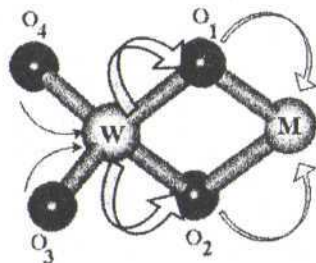


Незначний вміст органічної речовини викликаний перш за все високою інтенсивністю обробки земельної ділянки із відсутнім поповненням органічної складової, а вміст сульфатів може бути зумовлений вмістом таких мінералів, як гіпс або мірабіліт, що підтверджується вмістом кристалізаційної води. Для покращення стану ґрунту можна рекомендувати регулярне внесення органічних добрив. У недалекому майбутньому ми плануємо дослідити стан природної води з цієї ж ділянки.

ОБГРУНТУВАННЯ МЕХАНІЗМУ ПЕРЕНОСУ ЗАРЯДУ В АНІОНІ WO_4^{2-} ПІД ВПЛИВОМ КАТІОНІВ У ВОЛЬФРАМАТОВІСНИХ РОЗТОПАХ

Соловйов В. В., Черненко Л. О., Бондус С. М. (Полтава)

Використання лише традиційних критеріїв для оцінки характеристик і параметрів процесу електровідновлення аніонів складної будови, очевидно, не може дати повну та всебічну інформацію про термодинамічні і кінетичні особливості електрохімічної поведінки аніонів в іонних розтопах. Разом із тим застосування квантово-хімічного підходу до вивчення властивостей взаємодіючих часток розтопу привело до створення теоретико-експериментальної моделі кислотно-основної взаємодії в нітрат-, карбонат-, титан-, вольфраматовісних та інших розтопах [1]. Останнє дозволяє не тільки підтверджувати результати одержаних експериментальних закономірностей, але й прогнозувати тенденції в зміні ряду термодинамічних і кінетичних характеристик електрохімічної поведінки різних аніонів складної будови.



Зважаючи на безсумнівну цінність вольфраму та сполук на його основі в сучасних нанотехнологіях з метою розробки принципів керування процесами переносу заряду в red-oxi реакціях при синтезі наноматеріалів із вольфраматовісних розтопів, у даній роботі зроблена спроба квантово-хімічного обґрунтування механізму переносу заряду в аніоні WO_4^{2-} під впливом катіонів у вольфраматовісних розтопах.

Вивчення міжчасткових взаємодій у вольфраматовісних розтопах неемпіричними квантовохімічними методами проводилося в наближенні Хартрі-Фока з різними базисними наборами (SBK, MINI), розширеними додатковими функціями, з урахуванням поправок на кореляцію електронів методом MP-2 та багатоконфігураційними методами з використанням техніки побудови ефективного гамільтоніану значної розмірності у рамках програмного пакета GAMESS/FIREFLY.

Порівняльний аналіз зарядових характеристик на атомах, за Льовдінім, в "ізолюваному" аніоні WO_4^{2-} і катіонізованих частках $\{\text{M}^n[\text{WO}_4]^{2-n}\}^{(n-2)+}$ ($\text{M}^n = \text{Li}^+, \text{Ca}^{2+}$ та Mg^{2+} ; $n=1-6$) показав, що в процесі катіонізації відбувається перенос заряду з аніона на катіон (рис.1), а ступінь переносу заряду посилюється як зі збільшенням питомого заряду катіона, так і зі зростанням концентрації катіонів.

Рис.3. Концептуальна схема перерозподілу електронної густини в аніоні WO_4^{2-} під впливом одного катіона

Особливо слід підкреслити, що катіон-аніонна взаємодія стимулює прояв донорних властивостей центрального атома W аніона WO_4^{2-} (більших, ніж у атомів кисню) і тому робить його імовірним центром «електронної атаки» поряд із катіонами в red-oxi реакціях електрохімічно активних часток (ЕАЧ) виду $\{\text{M}^n[\text{WO}_4]^{2-n}\}^{(n-2)+}$.

Таким чином, на підставі результатів квантово-хімічного дослідження знайдено вплив катіонного складу на перенос заряду в ЕАЧ у об'ємній фазі розтопу. Виявлена специфічність катіон-аніонних взаємодій аніона WO_4^{2-} з катіонами розплаву, яка доводить, що зовнішньосферна катіонізація аніона WO_4^{2-} додатково стимулює прояв донорних властивостей центрального атома аніона (атома W); а головне «навантаження» у цьому процесі приймають на себе d-орбіталі атома W, що робить його поряд із катіонами центром «електронної атаки» в реакціях електровідновлення ЕАЧ. Отримана інформація щодо механізму переносу заряду на ЕАЧ дозволяє сформулювати концепцію конструювання різних форм і типу ЕАЧ в вольфраматовісних розплавах, створюючи, таким чином, засоби цілеспрямованого керування катодним процесом, який визначає зв'язок між наноструктурою та макрхарактеристиками речовини, тощо.

Література:

1. Шаповал В.И. Электрохимически активные частицы и многоэлектронные процессы в ионных расплавах / В.И.Шаповал, В.В.Соловьев, В.В.Мальшев // Успехи химии. – 2001. – Т.№70. – №2. – С.182–199.

МОЛЕКУЛЯРНА МЕХАНІКА І УТВОРЕННЯ ЛІНІЙНИХ СТРУКТУР НА АТОМНО АНІЗОТРОПНИХ ГРЯНЯХ

Лобурець А.Т., Сененко Н.Б., Заїка С.О. (Полтава)
Стрижеус Д.В., Сененко А.І. (Київ)

«Главную цель предпринимаемых мною исследований составляет соби́рание материалов, необходимых для молекулярной механики. Полагаю, что для успехов этой науки, должествующей в последствии изъяснить нам физические свойства и химические реакции тел, прежде всего необходимо следующие данные:

- 1) вес частиц;
- 2) удельный вес твердых и жидких тел и его изменения от нагревания;
- 3) сцепление тел...

«Изоморфизм», «Удельные объемы». 1860. Цит. по И.С. Дмитриев. «Человек эпохи перемен. Очерки о Д.И. Менделееве и его времени». Санкт-Петербург: Химиздат. 2004, с.44.

Ключовим досягненням у хімії було відкриття періодичної таблиці – універсального "хімічного коду", у якому можна "записати" всі речовини. Завдяки цьому наприкінці минулого століття комп'ютерна хімія завоювала принципові позиції. У 1998 році уперше Нобелівська премія по хімії за розробку обчислювальних методів квантової хімії була присуджена математикові й програмістові Джону Поппу за створення програми Gaussian – комп'ютерного "хімічного конструктора", який дозволяє оцінювати й прогнозувати властивості великих молекул. Звичайно тільки після такого аналізу в більшості випадків стає ясно, чи можна синтезувати сконструйовану дослідниками молекулу, які її властивості та чи варто це робити. Але використання традиційних чисто хімічних методів синтезу таких