

ВЫБОР АДЕКВАТНОЙ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОЙ КРИВОЙ И ПРОГНОЗ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ЕЕ ОСНОВЕ

Г.Г.Петрик

THE SELECTION OF ADEQUATE INTERMOLECULAR CURVE AND PROGNOSIS OF CRITICAL TEMPERATURE ACCORDING TO IT

G.G.Petrik

Институт проблем геотермии ДНЦ РАН, Махачкала, galina_petrik@mail.ru

Представлены новые результаты исследований в области моделирования энергии взаимодействия многоатомных молекул, полученные благодаря расчетным возможностям модели сферических оболочек. Предложены два способа расчета энергетической координаты точки перегиба межмолекулярной потенциальной кривой (ПК) сферических оболочек; установлено совпадение значений этой координаты с критической температурой. Конкретной адекватной ПК из семейства оболочек отвечает ПК-аналог в семействе Ми ($n-m$), значения индексов которой удается найти.

Ключевые слова: межмолекулярное взаимодействие, потенциал, модель оболочек, точка перегиба потенциальной кривой, прогноз критических параметров, критическая температура

The new research results on modeling of the interaction energy of polyatomic molecules got due to calculation potential of the spherical shell model are presented. In this work two ways of calculating the energy coordinate of the inflection point of the intermolecular potential curve (PC) are proposed; the coincidence in the values of this coordinate and the critical temperature is established. Some adequate PC of the shell group has PC-analogue of the Mie group ($n-m$) for which we found indexes values.

Keywords: intermolecular interaction, potential, shell model, inflection point of a potential curve, prediction of the critical parameters, critical temperature

Введение

Статистическая физика дает возможность рассчитать свойства системы N взаимодействующих частиц, если известна потенциальная энергия U_N последней. Расчет энергии U_N представляет исключительно трудную задачу. В то же время есть основания считать, что определенная доля трудностей связана частично с нашим неумением адекватно использовать уже известную в этой области информацию. Именно такая попытка обобщения модельного подхода при решении вопроса о парном потенциале взаимодействия многоатомных молекул представлена в настоящей работе.

1. Одноатомные молекулы

Только для одноатомных молекул оправдано использование точечного центра в качестве простейшей модели объекта и применение центральных потенциалов (ЦП) для описания энергии взаимодействия. Наиболее известными являются ЦП семейства Ми ($n-m$) [1], которым в этом году исполняется 110 лет:

$$U_{n-m}(r) = a/r^n - b/r^m, \quad (1)$$

где $n > m > 3$, a, b — неопределенные коэффициенты, r — расстояние между центрами взаимодействующих объектов. От вида (1) обычно переходят к другой форме, где коэффициенты a, b выражены через координаты точки M — минимума потенциальной

кривой (ПК) ($U(r_m) = -\varepsilon_m$, экстремум $U'(r_m) = 0$; $U''(r_m) > 0$):

$$U_{n-m}(r) = \frac{\varepsilon_m}{n-m} \left(m \left(\frac{r}{r_m} \right)^n - n \left(\frac{r}{r_m} \right)^m \right).$$

Взаимодействие пары конкретных молекул должно описываться наиболее точно одной ПК из семейства модельных потенциалов U_{n-m} . Считается, что решить эту задачу выбора, пользуясь только молекулярными представлениями, невозможно. Стандартный подход заключается в априорном задании индексов n, m и рассмотрении параметров r_m, ε_m как подгоночных. Подавляющее число работ основано на выборе частной формы потенциала Ми ($n = 12, m = 6$), так называемого потенциала Леннарда-Джонса для атом-атомного (АА) и межмолекулярного взаимодействий. (Включение индексов в число подгоночных параметров сильно усложняет задачу, поэтому только единицы берутся за ее решение [2]). Такой подход заставляет задаться вопросом, насколько вообще важен вопрос о форме модельного потенциала (МП) и какие характеристики молекул (и моделей, их заменяющих) проявляются в форме МП межмолекулярного взаимодействия (ММВ).

Многоатомные молекулы

Моделирование энергии парного взаимодействия многоатомных молекул заставляет решать дополнительно многие вопросы. При этом очевидна важность выбора достаточно адекватной модели для са-

мой молекулы. Самая простая модель в виде *единого* силового центра — *точечный центр* (бесструктурный объект) (см. выше). Самая простая *составная* модель — это *молекула из атомов*, когда сам атом представлен *точечным центром*. В этом случае обычно исходят из идеи аддитивного атом-атомного приближения (ААП), при котором энергия U_M парного ММВ определяется в виде суммы энергий u_{at} парных атом-атомных взаимодействий. Очевидно, здесь определяющим является выбор атом-атомных потенциалов. Существует две точки зрения на проблему. Одни авторы считают, что потенциалы u_{at} универсальны, т.е. зависят лишь от сорта атома. Другие считают, что функция u_{at} должна учитывать, что атомы принадлежат определенным молекулам.

