібла залежно від вихідного складу полімер-мономерної композиції (ПМК). Використання одержаних рівнянь забезпечує можливість встановлення вмісту вихідної реакційної композиції, екзотермічні ефекти процесу полімеризації якої забезпечують оптимальні технологічні параметри відновлення йонів металів.

Ключові слова: металонаповнені гідрогелі, хімічне відновлення, екзотермія, оптимізація, симплекс-градкове планування.

Вступ

Композиційні матеріали на основі металонаповнених полімерних гідрогелів сьогодні використовують у різних галузях науки і практики [1, 2]. Унікальність таких матеріалів забезпечується синергізмом властивостей полімерної матриці та металу-наповнювача. На формування комплексу властивостей металонаповнених гідрогелів найбільше впливає вибір методу їх одержання [3]. Існуючі методи є, як мінімум, двостадійними і містять стадію синтезу полімерної матриці та стадію одержання частинок металу-наповнювача, що ускладнює їх здійснення як з технологічного, так і економічного аспектів. Запропоновано новий метод одержання металогідрогелів на основі кополімерів 2-гідроксіетилметакрилату (ГЕМА) з полівінілпіролідом (ПВП), який полягає у здійсненні полімеризації з одночасним відновленням йонів металу, використовуючи екзоефект полімеризації [4, 5]. Доведено можливість одержання металонаповнених гідрогелів полімеризацією з одночасним хімічним відновленням йонів нікелю [4] та срібла [6]. Обґрунтовано вибір якісного і кількісного складу окисно-відновних систем.

Встановлено, що досліджувані процеси хімічного осадження металів інтенсивно відбуваються вже за температури 60–70 °С. У такому випадку технологічні умови відновлення йонів металів залежать від параметрів екзотермічної реакції полімеризації. Однак виявлено, що склад вихідної полімер-мономерної композиції (ПМК) спричиняє різносторонній вплив на параметри процесу екзотермії, що ускладнює вибір співвідношення компонентів для синтезу експериментальним методом. У зв'язку з цим, з метою зменшення частки експериментальних затрат та передбачення характеристик і властивостей одержаних композитів, для оптимізації складу вихідної ПМК актуальним в даному випадку є використання математичного планування експерименту.

Сьогодні математичне планування експерименту широко використовують для моделювання хіміко-технологічних процесів [7–10], особливо під час оптимізації багатокомпонентних систем [11–13]. Розроблені методи оптимізації забезпечують використання математичного апарату не тільки на стадії аналізу результатів дослідження, але і під час їх прогнозування, що дає можливість

значно зменшити затрати часу і матеріалів на здійснення експерименту [13–15]. Найбільшого використання отримали симплекс-граткові плани Шеффе [16–18]. Перевага симплекс-граткових планів (СГП) полягає у тому, що, використовуючи мінімальну кількість результатів експерименту, можливо передбачити значення властивостей для багатокомпонентних систем будь-якого складу [17]. Ефективність використання СГП для оптимізації композицій на основі ПВП підтверджено у попередніх роботах [11–13]. Однак, всі здійснені дослідження стосуються встановлення залежності “склад-властивість”. Метою цієї роботи було оптимізувати склад вихідної ГЕМА/ПВП/Н₂О композиції та одержати залежності “склад-технологічні параметри” з можливістю прогнозування технологічних умов хімічного відновлення йонів металів під час полімеризації.

Матеріали та методи досліджень

Для кополімеризації використовували 2-гідроксіетилметакрилат (Sigma Chemical Co) та полівінілпіролідон (AppliChem GmbH) високої очистки з ММ 12000, як ініціатор – пероксид бензоїлу (ПБ). ГЕМА переганяли у вакуумі (залишковий тиск 130 Н/м², $T_{\text{кип.}} = 351 \text{ K}$), ПВП сушили за температури 338 К у вакуумі 2–3 год, ПБ перекристалізували з етанолу.

Зміну температури реакційного середовища під час реакції полімеризації досліджували термометричним методом [4, 19]. Математичне планування складу вихідних ПМК здійснювали методом СГП Шеффе згідно з методикою [16].

