

СТАТЬИ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Индукционные процессы в нанокластере произвольной конфигурации образованном тремя нейтральными молекулами

В. В. Комаров,^{1, а} А. М. Попова,¹ Л. Шмидт,² Х. Юнгклас^{2, б}

¹ *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Россия, 119992, Москва, Ленинские горы, к. 19.*

² *Филиппс-университет, химический факультет. ФРГ, D-06421, Марбург.*

Поступила в редакцию 14.03.2019, после доработки 26.03.2019, принята к публикации 26.03.2019.

В настоящей работе получено аналитическое выражение для поля молекулярного дипольного момента в любой точке окружающего пространства. На основании этого выражения получены аналитические формулы для вычисления индуцированных дипольных моментов молекул в плоском нанокластере. Предполагается, что нанокластер содержит три нейтральные молекулы, одна из которых имеет постоянный дипольный момент. Полученные результаты обобщаются на случай трех молекулярных нанокластеров произвольной конфигурации.

Ключевые слова: трехмолекулярный нанокластер, индукционные процессы, дипольные моменты.

УДК: 539.19, 539.2. PACS: 30.00 — 34.10 — 36.40.

ВВЕДЕНИЕ

Рассматриваются индукционные процессы, протекающие в нанокластере, образованном тремя нейтральными молекулами M_1 , M_2 , M_3 , одна из которых, M_1 , имеет дипольный момент. Ранее эти процессы рассматривались в двух молекулярных системах, например [1, 2]. Исследования трех молекулярных систем были начаты нами в работах [3, 4], в которых предполагалась специальная пространственная конфигурация этой системы, ц. м. полярной молекулы находился в точке начала декартовой системы координат, а ее постоянный дипольный момент μ располагался вдоль положительной полуоси OZ . На этой же полуоси расположены ц. м. неполярных молекул M_2 и M_3 . Индуцированный дипольный момент каждой молекулы определяется суммой электростатических полей дипольных моментов молекул, окружающих рассматриваемую молекулу.

Выбор этой конфигурации был обусловлен тем, что в литературе имеется функция поля дипольного момента одной молекулы только для направления, совпадающего с направлением дипольного момента этой молекулы [1, 2]. В этой конфигурации векторы полей постоянного и индуцированных дипольных моментов всех трех молекул лежат на оси OZ и имеют одинаковое направление.

В работе [3] был предложен метод вычисления индуцированных дипольных моментов указанного выше трехмолекулярного нанокластера с учетом взаимной индукции молекул и получены аналитические выражения для индуцированных дипольных моментов всех трех молекул рассматриваемого нанокластера. На основании этих выражений в работе [4] были получены виды аналитических функций индукционных энергий молекул M_1 , M_2 и M_3 и вклад индукционных энергий молекул в полную энергию рассматриваемого нанокластера.

В настоящей работе получены аналитические выражения для индуцированных дипольных моментов молекул в трехмолекулярном нанокластере произвольной пространственной конфигурации. Для этого было получено аналитическое выражение для поля дипольного момента молекулы в направлении отличном от направления ее дипольного момента. При этом постоянный дипольный момент полярной молекулы M_1 не лежит на оси где расположены ц. м. всех трех молекул.

1. ПОЛЕ ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА МОЛЕКУЛЫ

Нейтральная молекула может иметь электрические свойства, если в ней ц. м. суммы равных по величине положительных зарядов q^+ и отрицательных зарядов q^- не совпадают. Такие молекулы имеют диполь, структурная формула которого имеет вид $(q^+|\ell|q^-)$, где ℓ — расстояние между ц. м. суммарных зарядов q^+ и q^- . Значение величины ℓ значительно меньше радиуса Ван-дер-Ваальса полярной молекулы.

Молекулярный диполь является вектором μ , значение которого есть $\mu = \ell q$. Предполагается, что вектор μ направлен от положительного заряда к отрицательному, и что ц. м. суммарного положительного заряда q^+ совпадает с ц. м. молекулы M_1 , а ц. м. отрицательного заряда расположен на расстоянии ℓ от q^+ [5, 6].

Для изучения индукционных процессов в трехмолекулярном нанокластере произвольной конфигурации необходимо иметь аналитическое выражение для значения поля дипольного момента молекул в произвольной точке пространства в окрестности каждой молекулы нанокластера. Для этого поместим ц. м. молекулы M_1 в точку O центра декартовой системы координат, предполагая, что вектор μ дипольного момента этой молекулы направлен вдоль положительной полуоси OZ ; при этом ц. м. суммарного заряда q^+ также находится в точке O , а ц. м. суммарного заряда q^- лежит на оси OZ на расстоянии ℓ от точки O . Будем называть в дальнейшем ось OZ осью дипольного момента молекулы M_1 .