В данной работе мы пытаемся расчетами обосновать правоту второго подхода в рамках модели сферических оболочек [3-5].

Более реалистичный модельный объект также может быть единым и составным. В простейшем случае это *единая* «эффективная» *сфера* определенного диаметра, моделирующая всю молекулу в целом. Потенциалы, в которых явно учтены эти факторы, на практике применяются гораздо реже (потенциалы Кихары [6], Смита—Тэккера [7], Незбеды [8], потенциал сферической оболочки (ПСО) в интерпретации де Рокко, Хувера [5] — с тремя подгоночными коэффициентами). В первых трех моделях индексы n, m фиксированы (12-6). В то же время теперь у модельного объекта есть собственные характеристики — форма и размер, с проявлением которых и должен быть связан характер ММВ, т.е. форма адекватной ПК. Именно это позволяет сделать ПСО.

Модель сферических оболочек оказалась пригодной (в интерпретации Хамана, Ламберта [3,4]) и в случае составной молекулы, представленной набором оболочек, где каждая оболочка моделирует отдельно взятый атом, входящий в состав молекулы. (Подчеркнем, что в [3,4] рассматривалась только суммарная кривая, но не вклады и было найдено, что для всех рассмотренных симметричных глобул ММ МП $n = 28$, $m = 7$).

В наших ранних работах по ПСО [9-12], где были обобщены результаты нескольких известных работ, введена и исследована модель связанного атома-оболочки (размера $d = 2\rho$, ρ — длина химической связи) и впервые было показано, что значения приведенных параметров АА ПСО могут быть *рассчитаны* по полученным нами соотношениям при задании одной (наиболее общей) характеристики модели $g_s = \sigma/d$, которую мы назвали жесткостью оболочки (σ — эффективный размер свободного атома, $u(\sigma = r_0) = 0$, параметр АА МП (12-6)).

В первую очередь полученные соотношения могут быть применены к расчету параметров ПК ММВ симметричных молекул-оболочек (т.е. с незанятым центром) из k одинаковых атомов (типа F_2, P_4, C_{60}). Все связанные атомы в этом случае одинаковы, энергия ММВ в ААП определяется как

$$U_M = k^2 u_{s-s}.$$

Очевидно, что положения минимумов совпадают. Особый интерес представляет расчет глубины ямы, т.е. параметра $\varepsilon_M = k^2 \varepsilon_{s-s}$. В качестве примера в [13] нами была выбрана молекула фуллерена C_{60} , когда приходится учитывать 3600 атом-атомных вкладов. Умножение на k^2 не приводит к нереалистичным значениям энергии, т.к. взаимодействие связанных атомов значительно слабее, чем взаимодействие свободных ($\varepsilon_{s-s} = 0,89676$ К (против 33,18 К для пары свободных атомов углерода, выбранных в [14] Жирифалько).

Факторы формы ПК. ПК-аналоги из разных семейств

На следующем этапе нами была впервые [10,15] введена в явное описание очередная особая точка ПК, о существовании которой упоминает ряд авторов [16,17]. В этой точке $P(r_p, \varepsilon_p)$ выполняются *необходимые и достаточные* условия перегиба функции [18]

$$U(r_p) = -\varepsilon_p, \quad U''(r_p) = 0, \quad U'''(r_p) \neq 0.$$

Были получены формулы для расчета приведенных параметров в виде полиномов g_s . Этот шаг открыл перспективу в возможном решении проблемы обоснованного выбора АПК в семействе Ми ($n-m$). Поясним сказанное. Пять координат трех точек ПК (нуль, минимум, перегиб) позволяют ввести понятия о характеристиках, названных нами факторами формы (ФФ) ПК [19] — крутизна (r_0/r_m), кривизна (r_p/r_m), относительная глубина ($\varepsilon_p/\varepsilon_m$), степень асимметрии, относительная ширина потенциальной ямы — подробно описывающих форму конкретной ПК из семейства ПСО. Очевидно, что в случае совпадения значений соответствующих ФФ двух ПК в двух семействах мы имеем дело с *ПК-аналогами*. Выражения для трех ФФ ПК семейства Ми легко получаются из выражений для потенциалов:

$$\begin{aligned} \frac{r_0}{r_m} &= \left(\frac{m}{n}\right)^{\frac{1}{n-m}} \text{ — крутизна, } \left(\frac{r_p}{r_m}\right)^{n-m} = \frac{(n+1)}{(m+1)} \text{ — кривизна,} \\ \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_m} &= \left(1 + \frac{m}{n+1}\right) \left(\frac{m+1}{n+1}\right)^{\frac{m}{n-m}} \text{ — относительная глубина. (2)} \end{aligned}$$

Отсюда следует, что если для пары молекул в рамках действительно физически обоснованной модели будет найдена адекватная ПК, для которой возможно будет найти значения ФФ ПК, полученные соотношения могут быть применены для обоснованного определения индексов в семействе потенциалов Ми ($n-m$).

