



# Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

П. М. Кессельман, С. А. Щекатолина, Е. С. Якуб,  
Второй вириальный коэффициент для свободных и метастабильно связанных атомов, взаимодействующих по потенциалу Морзе, *ТВТ*, 1972, том 10, выпуск 1, 55–58

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.235.145.252

3 ноября 2024 г., 22:34:38



УДК 536.2

**ВТОРОЙ ВИРИАЛЬНЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ ДЛЯ СВОБОДНЫХ  
И МЕТАСТАБИЛЬНО СВЯЗАННЫХ АТОМОВ,  
ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ПО ПОТЕНЦИАЛУ МОРЗЕ**

*П. М. Кессельман, С. А. Щекатолина, Е. С. Якуб*

Рассчитан второй вириальный коэффициент метастабильно связанных пар атомов и затабулирован второй вириальный коэффициент свободных атомов, взаимодействующих по потенциалу Морзе.

Как известно [1], второй вириальный коэффициент, соответствующий взаимодействию двух частиц по кривой притягивательного типа, можно представить в виде суммы отдельных вкладов

$$B(T) = B_{\text{своб}} + B_{\text{связ}} + B_{\text{мет}}. \quad (1)$$

В правой части (1) слагаемые соответствуют взаимодействию свободных и связанных либо метастабильно связанных частиц.

В [2] затабулированы значения  $B(T)$  для одной из наиболее распространенных межатомных потенциальных функций — потенциала Морзе. В [3] для того же потенциала приведены значения  $B_{\text{несв}}$ , которые по смыслу работы [1] можно представить в виде суммы

$$B_{\text{несв}} = B_{\text{своб}} + B_{\text{мет}}. \quad (2)$$

Целью данной работы является табулирование  $B_{\text{своб}}$ . Выражение для  $B_{\text{мет}}$  приведено в [1]:

$$B_{\text{мет}} = -4\pi^{1/2} (kT)^{-3/2} \int_0^{K_{\text{макс}}} \exp\left(-\frac{K}{kT}\right) \times \\ \times \int_{r_f}^{r_h} \left[ K - U(r) - \frac{M^2}{2mr^2} \right]^{1/2} r^2 dr dK. \quad (3)$$

Используя потенциал Морзе

$$U = D_e [\exp(-2x) - 2\exp(-x)]; \quad x = 2\beta(r - r_e) / r_e,$$

где  $D_e$  — энергия диссоциации;  $r_e$  — равновесное расстояние;  $2\beta$  — параметр и вводя безразмерные величины

$$r^* = r/r_e; \quad T^* = kT/D_e; \quad K^* = K/D_e; \quad U^* = \frac{U}{D_e},$$

