

SCI-CONF.COM.UA

**MODERN DIRECTIONS
OF SCIENTIFIC RESEARCH
DEVELOPMENT**



**PROCEEDINGS OF XVI INTERNATIONAL
SCIENTIFIC AND PRACTICAL CONFERENCE
SEPTEMBER 7-9, 2022**

**CHICAGO
2022**

MODERN DIRECTIONS OF SCIENTIFIC RESEARCH DEVELOPMENT

Proceedings of XVI International Scientific and Practical Conference

Chicago, USA

7-9 September 2022

Chicago, USA

2022

UDC 001.1

The 16th International scientific and practical conference “Modern directions of scientific research development” (September 7-9, 2022) BoScience Publisher, Chicago, USA. 2022. 369 p.

ISBN 978-1-73981-126-6

The recommended citation for this publication is:

Ivanov I. Analysis of the phaunistic composition of Ukraine // Modern directions of scientific research development. Proceedings of the 16th International scientific and practical conference. BoScience Publisher. Chicago, USA. 2022. Pp. 21-27. URL: <https://sci-conf.com.ua/xvi-mizhnarodna-naukovo-praktichna-konferentsiya-modern-directions-of-scientific-research-development-7-9-09-2022-chikago-ssha-arhiv/>.

Editor

Komarytskyy M.L.

Ph.D. in Economics, Associate Professor

Collection of scientific articles published is the scientific and practical publication, which contains scientific articles of students, graduate students, Candidates and Doctors of Sciences, research workers and practitioners from Europe, Ukraine, Russia and from neighbouring countries and beyond. The articles contain the study, reflecting the processes and changes in the structure of modern science. The collection of scientific articles is for students, postgraduate students, doctoral candidates, teachers, researchers, practitioners and people interested in the trends of modern science development.

e-mail: chicago@sci-conf.com.ua

homepage: <https://sci-conf.com.ua>

©2022 Scientific Publishing Center “Sci-conf.com.ua” ®

©2022 BoScience Publisher ®

©2022 Authors of the articles

TABLE OF CONTENTS

AGRICULTURAL SCIENCES

1. *Martyshuk T. V., Gutyj B. V., Khalak V. I., Sus H. V., Vus U. M.* 9
THE INFLUENCE OF FEED ADDITIVE "BUTASELMEVIT-PLUS"
ON THE PROTEIN SYNTHESIS FUNCTION OF THE LIVER OF
PIGLETTS AT WEANING
2. *Шапакидзе Е. Д.* 14
ГРАД И ПЕРСПЕКТИВЫ БОРЬБЫ С НИМ В МАЛЫХ И СРЕДНИХ
ФЕРМЕРСКИХ ХОЗЯЙСТВАХ

MEDICAL SCIENCES

3. *Bilovol A. M., Havryliuk O. A.* 20
POSTACNE TREATMENT
4. *Davydenko O. M., Lischuk K. O.* 23
SARS COVID19 AS A PATHOGNOMONIC FACTOR OF THE
EMERGENCE, EXCAVATION AND MANIFESTATION OF MENTAL
DISEASES (LITERATURE REVIEW)
5. *Davydenko O. M., Yuzvyk I. S., Vyhnanchuk V. V.* 29
RELEVANCE OF STUDIES OF HUMAN MONKEYPOX VIRUS
6. *Барладин О. Р., Вакуленко Л. О., Храбра С. З., Веремчук О. Д.,
Куцло В.* 32
ДОСЛІДЖЕННЯ ЯКОСТІ ЖИТТЯ ХВОРИХ НА ХРОНІЧНИЙ
БЕЗКАМ'ЯНИЙ ХОЛЕЦИСТИТ У КОНТЕКСТІ ЇХ ФІЗИЧНОЇ
РЕАБІЛІТАЦІЇ
7. *Кудокоцева О. В., Ломакін І. І., Бабійчук Л. В., Бабійчук В. Г.,
Айдарова В. С.* 38
АНТИОКСИДАНТНІ ВЛАСТИВОСТІ КРІОКОНСЕРВОВАНИХ
КЛІТИН КОРДОВОЇ КРОВІ
8. *Луценко І. В., Ушакова М. А., Сухоносів Р. О.* 44
ОСОБЛИВОСТІ КРОВОПОСТАЧАННЯ
ГІПОТАЛАМО - ГІПОФІЗАРНОЇ СИСТЕМИ
9. *Чунь Лю* 47
ВПЛИВ ТРИВОГИ ТА ДЕПРЕСІЇ ПРИ ІНТЕРВАЛЬНОМУ
ХАРЧУВАННІ У ПАЦІЄНТІВ З АРТЕРІАЛЬНОЮ ГІПЕРТЕНЗІЄЮ
ТА ГОЛОВНИМ БОЛЕМ