Сделаем следующий шаг. Допустим, что при переходе на модельный уровень описания потенциал должен сохранить наиболее фундаментальную информацию о ММВ, в которой отражаются наиболее общие характеристики реальных молекул. Если считать, что ПК, полученная при таком переходе, — *адекватная* модель ММВ, можно предположить, что

этого достаточно для обоснованного поиска корреляций между «фундаментальными» свойствами веществ и координатами «фундаментальных» особенностей межмолекулярных кривых. И потому описанию формы ПК, определению ее параметров и их связи с фундаментальными свойствами вещества должно уделяться гораздо больше внимания, чем в настоящее время, когда в рассмотрение включается только точка минимума ПК, и когда именно с ее координатами связывают все фундаментальные характеристики вещества, в том числе и критические параметры.

Какой потенциал может претендовать на роль физически обоснованного? Очевидно, что априорный выбор ПК исключается — в любом семействе. Первый претендент среди выше рассмотренных — это ПСО (g_s), все параметры и факторы формы которых определяются заданием единственного фактора g_s (см. ниже). Если прямым расчетом ММ ПК удастся обоснованно связать координаты новой особой точки ПК с V_c и T_c , можно будет считать выбор физически обоснованной АПК в первом приближении решенным. Весьма подробно связь V_c с координатами особых точек ПК была исследована нами в [20]. Здесь мы сосредоточимся на прогнозе T_c .

II. Молекулы-глобулы

Очевидно, что в модель оболочек должны вписываться (при допущении свободного вращения) также симметричные молекулы-глобулы, т.е. объекты типа CS_n . Было найдено, что для молекул глобул жесткость g_s меняется в интервале 0,8-1,2. Именно для этого интервала были получены приводимые ниже расчетные формулы. Полиномы получены методом наименьших квадратов, примененным к результатам расчетов, проведенных по общим соотношениям модели оболочек.

1. Параметры АА ПК ПСО как функции фактора g_s

r -координаты трех особых точек ПК (нуль, минимум, перегиб):

$$\begin{aligned} r_0 &= 1,0087 + 0,6841g_s + 0,0393g_s^2 \text{ — нуль,} \\ r_m &= 1,0097 + 0,8124g_s + 0,0368g_s^2 \text{ — минимум,} \\ r_p &= 1,2078 + 0,6985g_s + 0,09999g_s^2 \text{ — перегиб.} \end{aligned} \quad (3)$$

ε -координаты двух особых точек ПК (минимум, перегиб):

$$\varepsilon_s^* = -0,0439 + 0,0829g_s + 0,10208g_s^2 \text{ — минимум} \quad (4)$$

$$\varepsilon_p^* = -0,0355947 + 0,0688g_s + 0,079837g_s^2 \text{ — перегиб.} \quad (5)$$

2. Факторы формы ПСО как функции «жесткости» оболочки g_s

$$\text{крутизна: } r_0/r_m = 0,9654 - 0,0339g_s, \quad (6)$$

$$\text{кривизна: } r_p/r_m = 1,0341 + 0,0343g_s. \quad (7)$$

Расчет ε -координаты точки перегиба на основе расчета межмолекулярной ПК

Здесь мы приводим и анализируем результаты прямых расчетов ПК, описывающих взаимодействие молекул-глобул. Полная энергия взаимодействия

двух симметричных молекул типа CS_n в ААП запишется в виде суммы:

$$U_{m-m} = n^2 u_{s-s}^* + 2n u_{s-c}^* + u_{c-c}^*. \quad (8)$$

Как было показано [9-11,13], в нашей модели входящие в (8) потенциалы учитывают, что взаимодействующие атомы входят в состав «квазижестких» молекул ($d = 2r$) и по своим свойствам отличаются от свойств тех же, но свободных атомов ($\sigma, \varepsilon, \text{МП}$ (12-6)). Приведем выражения для энергий трех типов атом-атомных взаимодействий, определяемых положением атома в молекуле:

