

Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут»
Мішкольцький університет (Угорщина)
Магдебурзький університет (Німеччина)
Петрошанський університет (Румунія)
Познанська політехніка (Польща)
Софійський університет (Болгарія)

Ministry of Education and Science of Ukraine
National Technical University
«Kharkiv Polytechnic Institute»
University of Miskolc (Hungary)
Magdeburg University (Germany)
Petrosani University (Romania)
Poznan Polytechnic University (Poland)
Sofia University (Bulgaria)

**ІНФОРМАЦІЙНІ
ТЕХНОЛОГІЇ:
НАУКА, ТЕХНІКА,
ТЕХНОЛОГІЯ, ОСВІТА,
ЗДОРОВ'Я**

Наукове видання

Тези доповідей
**XXX МІЖНАРОДНОЇ
НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ
MicroCAD-2022**

Харків 2022

**INFORMATION
TECHNOLOGIES:
SCIENCE, ENGINEERING,
TECHNOLOGY, EDUCATION,
HEALTH**

Scientific publication

Abstracts
**XXX INTERNATIONAL
SCIENTIFIC-PRACTICAL
CONFERENCE
MicroCAD-2022**

Kharkiv 2022

174

УДК 004(063)

Голова конференції: Сокол Є.І. (Україна).

Співголови конференції: Герджиков А. (Болгарія), Зарембу К., Єсиновські Т. (Польща), Радун С.М. (Румунія), Стракелян Й. (Німеччина), Хорват З. (Угорщина).

Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доповідей XXX міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2022, 19-21 жовтня 2022 р. / за ред. проф. Сокола Є.І. – Харків: НТУ «ХПІ». – 1107 с.

Подано тези доповідей науково-практичної конференції MicroCAD-2022 за теоретичними та практичними результатами наукових досліджень і розробок, які виконані викладачами вищої школи, науковими співробітниками, аспірантами, студентами, фахівцями різних організацій і підприємств.

Для викладачів, наукових працівників, аспірантів, студентів, фахівців.

Тези доповідей відтворені з авторських оригіналів.

ISSN 2222-2944

© Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут»,
2022

ЗМІСТ

Секція 1. Енергетика, електроніка та електромеханіка	5
<i>1.1 Моделювання робочих процесів в тепло-технологічному, енергетичному обладнанні та проблеми енергозбереження</i>	5
<i>1.2 Електромеханічне та електричне перетворення енергії</i>	33
<i>1.3 Сучасні інформаційні та енергозберігаючі технології в енергетиці</i>	60
<i>1.4 Актуальні проблеми енергетичного машинобудування</i>	97
Секція 2. Актуальні питання механічної інженерії і транспорту	111
<i>2.1 Технологія та автоматизоване проектування в машинобудуванні</i>	111
<i>2.2 Фундаментальні та прикладні проблеми транспортного машинобудування</i>	146
<i>2.3 Нові матеріали та сучасні технології обробки металів</i>	189
<i>2.4 Природоохоронні технології, професійна безпека та здоров'я</i>	230
<i>2.5 Розбудова обороноздатності України</i>	274
Секція 3. Комп'ютерне моделювання, прикладна фізика та математика	302
<i>3.1 Математичне моделювання в механіці і системах управління</i>	302
<i>3.2 Комп'ютерні технології у фізико-технічних дослідженнях</i>	332
<i>3.3 Мікропроцесорна техніка в автоматичці та приладобудуванні</i>	343
Секція 4. Хімічні технології та інженерія	376
Секція 5. Економіка, менеджмент і міжнародний бізнес	490
Секція 6. Медичні науки	640
Секція 7. Міжнародна технічна освіта	662
<i>7.1 Міжнародна технічна освіта: тенденції та розвиток</i>	662
<i>7.2 Сучасні технології в освіті</i>	690
Секція 8. Соціально-гуманітарні технології	695
<i>8.1 Сучасні проблеми гуманітарних наук</i>	695
<i>8.2 Управління соціальними системами і підготовка кадрів</i>	741
<i>8.3 Актуальні проблеми розвитку інформаційного суспільства в Україні</i>	775

РОЗРАХУНОК ТЕМПЕРАТУР ПЛАВЛЕННЯ ВУГЛЕВОДНІВ НА ПІДСТАВІ ПЕРЕДБАЧЕННЯ ЇХ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЇ БУДОВИ

Трегубов Д.Г., Трегубова Ф.Д.