CHEMICAL SCIENCES

10. *Козуб П. А., Мірошніченко Н. М., Лук'янова В. А., Сирова Г. О.,
Козуб С. М., Мартинюк М. М.* 51
ВИКОРИСТАННЯ СЕРЕДНІХ МОЛЬНИХ ОБ'ЄМІВ ЕЛЕМЕНТІВ
ДЛЯ РОЗРАХУНКУ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ

CHEMICAL SCIENCES

УДК 536.632

ВИКОРИСТАННЯ СЕРЕДНІХ МОЛЬНИХ ОБ'ЄМІВ ЕЛЕМЕНТІВ ДЛЯ РОЗРАХУНКУ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ

Козуб Павло Анатолійович,

к.т.н., доцент

Харківський національний університет радіоелектроніки

Мірошніченко Наталія Миколаївна

к.т.н., доцент

Національний технічний університет

Харківський політехнічний інститут

Лук'янова Вікторія Анатоліївна,

Сирова Ганна Олегівна,

д.фарм.н., професор

Харківський національний медичний університет

Козуб Світлана Миколаївна,

к.т.н., доцент

Харківський національний медичний університет

м. Харків, Україна

Мартинюк Микола Михайлович

старший викладач

Харківський національний університет радіоелектроніки

м. Харків, Україна

Анотація: Проаналізовано можливість використання молекулярних об'ємів речовин для прогнозування теплоємності, ентропії та ентальпії утворення речовин. За допомогою статистичної обробки даних показано, що використання адитивній моделі середніх атомних мольних об'ємів не зменшує точність отриманих залежностей. Встановлено, що точність таких розрахунків для ентропії та теплоємності речовин близька до методу об'ємно-базованої термодинаміки, але є більш простою і універсальною у використанні, а подібна

залежність для розрахунків енергії утворення речовин значно менш точною і може використовуватись тільки для її грубої оцінки.

Ключові слова: середній молярний об'єм, термодинамічні параметри, ентальпія, ентропія, теплоємність, математична залежність.

Одним із методів оцінки термодинамічних параметрів речовин є об'ємно-базована термодинаміка, яка передбачає використання молекулярних об'ємів речовин для прогнозування їх термодинамічних параметрів [1].

Використання молекулярних об'ємів значно спрощує розрахунки таких важливих параметрів як теплоємність, ентропія та ентальпія утворення, але при цьому виникає безліч проблем з отриманням самих молярних об'ємів. Вони можуть бути отримані різними способами і жоден з них не може бути прийнятий як універсальний та винятково надійний [2-6].

Проведені нами дослідження показали, що розраховані за допомогою запропонованої нами моделі [7,8] середні молярні об'єми речовин можуть використовуватись для розрахунків термодинамічних параметрів подібно запропонованим в літературі об'ємам.

Для аналізу було взяті дані для більше 1000 неорганічних та простих органічних речовин, які використовувались раніше для отримання середніх атомних молярних об'ємів (табл.1), які включають в себе не менше 5 речовин з вмістом кожного з хімічних елементів за винятком нових радіоактивних елементів останнього періоду. Середня точність розрахунків середніх молярних об'ємів речовин за цією таблицею з використанням адитивної моделі складає 7% і для 90% речовин не перевищує 15%.

Термодинамічні параметри брались як з літературних джерел [9,10], так і з відкритих баз даних (NIST, CRCT, HSC) і їх аналіз показав, що розбіжність між ними досягає 10%, особливо для відносно рідких сполук.

