

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХАТОМНЫХ СОЕДИНЕНИЙ АРГОНА

Мальцев М. А.,^{*1,2} Морозов И. В.,^{1,2} Осина Е. Л.,¹
Миненков Ю. В.^{1,3}

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

³ФИЦ ХФ РАН, Москва, Россия

*daerus21@yandex.ru

Двухатомные соединения аргона являются слабосвязанными молекулами, поэтому их экспериментальное исследование затруднено. В то же время эти соединения встречаются как в астрофизических газах, так и лабораторных условиях, в частности, при использовании аргона в качестве буферного газа для масс-спектрометрии с тлеющим разрядом или индуктивно-связанной плазмой. Учитывая высокую концентрацию аргона в такой плазме, даже небольшое количество соединений Ar с другими компонентами плазмы может существенно влиять на получаемые масс-спектры [1].

Для количественного и качественного анализа распространенности соединений аргона (аргидов) в низкотемпературной плазме необходимы данные об их термодинамических функциях. Более того, для исследования влияния параметров генерации плазмы на результаты масс-спектрометрического эксперимента необходимы температурные зависимости термодинамических функций в широком диапазоне температур (до 10 000 К). В случаях, когда данные о молекулярных постоянных двухатомных соединений имеют недостаточную точность или они отсутствуют, термодинамические функции могут быть получены на основе расчета энергетического спектра молекулы из потенциала межатомного взаимодействия, который в свою очередь может быть определен на основе квантово-химического моделирования [2–5].

В данной работе представлены результаты расчета термодинамических функций ArCo^+ , ArV^+ , Ar_2 , Ar_2^+ , ArO , ArO^+ , ArH , ArH^+ , ArN , ArN^+ . Полученные функции были использованы для термодинамического моделирования состава плазмы индуктивно-связанной плазмы, используемой в масс-спектрометрии.

-
1. Witte T.M., Houk R.S. // Spectrochimica Acta Part B. 2012. V. 69. P. 25
 2. Мальцев М.А., Осина Е. Л. // Вестник ОИВТ РАН. 2019. Т. 2, С. 41
 3. Мальцев М.А., Осина Е.Л., Морозов И.В. // ТВТ. 2019. Т. 57, С. 42
 4. Мальцев М.А., Осина Е.Л., Морозов И.В. // ТВТ. 2019. Т. 58, С. 367
 5. Maltsev M.A., Aksenova S.A., Morozov I.V., Minenkov Y., Osina E.L. // J. Comput. Chem. 2023 V. 44 P. 1189