

## 6. ВЕЛИЧИНИ, ЕДИНИЦИ И СИМБОЛИ ВО ХЕМИЈАТА

Глигор Јовановски и Бојан Шоптрајанов

Институт за хемија, Природно-математички факултет, Универзитет „Св. Кирил и Методиј“,  
п. фах 162, 91001 Скопје, Македонија

Во претходните четири броја од Гласникот беа дадени [1–4] табели на македонските називи и интернационално препорачаните симболи, дефиниции и SI единици за физичките величини од областа на општата хемија и молекуларните и сродни науки [1], на хемиската термодинамика и хемиската кинетика [2], на електрохемијата, колоидната хемија и површинските појави [3], односно на областите простор и време, класична механика и квантна механика [4].

Во овој број се презентирани називите, симболите и дефинициите и SI единиците за физичките величини од областа на електромагнетното зрачење, на цврстата состојба, на статистичката термодинамика, односно транспортните својства. Некои од нив се веќе вклучени во претходните продолженија на оваа серија, а тука се дадени во контекстот на другите сродни величини и единици.

### 3.10. ЕЛЕКТРОМАГНЕТНО ЗРАЧЕЊЕ

Физичка величина	Симбол	Дефиниција	SI единица
Бранова должина	$\lambda$		m
Брзина на светлината			
во вакуум	$c_0$		$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
во определена средина	$c$	$c = c_0/n$	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
Индекс на прекршување	$n$	$n = c_0/c$	1
Бранов број <sup>1</sup>			
во вакуум	$\tilde{\nu}$	$\tilde{\nu} = \nu/c_0 = 1/n \lambda$	$\text{m}^{-1}$
во определена средина	$\sigma$	$\sigma = 1/\lambda$	$\text{m}^{-1}$
Фреквенција	$\nu$	$\nu = c/\lambda$	Hz
Кружна фреквенција	$\omega$	$\omega = 2\pi\nu$	$\text{s}^{-1}, \text{rad} \cdot \text{s}^{-1}$
Планкова (Planck) константа	$h$		J · s
Планкова константа / $2\pi$	$\hbar$	$\hbar = h/2\pi$	J · s
Радијациона енергија (енергија на зрачењето)	$Q, W$		J
Густина на радијациона енергија	$\rho, w$	$\rho = Q/V$	$\text{J} \cdot \text{m}^{-3}$
Спектрална густина на радијациона енергија			
изразена преку фреквенција	$\rho_\nu, w_\nu$	$\rho_\nu = d\rho/d\nu$	$\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{Hz}^{-3}$
изразена преку бранов број	$\rho_{\tilde{\nu}}, w_{\tilde{\nu}}$	$\rho_{\tilde{\nu}} = d\rho/d\tilde{\nu}$	$\text{J} \cdot \text{m}^{-2}$
изразена преку бранова должина	$\rho_\lambda, w_\lambda$	$\rho_\lambda = d\rho/d\lambda$	$\text{J} \cdot \text{m}^{-4}$



