

Продолжение таблицы 3

	2	3	4	5
NdBa <sub>2</sub> CoMnO <sub>6</sub>				
298,15	243±14	278±8	-	278±8
300	251±15	280±26	500±30	278±25
350	208±13	319±29	13070±800	281±26
400	149±9	342±31	21680±1330	287±26
450	164±10	359±33	28980±1770	294±27
500	203±12	381±35	39600±2420	302±28
550	128±8	394±36	46540±2850	310±28
600	162±10	407±37	53720±3290	317±29
650	209±13	422±38	62960±3850	325±30
675	236±14	430±39	68510±4200	329±30

Таким образом, впервые в интервале температур 298,15–673К исследованы изобарные теплоемкости хромито-манганитов NdM<sub>2</sub><sup>II</sup>CoMnO<sub>6</sub> (M<sup>II</sup>- Sr, Ba). Выведены уравнения, описывающие их зависимости от температуры. У исследуемых соединений обнаружены λ – образные эффекты: при 423 К и 548 К - NdSr<sub>2</sub>CoMnO<sub>6</sub>, при 323 К и 498 К - NdBa<sub>2</sub>CoMnO<sub>6</sub>, относящиеся к фазовым переходам II- рода. Рассчитаны значения термодинамических функций  $H^{\circ}(T)$  -  $H^{\circ}(298,15)$ ,  $S^{\circ}(T)$ ,  $\Phi^{**}(T)$ .

## Литература:

1. Park K., Jang K. U. Improvement in high-temperature thermoelectric properties of NaCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> through partial substitution of Ni for Co // Material Letters. – V. 60. – 2006. – P. 615.
2. Luo X. G., Jing Y. C., Chen H., Chen X. H. Intergrowth and thermoelectric properties in the Bi – Ca – Co – O system // Journal of Crystal Growth. – V. 308. – 2007. – P. 309.
3. Fukutomi H., Iguchi E. Texture development in Bi<sub>1.5</sub>Pb<sub>0.5</sub>Sr<sub>1.7</sub>Y<sub>0.5</sub>Co<sub>2</sub>O<sub>9.8</sub> layered cobaltite by high-temperature compression deformation and its effect on thermoelectric properties // Acta Materialia. – V. 55. – 2007. – P. 4213.
4. Платунов Е.С., Буравой С.Е., Курепин В.В., Петров Г.С. Теплофизические измерения и приборы. – Л.: Машиностроение, 1986. – 256 с.
5. Техническое описание и инструкция по эксплуатации ИТ-С-400. Актюбинск, Актюбинский завод «Эталон», 1986. – 48 с.
6. Robie R.A., Hewingway B.S., Fisher J.K. Thermodynamic Properties of Minerals and Related Substances at 298,15 and (10<sup>5</sup>Paskals) Pressure and at Higher Temperatures. Washington: United States Government Printing Office, 1978. – 456 p.
7. Спиридонов В.П., Лопаткин Л.В. Математическая обработка экспериментальных данных. М.: Изд-во МГУ, 1970. – 221 с.
8. Кумок В.Н. В сб.: Прямые и обратные задачи химической термодинамики. – Новосибирск, Наука, 1987. – 108 с.

## БАЛҚАШ ҚАЛАСЫНЫҢ ЖЫЛУ ЭЛЕКТР ОРТАЛЫҒЫНЫҢ ҚОРШАҒАН ОРТАҒА ӘСЕРІ

Тыкежанова Г.М., б.ғ.к.; Нугуманова Ш.М., м.ғ.к., доцент; Мукашева М.А., б.ғ.д., профессор, Конкабаева А.Е., м.ғ.д., профессор, Казимова А.Е., оқытушы; Расол М., магистрант; Утжанова М.Н., студент

Академик Е.А.Бөкетов атындағы Қарағанды мемлекеттік университеті  
Қарағанды қ., Қазақстан Республикасы