^а E-mail: komarow@yandex.ru

^б E-mail: jungclas.staff@uni-marburg.de

Поскольку ось дипольного момента μ и некоторая точка M , в которой изучается поле дипольного момента, должны лежать в одной плоскости, то можно рассматривать данную задачу в плоской декартовой системе координат XOZ . Предположим, что точка M лежит в области положительных значений координат X и Z . Величина поля дипольного момента молекулы M_1 в точке M равна сумме векторов электростатических полей P^+ и P^- , соответствующих зарядам q^+ и q^- дипольного момента μ .

Векторы P^+ и P^- полей зарядов q^+ и q^- лежат на лучах, идущих от ц.м. положительного заряда и от ц.м. отрицательного заряда к точке M соответственно. Величина вектора P^+ есть $P^+ = -q/R^2$, где R — расстояние от ц.м. q^+ до точки M . Величина вектора $P^- = P^- = q[(R \cos \theta - \ell)^2 + R^2 \sin^2 \theta]^{-1}$, где θ — угол отклонения вектора R от положительной полуоси OZ или от оси дипольного момента μ . Предполагается, что точка M находится вне полярной молекулы M_1 , то есть R больше радиуса Ван-дер-Вальса рассматриваемой молекулы. Можно полагать с точностью $\ell/R \ll 1$, что векторы полей P^+ и P^- находятся на луче идущем от ц.м. полярной молекулы M_0 к точке M . Это значит, что вектор P_μ лежит на том же луче начинаясь в точке M и определяется уравнением

$$P_\mu = -q/R^2 + q/[(R \cos \theta - \ell)^2 + R^2 \sin^2 \theta].$$

Отсюда, P_μ с точностью $\ell/R \ll 1$ определяется уравнением

$$P_\mu = 2\mu \cos \theta / R^3.$$

Направление вектора P_μ определяется направлением того из векторов P^+ или P^- , значение которого больше.

Поскольку в данном случае значение $P^- > P^+$, вектор P_μ лежит на луче, идущем от M_1 к M , начинаясь в точке M , и направлен от ц.м. полярной молекулы M_1 .

Аналогичное рассмотрение поля дипольного момента μ этой молекулы показывает, что величина P_μ в некоторой точке симметричной относительно оси OZ точке M^* , расположенной в плоскости декартовой системы координат, где значения $X < 0$, и $Z > 0$ показывает, что значение P_μ определяется выражением

$$P_\mu = 2\mu \cos \theta / R^3.$$

Проведя аналогичный анализ, получим значение поля дипольного момента μ молекулы M_1 для произвольных симметричных относительно оси OZ точек в нижней полуплоскости ($Z < 0$) в виде:

$$P_\mu = -q/R^2 + q/[(R \cos \theta + \ell)^2 + R^2 \sin^2 \theta] = -2\mu \cos \theta / R^3,$$

где R — расстояние между ц.м. молекулы M_1 и произвольной точкой в нижней полуплоскости и угол θ — угол отклонения вектора R от положительной полуоси OZ . Косинус этого угла в нижней полуплоскости имеет отрицательное значение и равен

косинусу угла отклонения вектора R от отрицательной оси OZ . Отсюда следует, что

$$P_\mu = 2\mu |\cos \theta| / R^3.$$

Направление вектора P_μ в нижней полуплоскости совпадает с направлением вектора P^+ в этой полуплоскости, то есть P_μ лежит на луче R и направлен к ц.м. молекулы M_1 .

Величина вектора P_μ электростатического поля дипольного момента μ молекулы в произвольной точке находящейся на оси этого дипольного момента на расстоянии R от ц.м. M_1 определяется формулой $P_\mu = 2\mu/R^3$. Значение поля дипольного момента μ молекулы M_1 в точках на оси OX равно нулю.