Физичка величина	Симбол	Дефиниција	SI единица
Радијациона моќ	$\Phi, P$	$\Phi = dQ/dt$	W
Радијационен интензитет	$I$	$I = d\Phi/d\Omega$	$W \cdot sr^{-1}$
Радијациона ексцитанца (емитиран радијационен флукс)	$M$	$M = d\Phi/dA_{source}$	$W \cdot m^{-2}$
Ирадијанца <sup>2</sup> (примен радијационен флукс)	$E, (I)$	$M = d\Phi/dA$	$W \cdot m^{-2}$
Емитанца <sup>3</sup>	$\epsilon$	$\epsilon = M/M_{bb}$	1
Штефан-Болцманова (Stefan-Boltzmann) константа	$\sigma$	$M_{bb} = \sigma T^4$	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}$
Прва радијациона константа	$c_1$	$c_1 = 2\pi hc_0^2$	$W \cdot m^2$
Втора радијациона константа	$c_2$	$c_2 = hc_0/k$	$K \cdot m$
Трансмитанца <sup>4</sup> , трансмисионен фактор	$\tau, T$	$\tau = \Phi_{tr}/\Phi_0$	1
Апсорптанца, апсорпционен фактор	$\alpha$	$\alpha = \Phi_{abs}/\Phi_0$	1
Рефлектанца, рефлексионен фактор	$\rho$	$\rho = \Phi_{refl}/\Phi_0$	1
(Декадна) апсорбанца	$A$	$A = -\lg(1 - \alpha_i)$	1
(Неперова) апсорбанца	$B$	$B = -\lg_n(1 - \alpha_i)$	1
Апсорпционен коефициент <sup>5</sup>			
(линеарен) декаден	$a, K$	$a = A/l$	$m^{-1}$
(линеарен) Неперов	$\alpha$	$\alpha = B/l$	$m^{-1}$
моларен (декаден) <sup>5,6</sup>	$\epsilon$	$\epsilon = a/c = A/cl$	$m^2 \cdot mol^{-1}$
моларен Неперов <sup>7</sup>	$\kappa$	$\kappa = \alpha/c = B/cl$	$m^2 \cdot mol^{-1}$
Апсорпционен индекс	$k$	$k = \alpha/4\pi\tilde{\nu}$	1
Комплексен индекс на прекршување	$\hat{n}$	$\hat{n} = n + ik$	1
Моларна рефракција	$R, R_m$	$R = \frac{(n^2 - 1)}{(n^2 + 2)} V_m$	$m^3 \cdot mol^{-1}$
Агол на оптичка ротација	$\alpha$		1, rad

1. За бранов број во вакуум обично се употребува единицата  $cm^{-1}$ .

2. Ирадијанцата, чии SI единици се  $W \cdot m^{-2}$ , честопати се нарекува и интензитет и се означува со  $I$ . Ова е особено карактеристично кога станува збор за сноп од светлина, каков што е случајот кога Ламбер-Беровиот (Lambert-Beer) закон се применува во спектрометриската анализа.

3. Емитанцата на одредена проба претставува однос на емитираниот флукс од пробата,  $M$ , и емитираниот флукс од црното тело (black body),  $M_{bb}$ , на истата температура.

4. Ако расејувањето и луминисценцијата можат да се занемарат, тогаш  $\tau + \alpha + \rho = 1$ . Во оптичката спектроскопија внатрешните својства (означени со супскриптитот  $i$ ) се дефинирани за да се исклучат површинските ефекти и ефектите на киветата. Така, ако расејувањето и луминисценцијата можат да се занемарат,  $\tau_i + \alpha_i = 1$ . Ова доведува до вообичаената форма на Ламбер-Беровиот (Lambert-Beer) закон

$$\Phi_{tr}/\Phi_0 (= I_{tr}/I_0) = \tau_i = 1 - \alpha_i = \exp(-\kappa cl).$$



5. Во овие изрази  $l$  е дебелината на слојот од образецот во кој зрачењето се апсорбира, а  $c$  е концентрација на супстанцата во образецот.

6. Моларниот декаден апсорпционен коефициент,  $\epsilon$ , често е означуван како „екстинкционен коефициент“. За несреќа, бројните вредности на „екстинкциониот коефициент“ често се даваат без специфицирање на единиците. Отсуството на овие единици обично значи дека  $\epsilon$  е изразено во

$\text{mol}^{-1} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{cm}^{-1}$ . Зборот „екстинкција“, инаку, треба да биде резервиран за прикажување на сумата на ефектите на апсорпција, расејување и луминисценција.

7. Величината  $\kappa$  може да се нарече моларен апсорпционен пресек, а  $\kappa/N_A$ , пресек по молекула.

