УДК 536.7.541.1

В. И. Недоступ*, О. В. Недоступ, В. Е. Кузьмин
Физико-химический институт им. А.В. Богатского Национальной академии наук Украины,
Люстдорфская дорога, 86, г. Одесса, 65080, Украина
** e-mail: physchem@paco.net*

СФЕРИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ ТЕХНИЧЕСКИ ВАЖНЫХ ГАЗОВ

Разработан метод построения сферического аналога многоатомной молекулы произвольной конформации, основанный на допущении о свободном вращении молекулы. В основу метода положено определение радиуса инерции, который вычисляется из значений главных моментов инерции.В статье изложена методика расчета главных моментов инерции по данным о конформации молекулы, содержания поворотных изомеров, а также свойств атомов, составляющих молекулу, и свойств валентных связей. Показано, как рассчитывать среднее значение свойства в точке на сфере найденного радиуса инерции. В качестве результатов расчетов приведены сферические характеристики молекул хладагентов метанового и этанового рядов.

Ключевые слова: *реальные газы; молекулы; моменты инерции; поляризуемость; электроотрицательность; дипольные моменты.*

V. I. Nedostup, O. V. Nedostup, V. E. Kuz'min

SPHERICAL MODEL OF POLYATOMIC MOLECULES OF TECHNICALLY IMPORTANT GASES

The method assuming free rotation of molecule for the search of any conformation sphere analog of the polyatomic molecule was developed. This method is based on the determination of inert radius calculated by the value of the principal moments of inertia. Subject to this it is shown how to expect the average characteristic in the point on the sphere of found before radius. The calculation technique of the principal inert moments by the data on the molecule conformation, content of rotary isomers as well as properties of atoms included in molecule and characteristics of valence bonds are reported in the article. Sphere characteristics of refrigerant molecules of methane and ethane series are given as a result of calculation.

Keywords: *real gases; molecules; moments of inertia; electronegativity; dipole moments.*

ОБОЗНАЧЕНИЯ

I — моменты инерции;
m — масса атома;
M — масса молекулы;
r — расстояние от атома до оси вращения;
R — радиус сферы;
x, y, z — координаты центров атомов;
α — поляризуемость связи;
Θ — аналог моментов инерции;
Ω — среднесферическое свойство молекулы.

ИНДЕКСЫ

Подстрочные:

x, y, z, j — для моментов инерции;
conf. — для радиуса инерции.

Надстрочные:

α, э.о., μ — для среднесферических свойств молекулы.

1. ВВЕДЕНИЕ

В том или ином виде сферическое представление многоатомных молекул используется в подавляющем большинстве методов расчета. Это относится к модельным потенциалам межмолекулярного взаимодействия (12-6), exp-6, Кихары, ПСО (потенциал сферической оболочки) и др. Два последних содержат представление о собственном объеме молекулы также сферической формы. Известные теоретические модели уравнения состояния, основанные на функциях распределения, теории групп, а также дырочные, ячеечные приближения для жидкости и мн. др. молекулу рассматривают как сферическую частицу, лишенную внут-

© *В. И. Недоступ, О. В. Недоступ, В. Е. Кузьмин, 2004*