ПСО — потенциал взаимодействия пары атом-оболочек:

$$\frac{u_{s-s}}{\varepsilon_{12-6}} = u_{s-s}^* = 4 \left[\frac{g_s^{12}}{90} \frac{P^{*(9)}}{r^*} - \frac{g_s^6}{12} \frac{P^{*(3)}}{r^*} \right],$$

$$P^{*(N)} = (r+d)^{-N} + (r-d)^{-N} - 2r^{-N}, \quad r^* = r/d, \quad P^{*(N)} = P^{(N)} d^N;$$

функция, описывающая взаимодействие центра с атомом-оболочкой:

$$u_{s-c}^* / \varepsilon_{12-6} = 4\sqrt{\beta} \left[\frac{g_s^{12}}{10} \left(\frac{\alpha+1}{2} \right)^{12} \frac{F^{*(10)}}{r^*} - \frac{g_s^6}{4} \left(\frac{\alpha+1}{2} \right)^6 \frac{F^{*(4)}}{r^*} \right], \quad (9)$$

где $F^{*(N)} = F^{(N)} d^N$, $F^{(N)} = (r-d/2)^{-N} - (r+d/2)^{-N}$.

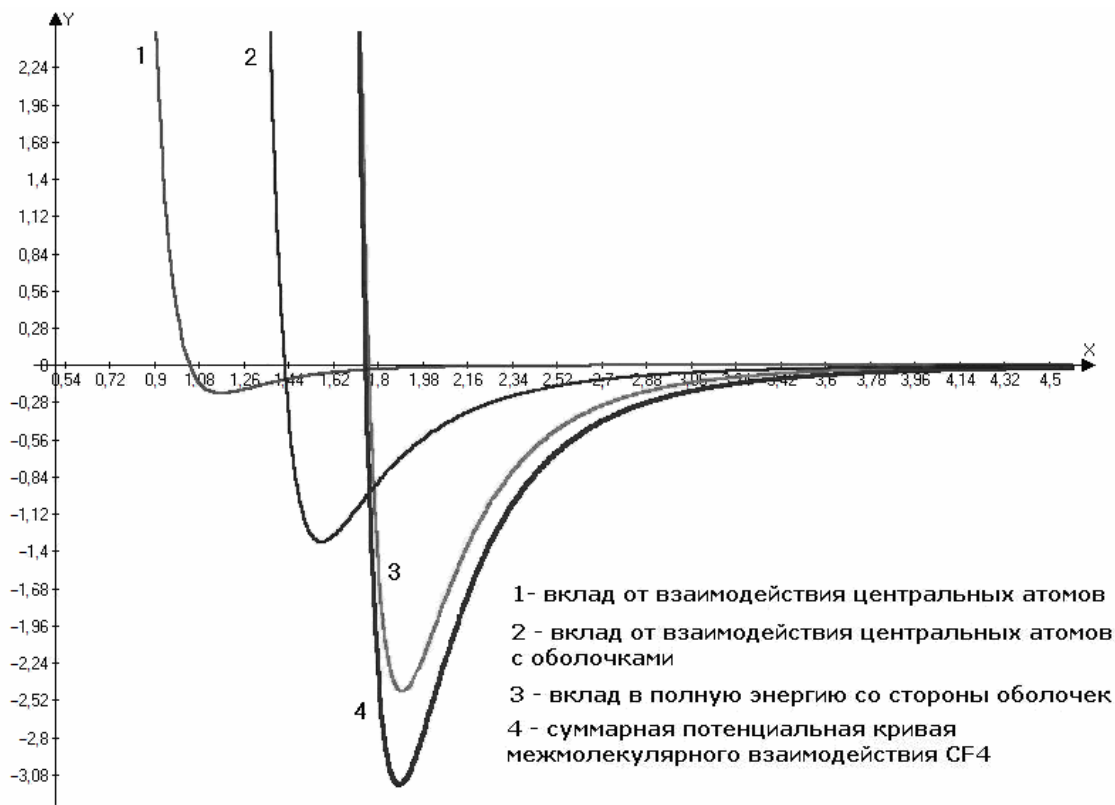
При оценке параметров ε', σ' «смешанной» ПК применялись обычные правила $\sigma' = (\sigma + \sigma'')/2$, $\varepsilon' = (\varepsilon\varepsilon'')^{1/2}$; взаимодействие центральных атомов (потенциал (12-6)) пары молекул:

$$u_{c-c}^* = \frac{u_{(12-6)}}{\varepsilon_{(12-6)}} = 4\beta \left[\frac{g_s^{12}}{r^{*(12)}} \frac{\alpha^{12}}{r^{*(6)}} - g_s^6 \frac{\alpha^6}{r^{*(6)}} \right].$$