Мақалада Балқаш қаласының жылу электр орталығының әрекеті нәтижесінде қоршаған ортаға әсері қарастырылды. Балқаш ЖЭО өндірістік алаңының территориясы металлургиялық кешен мен «Балқаштүстімет» ӨБ өндірістік алаңдарына жақын болуын ескере отырып, Балқаш ЖЭО атмосфераны ластану деңгейін орташа және қауіптілігі төмен деп есептеуге болады. Ластағыш заттардың 3 классқа жататын уытты қалдықтардың негізгі массасы топырақ жамылғысының қосымша техногендік екіншілік ластануына әкеп соғады. Балқаш қаласының топырағының қорғасын және мырышпен ластануы көрсетілген. Топырақтың мырыш, ванадий металдарымен 1500 м қашықтықта, марганецпен -3000 м қашықтықта ластануы тіркелді.

*Кілт сөздер:* қоршаған орта, ластану, өндіріс өнеркәсібі, атмосфералық ауа, топырақ, шан, металл, су.

Қоршаған ортаның ластануы – қазіргі кезде адамзатты толғандырып отырған аса маңызды мәселелердің бірі болып табылады. Қазақстан Республикасы тұрақты дамудың жаңа жолына түскенде экологиялық білім беру мен тәрбиенің маңызы зор. Бұл президент Н.Ә.Назарбаев ұсынған «2030 стратегиясы» бағдарламасында басты орында [1].

Көптеген әдебиет көздерінде қала агломерацияларының топырақтың морфологиялық қасиеттеріне әсері байқалады. Қалалардағы экология жағдайларын зерттей келе, бұл құбылыстардың көптеп таралып жатқанын ескерген жөн, нәтижесінде топырақтың биологиялық өнімділігі азайып, азып – тозуына ұшырайды және атмосфералық ауаның құрамының бұзылуына алып келеді [2].

Балқаш қаласы - Орталық Қазақстанның ірі өнеркәсіп аймағы. Бұл ауа атмосферасының жоғары деңгейде ластануына және ауданның селитебтік аймағының топырақ, су нысандарының нашарлауына әкелуде. Химиялық ластанулар ауа атмосферасынан жер бетіне түсіп топырақ жамылғысының беткі жазықтығында анықталды, өз кезегінде ластанған топырақ бөлшектері жел арқылы адамның тыныс алу мүшелерінің аймағына толықтай түседі.

Өндірістік орталықтағы топырақтың беткі қабаттарындағы металдар көп жылдық аймақтық ауа ластануының нәтижесі болып табылады. Балқаш қаласының территориясының ауа бассейнінің әрдайым шаң – тозаңмен және газбен ластануы қазіргі таңда жалпы мемлекеттік мәселеге айналып отыр.

Балқаш қаласының өнеркәсіп орындарының көпжылдық қызметі қаланың топырақ жамылғысына, атмосфералық ауа су нысандарының экологиялық жағдайларына кері әсерін тигізіп, қолайсыз жағдайлар тудыруда [3].

Металдардың техногенді таралуының әртүрлілігі табиғи ландшафттарда геохимиялық жағдайларының әркелкілігіне байланысты. Осыған орай, техногенез өнімдерімен ластануды болжау және күтпеген нәтижелердің алдын алу үшін геохимия заңдарын, әртүрлі табиғи ландшафттардағы және геохимиялық жағдайлардағы химиялық элементтердің миграция заңдылықтарын меңгерген жөн.

**Зерттеу мақсаты:** Балқаш жылу электр орталығының қоршаған орта компоненттеріне тигізетін әсерін бағалау.

#### **Зерттеу әдістері және материалдары**

Қала жағдайында ауыр металдардың техногендік эмиссиясы, біріншіден, жанған минералдық отындардың өнімдерінен, металл өңдеу өнеркәсібінің қалдықтарынан, әр түрлі өнеркәсіп салаларының қалдықтары және пайдаланылған көлік газдарының қалдықтарына байланысты жүзеге асырылады.

Ұзақ мерзімдік ауа сынақтарын алу жұмысының ауыртпашылығы және ауа құрамындағы ауыр металдардың сараптамаларының қиындығына байланысты, ірі қалалардың ауыр өнеркәсіптік – селитебті құрылыстардың қала территориясы кеңістігінде таралуы жөнінде сенімді мағлұмат алуға мүмкіндік бермейді.

