

**Міністерство освіти і науки України
Донецький національний університет
Імені Василя Стуса**

**МАТЕРІАЛИ
наукової конференції професорсько-викладацького складу,
наукових працівників і здобувачів наукового ступеня
за підсумками науково-дослідної роботи
за період 2015–2016 рр.**

[15–18 травня 2017 р.]

Том 2

**ДонНУ Імені Василя Стуса
Вінниця
2017**

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТУСА

МАТЕРІАЛИ

**наукової конференції професорсько-викладацького складу,
наукових працівників і здобувачів наукового ступеня
за підсумками науково-дослідної роботи
за період 2015–2016 рр.
(15–18 травня 2017 р.)**

У двох томах

Том 2

ДонНУ імені Василя Стуса
Вінниця
2017

Редакційна колегія:

Головний редактор – Гринюк Р. Ф., д-р юрид. наук., професор.

Заступник головного редактора – Хаджинов І. В., д-р екон. наук., професор.

Відповідальний секретар – Радіо С. В., канд. хім. наук.

Члени редакційної колегії:

Вєтров О. С.; Ніколюк П. К., д-р фіз.-мат. наук, професор; Жильцова С. В., канд. хім. наук, доцент; Велигодська А. К.; Кокорський В. Ф., канд. істор. наук, доцент; Ситар Г. В., канд. філол. наук, доцент; Залужна О. О., канд. філол. наук; Дороніна О. А., д-р екон. наук, професор; Амелічева Л. П., канд. юрид. наук, доцент; Латишев М. В., канд. наук з фіз. виховання і спорту, доцент; Додонов Р. О., д-р філос. наук, професор; Мартинець Л. А., канд. пед. наук, доцент; Нога І. В., канд. фіз.-мат. наук, доцент; Карягіна Н. О.; Алимова Т. В.

Матеріали наукової конференції професорсько-викладацького складу, наукових працівників і здобувачів наукового ступеня за підсумками науково-дослідної роботи за період 2015–2016 рр. (15–18 травня 2017 р.): у 2-х томах. Том 2. – Вінниця: Донецький національний університет імені Василя Стуса, 2017. – 188 с.

До другого тому увійшли матеріали секцій: педагогіка та фізичне виховання, порівняльно-історичне мовознавство, фізика, філологія, філософія, хімія.

<i>Гуржи К. Л.</i> Де/конструювання міського соціального простору: дослідницький потенціал розробок Кевіна Лінча та Коліна Елларда	156
<i>Додонова В. И. М.</i> Хайдеггер о модусах речи и «семантика социальных конфликтов»	157
<i>Додонов Р. О.</i> Про місце війн у російській історії	159
<i>Ковальський Г. Є.</i> Інформаційний інструментарій моделювання реальності в українському соціуму	161
<i>Колінько М. В.</i> Роль жінки у формуванні міжкультурного діалогу. Досвід американського фронтиру	163
<i>Попов В. Ю.</i> Проблема «наукового світогляду» в полеміці А. Деборіна з В. Вернадським.....	165
<i>Родигін К. М.</i> Феномен алхімії у сцинтистському контексті нового та новітнього часу	167
<i>Скворець В. О.</i> Соціальна еволюція в умовах глобалізації.....	169
<i>Халиков Р. Х.</i> Стены как последняя попытка государств утвердить границы	172

СЕКЦІЯ «ХІМІЯ»

