Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 11

ТВЕРЬ 2019

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – Вып. 11. – 680 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2019

© Тверской государственнй университет, 2019

УДК 539.196

Оригинальная статья

МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ КРИВЫЕ – «КОМПАЬОНЫ» И ПРОГНОЗ НА ИХ ОСНОВЕ КРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ

Г.Г. Петрик

ФГБУН «Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра РАН»

367030, Россия, Махачкала, пр. Шамиля, 39а

galina_petrik@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.636

Аннотация: В описание межмолекулярной потенциальной кривой (ПК) введена точка перегиба. С учетом появляющихся возможностей проведен анализ потенциалов $M_i(n-6)$, восстановленных по свойствам веществ из глобулярных молекул. Замеченные несоответствия в информации о форме потенциала для WF_6 стали отправной точкой анализа, который привел к новому понятию ПК–«компаньоны». Найдено, что по восстановленной ПК с малой погрешностью прогнозируется критическая температура, а по ПК-компаньону – критический объем веществ.

Ключевые слова: межмолекулярное взаимодействие, модельный потенциал, потенциальная кривая, факторы формы, точка перегиба, потенциал $M_i(n-t)$, критические параметры, глобулы.

1. Введение

Как известно, применение теоретических методов определения свойств веществ сталкивается не только с математическими трудностями, но и с проблемами при расчете энергии межмолекулярного взаимодействия (ММВ). В этой связи важное значение имеет разработка простых моделей, корректно отражающих связь особенностей свойств веществ из многоатомных молекул с особенностями модельных потенциалов (МП), описывающих энергию взаимодействия объектов, моделирующих эти молекулы.

2. Простейшие модели молекул и ММВ. Две особые точки ПК

Простейшая модель любой молекулы – точечный силовой центр, не имеющий собственных геометрических характеристик (из этого следует оправданность поиска параметров межатомного потенциала (МП) по свойствам веществ). Потенциальная энергия взаимодействия пары центров моделируется центральными потенциалами. Общего выражения для них не предложено. МП реализуется в виде аналитической потенциальной функции (ПФ) и геометрической ПК. Самые простые ПФ $U(r)$ состоят из двух членов – один из них описывает отталкивание, другой – притяжение модельных объектов. ПК имеет характерный вид непрерывной кривой, пересекающей ось r в точке нуля $N(r_0)$, и имеющей точку минимума M (с координатами r_m, ε_m), в которых выполняются условия:

$$\begin{aligned} N(r_0, \varepsilon_0): U(r_0) = \varepsilon_0 = 0, \\ M(r_m, \varepsilon_m): U(r_m) = -\varepsilon_m, U'(r_m) = 0, U''(r_m) > 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Наиболее популярны до сего дня потенциалы Ми $(n-m)$ [1], представленные обратностепенными функциями:

$$U(r) = a/r^n - b/r^m, \quad (2)$$

где $n > m > 3$, r – расстояние между центрами объектов, a и b – некие коэффициенты. Применив условия (1), определяющие минимум, получим:

$$U_m(r) = \varepsilon_m \frac{n}{n-m} \left[\frac{m}{n} \left(\frac{r_m}{r} \right)^n - \left(\frac{r_m}{r} \right)^m \right]. \quad (3)$$

Те же функции называют потенциалами Леннарда-Джонса, по имени ученого, который первым активно применял их в работах. Самый известный потенциал (12–6) априори задается в большинстве работ, связанных с поиском параметров в рамках концепции полуэмпирических потенциалов. Немногие авторы восстанавливают индекс n потенциала (при $m=6$) [2, 3] или полный набор из 4-х величин [4].

