

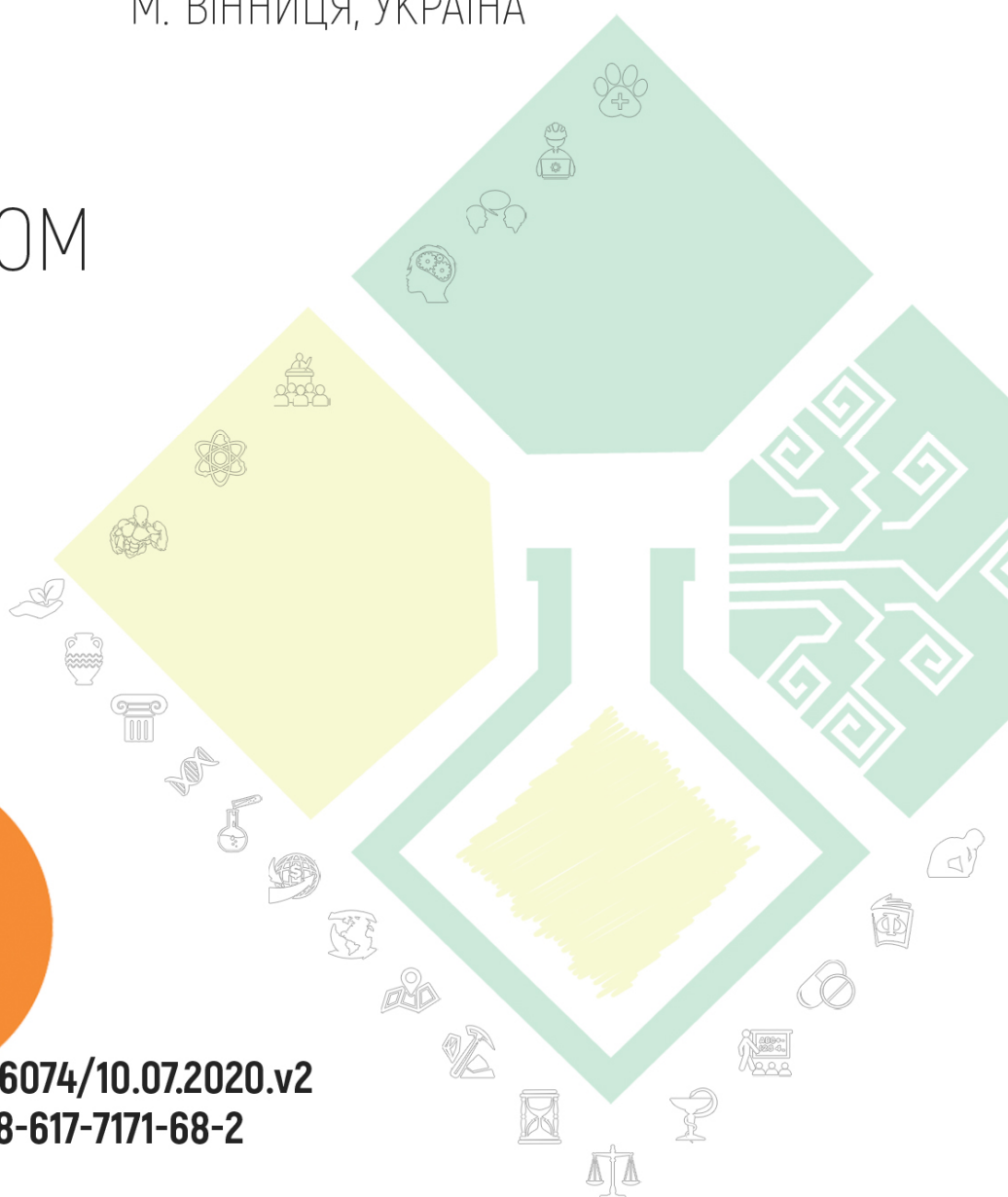
10 ЛИПНЯ 2020 РІК

М. ВІННИЦЯ, УКРАЇНА

'2 TOM



DOI 10.36074/10.07.2020.v2
ISBN 978-617-7171-68-2





Голова оргкомітету: Рабей Н.Р.

Верстка: Дудник Г.М.

Дизайн: Бондаренко І.В.

М 58 **Міжгалузові диспути: динаміка та розвиток сучасних наукових досліджень:** матеріали міжнародної наукової конференції (Т. 2), 10 липня, 2020 рік. Вінниця, Україна: МЦНД.
ISBN 978-617-7171-68-2
DOI 10.36074/10.07.2020.v2

Викладено матеріали учасників міжнародної мультидисциплінарної наукової конференції «Міжгалузові диспути: динаміка та розвиток сучасних наукових досліджень», яка відбулася у місті Вінниця 10 липня 2020 року.