### 3.11. ЦВРСТА СОСТОЈБА

Физичка величина	Симбол	Дефиниција	SI единица
Вектор на решетката	$R, R_0$		m
Фундаментални трансляциони вектори на кристалната решетка <sup>1</sup>	$a_1; a_2; a_3,$ $a; b; c$	$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$	m
(Кружен) вектор на реципрочната решетка <sup>2</sup>	$G$	$G \cdot R = 2\pi m$	$\text{m}^{-1}$
(Кружни) фундаментални трансляциони вектори на реципрочната решетка <sup>3</sup>	$b_1; b_2; b_3,$ $a^*; b^*; c^*$	$a_1 \cdot b_k = 2\pi \delta_{ik}$	$\text{m}^{-1}$
Растојание помеѓу рамнините на решетката	$d$		m
Брегов (Bragg) агол, агол на дифракција	$\theta$	$n\lambda = 2d \sin\theta$	1, rad
Ред на рефлексija	$n$		1
Бургеров (Burger) вектор	$b$		m
Вектор на положбата на честичката <sup>4</sup>	$r, R_j$		m
Вектор за рамнотежната положба на јонот	$R_0$		m
Вектор на поместување на јонот	$u$	$u = R - R_0$	m
Дебајов (Debye) кружен бранов број	$q_D$		$\text{m}^{-1}$
Дебајова (Debye) кружна фреквенција	$\omega_D$		$\text{s}^{-1}$
Маделунгова (Madelung) константа	$\alpha, M$	$E = \frac{\alpha N_A z_+ z_- e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0}$	1
Густина на состојбите <sup>5</sup>	$N_E$	$N_E = dN(E)/dE$	$\text{J}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$
(Спектрална) густина на вибрационите модови <sup>6</sup>	$N_\omega, g$	$N_\omega = dN(\omega)/d\omega$	$\text{s} \cdot \text{m}^{-3}$
Тензор на резистивноста	$\rho_{ik}$	$E = \rho \cdot j$	$\Omega \cdot \text{m}$
Тензор на кондуктивноста	$\sigma_{ik}$	$\sigma = \rho^{-1}$	$\text{s} \cdot \text{m}^{-1}$
Резидуална отпорност	$\rho_R$		$\Omega \cdot \text{m}$



Физичка величина	Симбол	Дефиниција	SI единица
Релаксационо време <sup>7</sup>	$\tau$	$\tau = l/v_F$	s
Лоренцов (Lorentz) коефициент <sup>8</sup>	$L$	$L = \lambda/\sigma T$	$V^2 \cdot K^2$
Термоелектрична сила	$E$		V
Пелтиев (Peltier) коефициент	$P$		V
Томсонов (Thomson) коефициент	$\mu, (\tau)$		$V \cdot K^{-1}$
Функција на работата <sup>9</sup>	$\Phi$	$\Phi = E_\infty - E_F$	J
Бројна густина, бројна концентрација <sup>10</sup>	$n, (p)$		$m^{-3}$
Донорска јонизациона енергија	$E_d$		J
Акцепторска јонизациона енергија	$E_a$		J
Фермиевска (Fermi) енергија	$E_F, \varepsilon_F$		J
Кружен бранов вектор <sup>11</sup>	$k, q$	$k = 2\pi/\lambda$	$m^{-1}$
Густина на полнеж на електрони <sup>12</sup>	$\rho$	$\rho(r) = -e\psi^*(r)\psi(r)$	$C m^{-3}$
Ефективна маса <sup>13</sup>	$m^*$		kg
Подвижност <sup>13</sup>	$\mu$	$\mu = v_{drift}/E$	$m^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$
Однос на подвижности	$b$	$b = \mu_n/\mu_p$	1
Дифузионен коефициент	$D$	$dN/dt = -DA(dn/dx)$	$m^2 \cdot s^{-1}$
Дифузиона должина <sup>14</sup>	$L$	$L = \sqrt{D\tau}$	m
Карактеристична Вајсова (Weiss) температура	$\theta, \theta_w$		K
Кириева (Curie) температура	$T_C$		K
Нилова (Neel) температура	$T_N$		K

1. Величините  $n_1, n_2$  и  $n_3$  се цели броеви, додека  $a, b, c$  често се нарекуваат константи на решетката.

2. Величината  $m$  е цел број.

3. Векторите на реципрочната решетка понекогаш се дефинираат како  $a_i \times b_k = \delta_{ik}$ .

