

International Conference

«CURRENT PROBLEMS IN CATALYSIS»



PROCEEDINGS



National Academy
of Sciences of Ukraine



L.V. Pysarzhevskii Institute
of Physical Chemistry

Proceedings of the International conference «Current problems in catalysis» CPC-2023 (Kyiv, September 25—29, 2023). — Kyiv: Akademperiodyka, 2023. — 180 p.

Proceedings Book contains the scientific presentations of participants of the International Conference «Current Problems in Catalysis», CPC-2023 organized by the National Academy of Sciences of Ukraine and L.V. Pysarzhevskii Institute of Physical Chemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine (Kyiv, September 25—29, 2023).

The presented materials highlight the latest achievements in catalysis obtained in leading scientific centres in 15 countries, including Ukraine, Azerbaijan, Hungary, Japan, Kazakhstan, Poland, USA, Belgium, Finland, Germany, Slovakia, Spain, Norway, China and Serbia. The topics of the abstracts cover modern fundamental and applied problems of catalysis: modern substances and materials for heterogeneous and homogeneous catalytic processes in the gas phase and solutions; production and design of new nanoscale and nanophase substances and materials for catalysis; catalysts for the synthesis of functional substances and materials for the chemical industry; heterogeneous catalytic processes of renewable raw materials processing; heterogeneous catalytic processes for hydrogen energy; catalysis for environmental protection, elimination of harmful emissions; photo-, electro- and photo- electrocatalysis.

The publication is prepared for publication
by the Organizing Committee of the Conference.

The materials are printed in the author's version without editing.

Compilers:

Dr. N.V. VLASENKO, Dr. O.Z. DIDENKO

Reviewers:

Corresponding Member of the NAS of Ukraine C.M. ORLYK,
Corresponding Member of the NAS of Ukraine S.O. SOLOVIEV

Approved for printing:

The Scientific Council of the L.V. Pysarzhevskii Institute of Physical Chemistry
of the National Academy of Sciences of Ukraine

Матеріали Міжнародної конференції “Сучасні проблеми каталізу” СРС-2023: (м. Київ, 25—29 вересня 2023 р.). — Київ: Академперіодика, 2023 — 180 с.

У збірці опубліковано тези наукових доповідей учасників Міжнародної конференції “Сучасні проблеми каталізу” СРС-2023, організованої відділенням хімії Національної академії наук України та Інститутом фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського НАН України (м. Київ, 25—29 вересня 2023 р.).

Представлені матеріали висвітлюють останні досягнення в галузі каталізу, що отримані у провідних наукових центрах 15 країн, серед яких Україна, Азербайджан, Угорщина, Японія, Казахстан, Польща, США, Бельгія, Фінляндія, Німеччина, Словаччина, Іспанія, Норвегія, Китай та Сербія. Тематика доповідей охоплює сучасні фундаментальні та прикладні проблеми каталізу: сучасні речовини та матеріали для гетерогенних і гомогенних каталітичних процесів в газовій фазі та розчинах; виробництво і проектування нових наномасштабних та нанофазних речовин і матеріалів для каталізу; каталізатори для синтезу функціональних речовин і матеріалів для хімічної промисловості; гетерогенні каталітичні процеси переробки відновлюваних сировинних матеріалів; гетерогенні каталітичні процеси для водневої енергетики; каталіз для охорони навколишнього середовища, ліквідації шкідливих викидів; фото-, електро- та фотоелектрокаталіз.

Видання підготовано до друку Організаційним комітетом Конференції.

Матеріали друкуються в авторському варіанті без редагування.