Конференцію зареєстровано Державною науковою установою «УкрІНТЕІ» в базі даних науково-технічних заходів України та інформаційному бюлетені «План проведення наукових, науково-технічних заходів в Україні» (Посвідчення № 301 від 18.05.2020).

Матеріали конференції знаходяться у відкритому доступі на умовах ліцензії Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0).



Всі роботи збірника відображені в Google Scholar. Роботи, що містять цифровий ідентифікатор DOI індексуються в ORCID, CrossRef та OUCI (Український індекс наукового цитування).

СЕКЦІЯ VI. ХІМІЧНІ НАУКИ

ЕНЕРГОЩІЛЬНІСТЬ ТВЕРДОФАЗНИХ КАТАЛІЗАТОРІВ ТИПУ $A^{IV}B^{VI}_2$

Вашкеба Наталія Борисівна

магістр хімії

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Україна

Голуб Неля Петрівна

канд. хім. наук, доцент, кафедра фізичної та колоїдної хімії

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Україна

Сполуки типу $A^{IV}B^{VI}_2$, які утворені елементами IV та VI груп періодичної системи, мають важливі для хімічної промисловості каталітичні властивості [1]. Крім того, деякі представники зазначених компонентів входять до складу перспективних композиційних сплавів, які проявляють цінні напівпровідникові властивості [2-8].

У даній роботі для низки каталізаторів типу $A^{IV}B^{VI}_2$ визначено величини їх енергощільності. Ця властивість відноситься до нових ефективних характеристик сполук [9]. Поряд із іншими енергетичними параметрами [9-11], вона може відігравати важливу роль при фізико-хімічних дослідженнях різноманітних матеріалів.

Енергощільність E_V сполук безпосередньо пов'язана з їх структурною крихкістю ω [9]:

$$E_V = \frac{2443,3}{\omega^{1,806}} \quad (1).$$

Використавши вираз (1) та експериментальну густину d із [12], для низки відповідних каталізаторів було встановлено величини їх енергощільності (табл. 1).

Таблиця 1

Енергощільність твердофазних каталізаторів типу $A^{IV}B^{VI}_2$

Каталізатор	d , г/см ³ [12]	ω , см ³ /г-ат	E_V , кДж/см ³
SiO ₂ (α-кварц)	2,66	7,54	63,60
TiO ₂ (β-рутил)	4,24	6,29	88,23
GeO ₂	4,25	8,21	54,53
ZrO ₂	~6	6,85	75,63
SnO ₂	6,85	7,33	66,93
HfO ₂	~10	7,02	72,36
PbO ₂	9,64	8,27	53,82

Як видно із табл. 1, серед наведених оксидів найвищою енергощільністю характеризується TiO₂, а найнижчою – PbO₂. Ймовірно при збільшенні молекулярної маси сполук величина їх E_V буде понижуватись, однак прямолінійної закономірності не простежується.

Цікаво провести подібне порівняння для хімічних аналогів $A^{IV}B^{VI}_2$, у яких атоми Оксигену заміщені на атоми халькогенів – Сульфур, Селену, Телуру. Відмітимо, що чимало сполук $A^{IV}B^{VI}_2$, у яких B^{VI} – S, Se або Te, у літературі взагалі не

представлені. Вони або не існують, або залишаються практично не дослідженими. Наприклад, у наукових джерелах є відомості про силіцій сульфід SiS_2 [12], але немає даних стосовно його аналогів – селеніду та телуриду. Інший приклад: чотиривалентний Плюмбум входить до складу оксиду PbO_2 [12], але не утворює сульфід, селенід чи телурид. Більше того, серед сполук $\text{A}^{\text{IV}}\text{B}^{\text{VI}}_2$ взагалі не вдалось знайти жодного телуриду. Таким чином, серед відомих зразків розглянутого типу найбільшу молекулярну масу має гафній селенід HfSe_2 . Енергощільність цієї сполуки становить $18,30 \text{ кДж/см}^3$ та є суттєво нижчою від аналогічних параметрів представлених вище оксидів (табл. 1). Цікаво відзначити, що серед $\text{A}^{\text{IV}}\text{B}^{\text{VI}}_2$ рекордно низькою енергощільністю характеризується не «найважчий» HfSe_2 , а його попередник – станум (IV) селенід SnSe_2 . Для цієї сполуки E_v становить $12,65 \text{ кДж/см}^3$.