Результати досліджень та їх обговорення

Розроблення технології одержання металогідрогелів методом полімеризації з одночасним хімічним відновленням йонів металів передбачає обґрунтування та встановлення оптимальних технологічних параметрів його здійснення. Однією з важливих стадій процесу є осадження частинок металу-наповнювача. Як показали кінетичні дослідження швидкості відновлення йонів нікелю гіпофосфітами [20], основними параметрами процесу є тривалість індукційного періоду відновлення ($\tau_{i.v.}$), тривалість відновлення (τ_v) та температура відновлення (T_v). Для характеристики процесу кополімеризації ГЕМА з ПВП використовували час початку гелеутво-

рення [4–6] ($\tau_{п.г.}$), тривалість області гелі-ефекту ($\tau_{o.г.}$) та максимальну температуру екзотермії (T_{max}). Залежно від типу ініціувальної системи процес здійснюють за відповідної початкової температури полімеризації (T_0) [4]. Параметри T_{max} , $\tau_{п.г.}$, $\tau_{o.г.}$ отримували на основі даних термометричних досліджень полімеризації [4–6]. З огляду на технологічні особливості запропонованого методу одержання металогідрогелів необхідно вибирати композиції, які полімеризуються з максимальним виділенням тепла, найменшим індукційним періодом та з максимальною областю гелі-ефекту. Граничною T_{max} є температура 102–105°C, за якої починається кипіння ГЕМА/ПВП композицій. Кінетичні параметри полімеризації, як показали результати термометричних досліджень, залежать від складу ПМК, вмісту розчинника та T_0 . Для ініціювання полімеризації використовували ПБ. Пероксид бензоїлу є ініціатором “гарячого отвердження” і використовується за температур 80–90 °C [21]. Однак, встановлено [4–6], що у випадку ГЕМА/ПВП композицій полімеризація в присутності ПБ відбувається з високою швидкістю вже за температури 50 °C. Тому за початкову температуру полімеризації приймаємо $T_0 = 50 \text{ °C}$. За вищих початкових температур T_{max} зростає до 110–130 °C. Водночас встановлено, що вміст розчинника, ГЕМА та ПВП у вихідній композиції чинить різносторонній вплив на параметри процесу екзотермії. Експериментально не вдалося знайти оптимальне поєднання значень чинників впливу (вміст компонентів вихідної композиції), за якого досягаються екстремуми усіх необхідних функцій відгуку. Тому для дослідження одночасного впливу компонентів вихідної композиції на параметри процесу екзотермії з метою зменшення кількості експериментальних затрат використовували оптимізацію за допомогою СГП Шеффе.

Першим етапом дослідження є отримання рівнянь-залежностей, які будуть експериментально-статистичною моделлю поставленої задачі і забезпечать можливість прогнозування необхідної властивості за будь-якої комбінації вмісту компонентів у ПМК.

Плани Шеффе забезпечують рівномірний розкид експериментальних точок за (q-1)-мірним симплексом. Експериментальні точки представ-

ляють $\{q, n\}$ -гратку на симплексі, де q – кількість компонентів композиції, n – степінь поліному [16]. У цьому випадку результатом досліджень є багатofакторна математична модель у вигляді полінома заданого степеня. Необхідною умовою в симплекс-методі є забезпечення умови, що $\sum X_i = 1$ в кожній експериментальній точці, де $X_i \geq 0$ – концентрація i -го компонента в композиції. Під час дослідження властивостей суміші, що залежать тільки від трьох компонентів, факторний простір представляє собою рівносторонній трикутник (рис. 1) і для системи виконується співвідношення $X_1 + X_2 + X_3 = 1$. Вершини трикутника відповідають чистим речовинам, сторони – подвійним системам. Під час вивчення діаграм “склад-властивість” q -компонентних систем часто виникає необхідність досліджувати залежність властивості від складу не у всій області зміни концентрації компонентів $0 \leq X_i \leq 1$, а на локальній ділянці діаграми: $0 \leq a_i \leq X_i \leq b_i \leq 1, i = 1, 2, \dots, q$ [16].