можно записать

$$B_{\text{мет}} = b_0 \cdot B_{\text{мет}}(T^*, 2\beta),$$

где

$$b_0 = 2^3 / 3\pi N r_e^3 \quad (\text{в расчете на моль}).$$

$2\beta = 1,4$				1,6			1,8		
$T^*$	$B^*(T^*)$	$B_{\text{несс}}^*$	$B_{\text{своб}}^*$	$B^*(T^*)$	$B_{\text{несс}}^*$	$B_{\text{своб}}^*$	$B^*(T^*)$	$B_{\text{несс}}^*$	$B_{\text{своб}}^*$
0,10	-0,5087·10 <sup>5</sup>	-99,92	-65,59	-0,6713·10 <sup>5</sup>	-71,53	-43,57	-0,5731·10 <sup>5</sup>	-53,03	-29,80
0,15	-0,4752·10 <sup>4</sup>	-73,02	-52,37	-0,3818·10 <sup>4</sup>	-51,60	-34,57	-0,3176·10 <sup>4</sup>	-38,95	-24,40
0,20	-0,1376·10 <sup>4</sup>	-56,82	-42,67	-0,1076·10 <sup>4</sup>	-41,25	-29,50	-0,8753·10 <sup>3</sup>	-30,74	-20,64
0,25	-0,6992·10 <sup>3</sup>	-47,50	-37,00	-0,5370·10 <sup>3</sup>	-34,77	-26,04	-0,4299·10 <sup>3</sup>	-25,94	-18,39
0,30	-0,4525·10 <sup>3</sup>	-41,16	-33,02	-0,3436·10 <sup>3</sup>	-30,09	-23,28	-0,2722·10 <sup>3</sup>	-22,62	-16,71
0,35	-0,3314·10 <sup>3</sup>	-36,41	-29,84	-0,2476·10 <sup>3</sup>	-26,51	-21,00	-0,1964·10 <sup>3</sup>	-19,97	-15,18
0,40	-0,2608·10 <sup>3</sup>	-32,64	-27,30	-0,1953·10 <sup>3</sup>	-23,67	-19,10	-0,1529·10 <sup>3</sup>	-17,66	-13,94
0,45	-0,2148·10 <sup>3</sup>	-29,49	-24,83	-0,1602·10 <sup>3</sup>	-21,22	-17,37	-0,1250·10 <sup>3</sup>	-15,94	-12,85
0,50	-0,1825·10 <sup>3</sup>	-26,78	-22,82	-0,1358·10 <sup>3</sup>	-19,34	-16,01	-0,1056·10 <sup>3</sup>	-14,53	-11,89
0,60	-0,1404·10 <sup>3</sup>	-22,75	-19,71	-0,1040·10 <sup>3</sup>	-16,48	-13,86	-0,8063·10 <sup>2</sup>	-12,59	-10,31
0,70	-0,1141·10 <sup>3</sup>	-19,86	-17,38	-0,8435·10 <sup>2</sup>	-14,52	-12,30	-0,6516·10 <sup>2</sup>	-10,42	-9,094
0,80	-0,9614·10 <sup>2</sup>	-17,83	-15,66	-0,7090·10 <sup>2</sup>	-12,83	-11,09	-0,5489·10 <sup>2</sup>	-9,665	-8,150
0,90	-0,8309·10 <sup>2</sup>	-15,98	-14,26	-0,6118·10 <sup>2</sup>	-11,51	-10,14	-0,4712·10 <sup>2</sup>	-8,697	-7,427
1,00	-0,7316·10 <sup>2</sup>	-14,69	-13,20	-0,5361·10 <sup>2</sup>	-10,647	-9,426	-0,4140·10 <sup>2</sup>	-8,072	-6,926
1,10	-0,6536·10 <sup>2</sup>	-13,40	-12,14	-0,4803·10 <sup>2</sup>	-9,784	-8,713	-0,3692·10 <sup>2</sup>	-7,447	-6,425
1,20	-0,5907·10 <sup>2</sup>	-12,36	-11,25	-0,4337·10 <sup>2</sup>	-9,029	-8,086	-0,3332·10 <sup>2</sup>	-6,855	-6,023
1,30	-0,5388·10 <sup>2</sup>	-11,48	-10,59	-0,3954·10 <sup>2</sup>	-8,367	-7,529	-0,3036·10 <sup>2</sup>	-6,333	-5,590
1,40	-0,4953·10 <sup>2</sup>	-10,71	-10,01	-0,3634·10 <sup>2</sup>	-7,787	-7,038	-0,2788·10 <sup>2</sup>	-5,889	-5,226
1,50	-0,4584·10 <sup>2</sup>	-10,04	-9,583	-0,3361·10 <sup>2</sup>	-7,287	-6,609	-0,2578·10 <sup>2</sup>	-5,514	-4,916