3. Точка перегиба ПК – третья особая точка. Новые возможности

Кроме нуля и минимума, ПК характеризует еще одна особая точка, а именно – точка перегиба $P(r_p, \varepsilon_p)$, в которой, по определению [5], имеет место:

$$U''(r_p) = 0, \quad U'''(r_p) \neq 0, \quad U(r_p) = -\varepsilon_p. \quad (4)$$

Впервые мы ввели точку перегиба в явное описание ПК в [6]. О существовании этой точки упоминает ряд авторов [7,8]. Однако нам неизвестно, чтобы она кем-либо вводилась при явном описании ММВ. Используя условия (4), получим для потенциалов Ми $(n-m)$ форму, коэффициенты которой выражены через координаты точки P перегиба:

$$U_p(r) = \frac{\varepsilon_p}{n(n+1) - m(m+1)} \left\{ m(m+1) \left(\frac{r_p}{r} \right)^n - n(n+1) \left(\frac{r_p}{r} \right)^m \right\}. \quad (5)$$

Появление в описании новых координат позволяет ввести ряд «относительных параметров» – факторов формы (ФФ) – и с их помощью довольно подробно описать форму ПК любого семейства. Мы ввели [9, 10] следующие ФФ – крутизна (r_0/r_m) , кривизна (r_p/r_m) , относительная глубина $(\varepsilon_p/\varepsilon_m)$, ширина ямы, а также степень ее асимметрии.

Для МП Ми $(n-m)$ факторы формы представляют функции от индексов n, m . Из условия равенства двух выражений для одной функции

$$U_m(r) = U_p(r)$$

следует равенство соответствующих вкладов. Преобразовав их, получим ряд соотношений между параметрами. Приведем два из них:

$$\Phi_R = \frac{r_p}{r_m} = \left(\frac{n+1}{m+1} \right)^{\frac{1}{n-m}}, \quad \Phi_E = \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_m} = \left(\frac{m+1}{n+1} \right)^{\frac{m}{n-m}} \left(1 + \frac{m}{n+1} \right). \quad (6)$$

Проверочный критерий для потенциалов. Из тех же условий равенства ПФ (3) и (5) и равенства соответствующих вкладов МП, получаем общее соотношение (7), связывающее параметры потенциала (координаты особых точек M и P), и индексы, определяющие форму вкладов. Соотношение (7) означает, что обе точки лежат на одной кривой, а также то, что параметры нельзя рассматривать как независимые:

$$\frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_m} \frac{r_p}{r_m} \left(\frac{n+1}{n+1+m} \right) \left(\frac{n+1}{m+1} \right)^{\frac{m-1}{n-m}} = 1. \quad (7)$$

Выделим в (7) часть, зависящую от индексов n и m , обозначим ее Φ :

$$\left(\frac{n+1}{n+1+m} \right) \left(\frac{n+1}{m+1} \right)^{\frac{m-1}{n-m}} = \Phi(n, m). \quad (8)$$

В уравнении связи (7) можно выделить Φ ПК и их произведение:

$$\left(\frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_m} \right) \left(\frac{r_p}{r_m} \right) \Phi(n, m) = 1, \quad \left(\frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_m} \right) \left(\frac{r_p}{r_m} \right) = 1 / \Phi(n, m), \quad \Phi_R \Phi_E = 1 / \Phi_n. \quad (9)$$

Расчеты Φ для значений индекса n из интервала (8–99) показывают, что по мере роста n отношение $\varepsilon_p / \varepsilon_m$ монотонно растет, а r_p / r_m — уменьшается — в обоих случаях — пределом имея 1.

Применение критерия к потенциалу (n-6). Представляет интерес провести на новой основе анализ результатов, полученных при стандартном подходе к моделированию ММВ в рамках концепции полуэмпирических потенциалов. С этой целью обратимся к работе [11], результаты которой, относящиеся к моделированию энергии ММВ для глобулярных молекул, были включены в информационно-вычислительную базу знаний (БЗ) ЭПИДИФ по транспортным свойствам разреженных газов и газовых смесей. В качестве объектов были выбраны квазисферические молекулы с тетра- и октаэдрической симметрией типа CCl_4 и WF_6 .