Қоршаған орта нысандарының қорғасынмен ластануының ластаушы көзі ретінде, қала өнеркәсіп орындарының мінездемесін беру үшін өнеркәсіп қалдықтарының мінездемесі беріліп, өндіріс технологиялары зерттелді. Сонымен қатар, қоршаған орта ластануының деңгейі 7 нысандық бекеттерде жүргізілді (1 – БТКМК - нан 500 м, 2 – БТКМК - нан 1500 м, 3 – БТКМК - нан 3000 м, 4 – ЖЭС, 5 - автобекет, 6 – темір жол вокзалы, 7 - орталық саябақ).

Топырақ жамылғысының ластану деңгейін анықтау үшін 18.11.12 жылы дайындалып бекітілген ҚР Денсаулық сақтау министрлігінің топырақтың, өсімдіктердің және қар жамылғысының ластануын бақылау бойынша әдістемелік нұсқауларына сәйкес қорғасын құрамы анықталды.

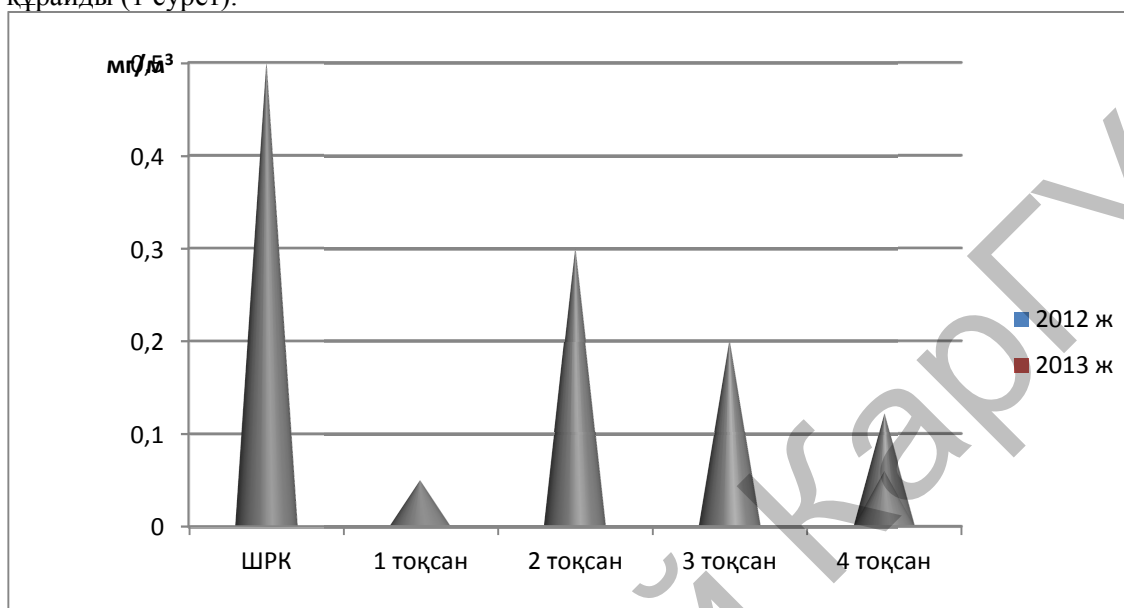
Таңдап алынған алаңнан «конверт» тәсілімен 5 сынақтан тұратын топырақтың аралас үлгілері алынды. Топырақтың 35 сынағы алынды (7 нүктеден 5 сынақтан).

Балқаш қаласының топырағының ауыр металдармен ластануын зерттеу үшін Балқаш қаласының топырақ жамылғысы құрамындағы химиялық элементтерді анықтауда атомдық эмиссия әдісімен сандық және сапалық спектрлі талдау жүргізілді. Аталынған әдіспен 20 – 30-ға жуық химиялық элементтер анықталды [4].