$2\beta = 2,0$				2,2			2,4		
$T^*$	$B^*(T^*)$	$B_{\text{несс}}^*$	$B_{\text{своб}}^*$	$B^*(T^*)$	$B_{\text{несс}}^*$	$B_{\text{своб}}^*$	$B^*(T^*)$	$B_{\text{несс}}^*$	$B_{\text{своб}}^*$
0,10	-0,4998·10 <sup>5</sup>	-41,32	-20,88	-0,4429·10 <sup>5</sup>	-32,98	-14,92	-0,3977·10 <sup>5</sup>	-27,32	-11,13
0,15	-0,2711·10 <sup>4</sup>	-30,30	-17,54	-0,2362·10 <sup>4</sup>	-24,60	-13,19	-0,2089·10 <sup>4</sup>	-20,62	-10,26
0,20	-0,7328·10 <sup>3</sup>	-24,43	-15,49	-0,6277·10 <sup>3</sup>	-20,05	-11,99	-0,5476·10 <sup>3</sup>	-16,66	-9,295
0,25	-0,3550·10 <sup>3</sup>	-20,64	-13,93	-0,3006·10 <sup>3</sup>	-17,04	-10,96	-0,2594·10 <sup>3</sup>	-14,00	-8,476
0,30	-0,2228·10 <sup>3</sup>	-17,63	-12,71	-0,1870·10 <sup>3</sup>	-14,76	-9,568	-0,1602·10 <sup>3</sup>	-12,50	-7,628
0,35	-0,1597·10 <sup>3</sup>	-15,41	-11,47	-0,1333·10 <sup>3</sup>	-12,99	-9,084	-0,1136·10 <sup>3</sup>	-10,44	-6,825
0,40	-0,1238·10 <sup>3</sup>	-13,70	-10,45	-0,1029·10 <sup>3</sup>	-11,51	-8,248	-0,8737·10 <sup>2</sup>	-9,275	-6,249
0,45	-0,1008·10 <sup>3</sup>	-12,35	-9,601	-0,8356·10 <sup>2</sup>	-10,33	-7,548	-0,7075·10 <sup>2</sup>	-8,301	-5,711
0,50	-0,8499·10 <sup>2</sup>	-11,61	-8,908	-0,7027·10 <sup>2</sup>	-9,263	-6,940	-0,5936·10 <sup>2</sup>	-7,521	-5,285
0,60	-0,6462·10 <sup>2</sup>	-9,804	-7,734	-0,5324·10 <sup>2</sup>	-7,814	-5,916	-0,4783·10 <sup>2</sup>	-6,391	-4,620
0,70	-0,5212·10 <sup>2</sup>	-8,504	-6,844	-0,4283·10 <sup>2</sup>	-6,804	-5,266	-0,3596·10 <sup>2</sup>	-5,574	-4,142
0,80	-0,4366·10 <sup>2</sup>	-7,543	-6,177	-0,3583·10 <sup>2</sup>	-6,036	-4,783	-0,3006·10 <sup>2</sup>	-4,957	-3,780
0,90	-0,3758·10 <sup>2</sup>	-6,784	-5,637	-0,3040·10 <sup>2</sup>	-5,878	-4,425	-0,2580·10 <sup>2</sup>	-4,522	-3,539
1,00	-0,3298·10 <sup>2</sup>	-6,316	-5,270	-0,2700·10 <sup>2</sup>	-5,301	-4,182	-0,2261·10 <sup>2</sup>	-4,232	-3,371
1,10	-0,2939·10 <sup>2</sup>	-5,849	-4,904	-0,2404·10 <sup>2</sup>	-4,725	-3,940	-0,2011·10 <sup>2</sup>	-3,942	-3,203
1,20	-0,2650·10 <sup>2</sup>	-5,377	-4,624	-0,2167·10 <sup>2</sup>	-4,355	-3,662	-0,1812·10 <sup>2</sup>	-3,611	-2,960
1,30	-0,2413·10 <sup>2</sup>	-4,968	-4,450	-0,1972·10 <sup>2</sup>	-4,028	-3,408	-0,1648·10 <sup>2</sup>	-3,344	-2,762
1,40	-0,2215·10 <sup>2</sup>	-4,628	-4,025	-0,1810·10 <sup>2</sup>	-3,760	-3,199	-0,1511·10 <sup>2</sup>	-3,125	-2,598
1,50	-0,2048·10 <sup>2</sup>	-4,344	-3,802	-0,1671·10 <sup>2</sup>	-3,533	-3,032	-0,1396·10 <sup>2</sup>	-2,936	-2,465