Для моделирования свойств систем из подобных объектов, число которых велико, важно иметь адекватный потенциал межчастичного взаимодействия. Авторы работали с семейством МП Ми ($n-6$), параметры которых — координаты r_m, ε_m минимума — и индекс n — показатель отталкивательного вклада, были восстановлены по данным о ВВК и вязкости (замечим, что обычно эти данные рассматривают отдельно и получают два набора параметров при априори заданном МП (12–6)). Полученные в [11] данные приведены там в виде таблицы. В следующей части мы представляем результаты своих расчетов, их анализ и выводы.

Анализ и дискуссия. В Таблице 1 молекулы расположены в том же порядке, что и в работе [11], где они классифицированы согласно структуре — вначале глобулы с тетраэдрической симметрией, затем — гексафториды. Такое расположение отвечает неявному допущению, что

именно структура определяет характер ММВ. Однако в строке, где приведены значения индекса n , собственно и определяющего (при $m=6$) характер взаимодействия (как это показывают соотношения для ФФ и функции Φ), никакой закономерности не выявлено.

Таблица 1. Значения индекса n для молекул, восстановленные по свойствам веществ

M	CH_4	CF_4	CCl_4	$C(CH_3)_4$	SiF_4	$SiCl_4$	$Si(CH_3)_4$	SF_6	MoF_6	WF_6	UF_6
n	21,6	41,6	19,4	27,3	19,3	25,8	19,1	30,9	27,6	14,9	26,7

Рассмотрим Таблицу 2. Примем, что найденные в [11] по свойствам веществ параметры – правильные, исключаящие дальнейшую подгонку. Ранжируем глобулы по значению индекса n – по его убыванию (мы приводим только часть большой таблицы). Список замыкает WF_6 с минимальным $n=14,9$. Введем в описание найденных ПК точку P перегиба. Для индексов n рассчитаем по (6) ФФ и по (8) – функции $\Phi(n,6)$. Порядок по Φ нарушен для WF_6 . Его значение $\Phi=1,1511$ должно находиться между 1,14 ($SiCl_4$) и 1,1517 (CCl_4) в «возрастающей» строке значений.

Таблица 2. Упорядочение объектов (M) по значению индекса n

M	CF_4	...	$SiCl_4$	...	CCl_4	...	WF_6
n	41,6		25,8		19,4		14,9
r_p / r_m	1,05		1,07		1,08		1,09
$\varepsilon_p / \varepsilon_m$	0,84		0,81		0,80		0,79
$\Phi(n)$	1,12		1,14		1,1517		1,1511

Поскольку само число n несет не слишком много информации, – она заключена в функциях, от него произведенных, отдадим предпочтение при анализе факторам формы и функции Φ . Рассмотрим следующую Таблицу 3. В ней восстановлен порядок относительно $\Phi(n)$. Но теперь для того же WF_6 нарушен порядок относительно индекса n ! При этом также нарушен ход изменения ФФ – тренд сохранен, но сами значения выделяются: слишком большое для r_p / r_m и слишком малое для $\varepsilon_p / \varepsilon_m$.

На основе рассчитанных по n ФФ и восстановленных значений параметров провели расчеты координат точек перегиба всех ПК. Сравнение значений ε_p / k и T_k (обе в градусах Кельвина) соответствующих веществ показало: для 5 из 10 молекул имеет место их совпадение с очень малой погрешностью (абсолютные отклонения в % – от 0,4 до 3, они указаны в скобках): CF_4 (1,0), MoF_6 (1,3), UF_6 (3,0), CCl_4 (1,0), $SiCl_4$ (0,4).