#### **Зерттеулер нәтижелері және оларды талдау**

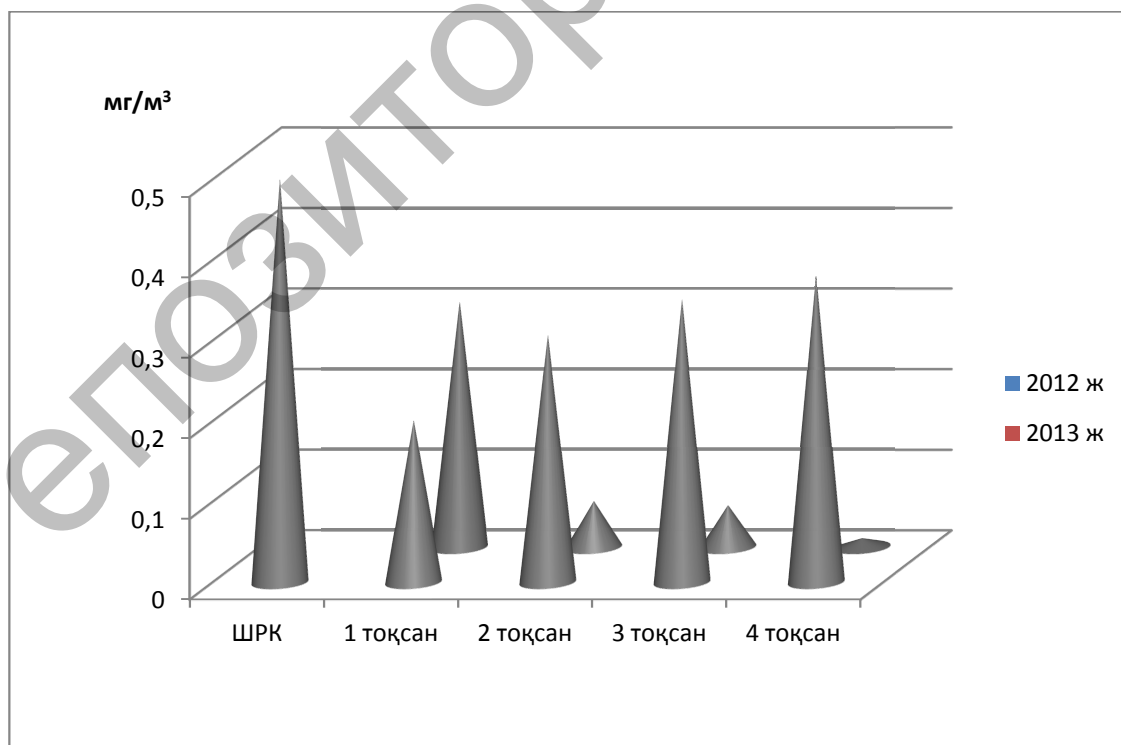
Қазіргі уақытта ЖЭО борлы көмірін жаққан кезде  $\text{NO}_x$  концентрациясы орта есеппен  $600 \text{ мг/м}^3$  құрайды және жекелеген қазандықтарда  $670 - 690 \text{ мг/м}^3$  максималды көрсеткіштерге жетеді. Бұл көрсеткіштер мұндай типті қазандықтардың азот оксидтерін шығару талаптарынан аспайды. Күкірт

оксидтерінің шығарылуы да орнатылған талаптардан аспайды. Балқаш ЖЭО өндірістік алаңы бойынша ластау көздерінен барлығы 18 атаулы ластаушы заттек және зиянды әсерінің қосылу салдары бар заттектердің 3 тобы (азот диоксиды + күкірт диоксиды, күкірт диоксиды + фтор сутек, тозандар) шығарылады. Балқаш ЖЭО ластау көздерінен атмосфераға шығарылатын зиянды қатты заттектердің басым бөлігі 70 - 20%  $\text{SiO}_2$  бейорганикалық тозаңы, оның барлық шығарылуудағы үлесі 44,12 % құрайды (1 сурет).