4. За да се прави разлика меѓу векторот на положбата на електрон, од една страна, и на јон, од друга, се користат ознаките  $r$  и  $R$ , соодветно. Супскриптитот  $j$  се однесува на честичката  $j$ .

5.  $N(E)$  е вкупниот број на енергетски состојби на електронот помали од  $E$ , поделен со волуменот.

6.  $N(\omega)$  е вкупниот број на вибрациони модови со кружна фреквенција помала од  $\omega$ , поделен со волуменот.

7. Дефиницијата се применува на електрони кај металите. Величината  $l$  е среден слободен пат, а  $v_F$  е брзина на електронот на Фермиевата (Fermi) сфера.

8. Во дефинирираниот израз,  $\sigma$  е електрична спроводливост.

9.  $E_\infty$  е енергија на електронот во мирување кога се наоѓа на бесконечно растојание.

10. Одделни бројни густини се означуваат со супскрипти: за електрони  $n_n, n_-, (n)$ ; за празнини  $n_p, n_+, p$ ; за донори  $n_d$ ; за акцептори  $n_a$ ; за внатрешна бројна густина  $n_i (n_i^2 = n_+ n_-)$ ; во општата хемија, во статистичката термодинамика (види подолу) и во други области претпочита на ознака за бројна густина е  $C$ .



11. Ознаката  $k$  се употребува за честички, а  $q$  за фонони.

12.  $\psi(r)$  е едноелектронска бранова функција. Вкупната густина на полнежот се добива со сумирање по сите електрони.

13. Супскриптите  $n$  и  $p$  или  $-$  и  $+$  можат да се употребат за да означат електрони и празнини, соодветно.

14.  $D$  е дифузиониен коефициент, а  $\tau$  е должина на животот.

### 3.12. СТАТИСТИЧКА ТЕРМОДИНАМИКА

Физичка величина	Симбол	Дефиниција	SI единица
Број на единки	$N$		1
Бројна густина на единки, бројна концентрација	$C, n$	$C = N/V$	$\text{m}^{-3}$
Авогадрова (Avogadro) константа	$L, N_A$		$\text{mol}^{-1}$
Болцманова (Boltzmann) константа	$k, k_B$		$\text{J} \cdot \text{K}^{-1}$
Гасна константа (моларна)	$R$	$R = Lk$	$\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$
Вектор на молекулска позиција	$r(x, y, z)$		$\text{m}$
Вектор на молекулската брзина	$c(c_x, c_y, c_z)$ $u(u_x, u_y, u_z)$	$c = dr/dt$	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
Вектор на молекулскиот импулс	$p(p_x, p_y, p_z)$	$p = mc$	$\text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
Маквелова (Maxwell) функција на распределба на брзините	$f(c_x)$	$f(c_x) = (m/2\pi kT)^{1/2} \times \exp(-mc_x^2/2kT)$	$\text{m}^{-1} \cdot \text{s}$
Функција на распределбата на брзината (Maxwell-Boltzmann-ова)	$F(c)$	$F(c) = (m/2\pi kT)^{3/2} \times 4\pi c^2 \exp(-mc^2/2kT)$	$\text{m}^{-1} \cdot \text{s}$
Средна брзина	$\bar{c}, \bar{u}$	$\bar{c} = \int cF(c)dc$	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
Воопштена координата <sup>1</sup>	$q$		(m)
Воопштен импулс <sup>2</sup>	$p$	$p = \partial L / \partial \dot{q}$	$(\text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1})$
Волумен во фазниот простор	$\Omega$	$\Omega = (1/h) \int p dq$	1
Веројатност	$P$		1
Статистичка тежина, дегенерираност <sup>3</sup>	$g, d, W, \omega, \beta$		1
Густина на состојбите	$\rho(E)$	$\rho(E) = dN/dE$	$\text{J}^{-1}$
Партициона функција, сума по состојбите:			
за една молекула	$q, z$	$q = \sum_i g_i \exp(-\epsilon_i/kT)$	1
за каноничен систем	$Q, Z$		1
за микроканоничен систем	$\Omega$		1
за макроканоничен систем	$\Xi$		1
Симетриски број	$\sigma, s$		1
Параметар на реципрочната температура	$\beta$	$\beta = 1/kT$	$\text{J}^{-1}$
Карактеристична температура <sup>4</sup>	$\Theta, \theta$		K



1. Ако  $q$  е должина, тогаш  $p$  е количество движење (како што укажуваат единиците во заграда).