2. ИНДУЦИРОВАННЫЕ ДИПОЛЬНЫЕ МОМЕНТЫ МОЛЕКУЛ В ТРЕХМОЛЕКУЛЯРНОМ НАНОКЛАСТЕРЕ ПРОИЗВОЛЬНОЙ КОНФИГУРАЦИИ

Рассмотрим индукционные процессы в нанокластере, образованном тремя органическими нейтральными молекулами M_1 , M_2 , M_3 , одна из которых, M_1 , имеет дипольный момент. Предположим, что этот нанокластер определен на плоскости и отличается от одномерного трехмолекулярного нанокластера, изученного нами в работе [7]. В рассматриваемом трехмолекулярном нанокластере ц.м. полярной молекулы M_1 ее дипольный момент μ и ц.м. одной из неполярных молекул M_2 лежат на одной оси. Определим эту ось как ось постоянного дипольного момента молекулы M_1 . Ц.м. третьей молекулы M_3 не лежит на этой оси, однако находится с ней в одной плоскости. Будем называть ее плоскостью декартовой системы координат XOZ , в которой ц.м. молекулы M_1 находится в начале координат. Ось дипольного момента молекулы M_1 есть ось OZ . Центры масс молекул M_1 и M_2 и вектор μ в рассматриваемом нанокластере лежат на положительной полуоси OZ . Ц.м. молекулы M_3 имеет координаты $X_3 > 0$, $Z_3 > 0$. При этом, Z_3 больше Z_2 молекулы M_2 . Ц.м. молекулы M_3 лежит на оси (M_1, M_3) , отклоненной от положительной полуоси OZ на угол θ_1 .

Наша задача определить индуцированные дипольные моменты молекул M_1 , M_2 и M_3 представленного нанокластера.

Индукированный дипольный момент каждой молекулы зависит от действия суммы полей дипольных моментов окружающих молекул.

Определим индуцированные дипольные моменты D_2 молекулы M_2 и D_3 молекулы M_3 в поле дипольного момента μ возникающие в ц.м. этих молекул с учетом их взаимной индукции. Назовем ось, на которой лежат ц.м. молекул M_2 и M_3 , осью взаимной индукции этих молекул с углом θ_2 отклонения от оси OZ . Пусть θ_3 есть угол между (M_2, M_3) и осью, на которой расположены ц.м. молекул M_1 , M_3 . Значение поля дипольного момента молекулы M_1 в ц.м. молекулы M_2 , как следует из разд. 1 настоящей работы, определяется выражением $P_\mu(M_2) = 2\mu/R_{12}^3$, где R_{12} — расстояние между ц.м. молекул M_1 и M_2 на оси дипольного момента μ . Вектор поля $P_\mu(M_2)$ лежит на оси OZ

и имеет направление от ц.м. молекулы M_1 . Отсюда индуцированный дипольный момент, возникающий в молекуле M_2 , лежащий на оси дипольного момента μ и имеющий направление от ц.м. M_1 , определяется выражением $2\alpha_2\mu/R_{12}^3$, где α_2 — коэффициент поляризации молекулы M_2 . Рассмотрим теперь поле индуцированного дипольного момента D_3 молекулы M_3 в ц.м. молекулы M_2 . Вектор этого поля $P_3(M_2)$ в ц.м. молекулы M_2 лежит на оси (M_2, M_3) и направлен к ц.м. молекулы M_3 . Значение поля дипольного момента $P_3(M_2)$ определяется проекцией D'_3 вектора D_3 на ось взаимной индукции (M_2, M_3) . Отсюда индуцированный дипольный момент, возникающий под действием этого поля $\alpha_2 D'_3/R_{23}^3$, лежит на оси (M_2, M_3) и направлен к ц.м. молекулы M_3 . Вектор D_2 является диагональю параллелограмма и одновременно диагональю прямоугольного четырехугольника, построенного на векторах D'_2 и перпендикулярного к ней D''_2 , где D'_2 — проекция D_2 на ось взаимной индукции (M_2, M_3) .

Уравнения для значений этих проекций индуцированного момента молекулы M_2 имеют вид:

$$D'_2 = (2\mu\alpha_2/R_{12}^3) \cdot \cos\theta_2 + 2D'_3\alpha_2/R_{23}^3. \quad (1)$$

$$D''_2 = (2\mu\alpha_2/R_{12}^3) \cdot \sin\theta_2.$$

Проведя аналогичный анализ для определения индуцированного дипольного момента D_3 , получим систему уравнений для D'_3 значения проекции индуцированного дипольного момента молекулы M_3 на ось взаимной индукции в ц.м. молекулы M_3 вдоль оси (M_2, M_3) и D''_3 , перпендикулярного к ней:

$$D'_3 = (2\mu\alpha_3/R_{13}^3) \cdot \cos\theta_1 \cdot \cos\theta_3 + 2D'_2\alpha_3/R_{23}^3. \quad (2)$$