Національний університет цивільного захисту України, Харків

Напрямки використання речовин спираються на їх фізико-хімічні параметри, багато з яких мають коливальний характер зміни у гомологічних рядах. Чергування властивостей «парних-непарних» молекул спостерігаються для температур плавлення $t_{пл}$ та масових швидкостей вигорання [1]. Рентгенівський аналіз виявив в непарних *n*-алканів менш щільну упаковку молекул з більшими міжмолекулярними відстанями. $t_{пл}$ розраховують через серії Агуме та молекулярну масу *M*. Враховують внесок функціональних груп у формування властивостей речовини. Для етану, пропану, *n*-бутану у твердому стані виявлено структури з молекулярною геометрією “прямокутник”, “п’ятикутник”, “шестикутник”, тому пропан упаковано більш щільно і в нього найменша $t_{пл}$. Наявність кластерної будови речовини може пояснити відмінності для «парних» та «непарних» молекул внаслідок різних моделей кластеризації. Для рідкого стану *n*-гексанолу показано наявність ди-, три- та тетрамерів. Циклобутан утворюють димерізацією етилену, вінілацетилен – етіну, бензол – тримерізацією етіну, триметилбензол – пропіну (кластери у рідині існують, а за впливу температури та каталізаторів реакція завершується), циклододекан – гідруванням продуктів циклотримерізації бутадієну у присутності каталізаторів. Можна очікувати, що у рідині існують миттєві кластерні структури, а стабільні – у твердому стані. З’ясування наявності та особливостей кластерної будови речовини допоможе прогнозувати її властивості.

За характерних температур речовин ($t_{пл}$, сублімації, кипіння та ін.) кластери руйнуються на менші стійкі утворення, або розкладаються з безповоротною втратою властивостей. Тоді за $t_{пл}$ стійка макромолекула перетворюється у кластер рідини як імовірнісну структуру, яка постійно перегрупується. Тоді властивості речовини будуть корелювати з кількістю атомів у кластері $n_{с\ екв}$ та його *M*. Така залежність у гомологічному ряду мала б мати плавний або лінійний характер внаслідок стабільної різниці на стандартну ланку ланцюга. Однак у багатьох гомологічних рядах це не працює [1]. Нами пояснено осциляційність властивостей у гомологічних рядах вуглеводнів димерізацією парних та непарних молекул за положенням карбону «1» та «2». Розгляд залежності співвідношення *M* кластеру до $t_{пл}$ у К (для гексамеру метану – 96/90,5) від довжини кластеру не дав кореляції.

Для алканів, алкенів, алкінів та циклоалканів (80 сполук) розроблено апроксимативні формули взаємозв’язку довжини кластеру з $t_{пл}$ та *M*:

$$t_{пл} = 0,0079(n_{с\ екв})^3 - 0,703(n_{с\ екв})^2 + 24,762(n_{с\ екв}) - 305,8, \text{ } ^\circ\text{C}, \quad (1)$$

$$T_{пл} = -4 \cdot 10^{-17} M_{ек}^6 + 4 \cdot 10^{-13} M_{ек}^5 - 10^{-9} M_{ек}^4 + 3 \cdot 10^{-6} M_{ек}^3 - 2,7 \cdot 10^{-3} M_{ек}^2 + 1,492 M_{ек} - 15,9, \text{ K}, \quad (2)$$

$$T_{пл} = 110(0,5n_{с\ екв})^{0,35} - (0,5n_{с\ екв})^{1,2} - 360/n_{с\ екв} + 60M^{0,2} - 158, \text{ K}, \quad (3)$$

Формула (1) має $R^2 = 0,9953$, (2) – $R^2 = 0,9955$. Але за одної довжини кластеру буває різна молярна маса, формула (3) має $R = 0,997$ та середнє відхилення 4,2 К.

Література

1. Tregubov D., Tarakhno O., Sokolov D., Trehubova F. The identification of hydrocarbons cluster structure by melting point. *PES*. 2021. № 34. С. 94–109.