1 сурет. 2012-2013 ж.ж. «Балқаштүстімет» ӨБ СҚЗ шекарасында атмосфералық ауадағы тозаң мөлшерінің салыстырмалы диаграммасы

Ал газ тәрізді ластаушы заттектердің ішінде күкірт диоксиды басым, оның үлесі - 41,02 % (2 сурет).



2 сурет. 2012-2013 ж.ж. «Балқаштүстімет» ӨБ СҚЗ шекарасында атмосфералық ауадағы күкіртті ангидрид мөлшерінің салыстырмалы диаграммасы

Қазіргі кезде Балқаш ЖЭО атмосфераны негізгі ластаушы көздері күл ұстап қалғыш қондырғылармен жабдықталған. Әр қазандықта Вентури құбырлары бар МВ ОРГРЭС типті ылғалды күлді ұстап қалғыш қондырғылар орнатылған.

Балқаш ЖЭО мен «Балқаштүстімет» ӨБ СҚЗ шекарасы мен аймағында атмосфералық ауада күкіртті ангидрид концентрациясының мөлшері біршама жоғары болды (ШРК 0,5 мг/м<sup>3</sup> болған кезде, ең жоғары концентрация 0,1 - 1,4 мг/м<sup>3</sup>). Күкіртті ангидридтің ШРК-ның жоғары болуы шілде және қыркүйек айларында байқалған.

Тозаның мөлшері, орташа есеппен, қалыпты күйінде болды (шекті ұйғарынды концентрациясы 0,5 мг/м<sup>3</sup> болса, ең жоғары концентрация 0,30 - 0,38 мг/м<sup>3</sup> көрсеткішке ие болды).

Зерттеулер нәтижесі бойынша СҚЗ шекарасында Метталургтер, Әлімжанов көшелері мен қалдық сақтайтын қойманың оңтүстік және шығыс бөліктерінде мыс, қорғасын және азот диоксидінің орташа концентрациялары 2012 жылғы деңгейі бойынша ШРК мөлшерінен аспады.

Өндірістік алаң үшін жекелеген ШРК өлшемінің жоғарылауы сәуір айында өлшенген заттектер бойынша – 1,47 есе, шілде айында азот диоксиді бойынша – 1,5 есе жоғары мөлшері байқалды. Басқа айларда зиянды заттектердің концентрациясы жоғары болған жоқ. Анықталған заттектердің орташа тоқсандық концентрациясы ШРК шегінде болды.

Балқаш ЖЭО өндірістік алаңының металлургиялық кешенінің «Балқаштүстімет» ӨБ өндірістік алаңдарына жақын болуын ескере отырып, Балқаш ЖЭО атмосфераны ластау деңгейін орташа және қауіптілігі төмен деп есептеуге болады.

Жүргізілген зерттеу жұмыстарының сараптамасы бойынша арақашықтыққа қарамастан, барлық дерлік сынақ нүктелерінде топырақ құрамында металдардың шоғырланғаны анықталды. Ең көп мөлшерде металдардың шоғырлануы 500 м арақашықтықта тіркелді, мұнда Cu, Pb, Ni, Co, Cd элементтері көптеп шөккен. Шоғырлану деңгейі ШРК 60-тан 5-ке дейін артық (p<0,01) болған. Ал 1500 м арақашықтықта ұқсас өзгерістер байқалады, мұнда Cu, Pb, Zn, As ШРК 12-ден 2 есеге арттырылған (p<0,01). Өнеркәсіп орындарынан металл санын азайту барысында, ШРК деңгейі төмендеді. Олар мына металдар Cu, Pb, Zn болды, олардың 3000 м ара қашықтықта концентрациясының шектеулі деңгейі 6-дан 1,48 есеге дейін арттырылған (p<0,01).

Топырақтың экологиялық – геохимиялық жағдайы концентрация коэффициенті және қауіптілік концентрациясы коэффициентімен сипатталады. Топырақ жамылғысының ластану деңгейіне баға беру үшін әр элементтің концентрация коэффициенттері есептеледі. Фондық түрінде берілген аймақта бірнеше рет қайталанатын минималды белгілер алынды (1 кесте).

