

**Міністерство освіти і науки України
Східноукраїнський національний університет
імені Володимира Даля
Інститут хімічних технологій СХУ ім. В.Даля (м. Рубіжне)
Науково-технічна установа «ІХТНЕ»(м. Рубіжне)
Комунальний заклад «Луганська обласна мала академія наук
учнівської молоді»
Інститут екології, економіки і права (м. Київ)**

**МАТЕРІАЛИ
IV ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ
«АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ НАУКОВО-ПРОМИСЛОВОГО
КОМПЛЕКСУ РЕГІОНІВ»**



Міністерство освіти і науки України
Східноукраїнський національний університет
імені Володимира Даля
Інститут хімічних технологій СХУ ім. В.Даля (м. Рубіжне)
Науково-технічна установа «ІХТНЕ» (м. Рубіжне)
Комунальний заклад «Луганська обласна мала академія наук
учнівської молоді»
Інститут екології, економіки і права (м. Київ)

МАТЕРІАЛИ
IV ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ
«АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ НАУКОВО-ПРОМИСЛОВОГО
КОМПЛЕКСУ РЕГІОНІВ»



23-27 квітня 2018, Рубіжне

УДК 001.8:62
ББК Ч215

Рекомендовано до друку
Вченою радою Інституту хімічних технологій
Східноукраїнського національного університету
імені Володимира Даля (м. Рубіжне)
(протокол № 8 від 24 травня 2018 р.)

Актуальні проблеми науково-промислового комплексу регіонів. Матеріали IV Всеукраїнської науково-практичної конференції, 23-27 квітня 2018 р., м. Рубіжне / Бушуєв А.С., Завойських Ю.А. – Рубіжне: видавець О. Зень, 2018. – 350 с.
ISBN 978-617-601-247-4

У збірнику опубліковано матеріали IV Всеукраїнської науково-технічної конференції, які висвітлюють широке коло питань, пов'язаних із теоретичними та прикладними проблемами регіонів. Рекомендовано для наукових працівників, спеціалістів науково-дослідних установ, студентів, магістрантів, аспірантів, докторантів і викладачів вищих навчальних закладів, фахівців системи освіти і науки.

Відповідальність за зміст і достовірність поданих матеріалів випуску несуть автори наукових статей. Точки зору авторів публікації можуть не співпадати з точкою зору редколегії збірника.

УДК 001.8:62
ББК Ч215

ISBN 978-617-601-247-4 © ІХТ СХУ ім. В. Даля (м. Рубіжне), 2018

УДК 544.333:543.272.71

ПЕРЕВАГИ ТА НЕДОЛІКИ МЕТОДУ ДЖОНСОНА-ХУАНГУ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ТЕПЛОЄМНОСТІ ЛЕТКИХ АЛКАНІВ

Козьма А.А., к.х.н., доц.,

кафедра фізичної та колоїдної хімії ДВНЗ «УжНУ» (м. Ужгород)

Вивчення теплових властивостей алканів викликає значний науковий інтерес [1]. У даній роботі реалізовано метод Джонсона-Хуангу (МДХ) [2] для визначення ізобарної теплоємності C_p газоподібних гомологів метану та вказано на переваги та недоліки зазначеного емпіричного підходу. Користуючись вказівками [2], здійснено обрахунок C_p для деяких нижчих алканів. За МДХ при 298 К одержано такі значення: 51.84 Дж/(моль×К) для етану та 74.64 Дж/(моль×К) для пропану. Ці величини відрізняються відповідно на -1.26% та 1.41% від даних, наведених у [3]. Отже, використаний метод характеризується високою точністю для C_2H_6 і C_3H_8 . Водночас, при використанні МДХ для CH_4 спостерігається неоднозначність. У роботі [2] наведено групові складові мольної теплоємності для метильної групи та атому Карбону з чотирма одинарними зв'язками, але немає відповідного значення для внеску атома Гідрогену в загальну теплоємність вуглеводневої сполуки. У зв'язку з цим, таку величину $C_p(H)=9.62$ Дж/(моль×К) брали з [4]. Розрахунок МДХ у вигляді $C_p(CH_4) = C_p(H_3C-) + C_p(H)$ дає значення 35.54 Дж/(моль×К), що тільки на -0.45% відрізняється від [3]. У той же час, при використанні групової складової атома Карбону з чотирма одинарними зв'язками та $4 \times C_p(H)$ з [4] одержується результат 52.81 Дж/(моль×К), що суттєво (на 47.93%) відрізняється від даних [3]. Таким чином, для подальшого використання метод Джонсона-Хуангу потребує оптимізації.

Список використаної літератури:

1. Vélez C. Temperature-dependent thermal properties of solid/liquid phase change even-numbered *n*-alkanes: *n*-Hexadecane, *n*-octadecane and *n*-eicosane / C. Vélez, M. Khayet, J.M. Ortiz de Zárate // Appl. Energy. – 2015. – Vol.143. – P. 383–394.
2. Викторов М.М. Методы вычисления физико-химических величин и прикладные расчеты / М.М. Викторов. – Л.: Химия, 1977. – 360 с.

3. Волков А.И., Жарский И.М. Большой химический справочник / А.И. Волков, И.М. Жарский. – Минск: Современная школа, 2005. – 608 с.

4. Физическая химия. В 2-кн. Кн. 1. Строение вещества. Термодинамика: Учеб. для вузов / Краснов К.С., Воробьев Н.К., Годнев И.Н. [и др.]; под ред. К.С. Краснова. – 3-е изд., испр. – М.: Высшая школа, 2001. – 512 с.

УДК 544.3.03+543.572.3+543.442.2+543.422.374+544.188+
+536.21:546.742'732'185-383

ТЕПЛОФІЗИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ОРТОФОСФАТІВ КОБАЛЬТУ (II) ТА НІКЕЛЮ (II)

Козьма А.А., к.х.н., доц., Голуб Н.П., к.х.н., доц.,
Голуб С.О., викл., Гомонай В.І., д.х.н., проф.
кафедра фізичної та колоїдної хімії ДВНЗ «УжНУ» (м. Ужгород)

Кобальт (II) та Нікель (II) ортофосфати $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2$ і $\text{Ni}_3(\text{PO}_4)_2$ відносяться до перспективних каталізаторів [1], що обумовлює певний науковий інтерес до їх теплофізичного дослідження.

Синтез зазначених сполук проводили методом осадження при $\text{pH}=5$ за методикою, розробленою на кафедрі фізичної та колоїдної хімії ДВНЗ «Ужгородський національний університет». З метою видалення кристалізаційної води, одержані осаді піддавали високотемпературній обробці. Кінцеві безводні продукти ідентифікували методами диференційного термічного (ДТА) та рентгенівського фазового (РФА) аналізів.

Теплофізичні властивості визначали за допомогою емпіричних та напівемпіричних методів, використовуючи наявні експериментальні дані [2-4]. При цьому застосовували фононну теорію Дебая, модель Сокольського для встановлення емпіричних інкрементів зв'язку, напівемпіричні методи Магнуса-Ліндемана та Кубашевського для визначення теплоємності та розрахунку за її участю дебаєвської функції, а також аналізували структурні особливості досліджуваних сполук [5, 6]. Для $\text{Ni}_3(\text{PO}_4)_2$ величину ізобарної теплоємності брали із роботи [7].

Одержані величини температури Дебая θ_D , середньої теплової швидкості v_0 , довжини вільного пробігу фононів l та ґраткової теплопровідності χ для вивчених ортофосфатів наведено в таблиці.