Таблиця 1

Середні атомні молярні об'єми

Елемент	Молярний атомний об'єм, см ³ /моль		Елемент	Середній молярний атомний об'єм, см ³ /моль		Елемент	Середній молярний атомний об'єм, см ³ /моль	
	середній	розрахунок		Середній	розрахунок		середній	Розрахунок
H	4.1	3.6	Nb	8.8	8.3	Tl	12.5	10.8
He	7.4	6.3	Mo	8.6	8.1	Pb	17.2	16.2
Li	5.4	5.4	Tc	9.3	8.6	Bi	20.4	21.6
Be	4.5	4.5	Ru	8.1	7.7	Po	24.5	27.0
B	4.4	3.6	Rh	7.8	7.4	At	30.0	32.4
C	5.7	5.4	Pd	8.3	7.2	Rn	36.9	37.8
N	5.9	7.2	Ag	11.3	10.8	Fr	30.0	32.4
O	6.7	9.0	Cd	13.0	12.6	Ra	25.0	27.0
F	8.2	10.8	In	11.5	9.0	Ac	17.3	17.1
Ne	13.3	12.6	Sn	15.5	13.5	Th	15.4	15.3
Na	10.9	10.8	Sb	19.1	18.0	Pa	13.8	13.5
Mg	7.8	9.0	Te	23.0	22.5	U	12.4	11.7
Al	7.4	5.4	I	27.5	27.0	Np	11.0	10.8
Si	8.7	8.1	Xe	31.0	31.5	Pu	11.7	11.7
P	10.3	10.8	Cs	27.2	27.0	Am	12.4	12.6
S	12.3	13.5	Ba	22.0	22.5	Cm	13.2	13.5
Cl	14.9	16.2	La	19.4	18.9	Bk	16.2	15.3
Ar	19.2	18.9	Ce	17.4	17.1	Cf	15.0	14.4
K	17.8	16.2	Pr	15.6	15.3	Es	14.9	14.4
Ca	14.5	13.5	Nd	14.1	13.5	Fm	14.8	14.4
Sc	7.9	7.2	Pm	12.6	12.6	Md	14.8	14.4
Ti	6.5	6.3	Sm	13.1	13.5	No	16.0	15.3
V	5.8	6.0	Eu	13.7	14.4	Lr	10.0	8.6
Cr	5.8	5.9	Gd	14.4	15.3	Rf	8.4	7.7
Mn	6.8	6.3	Tb	17.3	17.1	Db	7.6	7.4
Fe	5.5	5.4	Dy	16.0	15.3	Sg	8.0	7.2
Co	4.6	5.1	Ho	15.8	15.3	Bh	8.6	7.7
Ni	4.8	5.0	Er	15.5	15.3	Hs	7.5	6.8
Cu	7.9	7.2	Tm	15.3	15.3	Mt	7.5	6.5
Zn	9.4	9.0	Yb	16.3	17.1	Ds	8.5	6.3
Ga	9.2	7.2	Lu	10.4	9.9	Rg	17.5	18.0
Ge	11.5	10.8	Hf	8.8	9.0	Cn	20.0	19.8
As	14.1	14.4	Ta	7.7	8.7	Nh	14.0	12.6
Se	17.4	18.0	W	8.1	8.6	Fl	20.0	18.9
Br	21.1	21.6	Re	8.7	9.0	Mc	25.0	25.2
Kr	25.1	25.2	Os	7.7	8.1	Lv	30.0	31.5
Rb	21.3	21.6	Ir	7.6	7.8	Ts	36.0	37.8
Sr	16.6	18.0	Pt	8.6	7.7	Og	42.8	44.1
Y	11.4	9.5	Au	14.5	14.4			
Zr	9.8	8.6	Hg	16.4	16.2			

В результаті попереднього регресійного аналізу було встановлено, що найбільш тісний зв'язок середнього молярного об'єму існує для стандартної ентропії, причому коефіцієнт детермінації R^2 при використанні розрахованих середніх мольних об'ємів майже не відрізняється від експериментальних значень.

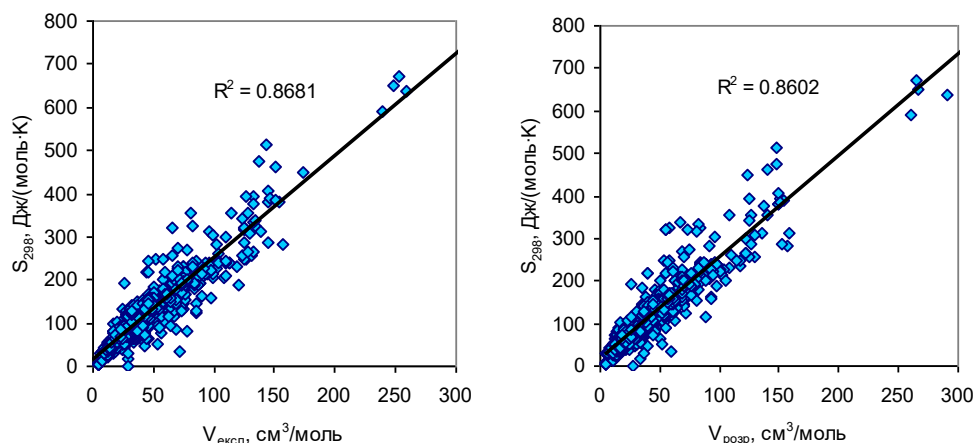


Рис.1. Залежність ентропії від середніх молярних об'ємів речовин

Для розрахунків з середньою точністю ~ 37 Дж/(моль·К) можна використовувати формулу