1 кесте

Топырақтағы ауыр металдардың концентрация коэффициенттері (Кк)

ЖЭО – дан қашықтығы	Pb	Cu	Zn	Cd	Cr	V	Ni	Co	Mn	Z <sub>c</sub>
500 метр	37,4	164,1	7,4	1,6	2,1	2,3	1,7	0,7	0,8	206,7
1500 метр	12,6	50,1	3,2	0	0,9	3,1	0,9	0,7	0,9	60,6
3000 метр	7,4	6,4	2,1	0	0,7	3,2	0,8	0,5	2,5	12,3

Топырақтағы концентрация коэффициентінен қорғасын, мыс, мырыш элементтерінің 500 м арақашықтығы аса қауіпті деңгейде екенін байқаймыз. Сонымен қатар қауіпті ластану деңгейі қорғасын мен мыс элементтерінде 1500-3000 м арақашықтықта байқалды. Қала аймағында бұл металдардың топырақта кездесуі фондық мағынасының жоғары болғандығын көрсетеді. Топырақтың ең қауіпті ластануы мырыш және ванадий металдары 1500 м қашықтықта, марганецпен - 3000 м қашықтықта байқалды.

Осыған орай 500 м және 1500 м қашықтықта зерттеліп отырған топырақ жамылғысы металдары жоғары жұтымдылық аймақ болып есептеледі.

Қорғасын бойынша қауіптілік коэффициенті 1500 м 29 есе, 3000 м -16 есе артық көрсеткішке ие.

Ал, мыс бойынша қауіптілік коэффициенті 500 м 108 есе артық, 3000 м -15,8 есе артық, яғни жою барысында көрсеткіштер төмендегені байқалады.

Мырыштың ШРК артық мөлшері (K<sub>0</sub> = 3,9 – 8,0 әртүрлі қашықтықтарда) және никель бойынша (K<sub>0</sub> = 1,2 500 м қашықтықта) көп емес. Ал, қалған химиялық элементтер бойынша топырақтың ШРК мөлшерінен тыс көрсеткіштері барлық аймақта байқалады (2 кесте).

2 кесте

Топырақтағы ауыр металдардың қауіптілік коэффициенттері ( $K_0$ )

ЖЭО – дан қашықтығы	Pb	Cu	Zn	Cd	Cr	Ni	Co	Mn	Z <sub>c</sub>
500 метр	6,2	11,1	9	0,4	0,6	1,5	0,7	0,3	0,5
1500 метр	31	46	7,5	0,5	0,8	0,8	0,8	0,6	0,6
3000 метр	18	16,9	4,1	0,09	0,03	0,7	0,6	0,4	0,09

Алынған нәтижелерді талдай келе, келесі қорытындыға келеміз: барлық ауыр металдардың фондық көрсеткіштері сынақ нүктелерінде мөлшерден тыс, әрі қорғасын, мырыш, мыс және кадмийдің максималды концентрация көлемдері мөлшерден тыс көрсеткішке ие. Топырақтарды сынақтан өткізу барысында алынған көрсеткіштерді үлестіру сараптамасы, халық денсаулығына қатер төндіретін аймақтарды анықтауға мүмкіндік берді. БТКМК-нан 500 м арақашықтықта орналасқан қауіпті аймағы 1- аймақ болып саналады. Сонымен бірге БТКМК-нан- 1500 м қашықтықта орналасқан 2- аймақта қауіптіге саналады. Аймақтағы топырақтың металдар мен ластану градиентінің суммарлы құрамын картаға енгізу барысында, факторлардың генотоксінділік әрекеті болжамының айқындалуын және мутагендік әрекеттердің артуын, суммарлық көрсеткіштердің жоғарылауын анықтап алған жөн.

Балқаш топырақ жамылғысының ластануын өнеркәсіп орындарынан шығарылатын қалдықтармен және өнеркәсіп аудандарында уытты заттардың сақталуымен түсіндіріледі. Қала ортасының ауыр металдармен ластануы, саябақтар мен саяжайлар топырағының ластануына интегралды әсер етеді.