Таблица 3. Упорядочение объектов по значению $\Phi(n)$

M	CF_4	...	$SiCl_4$	WF_6	CCl_4	...
n	41,6		25,8	14,9	19,4	
r_p / r_m	1,05		1,07	1,09	1,08	
$\varepsilon_p / \varepsilon_m$	0,84		0,81	0,79	0,80	
$\Phi(n)$	1,12		1,14	1,1511	1,1517	

Что касается второй координаты r_p точки P , то, рассчитав их и сравнив r_p^3 ($\text{\AA}^3$) с критическим объемом V_k ($\text{см}^3/\text{моль}$), видим: совпадение хуже. Для всех молекул значения оказались меньше V_k , за исключением WF_6 , для которого они совпали (погрешность 2%). Это совпадение, скорее всего, обеспечено большим значением r_p / r_m , которое (как отмечено выше) нарушило ход изменений этого фактора. Это натолкнуло на мысль о том, что улучшить совпадение r_p^3 с V_k можно, увеличив этот ФФ.

ПК-«компаньоны». Однако поскольку ФФ и индекс n связаны однозначно уравнением (6), индекс при этом также должен измениться. На первый взгляд при этом обязательно будет нарушено соотношение (9). В то же время смысл (9) в том, что произведение ФФ должно остаться постоянной величиной, если не меняется значение функции $1/\Phi(n)$. Следовательно, чтобы значение критерия осталось прежним, надо сохранить значение $\Phi(n_1)$. Вопрос – можно ли найти такие другие значения индекса n , для которых ФФ изменятся, но будет иметь место равенство $\Phi(n_1) = \Phi(n_2)$? Т.е. найти ПК-«компаньоны» для тех, что определены в работе [11]? Оказалось, можно.

Таблица 4. ПК-«компаньоны». Нарушение порядка для молекул WF_6

M	CF_4	...	$SiCl_4$	WF_6	CCl_4	...
n_1	41,6		25,8	14,9	19,4	
$\Phi(n_1) = \Phi(n_2)$	1,12		1,14	1,1511	1,1517	
n_2	8,6		12,28	20,6	15,7	

Найденные значения индекса n_2 приведены в строке 4 Таблицы 4, они идут в порядке возрастания, который нарушен только для того же WF_6 . Для него получено значение $n_2 = 20,6$, которое должно встать, нарушая порядок, между значениями 12,28 и 15,7. Для новых ПК-компаньонов были рассчитаны ФФ. Как и для восстановленной n_1 -ПК, для WF_6 ФФ демонстрируют скачок значений, нарушая порядок. Соотношения между ФФ для n_1 и ФФ для n_2 проверены и оказались таковы: один увеличился во

столько раз, во сколько уменьшился другой. В результате их произведение не изменилось, что и требовалось.

Точка перегиба. На основе рассчитанных для n_2 ФФ и параметров из [11] найдены координаты точек P перегиба ПК-компаньонов.

Координата r_p . В 4-х случаях из 7 получены значения величин r_p^3 , практически совпадающие с V_k (абсолютные отклонения в % указаны в скобках): CF_4 (4), SF_6 (0,6), $C(CH_3)_4$ (3), WF_6 (2) (три случая исключены из сравнения, т.к. для летучих веществ из молекул, центральным атомом которых является атом кремния, не удалось найти сведений о V_k). Подчеркнем, что сами мы не производили никаких подгонок, чтобы приблизиться к значениям критических объемов. Такое приближение обеспечивает ПК, найденная как компаньон для ПК, дающей хороший прогноз T_k . Еще раз обратим внимание на информацию для WF_6 , которая «ломает» правильный ход всех величин и поменяем местами индексы n_1 и n_2 , а также связанные с ними ФФ. Порядок будет восстановлен везде, где он нарушен. В том числе, как и для всех других молекул, лучшее значение для V_k даст ПК-компаньон. Можно сделать вывод о том, что авторы [11] по свойствам WF_6 нашли для его молекул именно ПК-компаньон.