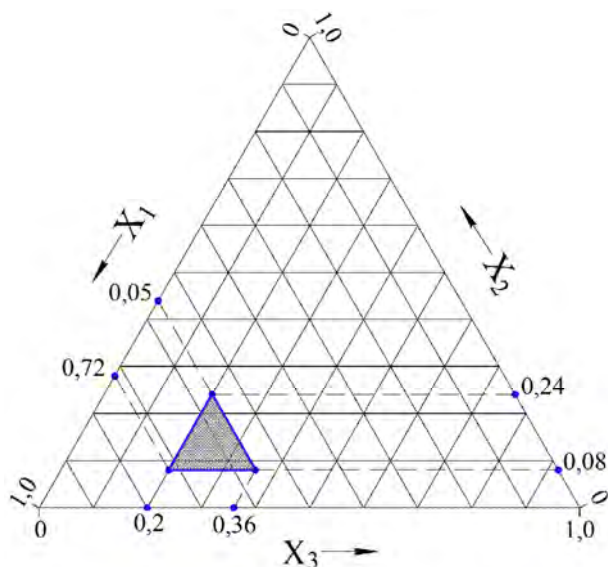


Рис. 1. Область дослідження параметрів процесу екзотермії

У нашому випадку досліджували не весь концентраційний трикутник, а тільки його локальну частину, яка є симплексом з вершинами A_1 (72 % ГЕМА; 8 % ПВП; 20 % H_2O); A_2 (56 % ГЕМА; 24 % ПВП; 20 % H_2O); A_3 (56 % ГЕМА; 8 % ПВП; 36 % H_2O) (рис. 1). Позначимо X_1 – ГЕМА, %; X_2 – ПВП, %; X_3 – H_2O , %. Нижня межа вмісту ПВП викликана тим, що за меншого

його вмісту значно збільшується тривалість індукційного періоду. Верхня межа зумовлена технологічними ускладненнями – за більшого вмісту ПВП зростає тривалість його розчинення в акрилатах, підвищується в’язкість композиції, яка важко дозується та деаерується, суттєво зменшуються $\tau_{o.g.}$ та T_{max} . Необхідність присутності H_2O у вихідній композиції зумовлена розчиненням окисника та відновника, чим пояснюється мінімальний вміст розчинника, що становить 20 %. Крім того, за меншого вмісту H_2O різко зменшується $\tau_{o.g.}$, а T_{max} є вищою за $110^\circ C$. Розведення розчинником композиції в кількості понад 36 % є причиною значного збільшення індукційного періоду та зменшення T_{max} . Оптимізацію здійснювали для параметрів екзотермії – часу початку гелеутворення ($\tau_{п.г.}$, хв), області гелі-ефекту ($\tau_{o.g.}$, хв) та максимальної температури екзотермії (T_{max} , $^\circ C$).

Для застосування планів, які використовуються для дослідження повних діаграм, здійснюємо перенормування і приймаємо склади в вершинах A_i ($i = 1, 2, 3$) за самостійні псевдокомпоненти Z_i так, щоб для всієї області локального симплексу виконувалась умова:

$$\sum_{i=1}^q Z_i = 1, \quad (1)$$

З метою отримання рівнянь регресії складаємо СГП Шеффе відносно псевдокомпонент Z_1, Z_2, Z_3 . Для вирішення поставленого завдання використано СГП $\{3, 2\}$ та приведений поліном другого порядку для потрібної системи (2). Кількість експериментальних точок в даному випадку становить 6.

$$y' = \beta_1 Z_1 + \beta_2 Z_2 + \beta_3 Z_3 + \beta_{12} Z_1 Z_2 + \beta_{13} Z_1 Z_3 + \beta_{23} Z_2 Z_3 \quad (2)$$

Використавши три рівні кожного з факторів: 0; 1/2; 1, отримуємо матрицю планування для трикомпонентної системи (табл. 1).