Диаметр оболочки d служит естественной единицей измерения расстояний, а в качестве единицы измерения энергий выбран параметр ε ААВ внешних атомов, когда они свободны (т.е. МП (12-6)). При этом в выражения потенциалов входят безразмерные величины α и β , соответственно определяющие отношение размеров внутреннего и внешнего атомов и отношение их же энергетических параметров. При переходе от σ' к σ получим $\sigma' = \sigma(1 + \frac{\sigma''}{\sigma})/2 = \sigma(1 + \alpha)/2$ и $g'_s = \sigma'/d = g_s(1 + \alpha)/2$. Для связи энергетических параметров ААВ разных типов получим: $\varepsilon'' = \beta\varepsilon$, $\varepsilon' = \varepsilon\sqrt{\beta}$, где $\beta = \varepsilon''/\varepsilon$.

Апробация расчетной методики

На рисунке представлены результаты расчетов отдельных вкладов и полной энергии взаимодействия пары молекул четырехфтористого углерода CF_4 . Видно, что основной вклад в результирующую кривую U_M вносит взаимодействие внешних атом-оболочек, следовательно, именно этим определяется наблюдаемое подобие формы ПК. Видно также, что вклад от взаимодействия центральных атомов весьма мал на расстояниях, представляющих интерес. Для суммарной ПК была найдена точка перегиба, определена ее координата ε_p^* и проведено сравнение ее с критической температурой.

Три отдельных вклада и суммарная ПК для молекул CF₄ (модель оболочек)

Исходная информация [21] для CF₄: $g_s = 1,043$ ($\sigma_F = 2,765$, $d = 2,65$); $\alpha = 1$ ($\sigma_c = 2,77$); $\beta = 0,21$ ($\varepsilon_F/k_B = 90,7$, $\varepsilon_C/k_B = 19,0$); (ААП (12-6)).

Расчет (по графику): $\varepsilon_p^* = 2,4538$; $\varepsilon_p/k_B = 90,7\varepsilon_p^*$; $\varepsilon_p/k_B = 222,56$ К; $T_c = 227,6$ К (эсп.) [22]. Точность прогноза критической температуры: $\Delta T_c = 1,9\%$.

Подобный расчет был проведен также для SF₆, шестифтористой серы.

Исходная информация [21] для SF₆: $g_s = 0,88$ ($\sigma_F = 2,765$, $d = 3,14$); $\alpha = 1$ ($\sigma_S = 2,77$); $\beta = 0,39$ ($\varepsilon_F/k_B = 90,7$, $\varepsilon_S/k_B = 35,4$).

Расчет (по графику, не приведен) дает: $\varepsilon_p^* = 3,5072$; $\varepsilon_p/k_B = 90,7\varepsilon_p^*$; $\varepsilon_p/k_B = 318,1$ К, $T_c = 318,7$ К (эсп.) [22]. Точность прогноза критической температуры: $\Delta T_c = 0,1\%$.

Прогноз критической температуры по расчетным формулам модели оболочек

С учетом очевидной важности найденного соотношения остановимся на анализе рисунка.

Прямыми расчетами в [9-11] нами было найдено, что для двух ПК (на рисунке — это суммарная межмолекулярная ПК и вклад, вносимый всеми оболочками) имеет место подобие формы. На этом основании мы попытались описать результирующую межмолекулярную ПК также с помощью потенциала сферических оболочек. Координаты новой ПК были найдены из следующих соображений: в применяемом ААП под-

ходе положения нулей и минимумов этих кривых, очевидно, совпадают, а глубина ямы определяется двумя вкладами: $\varepsilon_M = n^2\varepsilon_{S-S} + 2nu_{s-C}(r^* = r_m^*)$, где первый вносят взаимодействующие оболочки (это минимум соответствующей ПК), а второй равен вкладу от взаимодействия оболочек с центрами на расстоянии, фиксирующем минимум обеих кривых. В ходе расчетов и сравнения с известной информацией было показано, что методика себя полностью оправдала [11].

Применим теперь тот же подход для прогноза $(\varepsilon_p^u)_M$ — координаты точки перегиба ММ ПК. Считаем, что совпадают r -координаты всех трех особых точек двух ПК — нуль, минимум, перегиб. Для расчета координаты r_p^u имеем формулу (3). Значение параметра $(\varepsilon_p^u)_M$ для результирующей кривой найдем как сумму двух вкладов:

$$(\varepsilon_p^u)_M = n^2(\varepsilon_p^u)_{S-S} + 2nu_{s-C}(r^* = r_p^{*u}). \quad (10)$$

Первый вклад рассчитываем по формуле (5). Поправку к значению «оболочечного» параметра ε_p находим, приравняв ее значению функции u_{s-c} взаимодействия центров с оболочками по виду (9) при расстоянии $r = r_p^u$.

