

ГРОМАДСЬКА ОРГАНІЗАЦІЯ
«ЄВРОПЕЙСЬКА НАУКОВА ПЛАТФОРМА»



МІЖНАРОДНА НАУКОВО-ПРАКТИЧНА
КОНФЕРЕНЦІЯ

ПЕРСПЕКТИВНІ НАПРЯМКИ НАУКОВОЇ ДУМКИ

18 квітня 2018 рік | м. Тернопіль

ТОМ 6

ЗБІРНИК

НАУКОВИХ ПРАЦЬ

ΛΟΓΟΣ



ГРОМАДСЬКА ОРГАНІЗАЦІЯ
«ЄВРОПЕЙСЬКА НАУКОВА ПЛАТФОРМА»

ОО «ЕВРОПЕЙСКАЯ НАУЧНАЯ ПЛАТФОРМА» ♦ NGO «EUROPEAN SCIENTIFIC PLATFORM»

ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ «ΛΟΓΟΣ»

МАТЕРІАЛИ МІЖНАРОДНОЇ
НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

**«ПЕРСПЕКТИВНІ НАПРЯМКИ
НАУКОВОЇ ДУМКИ»**

18 КВІТНЯ 2018 РІК

ТОМ 6

м. Тернопіль

УДК 001(08)
ББК 72.4(4УКР)я 431
Н 34

Н 34 **Перспективні напрямки наукової думки** [текст]: матеріали Міжнародної науково-практичної конференції 18 квітня 2018 року у м. Тернопіль: зб. наук. праць «ЛОГОΣ» / відп. за випуск Голденблат М.А. // ГО «Європейська наукова платформа». – Обухів: Друкарня «Друкарник» (ФОП Гуляєва В.М.), 2018. – Т.6. – с.108.

ISBN 987-617-71717-80-4

Викладено тези доповідей та статті учасників міжнародної науково-практичної конференції «Перспективні напрямки наукової думки», яка відбулася у місті Тернопіль, 18 квітня 2018 року.

Збірник присвячено для студентів, аспірантів, докторантів, здобувачів, молодих фахівців, викладачів, науковців та інших зацікавлених осіб, а також для широкого кола читачів.

Бібліографічний опис матеріалів конференції представлено у Науковій електронній бібліотеці «Elibrary.ru».

Збірник включено до міжнародних наукометричних баз «РИНЦ» та «Google Академія».

УДК 001 (08)
ББК 72.4(4УКР)я 431

© Колектив авторів конференції, 2018
© Збірник наукових праць «ЛОГОΣ», 2018
ISBN 987-617-71717-80-4 © ГО «Європейська наукова платформа», 2018

рівні. Тому легкі вуглеводні (C_1-C_4), які входять до складу природного газу, газів крекінгу нафти та нафтопереробки, супутніх нафтових газів стають важливим джерелом вуглеводневої сировини.

Отже, переробка компонентів газу українських родовищ у цінні продукти (спирти, альдегіди, карбонові кислоти та інші) є особливо важливою для вітчизняної промисловості. Практична реалізація таких перетворень потребує нових ефективних каталізаторів, пошуком та синтезом яких активно займаються науковці кафедри фізичної та колоїдної хімії ДВНЗ «Ужгородський національний університет» [2, 3].

Список використаних джерел:

1. Енергетика: історія, сучасність і майбутнє. Т.І.: Від вогню та води до електрики / [В.І. Бондаренко та ін.]. – Київ, 2006. – 299 с.
2. Гетерогенне окиснення легких вуглеводнів на цеолітних каталізаторах / [Є.О. Голуб, Н.П. Голуб, В.І. Гомонай, А.А. Козьма, Й.В. Галушкой та ін.] // *Наук. вісник Ужгород. у-ту. (Сер. Хімія)*. – 2017. – №1(37). – С. 94–98.
3. Synthesis of complex oxide systems of $xAl_2O_3 \cdot yP_2O_5$ type, its physicochemical and catalytic properties research in processes of partial oxidation of light hydrocarbons / [N.P. Golub, E.O. Golub, V.I. Gomonay, K.Yu. Szekeresh, I.O. Barenblat, A.A. Kozma] // *Proceedings II Symposium «Modern Problems of Nanocatalysis» NANOCAT 2017 (September 24–29, 2017, Kyiv, Ukraine)*. – Kyiv: L.V. Pisarzhevskii Institute of Physical Chemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine Press, 2017. – p. O–11.