Таблиця 1

Матриця планування

№	Z_1	Z_2	Z_3	y^e
1	1	0	0	y_1
2	0	1	0	y_2
3	0	0	1	y_3
4	1/2	1/2	0	y_{12}
5	1/2	0	1/2	y_{23}
6	0	1/2	1/2	y_{13}

У табл. 2 представлені умови і результати дослідів у вигляді псевдокомпонент і в натуральному масштабі.

Середні результати y_1^e (T_{\max} , °C), y_2^e ($\tau_{п.г.}$, хв) та y_3^e ($\tau_{о.г.}$, хв) отримані за двома паралельними дослідями.

Таблиця 2

Умови і результати дослідів у вигляді псевдокомпонент і в натуральному масштабі

№	Псевдокомпоненти			Натуральні змінні			y_1^e	y_2^e	y_3^e
	Z_1	Z_2	Z_3	X_1	X_2	X_3			
1	1	0	0	0,72	0,08	0,20	103,5	23,00	37,00
2	0	1	0	0,56	0,24	0,20	84,40	13,00	18,20
3	0	0	1	0,56	0,08	0,36	79,00	24,20	36,50
4	1/2	1/2	0	0,64	0,16	0,20	96,80	16,00	28,00
5	1/2	0	1/2	0,64	0,08	0,28	92,00	23,70	36,90
6	0	1/2	1/2	0,56	0,16	0,28	84,00	17,40	26,40

Позначимо y'_1 – рівняння регресії T_{\max} , y'_2 – рівняння регресії $\tau_{п.г.}$, y'_3 – рівняння регресії $\tau_{о.г.}$. Використовуючи матрицю планування, умови та результати експерименту (табл. 1, 2) та скориставшись властивістю ненасиченості плану [16], розраховуємо коефіцієнти поліному (2) для y'_1 , y'_2 та y'_3 :

$$\begin{aligned} \beta_1 &= y_1; \beta_2 = y_2; \beta_3 = y_3; \\ \beta_{13} &= 4y_{13} - 2(y_1 + y_3); \\ \beta_{12} &= 4y_{12} - 2(y_1 + y_2); \\ \beta_{23} &= 4y_{23} - 2(y_2 + y_3). \end{aligned} \quad (3)$$

Для y'_1 : $\beta_1 = 103,5$; $\beta_2 = 84,4$; $\beta_3 = 79$; $\beta_{12} = 11,4$; $\beta_{13} = 3$; $\beta_{23} = 9,2$.

$$y'_1 = 103,5Z_1 + 84,4Z_2 + 79Z_3 + 11,4Z_1Z_2 + 32Z_1Z_3 + 9,2Z_2Z_3; \quad (4)$$

для y'_2 : $\beta_1 = 23$; $\beta_2 = 13$; $\beta_3 = 24,2$; $\beta_{12} = -8$; $\beta_{13} = 0,4$; $\beta_{23} = -4,8$.

$$y'_2 = 23Z_1 + 13Z_2 + 24,2Z_3 - 8Z_1Z_2 + 0,4Z_1Z_3 - 4,8Z_2Z_3; \quad (5)$$

для y'_3 : $\beta_1 = 37$; $\beta_2 = 18,2$; $\beta_3 = 36,5$; $\beta_{12} = 1,6$; $\beta_{13} = 0,6$; $\beta_{23} = -3,8$.

$$y'_3 = 37Z_1 + 18,2Z_2 + 36,5Z_3 + 1,6Z_1Z_2 + 0,6Z_1Z_3 - 3,8Z_2Z_3. \quad (6)$$

Псевдокомпоненти Z_i розраховуємо, використовуючи формули переведення координат:

$$\begin{aligned} Z_1 &= Z_1^{(1)} + X_2 \cdot (Z_1^{(2)} - Z_1^{(1)}) + X_3 \cdot (Z_1^{(3)} - Z_1^{(1)}); \\ Z_2 &= Z_2^{(1)} + X_2 \cdot (Z_2^{(2)} - Z_2^{(1)}) + X_3 \cdot (Z_2^{(3)} - Z_2^{(1)}); \\ Z_3 &= 1 - (Z_1 + Z_2). \end{aligned} \quad (7)$$