«Қазақмыс Корпорациясы» ЖШС Балқаш ЖЭО өндірістік алаңы Балқаш көлінің кемеріне жақын орналасқан. Өндірістік алаңы мен жаға арасы арқылы тас жол өтеді. Өндірістік алаң бетон дуалмен қоршалған және учаскеде шығару арнасы бар (апатты тоған).

ЖЭО өндірістік алаңының басым бөлігі жобаланған су қорғау зонасына, келесі цехтер мен бөлімдер: қазандық, турбина, электр, химиялық, жылу автоматикасы мен өлшеу, мазут шаруашылығы, автошаруашылық, сонымен қатар «Қазақмыс Корпорациясы» ЖШС Металлургиялық кешенінің майшаруашылығы кіреді.

Ағынды сулардың апатты шығару мүмкіндігі Балқаш ЖЭО жылу алмасу ағынды суларына қосылып, турбина майсалқындатқыштарынан майдың ағып шығуымен байланысты. Мұнай өнімдерін апатты шығарылуының соңғы тіркелген жағдайы 2010 жылы сәуір айында байқалды. Оның себебі турбина цехінде №7 турбина агрегатының, №3 май салқындатқыш түтігі герметикалығының бұзылуына байланысты болды. Мұнай өнімдерінің эмиссия нормативтерінен асуы 1,2 есе болды. Апат кезінде мұнай өнімдерімен ластанған Балқаш ЖЭО ағынды суларының көлемі 288000 м<sup>3</sup> құрады.

Судың минералдану көлемінің жыл мезгіліне байланысты орташа мәні 1674,3 мг/дм<sup>3</sup>, ол 1453 - 1863 мг/дм<sup>3</sup> шамасында өзгеріп отырады.

Катиондық құрамында 33,83 – 240,2мг/дм<sup>3</sup> калий мөлшері 182,4 - 274,17 мг/дм<sup>3</sup> натрий және 92,0 - 117,8 мг/дм<sup>3</sup> магний концентрациясы басым. Аниондардан мөлшері 514 - 797 мг/дм<sup>3</sup> болатын сульфаттар басым. Гидрокарбонатты және хлоридты иондар құрамы бойынша ұксас және 316 мг/дм<sup>3</sup> шамасында болады. Сонымен қатар иондардың қатынасы көпжылдық аспектіде мардымсыз ауытқиды.

Судың оттегімен қанықтығы әсіресе көктем-жаз мезгілінде 51 - 81% және күз-қыс мезгілінде 80 - 100% құрайды. Абсолютті шамада оттегі жазда 5,1 - 8,4 мгО<sub>2</sub>/дм<sup>3</sup>, мұз астындағы кезеңде 10 - 11 мгО<sub>2</sub>/дм<sup>3</sup> мәндерімен сипатталады.

Қорытынды

1. Зерттеулер нәтижесі бойынша Балқаш ЖЭО өндірістік алаңы аумағында жер беті атмосфера қабатындағы азот диоксидінің концентрациясы 2012 жылғы деңгейінде болды және ШРК көрсеткіші анағұрлым төмен. Өндірістік алаң үшін жекелеген ШРК өлшемінің жоғарылауы сәуір айында өлшенген заттектер бойынша – 1,47 есе, шілде айында азот диоксиді бойынша – 1,5 есе байқалды. Балқаш ЖЭО өндірістік алаңының аймағы металлургиялық кешені мен «Балқаштүстімет» ӨБ өндірістік алаңдарына жақын болуын ескере отырып, Балқаш ЖЭО атмосфераның ластану деңгейін орташа және қауіптілігі төмен деп есептеуге болады.

2. Ластағыш заттардың 3-ші класқа жататын уытты қалдықтардың негізгі массасы топырақ жамылғысының қосымша техногендік екіншілік ластануына әкеп соғады. Балқаш қаласы

топырағының қорғасын, мырыш, ванадиймен 1500 м қашықтықта, марганецпен -3000 м қашықтықта ластануы тіркелді.