$$S_{298} = 2.37 \cdot V + 14.1 \quad (1)$$

Де S_{298} - ентропія речовини при 298.15 К, Дж/(моль·К);

V - середній молярний об'єм речовини, см³/моль.

Слід зазначити, що значні відхилення в розрахунках переважно спостерігаються для рідких речовин, кристалогідратів з великою кількістю молекул води і для речовин з різними кристалічними модифікаціями.

Аналогічна залежність, але з меншою точністю присутня і для теплоємності (рис.2).

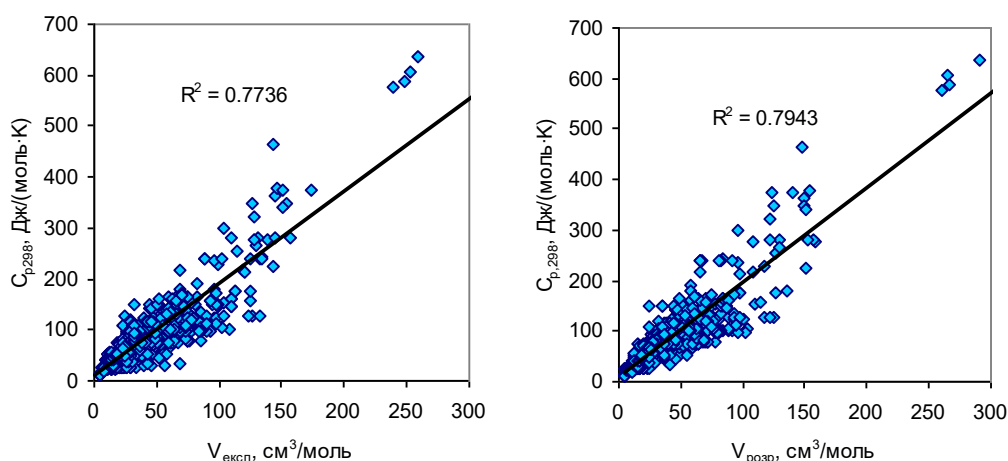


Рис.2. Залежність ізобарної теплоємності від середніх молярних об'ємів речовин

Для розрахунків з середньою точністю ~ 47 Дж/(моль·К) можна

використовувати формулу

$$C_{p,298} = 1.85 \cdot V + 8.34 \quad (1)$$

Де $C_{p,298}$ - ентропія речовини при 298.15 К, Дж/(моль·К);

V - середній молярний об'єм речовини, см³/моль.

Залежність для ентальпії утворення має ще меншу точність і не підтверджує запропоновану у літературі залежність (рис.3), причому ні у вигляді лінійної ні у вигляді ступеневої