$$D''_3 = (2\mu\alpha_3/R_{13}^3) \cdot \cos\theta_1 \cdot \sin\theta_3.$$

Решая совместно уравнения (1) и (2), получим

$$D'_2 = [(2\mu\alpha_2/R_{12}^3) \cdot \cos\theta_2 + (4\alpha_2\alpha_3\mu/R_{23}^3 R_{13}^3) \times \\ \times \cos\theta_1 \cdot \cos\theta_3] \cdot [1 - 4\alpha_2\alpha_3/R_{23}^6]^{-1},$$

$$D'_3 = [(2\mu\alpha_3/R_{13}^3) \cdot \cos\theta_1 \cdot \cos\theta_3 + \\ + (4\alpha_2\alpha_3\mu/R_{23}^3 R_{12}^3) \cdot \cos\theta_2] \cdot [1 - 4\alpha_2\alpha_3/R_{23}^6]^{-1}.$$

В результате индуцированные дипольные моменты D_2 и D_3 имеют значения:

$$D_2 = [D'^2_2 + D''^2_2]^{1/2},$$

$$D_3 = [D'^2_3 + D''^2_3]^{1/2}.$$

Пусть углы θ_4 и θ_5 являются углами отклонения векторов D_2 и D_3 от оси взаимной индукции (M_2, M_3) : $\cos\theta_4 = D'_2/D_2$ и $\cos\theta_5 = D'_3/D_3$.

Последовательно применяя метод анализа, изложенный выше, найдем сначала значения индуцированных дипольных моментов $D_{1,3}$ и $D_{2,3}$ молекул M_1 и M_2 в поле дипольного момента D_3 с учетом их взаимной индукции по оси (M_1, M_2) . Для этого определим параллельные $D'_{1,3}$ и $D'_{2,3}$ и перпендикулярные $D''_{1,3}$ и $D''_{2,3}$ значения проекций векторов $D_{1,3}$ и $D_{2,3}$ относительно оси (M_1, M_2) .

Значения векторов дипольных моментов, возникающих в молекулах M_1 , M_2 под действием полей

индуцированного дипольного момента D_3 по осям (M_3, M_1) и (M_3, M_2) равны: $(2D_3|\cos(\theta_3 - \theta_5)|/R_{13}^3)$ и $(2D'_3/R_{23}^3)$ соответственно. Следуя методу, предложенному выше, напишем уравнения для $D'_{1,3}$ и $D''_{1,3}$ и для $D'_{2,3}$ и $D''_{2,3}$ в виде:

$$D'_{1,3} = 2\alpha_1 D'_{2,3}/R_{12}^3 + \\ + 2\alpha_1 (2D_3|\cos(\theta_3 - \theta_5)|/R_{13}^3) \cdot \cos\theta_1, \quad (3)$$

$$D''_{1,3} = 2\alpha_1 (2D_3|\cos(\theta_3 - \theta_5)|/R_{13}^3) \sin\theta_1,$$

$$D'_{2,3} = 2\alpha_2 D'_{1,3}/R_{12}^3 + 2\alpha_2 (2D'_3/R_{23}^3) \cdot \cos\theta_2, \quad (4)$$

$$D''_{2,3} = (2D'_3/R_{23}^3) \sin\theta_2.$$

Решая совместно уравнения (3) и (4) получаем значения $D'_{1,3}$ и $D'_{2,3}$:

$$D'_{1,3} = [4\alpha_1\alpha_2 D_3|\cos(\theta_3 - \theta_5)|/R_{13}^3 R_{23}^3 + \\ + 2\alpha_1 (2D_3 \cos(\theta_3 - \theta_5)/R_{13}^3) \cdot \cos\theta_1] \cdot [1 - 4\alpha_1\alpha_2/R_{12}^6]^{-1},$$

$$D'_{2,3} = [4\alpha_1\alpha_2 D_3|\cos(\theta_3 - \theta_5)|/R_{13}^3 R_{23}^3 + \\ + 2\alpha_2 (2D_3 \cos(\theta_3 - \theta_5)/R_{23}^3) \cdot \cos\theta_2] \cdot [1 - 4\alpha_1\alpha_2/R_{12}^6]^{-1}.$$

Отсюда искоемые значения векторов $D_{1,3}$ и $D_{2,3}$ имеют вид:

$$D_{1,3} = (D'^2_{1,3} + D''^2_{1,3})^{1/2},$$

$$D_{2,3} = [D'^2_{2,3} + D''^2_{2,3}]^{1/2}.$$

Косинусы $\cos\theta_6$ и $\cos\theta_7$ углов отклонения векторов $D_{1,3}$ и $D_{2,3}$ от оси взаимной индукции (M_1, M_2) равны: $\cos\theta_6 = D'_{1,3}/D_{1,3}$, $\cos\theta_7 = D'_{2,3}/D_{2,3}$.