Проверка методики расчетов по формулам

CF₄, $n = 4$. Расчеты дают: $r_p^u = 2,03$. Взаимодействие оболочек вносит вклад: $-178,5$ К. Взаимодействие типа оболочка-центр при $r = r_p^u$ вносит вклад, равный

–31,82. Сумма двух вкладов: $(\epsilon_p^u)_M = -210,3$ К (взаимодействие центров внесло бы малый вклад = –1,36 К). Точность прогноза критической температуры: (227,6 К) — 7,6%.

SF₆, $n = 6$. Результат расчета: $r_p^u = 1,87$. Взаимодействие оболочек вносит вклад: –283,42. Взаимодействие типа оболочка-центр при $r = r_p^u$ вносит вклад, равный –41,24. Сумма двух вкладов: $(\epsilon_p^u)_M = -324,66$ К. Точность прогноза T_c : (318,7 К) — 1,8%.

Расчеты по формулам модели оказываются менее точными, чем по результирующим потенциальным кривым. Однако в качестве прогноза, дающего приемлемую точность (причем в модели нет подгоночных параметров), он вполне может быть применен. Следовательно, при наличии достоверной исходной информации, относящейся к молекулярному уровню описания, возможен корректный прогноз критической температуры на основе предложенной методики.

За неимением места мы не имеем возможности так же подробно представить результаты, относящиеся к решению проблемы выбора адекватных ПК, в том числе ПК-аналогов в семействе Ми. Методика основана на применении полученных для факторов формы выражений, связывающих крутизну и кривизну ПК с индексами n , m МП Ми и жесткостью g_s сферической оболочки ПСО:

Связь индекса n ПК Ми с фактором g_s ПСО

через крутизну r_0/r_m для $m = 6$:
 $n = 51,87158 - 24,41306g_s$, (11)

через кривизну r_p/r_m для $m = 6$:
 $n = 50,8262 - 23,91401g_s$. (12)

Связь факторов формы с индексом n

для $m = 6$: $r_0/r_m = 0,89336 + 0,00139n$;
 $r_p/r_m = 1,10709 - 0,00143n$, (13)

а также общим уравнением, связывающим все факторы формы

$$\frac{\epsilon_p}{\epsilon_M} \left(\frac{r_p^u}{r_m} \right)^m \left(\frac{n+1}{m+n+1} \right) = 1. \quad (14)$$

В результате был сделан *важный вывод*, что все параметры ПК и индексы не могут считаться независимыми величинами и, как следствие, не могут задаваться произвольно. Из (14) следует, что априорное задание формы ПК Ми, т.е. индексов, должно привести к определенному произволу в задании ФФ. В свою очередь, это приведет к отклонению при прогнозе фундаментальных характеристик вещества, образованного из конкретных молекул, поскольку именно в значениях ФФ должна проявляться наиболее общая физическая характеристика реальной молекулы. Проверка для конкретных веществ это подтвердила.

Выводы

Жесткость оболочки g_s оказывается фактором, весьма чувствительным при прогнозе критиче-

ских параметров — температуры и критического молярного объема. Установленные соотношения можно рассматривать как подтверждение высказанного нами предположения о связи фундаментальных свойств «реальной» поверхности потенциальной энергии ММВ и адекватных ПК, которые проявляются в фундаментальных характеристиках вещества. За неимением места мы не приводим простые физические обоснования установленных совпадений, но отсылаем к нашей работе [23]. Поскольку для модели оболочек все параметры могут быть рассчитаны, рассмотренный метод выбора формы АПК является чисто прогностическим, отличаясь от известных, которые опираются на информацию о свойствах вещества, но не молекул. Полученные результаты также подтверждают тот факт, что жесткость оболочки, являясь управляющим параметром модели и отражая факт электронно-ядерного устройства молекул, представляет максимально-информационный фактор (МИФ) объекта [24], возможности которого далеко не исчерпаны.

Часть результатов получена при поддержке гранта РФФИ (09-08-96521).