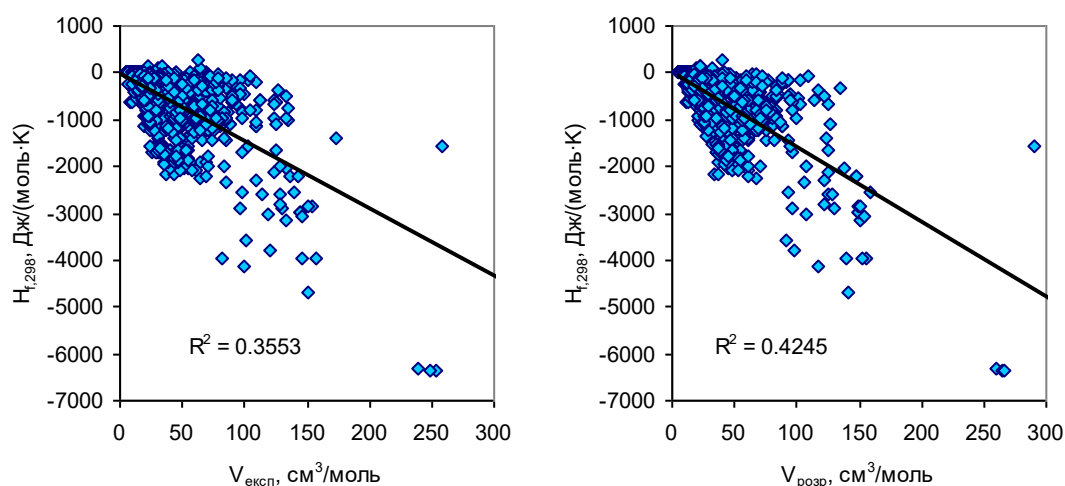


Рис.3. Залежність ентальпії утворення від середніх молярних об'ємів речовин

Але навіть використовуючи її можливо провести оцінку значень ентальпії утворення речовини за формулою

$$H_{f,298} = 12.6 - 15.2 \cdot V \quad (1)$$

Де $H_{f,298}$ - ентальпія утворення речовини при 298.15 К, Дж/(моль·К);

V - середній молярний об'єм речовини, см³/моль.

Причому, як видно з рис.3, точність розрахунків ентальпії утворення при використанні розрахованих значень молярних об'ємів є вищою (більший коефіцієнт множинної регресії R^2), що вказує на можливу більш складну залежність саме від складу речовини.

Таким чином, в результаті проведених досліджень було встановлено можливість використання середніх молярних об'ємів речовин для розрахунку термодинамічних параметрів речовин за допомогою їх середніх молярних

об'ємів оснований на адитивній моделі середніх атомних мольних об'ємів. Показано, що точність таких розрахунків для ентропії та теплоємності речовин близька до методу об'ємно-базованої термодинаміки, але є більш простою і універсальною у використанні. Також показано, що подібна залежність для розрахунків енергії утворення речовин є не точною і може використовуватись тільки для її грубої оцінки.

ВИКОРИСТАНА ЛІТЕРАТУРА

1. L. Glasser, H. D. Jenkins. Volume-Based Thermodynamics: A Prescription for Its Application and Usage in Approximation and Prediction of Thermodynamic Data. *J. Chem. Eng. Data* 2011, 56, 874–880 / [dx.doi.org/10.1021/je100683u](https://doi.org/10.1021/je100683u)
2. P. Ganguly, “Atomic sizes and atomic properties,” *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.*, vol. 41, no. 10, p. 105002, May 2008
3. Ghosh DC, Biswas R. Theoretical calculation of absolute radii of atoms and ions. part 1. the atomic radii. *Int J Mol Sci* 2002; 3: 87-113.
4. A. Houari, “Hall determination of atomic radii,” *Inst. Phys.*, vol. 43, pp. 519–521, 2008.
5. Bondi, A., Van der Waals Volumes and Radii, *J. Phys.Chem.*, 1964, vol. 68, no. 3, pp. 441–451
6. Waber JT, Cromer DT. Orbital radii of atoms and ions. *J Chem Phys* 1965; 42: 4116-23.
7. Козуб П. А., Мігунов В. Л., Мірошніченко Н. М., Лук'янова В. А., Козуб С. М. Обчислення середньої щільності сполук через середні мольні об'єми елементів// *Proceedings of the 13th International scientific and practical conference. CPN Publishing Group. Tokyo, Japan. 2022. Pp. 144-149. URL: <https://sci-conf.com.ua/xiii-mizhnarodna-naukovo-praktichna-konferentsiya-science-innovations-and-education-problems-and-prospects-28-30-07-2022-tokio-yaponiya-arhiv/>.*
8. Козуб П. А., Мігунов В. Л., Мірошніченко Н. М., Лук'янова В. А., Козуб С. М. Математична модель середніх мольних об'ємів елементів.

Proceedings of the 13th International scientific and practical conference. CPN Publishing Group. Tokyo, Japan. 2022. Pp. 150-155. URL: <https://sci-conf.com.ua/xiii-mizhnarodna-naukovo-praktichna-konferentsiya-science-innovations-and-education-problems-and-prospects-28-30-07-2022-tokio-yaponiya-arhiv/>.

9. Landolt-Börnstein: Thermodynamic Properties of Inorganic Material, Scientific Group Thermodata Europe (SGTE), Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1999.

10. Thermodynamic Data for Fifty Reference Elements, NASA-TP-3287, N93-1997, 1993, 240 pages.