<i>Бахалова Є. А., Беспалько Ю. М., Швед О. М., Ситник Н. С.</i> Регіоселективність реакції розкриття оксиранового циклу епіхлоргідрину бензоат-аніоном	174
<i>Борисова К. В., Кащуба А. І., Шульжук Б. В., Гетьман Є. І.</i> Подвійні силікати рідкісноземельних елементів зі структурою апатиту	175
<i>Гетьман Є. І., Радіо С. В.</i> Прогнозування енергії змішування та температур розпаду твердих розчинів складу $\text{La}_{1-x}\text{Ln}_x\text{PO}_4$	175
<i>Єрошина К.В., Фіткаленко Г. В., Румянцева Ж. О., Марійчак О. Ю., Радіо С. В.</i> Визначення вмісту хлорид-аніонів у питній воді колодязів м. Вінниця	177
<i>Жильцова С. В., Леонова Н. Г.</i> Структура і властивості епоксидно-силоксанових нанокомпозитів ангідридного тверднення.....	179
<i>Зосенко О. О., Гордєєва І. О., Куц О. В.</i> Антиоксидантна активність 3-(гідроксиміно)пентан-2,4-діону в реакціях з радикалами	180
<i>Калінський О. М., Юрілова К. С., Беспалько Ю. М., Швед О. М.</i> Нуклеофільний каталітичний ацидоліз епіхлоргідрину двохосновними карбоновими кислотами і їх естерами	181
<i>Копил О. Е., Лесишина Ю. О., Цяпalo О. С., Кублинська І. А.</i> Якісний і кількісний склад етанольних екстрактів грибів <i>FLAMMULINA VELUTIPE</i>	183
<i>Марійчак О. Ю., Розанцев Г. М., Радіо С. В.</i> Натріо гетерополідекавольфрамоевропіат(III): синтез, ІЧ-спектроскопічний аналіз, мікроморфологія поверхні.....	184
<i>Мельниченко В. І., Манько К. І.</i> Кополімеризація метилметакрилату з фторованими мономерами	185
<i>Розанцев Г. М., Гумерова Н. І., Іванцова Е. С., Усачов О. М., Зюбрицька Ю. І., Радіо С. В.</i> Гетерополігексавольфрамонікелати(II) рідкісноземельних елементів з аніоном структури Андерсона та їх термоліз.....	186
<i>Цяпalo О. С., Лесишина Ю. О., Шендрік О. М.</i> Вплив середовища на каталітичну активність лаккази <i>TRAMETES VERSICOLOR</i>	187
<i>Shpan'ko I. V.</i> Combined effects of structure and temperature on kinetics and free activation energy of reactions between trans-2,3-bis(3-bromo-5-nitrophenyl)oxirane and arenesulfonic acids	188

ПОДВІЙНІ СИЛІКАТИ РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНИХ ЕЛЕМЕНТІВ ЗІ СТРУКТУРОЮ АПАТИТУ

К. В. Борисова, А. І. Кацуба, Б. В. Шульжук, Є. І. Гетьман

Силікати рідкісноземельних елементів (РЗЕ) зі структурою апатиту можуть бути використані для створення твердооксидних паливних елементів, які використовуються при низьких температурах, люмінофорів і лазерів, каталізаторів і біоматеріалів. Згідно з літературними даними для синтезу силікатів рідкісноземельних елементів зі структурою апатиту можна використовувати твердофазний метод, золь-гель метод і його модифікації, метод співосадження та інші.

Для твердофазного синтезу силікатів РЗЕ зі структурою апатиту найчастіше використовують оксиди. При цьому температура спікання досягає 1600 °C. За допомогою механохімічного метода синтезу можна знизити температуру до 1300 °C. Застосування золь-гель методу синтезу вимагає спікання при температурі 1400 °C.

Була запропонована методика твердофазного синтезу подвійних силікатів РЗЕ з використанням нанорозмірного силіцій діоксиду («Орисил»), застосування якого у якості вихідного реагенту дозволило знизити температуру спікання до 1200 °C. Фаза апатиту утворювалась вже при 900 °C. Однак, були одержані лише подвійні силікати лантану та европію, лантану та гадолінію, лантану та неодиму, тому об'єктом дослідження стали подвійні силікати самарію та неодиму зі структурою апатиту.

Подвійні силікати зі структурою апатиту складу $\text{Sm}_{(9-x)}\text{Nd}_x(\text{SiO}_4)_6\text{O}(\text{OH})$ ($x = 0, 2, 4, 6, 8, 9$) були синтезовані твердофазним методом з використанням «Орисилу», вивчені методами рентгенофазового аналізу і растрової електронної мікроскопії. Початкова температура синтезу складала 800 °C, а максимальна – 1200 °C протягом 20 годин.

За даними електронної мікроскопії елементи практично рівномірно розподілені по поверхні частинки, що свідчить про утворення однорідного зразка. На рентгенограмі зразків присутні відображення лише від структури апатиту.

ПРОГНОЗУВАННЯ ЕНЕРГІЇ ЗМІШУВАННЯ ТА ТЕМПЕРАТУР РОЗПАДУ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ СКЛАДУ $\text{La}_{1-x}\text{Ln}_x\text{PO}_4$

Є. І. Гетьман, С. В. Радіо

У наш час актуальною задачею хімії та матеріалознавства є пошук нових радіаційно стійких матеріалів для використання в якості матриць для захоронення різних радіоактивних відходів, у тому числі з атомних реакторів, а також із демонтованої ядерної зброї, оскільки термін використання алюмофосфатного або боросилікатного скла, що використовують із цією метою, становить до 30–40 років. З цією метою інтенсивно досліджуються тверді розчини ортофосфатів «легких» рідкісноземельних елементів (РЗЕ) ряду La—Dy зі структурою монацита. Проте для використання твердих розчинів необхідно знати температури їх розпаду, експериментальне визначення яких методом відпалювання й закалювання ускладнено внаслідок складності досягнення рівноваги за низьких температур і розпадом їх при закалці за високих температур. Тому актуальною задачею є визначення температур розпаду розрахунковими методами.