Значення $Z_k^{(i)}$ ($k, i = 1, 2, 3$) знаходимо, розв'язавши систему рівнянь (8).

$$\begin{cases} X_1^{(1)} \cdot Z_1^{(1)} + X_2^{(1)} \cdot Z_1^{(2)} + X_3^{(1)} \cdot Z_1^{(3)} = 1; \\ X_1^{(2)} \cdot Z_1^{(1)} + X_2^{(2)} \cdot Z_1^{(2)} + X_3^{(2)} \cdot Z_1^{(3)} = 0; \\ X_1^{(3)} \cdot Z_1^{(1)} + X_2^{(3)} \cdot Z_1^{(2)} + X_3^{(3)} \cdot Z_1^{(3)} = 0; \\ X_1^{(1)} \cdot Z_2^{(1)} + X_2^{(1)} \cdot Z_2^{(2)} + X_3^{(1)} \cdot Z_2^{(3)} = 0; \\ X_1^{(2)} \cdot Z_2^{(1)} + X_2^{(2)} \cdot Z_2^{(2)} + X_3^{(2)} \cdot Z_2^{(3)} = 1; \\ X_1^{(3)} \cdot Z_2^{(1)} + X_2^{(3)} \cdot Z_2^{(2)} + X_3^{(3)} \cdot Z_2^{(3)} = 0, \end{cases} \quad (8)$$

де $Z_k^{(i)}$ – вміст псевдокомпонента Z_k у вершинах вихідного симплексу; $X_k^{(i)}$ – вміст k -го компонента в вершинах Z_i (A_i).

Підставляємо у систему рівнянь (2) вихідні значення (табл. 2.):

$$X_1^{(1)} = 0,72; \quad X_2^{(1)} = 0,08;$$

$$X_1^{(2)} = 0,56; \quad X_2^{(2)} = 0,24;$$

$$X_1^{(3)} = 0,56; \quad X_2^{(3)} = 0,08.$$

Отримуємо $Z_k^{(i)}$:

$$Z_1^{(1)} = 2,75; \quad Z_1^{(2)} = -3,5; \quad Z_1^{(3)} = -3,5;$$

$$Z_2^{(1)} = -0,5; \quad Z_2^{(2)} = 5,75; \quad Z_2^{(3)} = -0,5.$$

Використовуючи значення $Z_k^{(i)}$ та рівняння (7), знаходимо рівняння зв'язку між натуральними координатами X_i і системою координат Z_i :

$$\begin{aligned} Z_1 &= 2,75 - 6,25X_2 - 6,25X_3; \\ Z_2 &= 6,25X_2 - 0,5; \\ Z_3 &= 6,25X_3 - 1,25. \end{aligned} \quad (9)$$

Підставивши рівняння (9) в (4), (5) і (6), отримуємо рівняння регресії у початкових координатах (10–12):

$$y_1 = 123,44 + 63,75X_2 - 71,25X_3 - 203,13X_2X_3 - 445,31X_2^2 - 117,19X_3^2; \quad (10)$$

$$y_2 = 33,13 - 184,38X_2 + 7,5X_3 + 109,38X_2X_3 + 312,5X_2^2 - 15,63X_3^2; \quad (11)$$

$$y_3 = 40,39 - 50,63X_2 + 28,75X_3 - 234,38X_2X_3 - 62,5X_2^2 - 23,44X_3^2. \quad (12)$$

Після визначення коефіцієнтів рівнянь регресії здійснено перевірку їх адекватності за критерієм Стюдента (t) в трьох контрольних точках (табл. 3). Для кожної точки знаходили t-співвідношення:

$$t = \frac{\Delta y \sqrt{n}}{s_y^2 \sqrt{1 + \xi}}, \quad (13)$$

де $\Delta y = |y^e - y^p|$; y^e , y^p – відповідно, властивості, одержані експериментальним (табл. 3) та розрахунковим (за отриманими рівняннями регресії) способом; n – кількість паралельних дослідів у кожній точці (n=2); s_y^2 – дисперсія відтворюваності (s_y^2 та ξ розраховували за мето-

дикою [16]). Для всіх контрольних точок за рівня значущості $p=0,05$, кількості ступеней вільності $f_y=3$ і $t_{\text{табл}}=3,18$ значення t-критерію в кожному випадку є меншим за табличне (табл. 3). Отже, розраховані рівняння регресії є адекватними експерименту і з достатньою точністю описують отримані залежності.