3. Су түбінде мыс, мырыш, қорғасын бойынша микроэлементтердің жинақталу деңгейі жоғары. Бірақ, аналитикалық мәліметтерге қарағанда, жыларалық аспектіде барлық компоненттер бойынша концентрацияның төмендеуі байқалады. Салыстырмалы талдауға сәйкес, Балқаш көлінің суы мен Балқаш ЖЭО ағынды су сапасының көрсеткіштері бірдей және ШПК сәйкес.

#### Әдебиеттер

1 Назарбаев Н.Ә. Послание Президента Республики Казахстан «Стратегия вхождения Казахстана в число 50 наиболее конкурентноспособных стран мира». – Астана, 2006. – С. 8 – 13.

2 Намазбаева З.И., Дюсембаева Н.К., Мукашева М.А. Климато – метеорологические особенности и экологические аспекты г. Балхаша // Actual problems of ecology. – 2006. –Б. 72 – 74.

3 Мукашева М.А., Айткулов А.М., Тыкежанова Г.М., Нугманова Ш.М., Нурлыбаева К.А. Биогеохимические особенности и экологические аспекты центрального Казахстана // ҚарМУ хабаршысы. –2008. - №5. – Б. 49 – 52.

4 Авалиалы С.Л., Андрионова М.М., Печенникова Е.В., Пономарева О.В. Окружающая среда, оценка риска для здоровья человека (мировой опыт). – М., 1996. – 158 с.

## CALCULATION OF THERMODYNAMIC FUNCTIONS FRACTION OF COAL TAR

\*Feng-yung Ma, PhD; \*\*Baikenov M.I., d.ch.sc., professor;

\*\*\*Akhmetkarimova Zh.S., d.ch.sc., professor; \*\*\*Meiramov M.G., c.ch.sc;

\*\*\*Ordabaeva A.T., c.ch.sc; \*\*\*Bakirova R.K., engineer; \*\*\*Khrupov V.A., c.ch.sc

\*China, Urumqu, Xinjiang University, Lead of Laboratory;

\*\*Academician Y.A.Buketov Karaganda State University;

\*\*\*Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry Kazakhstan  
Karaganda, Republic of Kazakhstan

By the article were calculated entropy, enthalpy and Gibbs energy fraction of coal tar, depending nanocatalysts of hydrogenation process.

*Key words:* Gibbs energy, capacity, enthalpy, entropy, primary coal tar

Chemical reactions are associated with a variety of physical processes: heat transfer, absorption or release of heat absorption or emission of light, electrical phenomena, changes in volume, and others. In chemical reactions are closely related to physical and chemical phenomena, the study of this relationship - the main task of physical chemistry.

Doubtless that the focus in this area of science is given, the identification and study of the laws of chemical processes, the identification of chemical equilibrium, the study of the structure and properties of molecules [1]. This obviously makes it possible to solve the main problem - Prediction of the chemical process and the end result and allows you to control a chemical process. I.e. provide the most rapid and complete his conduct at the highest selectivity.

The search for answers to the question of methods of calculation of kinetic and thermodynamic parameters allowed us to make sure that the main task in the study of chemical processes is to determine the values of the thermodynamic and kinetic parameters: the equilibrium constant, the rate constants, the activation energy of the reaction Gibbs energy, and others.

Currently, to achieve more accurate and rapid determination to solve chemical processes, work is underway to create a relatively simple physical and chemical methods based on theoretical and semi-empirical calculations [2].

In the hydrogenation process of heavy hydrocarbon primary goal - this increase in yield of liquid products by transferring hydrogen compounds which are partially cast their hydrogen atoms to the reaction mixture [3]. Such compounds are called hydrogen donor. As a hydrogen donor solvents can be different fractions of coal tar, oil, heavy oil and its fractions. Thermodynamic calculations allow us to establish the optimal degree of saturation with hydrogen donor molecules [4].

The authors in [5] it is shown that the hydrogen content in the composition of the donor strongly influences the values of its thermodynamic functions and they concluded that the effectiveness of H-donor is not determined by the amount of hydrogen in its composition, and the values of thermodynamic functions.