ISSN 2521-6996

Міністерство освіти і науки України
Інститут прикладної фізики Національної академії наук України
Сумський державний педагогічний університет імені А.С. Макаренка
Фізико-математичний факультет

СУЧАСНІ ПРОБЛЕМИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЇ, ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ТА МЕТОДИКИ НАВЧАННЯ ФІЗИКИ

Присвячена 100-річчю
Національної академії наук України

МАТЕРІАЛИ
IV Всеукраїнської науково-практичної конференції молодих учених з міжнародною участю

24-25 квітня 2018 року

м. Суми

Козьма А. А.
кандидат хімічних наук, доцент,
ДВНЗ «Ужгородський
національний університет»,
м. Ужгород, Україна
Anton_Kozma@yahoo.com

МОДЕЛЮВАННЯ ТЕМПЕРАТУРНИХ ЗАЛЕЖНОСТЕЙ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ОРТОФОСФАТУ ДВОВАЛЕНТНОГО КОБАЛЬТУ $Co_3(PO_4)_2$

Ортофосфат двовалентного кобальту $Co_3(PO_4)_2$ відноситься до поліфункціональних матеріалів, який перспективний як компонент літій-іонних батарей [1], як складовий сенсорних мікроелектродів для моніторингу екологічного стану навколишнього середовища [2] та як каталізатор деяких хімічних процесів [3]. Водночас, його фізичні й фізико-хімічні властивості вивчені недостатньо. В даній роботі, спираючись на відомі емпіричні та напівемпіричні методи, здійснено моделювання термодинамічних властивостей зазначеного фосфату в температурному інтервалі 298–1428 К.

Ізобарну теплоємність (C_p°) при кімнатній температурі для сполуки $Co_3(PO_4)_2$ оцінювали за допомогою моделі Сокольського Ю.М. [4, 5]. Моделювання температурної залежності теплоємності проводили на основі базового рівняння $C_p^\circ = A + BT + CT^{-2}$. Потрібні для даного виразу коефіцієнти *A*, *B* і *C* визначали методом Келлога-Кубашевського [6-8].

Необхідне значення температури плавлення досліджуваного фосфату (1428 К) брали із [9]. Аналогічно до [10], за відомими термодинамічними формулами для $Co_3(PO_4)_2$ розраховано зміну ентальпії $H_T^\circ - H_{298}^\circ$ та ентропії $S_T^\circ - S_{298}^\circ$. Отримані результати наведено в таблиці.

Таблиця 1.

Одержані значення термодинамічних параметрів $Co_3(PO_4)_2$

Т, К	C_p°, Дж/(моль×К)	$H_T^\circ - H_{298}^\circ$, кДж/моль	$S_T^\circ - S_{298}^\circ$, Дж/(моль×К)
298	234.40	–	–
300	235.37	0.47	1.57
350	255.91	12.78	39.49
400	270.80	25.97	74.68
450	282.41	39.81	107.27
500	291.98	54.18	137.54
550	300.22	68.99	165.76
600	307.55	84.18	192.20
650	314.23	99.73	217.09
700	320.46	115.60	240.61
750	326.34	131.77	262.92
800	331.96	148.23	284.16
850	337.38	164.96	304.45
900	342.65	181.96	323.88
950	347.78	199.23	342.55
1000	352.82	216.74	360.51
1050	357.77	234.51	377.85
1100	362.66	252.52	394.60
1150	367.49	270.77	410.83
1200	372.27	289.27	426.57
1250	377.02	308.00	441.87
1300	381.73	326.97	456.75
1350	386.41	346.17	417.24
1400	391.06	365.61	485.38
1428	393.66	376.59	493.15

Одержані величини можуть використовуватись при наступних термодинамічних моделюваннях, зокрема для прогнозування фазових рівноваг у складних багатокомпонентних системах за участю $Co_3(PO_4)_2$.

Список використаних джерел

1. Changhoon Choi, Seung-Deok Seo, Hyun-Woo Shim, Mushtaq Ahmad Dar, In Sun Cho, Dong-Wan Kim. *J. Alloys Compd.* – 2015. – V. 652. – P. 100-105.

2. Woo Hyoung Lee, Youngwoo Seo, Paul L. Bishop. *Sensors and Actuators B: Chemical*. – 2009. – V. 137, №1. – P. 121-128.
3. Yi Lin, Tao Meng, Zhen Ma. *J. Ind. Eng. Chem*. – 2015. – V. 28. – P. 138-146.
4. Сокольский Ю.М. *Неорганические материалы*. – 1983. – т.19, №1. – С. 120-122.
5. Козьма А.А., Голуб Н.П., Голуб Є.О., Гомонай В.І. *Наук. вісник Ужгород. у-ту. (Сер. Хімія)*. – 2015. – №1(33). – С. 63–65.
6. Kellog H.H. in:Fitterer G.R. (Editor), Applications of Fundamental Thermodynamics to Metallurgical Processes, Gordon and Breach, London, 1967, 357 p.
7. Kubaschewski O., Ühal H. *High Temp.-High Pressur*. – 1977. – V. 9, №3. –P. 361–365.
8. Leitner J., Chuchvalec P., Sedmidubský D., Strejc A., Abrman P. *Thermochim. Acta* – 2002. – V. 395, №1-2. –P. 27-46.
9. Константинов З.А., Диндуне А.П. Фосфаты двухвалентных металлов. – Рига: Зинатне, 1987. – 371 с.
10. Denisova L.T., Belousova N.V., Galiakhmetova N.A., Denisov V.M. *Phys. Solid State*. – 2017. – V.59, №5. – P. 1047-1049.