Укладачі:

канд. хім. наук Н.В. ВЛАСЕНКО, О.З. ДІДЕНКО

Рецензенти:

член-кореспондент НАН України С.М. ОРЛИК,
член-кореспондент НАН України С.О. СОЛОВЙОВ

*Затверджено до друку Вченою радою
Інституту фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського НАН України*

DETERMINATION OF THERMOCHEMICAL PROPERTIES OF DIVALENT METAL ORTHOPHOSPHATES BY SEMI-EMPIRICAL METHODS

A.A. Kozma^{1*}, N.P. Golub¹, Ye.O. Golub², D.V. Davyda¹, V.I. Gomonaj¹

¹*Department of Physical and Colloid Chemistry, Educational and Scientific Institute of Chemistry and Ecology (Faculty of Chemistry), Uzhhorod National University, Pidhirna St., 46, Uzhhorod, 88000 Ukraine, Anton_Kozma@uzhnu.edu.ua*

²*Department of Pharmaceutical Disciplines, Faculty of Medicine, Uzhhorod National University, Pidhirna St., 46, Uzhhorod, 88000 Ukraine*

In this work, a number of thermochemical properties of orthophosphate catalysts [1] of the general formula $\text{Me}_3(\text{PO}_4)_2$ (Me – Be, Mg, Ca, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ge, Sr, Pd, Cd, Sn, Ba, Eu, Hg, Pb) were determined using semi-empirical methods.

The main calculations were performed using three different methods: by Kapustynskiy, by Fersman, and by Yatsymirskiy. The obtained values of the crystal lattice energies U were used in the Born–Haber cycle to calculate the enthalpy of formation ΔH_f of these compounds. The Shannon's ionic radii, heat of formation of gaseous ions, energy coefficients of cations and orthophosphate anion were used as auxiliary quantities [2].

The results were compared with known experimental and theoretical data. It turned out that the Kapustynskiy's method gives the smallest deviations from known values, and the Fersman's method gives the largest deviations. However, both approaches can be combined. The combined use of these methods allowed us to significantly minimize the magnitude of errors. In particular, for the vast majority of $\text{Me}_3(\text{PO}_4)_2$ phosphates, the maximum deviations from the literature data did not exceed $\pm(1-6)$ %. The optimal methods were used to determine previously unknown values of ΔH_f for five compounds: $\text{Be}_3(\text{PO}_4)_2$ (-3378 kJ/mol), $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2$ (-2689 kJ/mol), $\text{Cd}_3(\text{PO}_4)_2$ (-2612 kJ/mol), $\text{Eu}_3(\text{PO}_4)_2$ (-4605 kJ/mol), $\text{Hg}_3(\text{PO}_4)_2$ (-1816 kJ/mol) [2]. In addition, from the thermochemical point of view, the possibility of formation of two new orthophosphates $\text{Ge}_3(\text{PO}_4)_2$ and $\text{Pd}_3(\text{PO}_4)_2$, the existence of which is not reported in the literature, was predicted.

The determined values of ΔH_f , in combination with the initial data from [3, 4], were used to calculate other thermochemical functions of $\text{Me}_3(\text{PO}_4)_2$: the Gibbs energy of formation ΔG_f , the entropy of formation ΔS_f , and the logarithm of the equilibrium constant of formation reaction $\log[K_f]$.

The obtained results can be used for thermochemical analysis of promising catalytic systems formed on the basis or with the participation of the considered divalent metal orthophosphates.

References:

1. V. Gomonaj, H. Toulhoat, ACS Catalysis. **8** (2018) 8263.
2. A.A. Kozma, N.P. Golub, Ye.O. Golub, D.V. Davyda, N.V. Rusaniuk, V.V. Barna, The 75th Final Scientific Conference of the Teaching Staff of the Faculty of Chemistry of the Uzhhorod National University. Uzhhorod, Ukraine. 2021, P. 50-52, and references cited therein.
3. I. Barin, Thermochemical Data of Pure Substances, John Wiley & Sons, Weinheim (1995).
4. M.W. Chase Jr., NIST-JANAF Thermochemical Tables, 4th edn., Journal of Physical and Chemical Reference Data, Monograph 9, American Institute of Physics (1998).