Рівняння (10–12) дають можливість прогнозувати характер зміни параметрів процесу екзотермії кополімеризації ГЕМА з ПВП – час початку гелеутворення, область гелі-ефекту та максимальну температуру екзотермії за будь-якого складу вихідної композиції.

Таблиця 3

Перевірка моделі на адекватність

№ досл.	Натуральні змінні			y_1^e	y_1^p	Δy_1	t_1	y_2^e	y_2^p	Δy_2	t_2	y_3^e	y_3^p	Δy_3	t_3
	X_1	X_2	X_3												
7	0,67	0,08	0,25	96,50	96,49	0,01	0,08	23,50	23,47	0,03	0,12	37,20	36,98	0,22	0,85
8	0,67	0,13	0,20	100,0	99,98	0,02	0,15	18,00	18,16	0,16	0,62	31,80	31,47	0,33	1,27
9	0,54	0,13	0,33	79,20	79,22	0,02	0,15	19,50	19,91	0,41	1,59	30,00	29,63	0,37	1,42

Другим етапом досліджень є побудова ізоліній зміни параметрів екзотермії за отриманими рівняннями регресії залежно від вмісту кожного з компонентів вихідної композиції (рис. 2). Отримані лінії рівних значень параметрів забезпечують швидкий пошук сукупності значень концентрацій компонентів реакційної композиції, з використанням яких можливо отримати оптимальні технологічні умови, необхідні для осадження потрібних металів-наповнювачів під час полімеризації.

Висновки

Оптимізацією експерименту за використання методу симплекс-градкового планування Шеффе здійснено прогнозування параметрів полімеризації ГЕМА/ПВП композицій, які визначають технологічний режим хімічного осадження металів.

Одержані рівняння регресії дозволяють аналітично встановити взаємозв'язок параметрів екзотермічних процесів з технологічними умовами відновлення йонів металів, а також зі складом полімер-мономерної композиції. Отримані лінії рівних значень параметрів дозволять

значно скоротити експериментальний пошук композиційних складів із наперед заданими параметрами екзотермії процесу полімеризації залежно від природи осаджуваного металу.

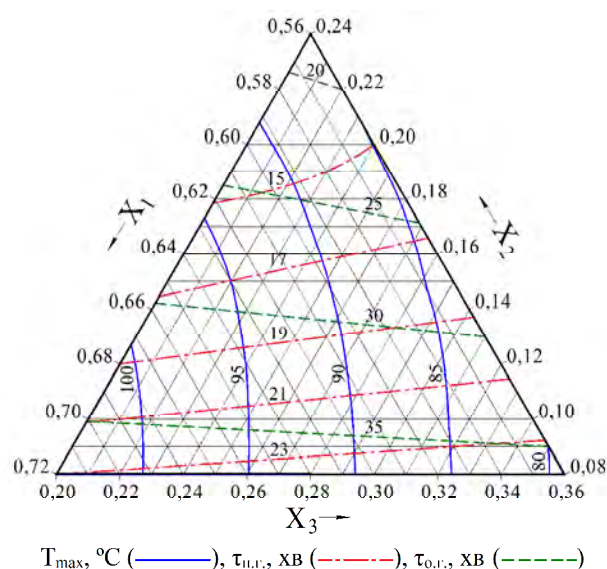


Рис. 2. Лінії рівних значень параметрів процесу екзотермії

Публікація містить результати досліджень, проведених за грантом Президента України (Розпорядження Президента України № 241/2019-рп “Про призначення грантів Президента України докторам наук для здійснення наукових досліджень на 2019 рік”)