Таблица 5. Сравнение результатов расчета с критическими параметрами

M	CF_4	SF_6	MoF_6	$C(CH_3)_4$	UF_6	$SiCl_4$	WF_6	CCl_4	SiF_4	$Si(CH_3)_4$
n_1	41,6	30,9	27,6	27,3	26,7	25,8	20,6	19,4	19,3	19,1
$\varepsilon_p / k, K$	224,7	277	465,5	394	510,1	505,2	342	561,5	164	357
T_k, K	228	319	473	434	505	507	453	556	259	458
n_2	8,6	10,6	11,58	11,7	11,92	12,28	14,9	15,7	16	16,02
$r_p^3 \cdot (\text{\AA}^3)$	130	200	206,3	293	217,2	283	228	230	182	326
$V_k, \text{см}^3/\text{моль}$	136-140	199	228	303	255	-	233	276	-	-

Координата ε_p . В двух случаях хороший прогноз критической температуры стал еще лучше. При этом абсолютные отклонения в % изменились следующим образом: для UF_6 – 3 на 0,7, для CCl_4 – 1,0 на 0,08. В остальных случаях расхождения с T_k , зафиксированные первым набором ФФ, отвечающим значениям n_1 , незначительно увеличились.

4. Заключение

Введение в описание ПК точки перегиба расширяет возможности модели. Это доказывает, в том числе настоящая работа, в которой результаты, полученные стандартным способом, были проанализированы в

рамках новой модели, для ПК «с перегибом». Результатом стал выход на критические параметры веществ через ПК-«компаньоны», с индексами $n_1 > n_2$, из которых ПК (n_1) дает лучший прогноз критической температуры, а вторая ПК (n_2) лучше прогнозирует критический объем. Таким образом, устанавливаются корреляция между особыми точками на двух уровнях описания, между особенностями ММВ и особенностями теплофизических свойств веществ. Возникает ряд вопросов, в том числе такой – не является ли этот факт неким обоснованием для раздельного восстановления параметров по разным свойствам? Не описывают ли две ПК-компаньоны два состояния вещества – одно из которых – разреженный газ и более плотное, которое характеризуется критической плотностью? Особый интерес вызывает роль индексов – их влияние на качество прогноза. И в этой связи встает вопрос о правомочности принятого априорного их задания. Представляется очевидным, что полученные результаты настоятельно требуют продолжения исследований.

В заключение отметим, что об имеющейся связи между координатами точек перегиба на двух уровнях описания впервые мы сообщили 20 лет назад [12]. И не раз возвращались к этой проблеме [13-15]. Однако, если бы даже этого не случилось прежде, эта связь все равно проявилась бы в результате проведенного нами сейчас анализа.

Библиографический список:

1. **Mie, G.** Zur Kinetischen theorie der einatomigen Körper / G. Mie // *Annalen der Physik.* – 1903. – V. 316. – I. 8. – P. 657-697.
2. **Анашкин, И.П.** Определение параметров потенциала межмолекулярного взаимодействия по линии Zeno / И.П. Анашкин, А.В. Клинов // *Журнал физической химии.* – 2013. – Т. 87. – № 11. – С. 1805-1813.
3. **Zarkova, L.** The Isotropic temperature-dependent potential describing the binary interactions in gaseous WF_6 and MoF_6 / L. Zarkova, P. Pirgov // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.* – 1996. – V. 29. – № 19. – P. 4411-4422.
4. **Магомедов, М.Н.** Изучение межатомного взаимодействия, образования вакансий и самодиффузии в кристаллах / М.Н. Магомедов. – М.: Физматлит, 2010. – 544 с.
5. **Никольский, С.М.** Курс математического анализа / С.М. Никольский. – М.: Наука, 1983. – Т. 1. – 464 с. – Т. 2. – 448 с.
6. **Петрик, Г.Г.** Потенциал сферической оболочки. Общие соотношения между параметрами потенциалов взаимодействия свободных и связанных атомов / Г.Г. Петрик, Б.Е. Тодоровский // *Журнал физической химии.* – 1988. – Т. 62. – № 12. – С. 3257-3263.
7. **Борн, М.** Динамическая теория кристаллических решеток / М. Борн, Х. Кунь; пер. с англ. В.И. Когана; под ред. И.М. Лившица. – М.: Изд-во иностранной литературы, 1958. – 488 с.
8. **Недоступ, В.И.** Расчет термодинамических свойств газов и жидкостей методом идеальных кривых / В.И. Недоступ, Е.П. Галькевич. – Киев: Наукова думка, 1986.