1. Mie G. Zur Kinetischen Theorie der einatomigen Körper // Annalen der Physik. 1903. №11. S.657-672.
2. Магомедов М.Н. Изучение межатомного взаимодействия, образования вакансий и самодиффузии в кристаллах. М.: Физматлит, 2010. 544 с.
3. Hamann S.D., Lambert J.A. The Behaviour of Fluids of quasi-spherical Molecules I. Gases at low densities // Austr. J. Chem. 1954. V.7. P.1-17.
4. Lambert J.A. The Potential between pairs of quasi-spherical Molecules // Austr. J. Chem. 1959. №12. P.109-113.
5. De Rocco A.G., Hoover W.G. Second virial Coefficient for the spherical shell Potential // J. Chem. Phys. 1962. V.36. №4. P.916-926.
6. Kihara T. Virial coefficients and models of molecules in gases // Rev. Mod. Phys. 1953. V.25. №4. P.831-843.
7. Thakkar A.Z., Smith V.A. Atomic interactions in the heavy Noble gases // Mol. Phys. 1977. V.27. №1. P.191-208.
8. Nezbeda I. Simple pair potential model for real fluids. III. Parameter determination and a revised model for spherical molecules // Czech.J.of Phys. 1981. V.31. №6. P.563-572.
9. Петрик Г.Г., Алибеков Б.Г. Связь потенциала сферической оболочки с потенциалом Ми (m-n). Критерий выбора индексов (m-n). Расчёт параметров // Журн. физ. химии. 1987. Т.61. №5. С.1228-1234.
10. Петрик Г.Г., Тодоровский Б.Е. Потенциал сферической оболочки. Общие соотношения между параметрами потенциалов взаимодействия свободных и связанных атомов // Журн. физ. химии. 1988. Т.62. №12. С.3257-3263.
11. Алибеков Б.Г., Петрик Г.Г., Гаджиева З.Р. Расчет параметров потенциала сферической оболочки молекул. Учет взаимодействий с центральным атомом // Журн. физ. химии. 1985. Т.59. №8.-С.1974-1978.
12. Петрик Г.Г. Расчет параметров межмолекулярного взаимодействия для потенциала сферической оболочки. Двухатомные молекулы / Теплофизические свойства веществ в конденсированном состоянии. Махачкала. Даг. ФАН СССР. 1982. С.123-129.
13. Петрик Г.Г. О некоторых возможностях модели сферических оболочек в атом-атомном приближении // Мониторинг. Наука и технологии. 2012. №1(10). С.86-98.
14. Girifalco L.A. Molecular Properties of C₆₀ in the gas and solid phases // J. Phys. Chem. 1992. V.96. P.858-861.
15. Петрик Г.Г., Тодоровский Б.Е., Гаджиева З.Р. О возможности расчета критических параметров (T_c, V_c) вещества на основе информации о взаимодействии обра-

- зующих его молекул // Химия и компьютерное моделирование. Бултеровские сообщения. Спецвыпуск №10. 2002. С.301-304.
16. Недоступ.В.И., Галькевич Е.П. Расчет термодинамических свойств газов и жидкостей методом идеальных кривых. Киев: Наукова думка, 1986. 196 с.
 17. Макс Борн, Хуанг Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. Л., 1958. 488 с.
 18. Никольский С.М. Курс математического анализа. М.: Наука, 1983. 464 с.
 19. Петрик Г.Г. К вопросу о выборе формы потенциалов межчастичного взаимодействия на основе молекулярной информации // Мониторинг. Наука и технологии. 2012. №2(11). С.71-83.
 20. Петрик Г.Г. Об иерархии связей критического молярного объема веществ с эффективными собственными объемами молекул в особых точках межмолекулярных кривых // Мониторинг. Наука и технологии. 2012. №4(13). С.80-92.
 21. McKinley M.D., Reed T.M.III. Intermolecular Potential-Energy Functions for pairs of Simple Polyatomic Molecules // J. Chem. Phys. 1965. V.42. №11. P.3891-3899.
 22. Филипов Л.П. Подобие свойств веществ. М.: Изд-во МГУ, 1978. 255 с.
 23. Петрик Г.Г., Гаджиева З.Р. Однопараметрическое семейство уравнений состояния на основе модели точечных центров и его связь с однопараметрическим законом соответственных состояний // Мониторинг. Наука и технологии. 2010. №1(2). С.67-78.
 24. Петрик Г.Г. О системном подходе к моделированию объектов и их свойств на молекулярном и термодинамическом уровнях // Мониторинг. Наука и технологии. 2011. №2(7). С.86-101.