Применяя метод анализа взаимной индукции, предложенный в настоящей работе, найдем значения индуцированных дипольных моментов $D_{1,2}$ и $D_{3,2}$ молекул M_1 и M_2 в поле дипольного момента D_2 с учетом их взаимной индукции по оси (M_1, M_3) . Для этого определим параллельные $D'_{1,2}$ и $D'_{3,2}$ и перпендикулярные $D''_{1,2}$ и $D''_{3,2}$ значения проекций векторов $D_{1,2}$ и $D_{3,2}$ относительно оси (M_1, M_3) .

Значения векторов дипольных моментов, возникающих в молекулах M_1 , M_3 под действием полей индуцированного дипольного момента D_2 по осям (M_1, M_2) и (M_1, M_3) равны: $(2D_2|\cos(\theta_2 - \theta_6)|/R_{12}^3)$ и $(2D'_2/R_{23}^3)$ соответственно. Следуя методу, предложенному выше, напишем уравнения для $D'_{1,2}$ и $D''_{1,2}$ и для $D'_{3,2}$ и $D''_{3,2}$ в виде:

$$D'_{1,2} = 2\alpha_1 D'_{3,2}/R_{13}^3 + \\ + 2\alpha_1 (2D_2|\cos(\theta_2 - \theta_3)|/R_{12}^3) \cdot \cos\theta_1, \quad (5)$$

$$D''_{1,2} = 2\alpha_1 (2D_2|\cos(\theta_2 - \theta_3)|/R_{12}^3) \sin\theta_1,$$

$$D'_{3,2} = 2\alpha_3 D'_{1,2}/R_{12}^3 + 2\alpha_3 (2D'_2/R_{23}^3) \cdot \cos\theta_4, \quad (6)$$

$$D''_{3,2} = (2D'_2/R_{23}^3) \sin\theta_4.$$

Решая совместно уравнения (5) и (6), получаем значения $D'_{1,2}$ и $D'_{3,2}$:

$$D'_{1,2} = [4\alpha_1\alpha_2 D_2|\cos(\theta_2 - \theta_3)|/R_{13}^3 R_{23}^3 + \\ + 2\alpha_1 (2D_2 \cos(\theta_2 - \theta_3)/R_{13}^3) \cdot \cos\theta_1] \cdot [1 - 4\alpha_1\alpha_2/R_{12}^6]^{-1},$$

$$D'_{3,2} = [4\alpha_1\alpha_2 D_2|\cos(\theta_2 - \theta_3)|/R_{13}^3 R_{23}^3 + \\ + 2\alpha_2 (2D_2 \cos(\theta_2 - \theta_3)/R_{23}^3) \cdot \cos\theta_2] \cdot [1 - 4\alpha_1\alpha_2/R_{12}^6]^{-1}.$$

Отсюда искомые значения векторов $\mathbf{D}_{1,2}$ и $\mathbf{D}_{3,2}$ имеют вид:

$$D_{1,2} = (D_{1,2}^{\prime 2} + D_{1,2}^{\prime\prime 2})^{1/2}, D_{3,2} = (D_{3,2}^{\prime 2} + D_{3,2}^{\prime\prime 2})^{1/2}.$$

Косинусы $\cos \theta_8$ и $\cos \theta_9$ углов отклонения векторов $\mathbf{D}_{1,2}$ и $\mathbf{D}_{3,2}$ от оси взаимной индукции ($\mathbf{M}_1$, $\mathbf{M}_3$) равны: $\cos \theta_8 = D_{1,2}'/D_{1,2}$, $\cos \theta_9 = D_{3,2}'/D_{3,2}$.