– 196 с.

9. **Петрик, Г.Г.** К вопросу о выборе формы потенциалов межчастичного взаимодействия на основе молекулярной информации / Г.Г. Петрик // Мониторинг. Наука и технологии. – 2012. – Вып. 2 (11). – С. 71-83.

10. **Петрик, Г.Г.** Адекватный потенциал на основе молекулярной информации – выбор и апробирование / Г.Г. Петрик // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2013. – Вып. 5. – С. 245-260.

11. **Фокин, Л.Р.** Потенциалы взаимодействия девяти квазисферических молекул в базе ЭПИДИФ по транспортным свойствам газов / Л.Р. Фокин, Л. Заркова, М. Дамьянова // Теплофизика высоких температур. – 2004. – Т. 42. – Вып. 6. – С. 878-884.

12. **Петрик, Г.Г.** Обоснованный прогноз критических параметров. О связи координат особых точек двух уровней описания свойств / Г.Г. Петрик, Б.Е. Тодоровский / Международная конференция «Фазовые переходы и критические явления в конденсированных средах», Махачкала, 8-11 сентября 1998 г.: тезисы докладов. – Махачкала: ИФ ДНЦ РАН, 1998. – С. 198-199.

13. **Петрик, Г.Г.** О возможности расчета критических параметров (T_c, V_c) вещества на основе информации о взаимодействии образующих его молекул / Г.Г. Петрик, Б.Е. Тодоровский, З.Р. Гаджиева // Химия и компьютерное моделирование. Бутлеровские сообщения. – 2002. – Специальный выпуск № 10. – С. 301-304.

14. **Петрик, Г.Г.** Выбор межмолекулярной потенциальной кривой и расчет критической температуры флюида на основе молекулярной информации / Г.Г. Петрик // Мониторинг. Наука и технологии. – 2013. – Вып. 1 (14). – С. 77-89.

15. **Петрик, Г.Г.** Молекулярно-обоснованный прогноз критических параметров веществ / Г.Г. Петрик // Вестник Казанского национального исследовательского технологического университета. – 2014. – Т. 17. – № 19. – С. 40-46.

References:

1. **Mie, G.** Zur Kinetischen theorie der einatomigen Körper / G. Mie // Annalen der Physik. – 1903. – V. 316. – I. 8. – P. 657-697.

2. **Anashkin, I.P.** Determining the parameters of the potential of intermolecular interaction by the Zeno line / I.P. Anashkin, A.V. Klinov // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2013. – V. 87. – I. 11. – P. 1781-1788.

3. **Zarkova, L.** The Isotropic temperature-dependent potential describing the binary interactions in gaseous WF_6 and MoF_6 / L. Zarkova, P. Pirgov // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. – 1996. – V. 29. – № 19. – P. 4411-4422.

4. **Magomedov, M.N.** The investigation of interatomic interaction, vacancy formation and self-diffusion in crystals / M.N. Magomedov. – M.: Fizmatlit, 2010. – 544 p. (In Russian).

5. **Nikol'skij, S.M.** Mathematical analysis course / S.M. Nikol'skij. – M.: «Nauka», 1983. – V. 1. – 464 p. – V. 2. – 448 p. (In Russian).

6. **Petrik, G.G.** The spherical shell potential. General relations between the parameters of the interaction potentials of free and bound atoms / G.G. Petrik, B.E. Todorovskii // Russian Journal of Physical Chemistry. – 1988. – V. 62. – I. 12. – P. 1703-1707.

