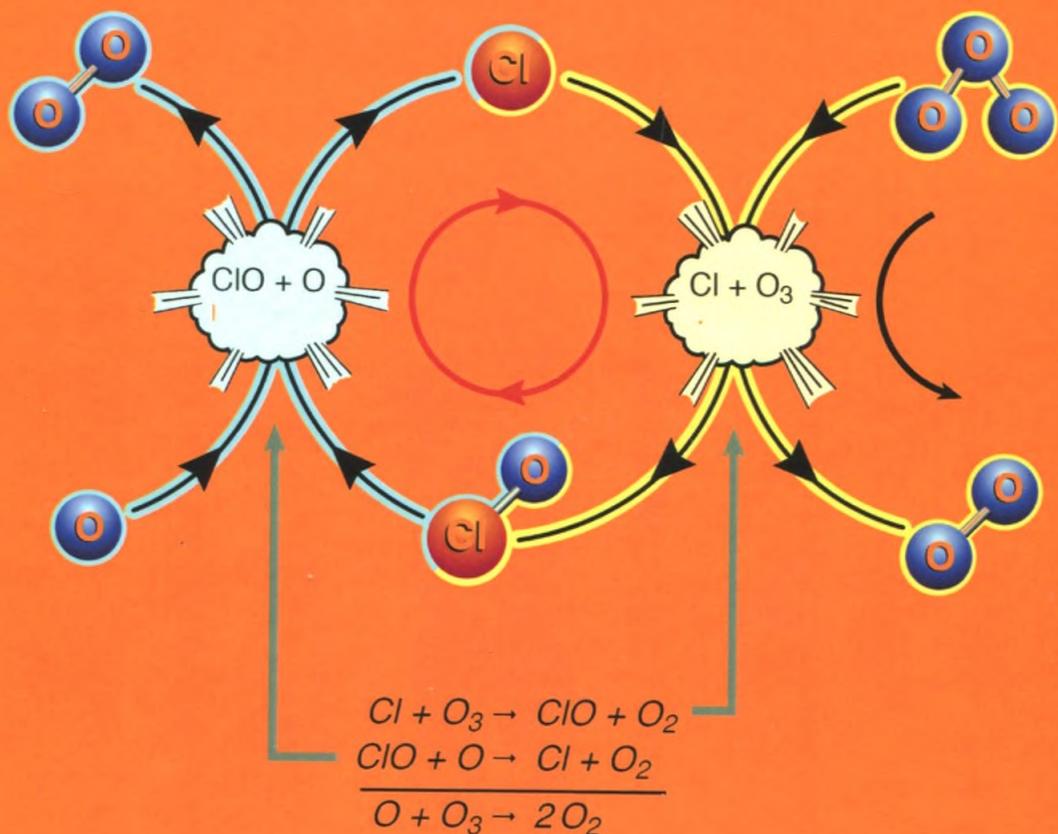


621.56
К84

Ю. А. Кругляк

Прогнозирование свойств молекулярных веществ
Критические свойства фреонов и их Si- и Ge-аналогов
Озонобезопасные фреоны и механизмы истощения
озонового слоя Земли



Ю. А. Кругляк

**Прогнозирование свойств молекулярных веществ
Критические свойства фреонов и их Si- и Ge-аналогов
Озонобезопасные фреоны и механизмы истощения озонового слоя Земли**

Одесса
ТЭС
2018

УДК 681.3.016:519.17:541.66

PACS: 92.60.hd, 92.60.Ls, 92.60.Xg, 94.20.dk, 96.40.Fg, 96.50.S-

MSC-2010: 05C22, 05C70, 92E10

К 840 Кругляк, Юрий Алексеевич

Прогнозирование свойств молекулярных веществ.

Критические свойства фреонов и их Si- и Ge-аналогов.

Механизмы истощения озонового слоя Земли и озонобезопасные фреоны/

Ю. А. Кругляк. – Одесса: ТЭС, 2018 – 170 стр.; 34 рис.; 29 табл.; 177 лит.