2. Во дефиницијата на  $p$ ,  $L$  означува Лагранжов (Lagrange) оператор.

3. Ознаката  $\beta$  обично се употребува за спинска статистичка тежина.

4. Одделните карактеристични температури се означуваат со супскрипти, како на пример: ротационата температура со  $\Theta_r = hc\tilde{B}/k$ ; вибрационата температура со  $\Theta_v = hc\tilde{\nu}/k$ ; Дебајовата (Debye) температура со  $\Theta_D = hc\tilde{\nu}_D/k$ ; Ајнштајновата (Einstein) температура со  $\Theta_E = hcv_E/k$ .

### 3.13. ТРАНСПОРТНИ СВОЈСТВА

Физичка величина	Симбол	Дефиниција	SI единица
Флукс (на величината $X$ )	$J_X, J$	$J_X = A^{-1}dX/dt$	променлива
Брзина на волуменски проток	$q_V, \dot{V}$	$q_V = dV/dt$	$m^3 \cdot s^{-1}$
Брзина на масен проток	$q_m, \dot{m}$	$q_m = dm/dt$	$kg \cdot s^{-1}$
Коефициент на пренос на маса	$k_d$		$m \cdot s^{-1}$
Брзина на топлински проток	$\phi$	$\phi = dq/dt$	W
Топлински флукс	$J_q$	$J_q = \phi / A$	$W \cdot m^{-2}$
Термичка кондуктанца	$G$	$G = \phi / \Delta T$	$W \cdot K^{-1}$
Термичка резистанца	$R$	$R = 1/G$	$K \cdot W^{-1}$
Термичка спроводливост	$\lambda, k$	$\lambda = J_q(dT/dl)$	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$
Коефициент на предавање на топлина	$h, (k, K, \alpha)$	$h = J_q / \Delta T$	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$
Термичка дифузивност	$a$	$a = \lambda / \rho c_p$	$m^2 \cdot s^{-1}$
Дифузионен коефициент	$D$	$D = J_n / (dc/dl)$	$m^2 \cdot s^{-1}$
Рејнолдсов (Reynold) број <sup>1</sup>	$Re$	$Re = \rho v l / \eta$	1
Ојлеров (Euler) број <sup>2</sup>	$Eu$	$Eu = \Delta p / \rho v^2$	1
Веберов (Weber) број <sup>3</sup>	$We$	$We = \rho v^2 l / \gamma$	1
Махов (Mach) број <sup>4</sup>	$Ma$	$Ma = v / c$	1
Фуриеов (Fourier) број <sup>5</sup>	$Fo$	$Fo = at / l^2$	1
Рејлиев (Reyleigh) број <sup>6</sup>	$Ra$	$Ra = l^3 g \alpha \Delta T \rho / \eta a$	1

1. Симболите  $\rho, v, l$  и  $\eta$  се однесуваат на величините густина, брзина, должина и вискозност, соодветно.

2. Симболите  $p, \rho$  и  $v$  се однесуваат на величините притисок, густина и брзина, соодветно.

3. Симболите  $\rho, v, l$  и  $\gamma$  се однесуваат на величините густина, брзина, должина и површински напон, соодветно.

4. Симболите  $v$  и  $c$  се однесуваат на величините брзина на определена честичка или тело, односно брзина на звукот, соодветно.

5. Симболите  $a, t$  и  $l$  се однесуваат на термичка дифузивност, време и должина, соодветно.