$2\beta = 2,6$				2,8			3,0		
$T^*$	$B^*(T^*)$	$B_{\text{несс}}^*$	$B_{\text{своб}}^*$	$B^*(T^*)$	$B_{\text{несс}}^*$	$B_{\text{своб}}^*$	$B^*(T^*)$	$B_{\text{несс}}^*$	$B_{\text{своб}}^*$
0,10	-0,3609·10 <sup>5</sup>	-22,79	-8,110	-0,3302·10 <sup>5</sup>	-19,70	-6,265	-0,3044·10 <sup>5</sup>	-17,04	-4,663
0,15	-0,1872·10 <sup>4</sup>	-17,56	-8,059	-0,1695·10 <sup>4</sup>	-14,84	-6,044	-0,1548·10 <sup>4</sup>	-12,68	-4,738
0,20	-0,4847·10 <sup>3</sup>	-14,30	-7,486	-0,4342·10 <sup>3</sup>	-11,69	-5,537	-0,3929·10 <sup>3</sup>	-10,56	-4,397
0,25	-0,2275·10 <sup>3</sup>	-11,90	-6,708	-0,2021·10 <sup>3</sup>	-9,612	-5,028	-0,1815·10 <sup>3</sup>	-8,401	-3,941
0,30	-0,1395·10 <sup>3</sup>	-10,03	-5,901	-0,1233·10 <sup>3</sup>	-8,212	-4,540	-0,1101·10 <sup>3</sup>	-7,169	-3,513
0,35	-0,9284·10 <sup>2</sup>	-8,693	-5,311	-0,8665·10 <sup>2</sup>	-7,394	-4,102	-0,7706·10 <sup>2</sup>	-6,295	-3,263
0,40	-0,7548·10 <sup>2</sup>	-7,655	-4,817	-0,6815·10 <sup>2</sup>	-6,489	-3,805	-0,5868·10 <sup>2</sup>	-5,604	-3,048
0,45	-0,6096·10 <sup>2</sup>	-6,883	-4,432	-0,5329·10 <sup>2</sup>	-5,857	-3,554	-0,4716·10 <sup>2</sup>	-5,057	-2,863
0,50	-0,5104·10 <sup>2</sup>	-6,275	-4,171	-0,4454·10 <sup>2</sup>	-5,343	-3,344	-0,3935·10 <sup>2</sup>	-4,615	-2,706
0,60	-0,3853·10 <sup>2</sup>	-5,348	-3,883	-0,3344·10 <sup>2</sup>	-4,563	-3,089	-0,2946·10 <sup>2</sup>	-3,948	-2,433
0,70	-0,3075·10 <sup>2</sup>	-4,678	-3,393	-0,2674·10 <sup>2</sup>	-3,990	-2,828	-0,2351·10 <sup>2</sup>	-3,520	-2,371
0,80	-0,2568·10 <sup>2</sup>	-4,215	-3,312	-0,2226·10 <sup>2</sup>	-3,649	-2,601	-0,1935·10 <sup>2</sup>	-3,172	-2,242
0,90	-0,2202·10 <sup>2</sup>	-3,850	-2,902	-0,1907·10 <sup>2</sup>	-3,328	-2,440	-0,1673·10 <sup>2</sup>	-2,876	-2,123
1,00	-0,1927·10 <sup>2</sup>	-3,565	-2,751	-0,1668·10 <sup>2</sup>	-3,070	-2,347	-0,1461·10 <sup>2</sup>	-2,650	-1,948
1,10	-0,1713·10 <sup>2</sup>	-3,281	-2,611	-0,1481·10 <sup>2</sup>	-2,812	-2,255	-0,1297·10 <sup>2</sup>	-2,425	-1,774
1,20	-0,1542·10 <sup>2</sup>	-3,040	-2,471	-0,1333·10 <sup>2</sup>	-2,592	-2,072	-0,1166·10 <sup>2</sup>	-2,242	-1,672
1,30	-0,1402·10 <sup>2</sup>	-2,821	-2,269	-0,1211·10 <sup>2</sup>	-2,410	-1,880	-0,1091·10 <sup>2</sup>	-2,085	-1,574
1,40	-0,1285·10 <sup>2</sup>	-2,637	-2,136	-0,1110·10 <sup>2</sup>	-2,253	-1,773	-0,9701·10 <sup>1</sup>	-1,945	-1,484
1,50	-0,1187·10 <sup>2</sup>	-2,475	-2,027	-0,1024·10 <sup>2</sup>	-2,111	-1,682	-0,8948·10 <sup>1</sup>	-1,821	-1,407