Книга посвящена прогнозированию свойств молекулярных веществ на примере критических свойств фреонов $C_1 - C_3$ и их Si- и Ge-аналогов, а также алканов. Предложен новый подход в исследовании количественных соотношений «структура – свойство» с использованием инвариантов графов, численно взвешенных как по вершинам, так и по ребрам. Он предусматривает зависимость топологического описания молекул от изучаемого свойства. Сформулирован принцип формирования инвариантов взвешенных графов, предложен новый класс инвариантов и исследованы два новых инварианта для расчета T_c и P_c . На примере этих рядов веществ показано, что веса вершин и ребер молекулярных графов, оптимизированных на одном ряду соединений, могут быть использованы для расчета этого же свойства в близких рядах соединений. Найдены зависимости для высокоточного расчета критических свойств фреонов $C_1 - C_3$. Табулированы T_c для всех этих фреонов, а также P_c и V_c для всех этановых фреонов.

Рассмотрены механизмы истощения озонового слоя Земли – фотохимическая модель, включая высокоточные результаты квантовохимических расчетов термоллиза фреонов и тонкие механизмы деструкции атмосферного озона, а также корпускулярные модели, включая известную модель реакции электронов космического происхождения, в том числе в связи с проблемой глобального изменения климата. Учитывая, что космическое излучение, достигающее Земли, состоит в основном из протонов, предлагается обратить внимание на важную роль протонов космического происхождения в разрушении озонового слоя, поскольку протоны при столкновении с молекулами фреонов фрагментируют их преимущественно с выделением атомарного хлора, что подтверждается нами экспериментальными данными и высокоточными квантовохимическими расчетами.

Книга предназначена для специалистов в области задач «структура – свойство». Обсуждаются пути дальнейшего развития предлагаемого подхода с использованием инвариантов полностью взвешенных молекулярных графов.

УДК 681.3.016:519.17:541.66

ISBN 978-617-7711-03-1

Содержание

Предисловие	3
Введение	7
Глава 1. Прогнозирование и расчеты физических свойств веществ	11
1.1. Традиционные методы расчета критических свойств веществ	13
1.2. Критические свойства фреонов как объект исследования	16
1.3. Топологические методы в расчетах физико-химических свойств Веществ	19
Глава 2. Изучение возможности описания критических свойств фреонов с помощью инвариантов взвешенных графов	27
2.1. Анализ экспериментальных данных по критическим свойствам Фреонов	28
2.2. Проблема выбора топологических инвариантов и параметров	39
2.3. Обоснование нового инварианта паросочетаний и нового принципа генерации инвариантов взвешенных графов	41
Глава 3. Методы и алгоритмы для расчета физико-химических свойств	45
3.1. Общая схема подхода к расчету неизвестных значений свойств Веществ	45
3.2. Алгоритмы оптимизации параметров	48
3.3. Вычисление нового инварианта паросочетаний	52
Глава 4. Прогнозирование критических свойств фреонов	57
4.1. Параметризация и расчет T_c	57
4.1.1. Этап 1: Неравенства и ограничения на параметры	57
4.1.2. Этап 2: Оптимизация параметров	59
4.1.3. Этап 3. Расширение	64
4.1.4. Этап 4: Усложнение	67
4.2. Параметризация и расчет P_c	69
4.3. Параметризация и расчет V_c	74
Глава 5. Прогнозирование T_q алканов и Si- и Ge-фреонов	81
5.1. Расчет T_c в ряду алканов	81
5.2. Расчет T_c в рядах галогенпроизводных гидридов Si и Ge	88
Глава 6. Механизмы истощения озонового слоя Земли Озोनобезопасные фреоны	97
6.1. Введение	97
6.2. Фотохимическая модель	99
6.2.1. Квантовохимические расчеты термоллиза фреонов и тонкие механизмы деструкции атмосферного озона	103
6.2.1.1. HCFC-124	103
6.2.1.2. HFC-152a	107

6.2.1.3. HFC-125	111
6.2.1.4. HCFC-123	115
6.2.1.5. HCFC-141b	117
6.2.1.6. HFE	118
6.3. Корпускулярные модели	120
6.3.1. Модель реакции электронов космического происхождения	120
6.3.2. Модель реакции протонов космического происхождения	121
Приложения	
Таблица П-1. Прогнозируемые значения T_c для всех 210 этановых фреонов	125
Таблица П-2. Прогнозируемые значения T_c для всех 2100 пропан-фреонов	128
Таблица П-3. Прогнозируемые значения P_c для всех 210 этановых фреонов	155
Таблица П-4. Прогнозируемые значения V_c для всех 210 этановых фреонов	158
Литература	161