6. Симболите  $l, g, \alpha, T, \rho, \eta$  и  $a$  се однесуваат на должина, забрзување при слободно паѓање, експанзионен коефициент, температура, густина, вискозност и термичка дифузивност, соодветно.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Г. Јовановски, З. Здравковски, *Глас. хем. технол. Македонија*, **10** (1-2), 77 (1991).
- [2] Г. Јовановски, Б. Шоптрајанов, *Глас. хем. технол. Македонија*, **11** (1-2), 73 (1992).
- [3] Г. Јовановски, Б. Шоптрајанов, *Глас. хем. технол. Македонија*, **12** (1-2), 51 (1993).
- [4] Г. Јовановски, Б. Шоптрајанов, *Глас. хем. технол. Македонија*, **13** (1), 47 (1994).
- [5] I. Mills, C. Cvitaš, K. Homann, N. Kallay and K. Kuchitsu, *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*, International Union of Pure and Applied Chemistry, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1989.
- [6] T. Cvitaš, N. Kallay, *Fizičke veličine i jedinice Medjunarodnog sustava*, Hrvatsko kemijsko društvo, Zagreb, 1975.
- [7] Д. Темелковски, С. Пановски, Ж. Вуевски, *Меѓународен систем на мерни единици (SI)*, Просветно дело, Скопје, 1981.

## CALCULATION OF THE MOMENTS OF INERTIA OF A MOLECULE BY A COMPUTER PROGRAM IN BASIC

Vladimir M. Petrusovski<sup>1</sup> and Ljupka Pavos<sup>1</sup>Department of Natural Sciences, The "Ss. Cyril and Methodius" University, P.O. Box 162, 5500 Skopje, Macedonia

It is possible to calculate the moments of inertia of a molecule by using the principal values of the tensor of inertia. These moments are necessary at the calculation of the thermodynamic functions and prediction of some details of vibrational spectra. The program for calculating the moments of inertia is written in the language of BASIC. A program is also written for the calculation of the moments of inertia of a molecule by using the principal values of the tensor of inertia.

Key words: moments of inertia, molecule

## INTRODUCTION

It is well known that motions of an N-atomic molecule may be described by 3N independent coordinates, corresponding to the 3N degrees of freedom. If the molecule is not linear, these 3N motions may be classified as 3 translations, 3 rotations and 3N-6 vibrations.

In the rigid rotor-vibrator-harmonic oscillator approximation, which is a rule used in the calculation of thermodynamic functions (1), it is necessary to determine the set of normal vibrations, and the elementary moments of inertia of the molecule itself. The corresponding vibrational frequencies may be obtained by the study of the vibrational (IR and Raman) and microwave spectra of the compound in question.

Unfortunately, the vibrational frequencies and the numerical values of the elementary moments of inertia are not always available. In some cases they may not be obtained in the usual way because of the geometry of the molecule is unknown or changing. As a result of a crystal structure investigation, the set of molecular crystals often, the elementary moments

of the molecule is known, and small changes in the differences in the molecular geometry of the liquid and the gas phase, the moments of inertia may be calculated. The easiest way to do this is to use a computer. In certain cases (for molecules containing large number of atoms) one is not allowed to use a computer in the calculation of the moments of inertia, otherwise the calculation would be very lengthy and totally impractical. It is necessary to do this in more detail.

The point is that the moments of inertia of molecules are described by a second rank tensor. The principal values of this tensor (the elementary moments of inertia) are what one really needs for most problems in physical chemistry. These values may be calculated as the moments of inertia by the use of the so-called "elementary rotations". In certain cases these axes are determined by symmetry and although rotating the calculation is not very involved. When this is not the case, one has to use complicated auxiliary devices etc. This is a typical eigenvalue problem, hence the use of a computer is strongly recommended.

## THE COMPUTER PROGRAM

In order to solve the above problem, a computer program written in BASIC was developed. The pro-

gram was written on an IBM PC compatible format, using the QuickBasic interpreter/compiler.

<sup>1</sup>Corresponding author; e-mail: vpetrusovski@ptt.mk

© 1995 by the author(s). All rights reserved. This article is intended solely for the personal use of the individual user and is not to be disseminated broadly.

This article is copyrighted as indicated in the article. Reuse of AIP content is subject to the terms at: <http://scitation.org/termsconditions>. Downloaded to IP: 129.17.97.147 On: Tue, 17 Jun 2014 12:52:07

The program is available from the author upon request.