

виявляється метод комп'ютерного моделювання. Комп'ютерне моделювання зараз є таким же широко визнаним методом дослідження як і експериментальні та теоретичні методи. З його допомогою на атомному рівні можна ефективно досліджувати не лише надзвичайно швидкі процеси, а й більш тривалі за часом. За допомогою комп'ютерної моделі можна перевірити теоретичні розробки та пояснити і спрогнозувати явища, які ще не висвітлені повною мірою іншими методами дослідження. У своїй роботі при створенні моделі для дослідження швидкоплинних процесів у субмоношарових адсорбованих плівках ми використали метод молекулярної динаміки. Для вирішення наших задач він має ряд переваг у порівнянні з іншими. Кінематика атомів тут описується за допомогою рівнянь Ньютона. Це дозволяє найбільш реалістично моделювати різні процеси в ідеальних кристалічних структурах та реальних, які містять різні дефекти. У теоретичних роботах, як правило, розглядаються ланцюжки атомів у наближенні, яке враховує взаємодію лише найближчих частинок. Але ж часто в кристалах сили міжатомної взаємодії можуть бути далекодіючими. Наприклад, адсорбовані атоми лужних чи лужноземельних елементів на гранях (110) та (112) на вольфрамі і молібдені утворюють за певних умов довгоперіодні структури. Вичерпна інформація про такі структури та причини їх утворення приведена у монографії [3]. У нашій ранній роботі [1] була висловлена гіпотеза про те, що у співадсорбованих плівках літію та стронцію (обидва елементи зазнають диполь-дипольного відштовхування, причому більш сильним є потенціал взаємодії адатомів стронцію) адатоми літію можуть вбудовуватися в ланцюжкові структури стронцію. У випадках захоплення ланцюжками стронцію цілих фрагментів ланцюжків літію, останні зазнають колективних локальних збуджень. При цьому надлишкові до стехіометричної концентрації атоми літію перебувають у газовій фазі.

Література

1. Loburets A.T., Zaika S.A., Naumovets A.G. Influence of coadsorbed strontium atoms on surface diffusion in lithium submonolayer films on tungsten (112) face // *Ukr. J. Phys.* – 2012. – Vol. 57, № 6. – P. 661 – 669.
2. Браун О.М. Модель Френкеля-Конторовой. Концепции, методы, приложения / О.М. Браун, Ю.С. Кившарь. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 536 с.
3. Lyuksyutov I.F. Two-dimensional crystals / Lyuksyutov I.F., Naumovets A.G., Pokrovsky V.L. - Boston: Academic Press, 1992. - 423 p.

УДК 546.226/131/175/657

Н.В. Бунякіна, к.х.н., доцент

О.Г. Дрючко, к.х.н., доцент

«Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»

ПОДВІЙНІ СУЛЬФАТИ, ХЛОРИДИ, НІТРАТИ НЕОДИМУ І АМОНІЮ

Розвиток високих технологій сприяє застосуванню лантаноїдів та їхніх сполук. На основі лантаноїдів одержують багато унікальних матеріалів, котрі знаходять широке застосування у різних галузях науки і техніки. Сполуки

лантаноїдів використовують у каталізі, органічному синтезі, для створення матеріалів із заданими електричними, оптичними і магнітними властивостями. До таких сполук належать сульфати, хлориди й нітрати неодиму, а також його подвійні сполуки з амонієм.

Методом ізотермічної розчинності при 50, 75 та 100°C вивчені системи $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 - \text{Nd}_2(\text{SO}_4)_3 - \text{H}_2\text{O}$ [1] і $\text{NH}_4\text{Cl} - \text{NdCl}_3 - \text{H}_2\text{O}$ [2], в яких виявлені поля кристалізації вихідних солей і подвійних сполук. Методика дослідження наведена у [3].

Так у системі $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 - \text{Nd}_2(\text{SO}_4)_3 - \text{H}_2\text{O}$ в інтервалі температур від 50 до 75°C кристалізується подвійний сульфат $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 \cdot \text{Nd}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$, а вже при 100°C – $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 \cdot \text{Nd}_2(\text{SO}_4)_3$. Це означає, що при підвищенні температури відбувається повне зневоднення октагідрату.

У системі $\text{NH}_4\text{Cl} - \text{NdCl}_3 - \text{H}_2\text{O}$ при 50°C існують тільки поля кристалізації вихідних солей, утворення подвійного хлориду $\text{NH}_4\text{Cl} \cdot \text{NdCl}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ виявлено при 75 – 100°C.

З водного розчину в температурному інтервалі 50 – 100°C синтезовано подвійний нітрат складу $3\text{NH}_4\text{Cl} \cdot 2\text{NdCl}_3$ [4].

Виявлені у досліджуваних системах нові сполуки одержані у монокристалічному вигляді та ідентифіковані хімічним, кристалооптичним, мікрофотографічним, ІЧ-спектроскопічним, рентгенофазовим і, по можливості, рентгеноструктурним методами аналізу.

Отримані результати становлять інтерес для хімії лантаноїдів і можуть бути використані в технології при переробленні складної мінеральної сировини, а також розробленні технологічних регламентів синтезу монокристалів подвійних сульфатів, хлоридів, нітратів неодиму й амонію.

Література

1. Фазовые равновесия в системах $\text{M}_2\text{SO}_4 - \text{Nd}_2(\text{SO}_4)_3 - \text{H}_2\text{O}$ ($\text{M} - \text{K}, \text{NH}_4$) при 50 – 100°C Бунякаина Н.В., Стороженко Д.А., Шевчук В.Г. Журнал неорганической химии, 1990, т. 35, № 4, С. 1016 – 1019.
2. Системы $\text{MCl} - \text{NdCl}_3 - \text{H}_2\text{O}$ ($\text{M} - \text{K}, \text{NH}_4$) при 50 – 100°C Бунякаина Н.В., Стороженко Д.А., Сюсько Ю.В., Шевчук В.Г. Журнал неорганической химии, 1991, т. 36, № 4, С. 1078 – 1081.
3. Phase relations and double salts in triplicate sulphate, nitrate and chloride water systems of alkaline metals and neodymium at 25 and 100 °C. Storozhenko D., Bunyakina N., Dryuchko O., Ivanitskaya I. Humboldt-Conference «Chemistry and life». – Poltava, 2013. P. 39.
4. Peculiarities of transformation ree-containing systems of nitrate precursors in the preparatory process of formation multi-functional of oxide materials / Dryuchko O., Storozhenko D., Bunyakina N., Ivanytska I., Kytaihora K., Khaniukov V. // Electronic Processes in Organic and Inorganic Materials (ICEPOM-11): Conference abstracts, May 21 – 25, 2018. – Ivano-Frankivsk, 2018. – P. 22.