Література

1. Schexnailder, P., & Schmidt, G. (2009) Nanocomposite polymer hydrogels. *Colloid and Polymer Science*, 287, 1, 1–11. <https://doi.org/10.1007/s00396-008-1949-0>
2. Nicolais, L., & Carotenuto, G. (2004). *Metal-Polymer Nanocomposites*. New Jersey: John Wiley & Sons. doi:10.1002/0471695432
3. Thomas, V., Namdeo, M., Murali Mohan, Y., Bajpai, S. K., & Bajpai, M. (2007). Review on Polymer, Hydrogel and microgel metal nanocomposites: a facile nanotechnological approach. *Journal of Macromolecular Science, Part A*, 45, 107–119. <https://doi.org/10.1080/10601320701683470>
4. Pokhmurska, A. V., Grytsenko, O. M., Suberlyak, O. V., & Gorbenko, N. Ye. (2019). Thermometric investigations of 2-hydroxyethylmethacrylate polymerization at the presence of polyvinylpyrrolidone with simultaneous nickel ions reduction. *Naukovyy visnyk NLTU Ukrayiny – Scientific Bulletin of UNFU*, 29(3), 99–103. [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.15421/40290321>
5. Koval, Yu. B., Grytsenko, O. M., Suberlyak, O. V., & Voloshkevych, P. P. (2015). Vstanovlennya temperaturnoho rezhymu oderzhannya metalohidroheliy polivinilpirolidonu na stadiyi polimeryzatsiyi. *Visnyk Natsionalnoho universytetu “Lvivska politehnika”*, 812, 372–378. [in Ukrainian].
6. Pokhmurska, A. V., Grytsenko, O.M., Baran, N. M., & Voloshkevych P. P. (2019). Osoblyvosti syntezu ta struktura Ag(0)/pHEMA-pr-PVP nanokompozytiv, oderzhanykh polimeryzatsiyeyu z osadzhennyam metalu. *Vcheni zapysky TNU imeni V. I. Vernadskoho*, 30 (69), 2, 118-124. [in Ukrainian].
7. Chervakov, O. V., & Andriyanova, M. V. (2016). *Matematychno modelyuvannya ta optymizatsiya obyektiv khimichnoyi tekhnolohiyi. Konspekt lektsiy*. Dnipropetrovsk: DVNZ UDKHTU. [in Ukrainian].
8. Brayilo, M. V., Buketov, A. V., Kobelnyk, O. S., Yakushchenko, S. V., Sapronova, A. V., Sapronov, O. O., et al. (2018). Optymizatsiya vmistu dobavok u epoksy-poliefirnomu zvyazuvachi dlya pidvyshchennya koheziynoyi mitsnosti kompozytiv. *Naukovyy visnyk NLTU Ukrayiny – Scientific Bulletin of UNFU*, 28, 11, 71–77. [in Ukrainian].
9. Boyko, T. V., Skladannyy, D. M., & Potapenko, T. Ye. (2017). Modelyuvannya i optymizatsiya protsesu tsementatsiyi rtuti v umovakh statystychnoyi nevyznachenosti. *Visnyk Vinnytskoho politekhnichnoho instytutu*, 6, 21-25. [in Ukrainian].
10. Trishchenkova, A. V., Gordiyenko, M. G., Timoshenko, K. A., & Shmykova. O. V. (2014). Issledovaniye i optimizatsiya stadii sushki pri poluchenii sukhikh ekstraktov iz bakterialnoy biomassy. *Uspekhi v khimii i khimicheskoy tekhnologii*, 28, 1, 57-59. [in Russian].
11. Grytsenko, O. M., Klym, Yu. O., & Skorokhoda, V. Y. (1999). Optymizatsiya kompozytsiynykh skladiv elastoheliv. *Visnyk DU “Lvivska politehnika”*, 361, 7-40 [in Ukrainian].
12. Suberlyak, O. V., Krasinskyi, V. V., Shapoval, I. M., & Grytsenko, O. M. (2011). Influence of the mechanism and parameters of hardening of modified novolac phenol-formaldehyde resins on the physicomechanical properties of the composite. *Materials Science*, 46, 5, 669-678. <https://doi.org/10.1007/s11003-011-9339-z>
13. Baran, N. M., Krasinsky, V. V., Zemke, V. M., Grytsenko, O. M., & Burcha, T. M. (2012). Prohnozuvannya vlastyvostey modyfikovanykh poliamidnykh membran iz zastosuvannyam matematychnoho modelyuvannya skladu polimernoyi sumishi. *Visnyk Natsionalnoho universytetu “Lvivska politehnika”*, 726, 437-443. [in Ukrainian].
14. Berezyuk, O. Ya. (2009). Rozrobka ta optymizatsiya skladiv past na osnovi mineral'nykh rehovyn dlya vyvedennya maslyanykh plyam z bavovnyanykh tkanyn. *Visnyk Khmelnytskoho natsionalnoho universytetu*, 1, 160-162 [in Ukrainian].
15. Bogdanova, V. V., Kobets, O. I., Lyudko, A. A., & Kirlitsa, V. P. (2012). Optimizatsiya ogneshchitno-ognetushchikh svoystv sostava dlya predotvrashcheniya i lokalizatsii pozharov v prirodnom komplekse metodom matematicheskogo planirovaniya eksperimenta. *Vestnik Komandno-inzhenerenogo instituta MCHS Respubliki Belarus*, 1 (15), 32-39 [in Russian].
16. Akhnazarova, S. L., & Kafarov, V. V. (1985). *Metody optimizatsii eksperimenta v khimicheskoy tekhnologii*. Moskva: Vysshaya shkola [in Russian].
17. Afonin, Yu. S., & Dubrovin, V. I. (2004). Simulation of compositions by the method of simplex lattices. *Radioelektronika. Informatyka. Upravlinnya*, 2, 60-63 [in Russian].
18. Akhmetzhanov, A. M., Urbanov, A. V., & Potapova, Ye. N. (2016). Primeneniye metodov planirovaniya eksperimenta pri izuchenii kompleksnogo vliyaniya dobavok na svoystva vyazhuchego. *Uspekhi v khimii i khimicheskoy tekhnologii*, 30, 7, 14-16 [in Russian].