ПРО ЗАСТОСОВНІСТЬ МЕТОДУ КЕЛЛОГА-КУБАШЕВСЬКОГО ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ТЕМПЕРАТУРНОЇ ЗАЛЕЖНОСТІ ТЕПЛОЄМНОСТІ $CeCl_3 \cdot 7H_2O$

к.х.н., доц. Козьма Антон Антонович
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»
Україна

Церій (III) хлорид гептагідрат $CeCl_3 \cdot 7H_2O$ відноситься до ефективних каталізаторів деяких реакцій органічного синтезу [1]. Водночас, його фізико-хімічні властивості досліджені недостатньо. Зокрема, в літературних джерелах немає відомостей про ізобарну теплоємність (C_p) зазначеної сполуки. Саме тому в даній роботі вперше здійснено оцінку C_p для $CeCl_3 \cdot 7H_2O$, використовуючи комплексний емпіричний підхід.

Автором цієї праці запропоновано новий спосіб оцінки теплоємності деяких кристалогідратів при кімнатній температурі. Вихідними даними слугували відомості з робіт [2-5], в яких показана можливість

Контент розповсюджується відповідно до ліцензії Creative Commons «Attribution»

Копіювання та розповсюдження матеріалів випуску без зазначення авторства та первинної публікації в даному збірнику заборонено!

прогнозування ізобарної теплоємності неорганічних сполук при використанні хвильових чисел валентних коливань їх хімічних зв'язків. З метою підвищення точності розрахунку, також використовували величину C_p для безводного CeCl_3 [6].

У результаті проведених розрахунків встановлено, що $\text{CeCl}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ має $C_p = 384.90$ Дж/(моль \times К) при 298 К.

Також здійснено аналіз можливості застосування методу Келлога-Кубашевського (МКК) [7-9] для виведення інтерполяційного рівняння опису температурної залежності теплоємності $\text{CeCl}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$. При цьому, як базовий параметр, використовували встановлене значення 384.90 Дж/(моль \times К) та класичне рівняння $C_p = a + bT + cT^2$. Необхідну температуру початку дегідратації $\text{CeCl}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (388 К) брали з [6].

Згідно з [9] для визначення величини коефіцієнтів a , b і c потрібно враховувати кількість іонів у формульній одиниці. Саме тому досліджуваний кристалогідрат представляли у вигляді сполуки, утвореної чотирма іонами: $[\text{Ce}(\text{H}_2\text{O})_7]^{3+} + 3\text{Cl}^-$. Якщо виходити з цього уявлення, то МКК приводить до виразу (1):

$$C_p = 1301.27 - 3.01T - 1.68 \cdot 10^5 T^{-2} \quad (1).$$

Рівняння (1) при 298 К дає $C_p = 385.37$ Дж/(моль \times К), що на 0.12 % відрізняється від результату, отриманого авторським способом.

Однак, при 388 К вираз (1) дає значення 132.27 Дж/(моль \times К). Таке значення видається малоімовірним, адже при підвищенні температури для неорганічних сполук характерним є зростання теплоємності. У зв'язку з цим було використано альтернативний підхід. У МКК брали 25 атомів у формульній одиниці $\text{CeCl}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$. Внаслідок цього одержано вираз (2):

$$C_p = -578.63 + 3.61T - 1.05 \cdot 10^7 T^{-2} \quad (2).$$

За даним рівнянням при 298 К одержується $C_p = 378.91$ Дж/(моль \times К), що на 1.56 % відрізняється від очікуваного та представленого вище результату. Зауважимо, що при 388 К за виразом (2) одержується величина 752.30 Дж/(моль \times К). Це значення також важко вважати прийнятним, бо при нагріванні зразка на 90 градусів його теплоємність не повинна зростати майже в два рази.

Підсумовуючи викладене відзначимо, що з прийнятною точністю вдалось визначити теплоємність $\text{CeCl}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ тільки при 298 К. Встановлено, що метод Келлога-Кубашевського незастосовний для прогнозування теплоємності даного кристалогідрату при температурах, вищих за кімнатну. Таким чином, наявною є потреба в альтернативних методах або в суттєвому вдосконаленню МКК, шляхом його адаптації до $\text{CeCl}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$.

