

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХАТОМНЫХ СОЕДИНЕНИЙ АРГОНА

Мальцев М.А.,^{*1,2} Морозов И.В.,¹ Осина Е.Л.¹

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия

*maksim.malcev@phystech.edu

Двухатомные соединения ионов аргона (аргиды) играют важную роль в масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой в силу того, что при использовании аргона в качестве буферного газа указанные соединения могут возникать при взаимодействии аргона с исследуемыми веществами и другими компонентами плазмы. Для учета возможных искажений результатов измерений из-за наложения спектральных линий соединений аргона и исследуемых веществ необходима информация о термодинамических свойствах аргидов.

В данной работе представлены расчеты термодинамических функций следующих двухатомных соединений с аргоном: ArV^+ , ArCo^+ , Ar_2 , Ar_2^+ , ArH и ArH^+ . За основу расчетов были взяты различные полуэмпирические и теоретические модели потенциальных кривых для основных и возбужденных электронных состояний. Далее численно было решено стационарное уравнение Шредингера и рассчитаны колебательно-вращательные спектры молекул с использованием программы LEVEL [1] и оригинальной программы, описанной в работе [2]. Из полученных спектров были определены внутренняя статистическая сумма и основные термодинамические функции в диапазоне температур от 298 до 10000 К. Результаты внесены в термодинамическую базу данных ИВТАНТЕРМО-Онлайн [3].

1. Le Roy R.J. A Computer program for solving the radial Shroedinger equation for bound and quasibound levels // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2016. V. 186. P. 167.
2. Maltsev M.A., Kulikov A.N., Morozov I.V. Thermodynamic properties of vanadium and cobalt argide ions, VAR^+ and CoAr^+ // Journal Conference Series. 2016. V. 774. P. 012023.
3. Belov G.V., Dyachkov S.A., Levashov P.R. et al. The IVTANTHERMO-Online database for thermodynamic properties of individual substances with web interface // J. Phys. Conf. Ser. 2018. V. 946 P. 012120.