



International Year of  
**CHEMISTRY**  
2011

**ЛЬВІВСЬКІ ХІМІЧНІ ЧИТАННЯ – 2011**

**Конференція приурочена 350-річчю  
Львівського національного університету  
імені Івана Франка**



## ВИЗНАЧЕННЯ ЗАРЯДІВ НА АТОМАХ У ГАЗОПОДІБНИХ МОЛЕКУЛАХ

Валентин Ощাপовський, Щербина Ольга, Рак Юлія, Хомишин Віктор

кафедра процесів горіння та загальної хімії

Львівський державний університет безпеки життєдіяльності

вул. Клепарівська, 35, Львів, 79007, Україна

E-mail: oshchapovsky@yahoo.com

Запропонований і розроблений новий метод розрахунку енергії решітки бінарних іонних кристалів типу MX [1], що дало змогу отримати нову універсальну формулу для обчислення енергії решітки по величинах тільки радіусів іонів без введення додаткових довільних чинників. Показано, що точність розрахунку  $U$  залежить від ступеня йонності зв'язку  $\epsilon$ . Знайдено, що помилка розрахунків  $U$  зменшується прямо пропорційно із зменшенням внеску ковалентної складової в хімічному зв'язку і збільшенням  $\epsilon$  [1].

На цій основі одержано рівняння для *a priori* розрахунку довжини міжатомних віддалей в кристалах і газоподібних молекулах при допущенні, що всі зв'язки в них є чисто йонного типу [2].

Виведено рівняння для розрахунку радіусів іонів з довільним ефективним зарядом [3]. Розраховані радіуси іонів в бінарних неполярних молекулах галогенів, халькогенів та ін. Напр.,  $R^{IV}(F^+) = 0,255 \text{ \AA}$ ,  $R^{IV}(Cl^+) = 0,701 \text{ \AA}$ ,  $R^{IV}(At^+) = 1,147 \text{ \AA}$ .

На базі цих величин при використанні раніше отриманого рівняння для *a priori* визначення міжядерних віддалей [2] розраховані значення  $R_{12}$  для великої групи молекул різного типу: галогенів, кисню, халькогенів, азоту та їх сполук. Помилка розрахунку міжядерної віддалі для галогенів та інтергалогенідів не перевищує  $0,07 \text{ \AA}$  (3-4 %). Це дозволило оцінити заряди на атомах у великої групи бінарних газоподібних молекул:  $O_2$  ( $O^{1,92+}O^{1,92-}$ ),  $CO$  ( $C^{1,76+}C^{1,76-}$ ),  $CS$  ( $C^{1,57+}S^{1,57-}$ ),  $N_2$  ( $N^{2,69+}N^{2,69-}$ ),  $NO$  ( $N^{1,87+}O^{1,87-}$ ) тощо.

Показана можливість оцінки координації іонів, кратності зв'язку, а також деякої корекції розмірів радіусів іонів  $R_i$ .

1. Ощাপовский В.В. ЖОХ, 2008, 78, вып. 4, с.549-559.
2. Ощাপовский В.В. ЖНХ, 2010, т.55, №3, с. 416-425.
3. Ощাপовский В.В. ЖНХ (в друці).