Bibliography (Transliterated)

1. Mie G. Zur Kinetischen Theorie der einatomigen Körper // Annalen der Physik. 1903. №11. S.657-672.
2. Magomedov M.N. Izuchenie mezhatomnogo vzaimodejstvija, obrazovanija vakansij i samodiffuzii v kristallah. M.: Fizmatlit, 2010. 544 s.
3. Hamann S.D., Lambert J.A. The Behaviour of Fluids of quasi-spherical Molecules I. Gases at low densities // Austr. J. Chem. 1954. V.7. P.1-17.
4. Lambert J.A. The Potential between pairs of quasi-spherical Molecules // Austr. J. Chem. 1959. №12. P.109-113.
5. De Rocco A.G., Hoover W.G. Second virial Coefficient for the spherical shell Potential // J. Chem. Phys. 1962. V.36. №4. P.916-926.
6. Kihara T. Virial coefficients and models of molecules in gases // Rev. Mod. Phys. 1953. V.25. №4. P.831-843.
7. Thakkar A.Z., Smith V.A. Atomic interactions in the heavy Noble gases // Mol. Phys. 1977. V.27. №1. P.191-208.
8. Nezbeda I. Simple pair potential model for real fluids. III. Parameter determination and a revised model for spherical molecules // Czech J. of Phys. 1981. V.31. №6. P.563-572.
9. Petrik G.G., Alibekov B.G. Svjaz' potenciala sfericheskoj obolochki s potencialom Mi (m-n). Kriterij vybora indeksov (m-n). Raschjot parametrov // Zhurn. fiz. himii. 1987. T.61. №5. S.1228-1234.
10. Petrik G.G., Todorovskij B.E. Potencial sfericheskoj obolochki. Obshhie sootnoshenija mezhdru parametrami potencialov vzaimodejstvija svobodnyh i svjazannyh atomov // Zhurn. fiz. himii. 1988. T.62. №12. S.3257-3263.
11. Alibekov B.G., Petrik G.G., Gadzhieva Z.R. Raschet parametrov potenciala sfericheskoj obolochki molekul. Uchet vzaimodejstvij s central'nym atomom // Zhurn. fiz. himii. 1985. T.59. №8.-S.1974-1978.
12. Petrik G.G. Raschet parametrov mezhmolekuljarnogo vzaimodejstvija dlja potenciala sfericheskoj obolochki. Dvuhatomnye molekuly / Teplofizicheskie svojstva veshhestv v kondensirovannom sostojanii. Mahachkala. Dag. FAN SSSR. 1982. S.123-129.
13. Petrik G.G. O nekotoryh vozmozhnostjah modeli sfericheskih obolochek v atom-atomnom priblizhenii // Monitoring. Nauka i tehnologii. 2012. №1(10). S.86-98.
14. Girifalco L.A. Molecular Properties of C60 in the gas and solid phases // J. Phys. Chem. 1992. V.96. P.858-861.
15. Petrik G.G., Todorovskij B.E., Gadzhieva Z.R. O vozmozhnosti rascheta kriticheskikh parametrov (T_c , V_c) veshhestva na osnove informacii o vzaimodejstvii obrazujushchih ego mo-lekul // Himija i komp'juternoe modelirovanie. Butlerovskie soobshhenija. Specvypusk №10. 2002. S.301-304.
16. Nedostup.V.I., Gal'kevich E.P. Raschet termodinamicheskikh svojstv gazov i zhidkostej metodom ideal'nyh krivyh. Kiev: Naukova dumka, 1986. 196 s.
17. Maks Born, Huang Kun'. Dinamicheskaja teorija kristallicheskih reshetok. L., 1958. 488 s.
18. Nikol'skij S.M. Kurs matematicheskogo analiza. M.: Nauka, 1983. 464 s.
19. Petrik G.G. K voprosu o vybore formy potencialov mezhdzas-tichnogo vzaimodejstvija na osnove molekuljarnoj informacii // Monitoring. Nauka i tehnologii. 2012. №2(11). S.71-83.
20. Petrik G.G. Ob ierarhii svjazej kriticheskogo moljarnogo ob#ema veshhestv s jeffektivnymi sobstvennymi ob#emami molekul v osobyh tochkah mezhmolekuljarnykh krivyh // Monitoring. Nauka i tehnologii. 2012. №4(13). S.80-92.
21. McKinley M.D., Reed T.M.III. Intermolecular Potential-Energy Functions for pairs of Simple Polyatomic Molecules // J. Chem. Phys. 1965. V.42. №11. P.3891-3899.
22. Filipov L.P. Podobie svojstv veshhestv. M.: Izd-vo MGU, 1978. 255 s.
23. Petrik G.G., Gadzhieva Z.R. Odnoparametricheskoe semejstvo uravnenij sostojanija na osnove modeli tochechnykh centrov i ego svjaz' s odnoparametricheskim zakonom sootvetstvennyh sostojanij // Monitoring. Nauka i tehnologii. 2010. №1(2). S.67-78.
24. Petrik G.G. O sistemnom podhode k modelirovaniju ob#ektov i ih svojstv na molekuljarnom i termodinamicheskom urovnjah // Monitoring. Nauka i tehnologii. 2011. №2(7). S.86-101.