7. **Born, M.** The dynamic theory of crystal lattices / M. Born, Kh. Kun'; per. s angl. V.I. Kogana; pod red. I.M. Livshitsa. – M.: Izd-vo inostrannoj literatury, 1958. – 488 p. (In Russian).

8. **Nedostup, V.I.** Calculation of the thermodynamic properties of gases and liquids by the

ideal curve method / V.I. Nedostup, E.P. Gal'kevich. – Kiev: Naukova dumka, 1986. – 196 p. (In Russian).

9. **Petrik, G.G.** On selecting the form of the interparticle interaction potentials based on molecular information / G.G. Petrik // *Monitoring. Science and Technologies.* – 2012. – I. 2 (11). – P. 71-83. (In Russian).

10. **Petrik, G.G.** An adequate potential based on molecular information: selection and approbation / G.G. Petrik // *Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials.* – 2013. – I. 5. – P. 245-260. (In Russian).

11. **Fokin, L.R.** Interaction potentials of nine quasi-spherical molecules in the database on the transport properties of gases / L.R. Fokin, L. Zarkova, M. Damyanova // *High Temperature.* – 2004. – V. 42. – I. 6. – P. 888-894.

12. **Petrik, G.G.** A reasonable forecast of critical parameters. On the relationship of the coordinates of singular points of two levels of description of properties / G.G. Petrik, B.E. Todorovskij / *Mezhdunarodnaya konferentsiya «Fazovye perekhody i kriticheskie yavleniya v kondensirovannykh sredakh»*, Makhachkala, 8-11 sentyabrya 1998 g.: tezisy dokladov. – Makhachkala: IF DNTs RAN, 1998. – P. 198-199. (In Russian).

13. **Petrik, G.G.** On the possibility of calculating critical parameters of a substance (T_c, V_c) based on information on the interaction of the molecules forming it / G.G. Petrik, B.E. Todorovskij, Z.R. Gadzhieva // *Khimiya i komp'yuternoe modelirovanie. Butlerovskie soobshcheniya.* – 2002. – Spetsial'nyj vypusk № 10. – P. 301-304. (In Russian).

14. **Petrik, G.G.** Choice of the intermolecular potential curve and calculation of critical fluids temperature based on molecular information / G.G. Petrik // *Monitoring. Science and Technologies.* – 2013. – I. 1 (14). – P. 77-89. (In Russian).

15. **Petrik, G.G.** Molecularly-based prediction of critical parameters of substances / G.G. Petrik // *Vestnik Kazanskogo natsional'nogo issledovatel'skogo tekhnologicheskogo universiteta.* – 2014. – V. 17. – № 19. – P. 40-46. (In Russian).

Original paper

INTERMOLECULAR POTENTIAL CURVES – «COMPANIONS» AND FORECAST ON THEIR BASIS OF THE CRITICAL PARAMETERS

G.G. Petrik

Institute for Geothermal Research of the Dagestan Scientific Center of RAS, Makhachkala, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.636

Abstract: An inflection point is entered in the description of the potential curve (PC). Taking into account the emerging possibilities, the potentials of $M_i (n-6)$ reduced by the properties of nine substances from globular molecules were analyzed. The observed inconsistencies in the shape of the WF_6 potential was the starting point of the analysis that led to the new notion of companion PCs. It was found that the restored PC with low error is predicted to be critical temperature, and the PC companion is predicted to be critical volume.

Keywords: *intermolecular interaction, model potential, potential curve, form factors, inflection point, $M_i's (n-m)$ potential, critical parameters, globula.*

Петрик Галина Георгиевна – к.ф.-м.н., старший научный сотрудник ФГБУН «Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра РАН»

Galina G. Petrik – Ph. D., Senior Researcher, Institute for Geothermal Research of the Dagestan Scientific Center of RAS

Поступила в редакцию/received: 14.09.2019; после рецензирования/revise: 23.10.2019; принята/accepted 09.11.2019.