S-15	V.Sh. Saberov, O.S. Avksentiev , V.I. Yenya, G.F. Rayenko, N.I. Korotkikh Comparative characteristics of the catalysis of the transesterification reaction by carbenes and the hydroxide form of anionite AB-17-8	121
S-16	A.I. Trypolskyi , N.V. Vlasenko, O.O. Zhokh Kinetics and mechanism of methanol dehydration on acid sites of composite catalysts H-ZSM-5–Al ₂ O ₃	123
S-17	E.V. Senchylo , N.V. Vlasenko, G.R. Kosmambetova Mesoporous phosphate-stabilized tungsten-zirconium oxide composition as a catalysts for glycerol dehydration	125
S-18	L. Hrytsak , V. Vasil'ev, B. Turko Heterogeneous photoelectrocatalysis of porous ZnO plate with micro- and nano elements	127
S-19	O.I. Ivanenko , S.D. Dovholap, A.I. Trypolskyi, P.E. Strizhak, T.A. Overchenko Removal of harmful emissions from electrode production in a catalytic reactor with a ferrite loading	128
S-20	A.A. Kozma , N.P. Golub, Ye.O. Golub, D.V. Davyda, V.I. Gomonaj Determination of thermochemical properties of divalent metal orthophosphates by semi-empirical methods	130
S-21	Yu.L. Lishchenko , S.O. Sotnik, A.S. Poturai, S.V. Ryabukhin, D.M. Volochnyuk, S.V. Kolotilov Catalytic oxidation of sulfides at presence of Co ^{II} , Fe ^{III} and Mn ^{II} complexes	131
S-22	V.S. Protsenko , D.O. Makhota, O.D. Sukhatskyi, L.S. Bobrova, T.E. Butyrina, F.I. Danilov Fabrication of electrocatalysts for green hydrogen production using deep eutectic solvents	132
S-23	A. Ciemięga, K. Maresz, M. Sitarz, M. Krzywiecki, J. Mrowiec-Białoń Insight into structural and physicochemical properties of ZrO ₂ -SiO ₂ monoliths with hierarchical pore structure. Effect of zirconium precursor	134
S-24	Kh.A. Nasullaev , I.S. Abdurakhmanova, Sh.T. Gulomov, R.G. Khadjiev, D.P. Turdieva Use of spent alumina in the production of an adsorbent for drying nitrogen at a catalytic reformer	136
S-25	N. Makayeva , G. Yergaziyeva, S. Soloviev, N. Khudaibergenov, M. Annisova, M. Mambetova, K. Dossumov Effects of cerium oxide on the activity of Fe-Ni/Al ₂ O ₃ catalyst in the decomposition of methane	137
S-26	M. Zabochnicka , P.E. Strizhak, G.R. Kosmambetova, S. Szufa, R. Bhosale, G. Piechota, G. Kumar Catalysis for CO ₂ utilization using bio-resources	138
S-27	M. Mambetova , G. Yergaziyeva, K. Dossumov Ethanol conversion on copper catalysts	140
S-28	S.N. Osmanova , S.A. Suleymanova, T.G. Zeynalova, E.H. Ismailov Intermediates in catalytic systems for metathesis of olefins based on WCl ₆ and organoaluminium compounds according to dynamic light scattering and electron paramagnetic rezonance data	142

Наукове видання

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИЧНОЇ ХІМІЇ
ім. Л.В. ПИСАРЖЕВСЬКОГО НАН УКРАЇНИ

**МАТЕРІАЛИ
МІЖНАРОДНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ
“СУЧАСНІ ПРОБЛЕМИ КАТАЛІЗУ”
СРС-2023
(м. Київ, 25—29 вересня 2023 р.)**

Англійською мовою

Підп. до друку 20.09.2023. Формат 60×84/16.
Ум. друк. арк. 10,46. Обл.-вид. арк. 12,87.
Тираж 50 прим. Зам. № 7043

Видавець і виготовлювач
Видавничий дім «Академперіодика» НАН України
01024, Київ, вул. Терещенківська, 4

Свідоцтво про внесення до Державного реєстру суб'єктів
видавничої справи серії ДК № 544 від 27.07.2001 р.