Енергії змішування, за якими розраховували температури розпаду $\text{La}_{1-x}\text{Eu}_x\text{PO}_4$ та $\text{La}_{1-x}\text{Gd}_x\text{PO}_4$ було отримано раніше різними колективами авторів на основі

експериментальних даних про ентальпії утворення, а також шляхом розрахунків енергії деформації твердих розчинів та *Ab initio* квантовохімічних розрахунків (табл.) [1–5].

Таблиця

Енергії змішування та температури розпаду, одержані різними методами

Енергії змішування кДж/моль		Температури розпаду, К		Метод одержання, посилання
La _{1-x} Eu _x PO ₄	La _{1-x} Gd _x PO ₄	La _{1-x} Eu _x PO ₄	La _{1-x} Gd _x PO ₄	
5,2	6,8	310	400	Strain energy [1]
14,0	24,0	830	1433	Drop calorimetry [2]
13,4	16,5	800	985	Ab initio [3]
6,2	8,6	370	510	Ab initio/strain [4]
2,5	11,4	150	680	Drop solution [5]
8,3	13,5	500	810	Середні значення
9,8	13,9	590±100	830±100	Отримані в роботі дані

Проте розраховані в [1–5] енергії змішування істотно відрізняються одна від іншої в межах від 2,5 до 14,0 кДж/моль для La_{1-x}Eu_xPO₄ та від 6,8 до 24,0 кДж/моль для La_{1-x}Gd_xPO₄, у результаті чого розраховані з їх використанням критичні температури розпаду відрізняються відповідно в межах 150–830 та 400–1433°К. Очевидно, що найбільш достовірні результати дає середнє значення. Проте, якщо для La_{1-x}Eu_xPO₄ найбільш близькою до середнього значення (8,3 кДж/моль) є величина, одержана методом Ab initio/strain energy (6,2 кДж/моль), то для La_{1-x}Gd_xPO₄ найбільш близькою до середнього значення (13,5 кДж/моль) є величина, одержана методом Drop solution (11,4 кДж/моль). Отже, жодному з проаналізованих методів неможна надати перевагу.

Тому в роботі для розрахунку енергії змішування було застосовано принципово інший спосіб розрахунку, розроблений В. С. Урусовим на основі кристалоенергетичної теорії ізоморфної змішуваності [6, 7]. За допомогою даного методу було одержано більш близькі до середніх величини енергії змішування для La_{1-x}Eu_xPO₄ та La_{1-x}Gd_xPO₄, які дорівнюють відповідно 9,8 (середнє 8,3) та 13,9 (середнє 13,5) кДж/моль, а критичні температури розпаду відрізняються від середніх в межах похибки методу розрахунку (± 100 К).

Аналогічним чином проведено розрахунок енергій змішування й температур розпаду (стабільноті) твердих розчинів La_{1-x}Ln_xPO₄ зі всіма РЗЕ. Встановлено, що зі збільшенням номеру РЗЕ розраховані енергії змішування й критичні температури розпаду твердих розчинів закономірно зростають, що обумовлено зменшенням іонних радіусів РЗЕ в ряду від Ce до Dy й збільшенням різниці у ступенях іонності хімічного зв’язку в компонентах систем. Побудовано діаграму термодинамічної стабільноті твердих розчинів, яка дозволяє прогнозувати границі заміщення Лантану на РЗЕ за заданою температурою або температуру за заданими границями заміщення. Оцінено температуру переходу твердих розчинів у метастабільний стан. Отримані результати розрахунку можуть бути використані при розробці нових матриць для поглинання радіоактивних відходів, а також лазерних, люмінесцентних і інших матеріалів.

Література

1. Mogilevsky P., Phys. Chem. Miner. **34**, 201–214 (2007).
2. Popa K., Konings R.J.M., Geisler T., J. Chem. Thermod. **39**, 236–239 (2007).
3. Li Y., Kowalski P., Blanca-Romero A., Vinograd V., Bosbach D., J. Solid State Chem. **220**, 137–141 (2014).
4. Kowalski P., Li Y., J. Eur. Ceram. Soc. **36**, 2093–2096 (2016).
5. Neumeier S., Kegler P., Arinicheva Y., Shelyug A., Kowalski P.M., Schreinemachers C., Navrotsky A., Bosbach D., J. Chem. Thermod. **105**, 396–403 (2017).
6. Урусов В.С., Теория изоморфной смесимости. –М: Наука, 1977. 251 с.
7. Urusov V.S., Fortschr. Mineral. **52**, 141–150 (1975).