Отже, встановлені результати можуть використовуватись для обґрунтування відомих закономірностей каталітичної активності сполук типу $\text{A}^{\text{IV}}\text{B}^{\text{VI}}_2$ та, ймовірно, дозволять прогнозувати для них нові властивості.

Список використаних джерел:

1. Голуб, Н. П. (1996) *Закономірності каталітичного окиснення етану на кислотних катализаторах* (автореф. дис. ... канд. хім. наук). КНУ ім. Тараса Шевченка. Київ, Україна.
2. Козьма, А. А., Барчій, І. Є., Переш, Є. Ю. & Цигика, В. В. (2009). Фізико-хімічна взаємодія у квазіпотрійній системі $\text{SnSe}_2\text{--TiBiSe}_2\text{--Bi}_2\text{Se}_3$. *Наук. вісник Ужгородського у-ту. Серія «Хімія»*, 1(21), 6-12.
3. Козьма, А. А., Барчій, І. Є., Переш, Є. Ю., Сабов, М. Ю., Беца, В. В., Цигика, В. В. & Габорець, Н. Й. (2011). Про взаємозв'язок технологічних умов одержання та властивостей вихідних сполук системи $\text{SnSe}_2\text{--Bi}_2\text{Se}_3\text{--TiBiSe}_2$. *Наук. вісник Ужгородського у-ту. Серія «Хімія»*, 2(26), 34-40.
4. Kozma, A. A., Sabov, M. Yu., Peresh, E. Yu., Barchiy, I. E. & Tsygyka, V. V. (2015). Thermoelectric Properties of a Eutectic $\text{SnSe}_2\text{--Bi}_2\text{Se}_3$ Alloy. *Inorganic Materials*, 51(2), 93-97. <https://doi.org/10.1134/S0020168515010082>.
5. Козьма, А. А., Переш, Е. Ю., Барчій, І. Є., Сабов, М. Ю. & Зубака, О. В. (2016). Термоелектричні властивості евтектичних сплавів квазіпотрійної системи $\text{SnSe}_2\text{--TiBiSe}_2\text{--Bi}_2\text{Se}_3$. *Наук. вісник Ужгородського у-ту. Серія «Хімія»*, 1(35), 22-27.
6. Козьма, А. А., Барчій, І. Є., Переш, Є. Ю. & Барчій, О. І. Триангуляція квазіпотрійної системи $\text{Ti}_2\text{Se--SnSe}_2\text{--Bi}_2\text{Se}_3$. *Proceeding of IV International workshop "RNAOPM'2008"* (p. 40-42). Jine 1–5, 2008, Lutsk, Ukraine.
7. Козьма, А. А., Барчій, І. Є., Переш, Є. Ю. & Цигика, В. В. (2010). Фазові рівноваги на квазібінарних перерізах квазіпотрійної системи $\text{Ti}_2\text{Se--SnSe}_2\text{--Bi}_2\text{Se}_3$. *Укр. хім. журн.*, 76(4), 80-84.
8. Козьма, А. А., Переш, Є. Ю., Барчій, І. Є., Сабов, М. Ю., Беца, В. В. & Цигика, В. В. (2011). Термоелектричні властивості евтектичних сплавів систем $\text{TiBiSe}_2\text{--SnSe}_2$ (Ti_2SnSe_3 , Ti_4SnSe_4) і $\text{Ti}_4\text{SnSe}_4\text{--Ti}_9\text{BiSe}_6$. *Укр. хім. журн.*, 77(9), 23-26.
9. Зуев, В. В., Поцелуева, Л. Н. & Гончаров, Ю. Д. (2006). *Кристаллоэнергетика как основа оценки свойств твердотельных материалов (включая магнизиальные цементы)*. С-Пб: N. p.
10. Kozma, A. A. (2019). Advantages of Using Semi-Empirical Methods in Teaching Students at the Faculty of Chemistry of Uzhhorod National University. *International Journal of Education and Science*, 2(2), 22. <https://doi.org/10.26697/ijes.2019.2.09>
11. Козьма, А. А. Кристалоенергетичні властивості бісмут(III) оксид-хлориду BiOCl . *Wiadomości o postępie naukowym i rzeczywistych badaniach naukowych współczesności: kolekcja prac naukowych «ΛΟΓΟΣ» z materiałami Międzynarodowej naukowo-praktycznej konferencji* (Tom 4, ss. 63-66). 17 czerwca 2019 r., Kraków, Polska: OP «Europejska platforma naukowa».
12. Волков, А. И. & Жарский, И. М. (2005). *Большой химический справочник*. Минск: Современная школа.