Легко проверить, что при нулевых значениях углов θ_1 , θ_2 и θ_3 плоский трехмерный нанокластер переходит в одномерный, рассмотренный нами ранее [4, 7]. Предложенный в настоящей работе метод определения взаимной индукции применим к трехмолекулярным нанокластерам произвольной пространственной конфигурации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено исследование поля дипольного момента молекулы в произвольной точке окружающего ее пространства. Получено аналитическое выражение для величины вектора этого поля и определено его направление. Проведенный анализ позволил получить индуцированные дипольные моменты, возникающие в рассматриваемом плоском трехмолекулярном нанокластере. Для полярной молекулы $\mathbf{M}_1$, в дополнении к ее постоянному дипольному моменту $\boldsymbol{\mu}$, были получены два вектора индуцированных дипольных моментов $\mathbf{D}_{1,2}$, $\mathbf{D}_{1,3}$, возникающие под действием полей индуцированных дипольных моментов в неполярных молекулах $\mathbf{M}_2$ и $\mathbf{M}_3$ при образовании рассматриваемого нанокластера. Для неполярных молекул $\mathbf{M}_2$ и $\mathbf{M}_3$ в дополнение к индуцированным дипольным моментам $\mathbf{D}_2$ и $\mathbf{D}_3$ были

получены два вектора индуцированных дипольных моментов $\mathbf{D}_{2,3}$ и $\mathbf{D}_{3,2}$ соответственно, возникающие в процессе взаимной индукции при образовании рассматриваемого нанокластера. Проведенный анализ полученных значений индуцированных дипольных моментов молекул $\mathbf{M}_1$, $\mathbf{M}_2$ и $\mathbf{M}_3$ позволил заключить, что наиболее значительные индукционные процессы происходят при отклонении молекулы $\mathbf{M}_3$ от оси дипольного момента $\boldsymbol{\mu}$ или оси OZ на нулевой угол, т.е. в одномерном трехмолекулярном нанокластере. Возможно обобщение для нанокластеров произвольной конфигурации содержащих большее число молекул. Полученные результаты важны для анализа полной внутренней энергии и стабильности рассматриваемых молекулярных нанокластеров и для определения условий образования слоистых структур, состоящих из этих нанокластеров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Волкенштейн М.В. Строение и физические свойства молекул. Изд. АН СССР, 1955.
2. Stone A.J. The Theory of Intermolecular Forces, Clarendon Press, London, 1996.
3. Komarov V.V., Popova A.M., Schmidt L., Jungclas H.Z. // *Naturf.* 2013. 68a, P. 310.
4. Комаров В.В., Попова А.М., Шмидт Л., Юнгклас Х. // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* 2013. № 5. С. 3. (Komarov V.V., Popova A.M., Schmidt L., Jungclas H. // *Moscow Univ. Phys. Bull.* 2013. **68**, N 5. P. 339.)
5. Реутов О.А. Теоретические проблемы органической химии. Изд. МГУ, 1956.
6. Atkins P.W. Molecular Quantum Mechanics. Oxford University Press. 1982.
7. Komarov V.V., Popova A.M., Schmidt L., Jungclas H. // *Z. Naturf.* 2017. 72a. P. 17.

The Induction Processes in a Nanocluster of Arbitrary Configuration Formed by Three Neutral Molecules

V. V. Komarov^{1,a}, A. M. Popova¹, L. Schmidt², H. Jungclas^{2,b}

¹Lomonosov Moscow State University, Skobel'tzin Institute of Nuclear Physics. Moscow 119992, Russia.

²Chemistry Department Philipps-University. Marburg D-35032, Germany.

E-mail: ^avv.komarov@yandex.ru, ^bjungclas.staff@uni-marburg.de.

An analytical expression is obtained for the dipole moment field at an arbitrary point of the surrounding space of a molecule. It allows the inducing dipole moments of molecules to be evaluated in case of a three-molecule nanocluster, where one of constituent molecules possesses a permanent dipole moment. The results can be generalized for nanoclusters consisting of more than three molecules.

Keywords: three molecule nanocluster, induction processes, dipole moments.

PACS: 30.00 — 34.10 — 36.40

Received 14 March 2019.

English version: *Moscow University Physics Bulletin.* 2019. **74**, No. 4. Pp. 323–327.

Сведения об авторах

1. Комаров Вячеслав Викторович — доктор физ.-мат. наук, профессор, вед. науч. сотрудник; e-mail: vv.komarov@yandex.ru.
2. Попова Анна Михайловна — доктор физ.-мат. наук, профессор, вед. науч. сотрудник; e-mail: am.popowa@yandex.ru.
3. Шмидт Лотар — доктор; e-mail: jungclas.staff@uni-marburg.de.
4. Юнгклас Хартмут — доктор, профессор; e-mail: jungclas.staff@uni-marburg.de.