

## ПОЛІОКСОВОЛЬФРАМАТИ КОБАЛЬТУ(II) У ВОДНО-ДМФА РОЗЧИНІ ПРИ $Z = 1,00$

*Шмирко О. В.*, Книжник І. А., Радіо С. В., Розанцев Г. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна  
o.shmyrko@donnu.edu.ua

Розробка та синтез органіко-неорганічних гібридних поліоксовольфраматів набуває актуальності не лише за рахунок низки цікавих структурних особливостей, але й різнобічного застосування у каталізі, медицині, нанотехнологіях. Одна з важливих не вирішених проблем полягає в тому, що деякі з ізополіаніонів присутні як метастабільні проміжні продукти або фрагменти з низькою концентрацією в розчині і їх неможливо стабілізувати або виділити із звичайних реакційних систем. У той же час використання металоорганічних фрагментів може зіграти вирішальну роль у структурній стабілізації метастабільних поліоксовольфраматів.

Були проведені дослідження методом рН-потенціометрії в системі  $\text{Na}_2\text{WO}_4 - \text{HCl} - \text{NaCl} - \text{CoCl}_2 - \text{H}_2\text{O} - \text{ДМФА}$  (10 % v/v), з концентраціями  $\text{Na}_2\text{WO}_4$  ( $C_w = 0,268$  моль/л),  $\text{CoCl}_2$  ( $C_{\text{Co}} = 0,178$  моль/л),  $\text{HCl}$  ( $C_{\text{HCl}} = 0,04$  моль/л). У якості органічного розчинника використовували ДМФА, який додавався у кількості 10 %, іонну силу  $I = 0,25$  (моль/л) в розчині створювали додаванням необхідної кількості 2 моль/л розчину  $\text{NaCl}$  (ч.д.а). Титрування проводили з кроком  $\Delta Z = 0,02$  кислотою і лугом в інтервалах кислотності  $Z = 1,00 - 2,30$  і  $Z = 1,00 - 0,74$  відповідно. Математичне моделювання процесів утворення ІПВА, використовуючи програму CLINP 2.1, полягало в проведенні послідовного пошуку оптимальної моделі. Аналізуючи дані формувалася сукупність найбільш імовірних комплексів, поступово додавались частинки, які покращували розраховані параметри. Підібрана модель, яка має найкращі параметри, та містить наступні частинки:  $\text{Co}^{2+}$  [W<sub>4</sub>O<sub>14</sub>(OH)<sub>2</sub>]<sup>6-</sup> (2), Co(OH)[W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>(OH)<sub>2</sub>]<sup>10-</sup> (3), Co<sup>2+</sup>[W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>(OH)<sub>2</sub>]<sup>10-</sup> (4) та його протоновані форми Co<sup>2+</sup> H[W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>(OH)<sub>2</sub>]<sup>9-</sup> (5), Co<sup>2+</sup>H<sub>2</sub>[W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>(OH)<sub>2</sub>]<sup>8-</sup> (6), Co<sup>2+</sup>H<sub>3</sub>[W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>(OH)<sub>2</sub>]<sup>7-</sup> (7) також [W<sub>12</sub>O<sub>30</sub>(OH)<sub>2</sub>]<sup>6-</sup> (8), [W<sub>12</sub>O<sub>38</sub>(OH)<sub>2</sub>]<sup>5-</sup> (9), H<sub>2</sub>[W<sub>12</sub>O<sub>32</sub>]<sup>2-</sup> (10) (Рис.1).

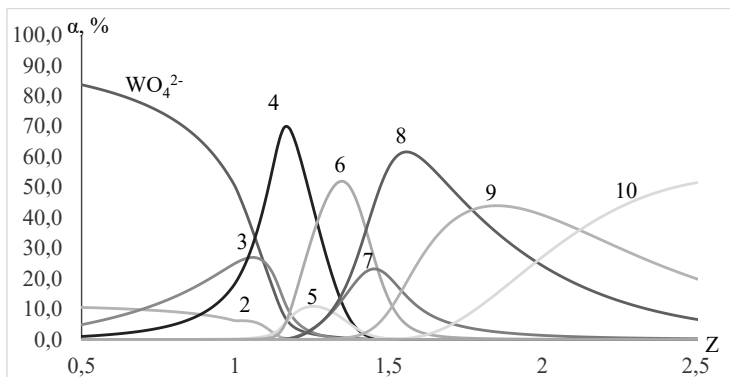


Рис. 1. Діаграма розподілу іонів вольфраму (IV)

Дана модель має низьке значення критеріальної функції (Criterion function)  $CF = 12,00$  та оптимальний критерій адекватності  $\chi^2_{\text{експ.}} = 0,54 \ll \chi^2_{f, \alpha=0,05} = 144,35$  і не є надлишковою.