19. Korolev, G. V., Pavlov, B. V., & Berlin, A. A. (1959). Termometriya kak metod izucheniya kinetiki polimerizatsii. *Vysokomolekulyarnyye soyedineniya – Polymer Science*, 1, 9, 1396-1402. [in Russian].

20. Grytsenko, O. M., Suberlyak, O. V., Moravs'kyy, V. S., & Gayduk, A. V. (2016). Doslidzhennya kinetychnykh zakonomirnostey khimichnoho osadzhennya

nikelyu. *Skhidno-Yevropeyskyy zhurnal peredovykh tekhnolohiy – Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, 1/6(79), 26–31. [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2016.59506>

21. Nikolayev, A. F. (1974). *Sinteticheskiye polimery i plasticheskiye massy na ikh osnove*. Moskva: Khimiya. [in Russian].

O. M. Grytsenko, O. V. Suberlyak, A. V. Pokhmurska, N. M. Baran, B. V. Bereznyy

Lviv Polytechnic National University,

Department of Chemical Technology of Plastic Processing

**PREDICTION OF TECHNOLOGICAL CONDITIONS OF METALS CHEMICAL
PRECIPITATION THROUGH OPTIMIZING OF REACTION
COMPOSITION FORMULA DURING POLYMERIZATION**

The diverse influence of the original composition formula on the main parameters of exothermic copolymerization of 2-hydroxyethyl methacrylate (HEMA) with polyvinylpyrrolidone (PVP), which constitute the technological mode of metals chemical deposition have been experimentally proved. Regression equations of the main deposition parameters (induction period, maximum temperature, duration of reduction) of nickel and silver, depending on the initial formula of polymer-monomeric composition (PMC) are obtained by method of simplex-lattice planning Sheffe. The use of the obtained equations makes it possible to calculate the content of the initial reaction composition, the exothermic effects of the polymerization process of which provide the optimal technological parameters for the reduction of metal ions.

Key words: metal-filled hydrogels, chemical reduction, polymerization exotherm, optimization, simplex-lattice planning.