Список використаних джерел:

1. An eco-friendly synthesis of 2-pyrazoline derivatives catalysed by $\text{CeCl}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ / [Prabhat Bhat, Gomathi Shridhar, Savita Ladage, Lakshmy Ravishankar] // J. Chem. Sci. – 2017. – Vol.129, №9. – P. 1441–1448.

2. Сокольский Ю.М. Числа осцилляторов в кристаллах сложных химических веществ / Ю.М. Сокольский // Журн. физ. химии. – 1982. – т.56, №3. – С. 722–724.
3. Сокольский Ю.М. Расчет тепловых свойств солей с оксианионами / Ю.М. Сокольский // Неорган. материалы. – 1983. – т.19, №1. – С. 120–122.
4. Сокольский Ю.М. О расчете теплоемкости кристаллов сложных химических веществ / Ю.М. Сокольский // Неорган. материалы. – 1986. – т.22, №6. – 1051–1053.
5. Козьма А.А. Про хвильові числа валентних коливань хімічних зв'язків метал–оксиген у неорганічних солях із оксоаніонами / А.А. Козьма // Наук. вісник Ужгород. у-ту. (Сер. Хімія). – 2015. – №1(33). – С. 18–21.
6. Patnaik Pradyot. Handbook of inorganic chemicals / Pradyot Patnaik. – New York: McGraw-Hill, 2003. – 1086 p.
7. Kellog H.H. in: Fitterer G.R. (Editor). Applications of Fundamental Thermodynamics to Metallurgical Processes / H.H. Kellog. – London: Gordon and Breach, 1967. – 357 p.
8. Kubaschewski O. An empirical estimation of the heat capacities of inorganic compounds / O. Kubaschewski, H. Ühal // High Temp.-High Pressur. – 1977. – V. 9, №3. – P. 361–365.
9. Estimation of heat capacities of solid mixed oxides / J. Leitner, P. Chuchvalec, D. Sedmidubský [et al.] // Thermochemica Acta. – 2002. – V. 395, №1-2. – P. 27–46.

РІВНЯННЯ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОЇ ІЗОХОРНОЇ ТЕПЛОЄМНОСТІ $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2$

к.х.н., доц. Козьма Антон Антонович
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»
Україна

Ортофосфат двовалентного кобальту $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2$ відноситься до перспективних компонентів літій-іонних батарей [1]. У той же час чимало важливих термодинамічних параметрів даного фосфату залишаються не дослідженими. В даній роботі наведено рівняння ізохорної теплоємності (C_V) $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2$ для температурного інтервалу 298–1428 К, яке одержували за допомогою відомих емпіричних та напівемпіричних методів.

В роботі [2], завдяки підходам [3, 4], встановлено ізобарну теплоємність (C_p) для $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2$ при кімнатній температурі. Цю величину використовували для виведення температурної залежності C_p в інтервалі 298–1428 К (до точки плавлення досліджуваного фосфату [5]). З цією метою використовували метод Келлога-Кубашевського [6]. Одержану залежність можна представити у вигляді рівняння:

$$C_p = 269.36 + 88.92 \cdot 10^{-3} T - 5.46 \cdot 10^{-6} T^{-2} \quad (1).$$

НАУКОВЕ ВИДАННЯ

МАТЕРІАЛИ МІЖНАРОДНОЇ
НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ
«ПЕРСПЕКТИВНІ НАПРЯМКИ
НАУКОВОЇ ДУМКИ»

18 квітня 2018 року, м. Тернопіль

ТОМ 6

Українською та російською мовами

*Матеріали друкуються в авторській редакції
Організаційний комітет не завжди поділяє позицію авторів
За точність викладеного матеріалу відповідальність несуть автори*

Підписано до друку 18.04.2018. Формат 60×84/16.
Папір офсетний. Гарнітура Times New Roman. Лазерний друк.
Умовно-друк. арк. 6,28.

Віддруковано з готового оригінал-макета.

Контактна інформація організаційного комітету:
21037, Україна, м. Вінниця, вул. Зодчих 18, офіс 81
ГО «Європейська наукова платформа»
Телефони: +38 098 1948380; +38 063 6241556
E-mail: info@ukrlogos.in.ua
www.ukrlogos.in.ua

Видавець: Друкарня ФОП Гуляєва В.М.
08700, Україна, м. Обухів, мкрн. Сосновий 2, офіс 2,
E-mail: info@drukaryk.com
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи:
ДК № 3909 від 02.11.2010 р.