23 = 3,2						3,4			3,6		
T*	B*(T*)	B <sub>Hecc</sub> *	B <sub>Choo6</sub> *	B*(T*)	B <sub>Hecc</sub> *	B <sub>Choo6</sub> *	B*(T*)	B <sub>Hecc</sub> *	B <sub>Choo6</sub> *		
0,10	-0,2823·10 <sup>4</sup>	-14,95	-3,482	-0,2633·10 <sup>4</sup>	-13,27	-2,800	-0,2466·10 <sup>5</sup>	-12,09	-2,044		
0,15	-0,1424·10 <sup>4</sup>	-11,08	-3,618	-0,1318·10 <sup>4</sup>	-9,859	-2,810	-0,1227·10 <sup>5</sup>	-8,901	-2,080		
0,20	-0,3585·10 <sup>3</sup>	-8,813	-3,318	-0,3295·10 <sup>3</sup>	-7,843	-2,368	-0,3047·10 <sup>5</sup>	-6,977	-1,911		
0,25	-0,1625·10 <sup>3</sup>	-7,289	-2,997	-0,1503·10 <sup>3</sup>	-6,483	-2,358	-0,1332·10 <sup>5</sup>	-5,736	-1,728		
0,30	-0,9936·10 <sup>2</sup>	-6,283	-2,769	-0,8030·10 <sup>2</sup>	-5,523	-2,177	-0,5791·10 <sup>5</sup>	-4,882	-1,673		
0,35	-0,5239·10 <sup>2</sup>	-5,480	-2,585	-0,6277·10 <sup>2</sup>	-4,822	-2,046	-0,5791·10 <sup>5</sup>	-4,261	-1,591		
0,40	-0,3225·10 <sup>2</sup>	-4,884	-2,457	-0,4774·10 <sup>2</sup>	-4,190	-1,930	-0,4330·10 <sup>5</sup>	-3,788	-1,520		
0,45	-0,2412·10 <sup>2</sup>	-4,408	-2,304	-0,3505·10 <sup>2</sup>	-3,870	-1,772	-0,3460·10 <sup>5</sup>	-3,414	-1,403		
0,50	-0,3512·10 <sup>1</sup>	-4,024	-2,180	-0,3163·10 <sup>1</sup>	-3,529	-1,772	-0,2872·10 <sup>5</sup>	-3,113	-1,389		
0,60	-0,2090·10 <sup>2</sup>	-3,434	-1,943	-0,2377·10 <sup>2</sup>	-3,038	-1,546	-0,1694·10 <sup>5</sup>	-2,366	-1,218		
0,70	-0,1735·10 <sup>2</sup>	-2,785	-1,845	-0,1554·10 <sup>2</sup>	-2,412	-1,480	-0,1403·10 <sup>5</sup>	-2,115	-1,158		
0,80	-0,1483·10 <sup>2</sup>	-2,511	-1,745	-0,1327·10 <sup>2</sup>	-2,192	-1,390	-0,1199·10 <sup>5</sup>	-1,943	-1,106		
0,90	-0,1294·10 <sup>2</sup>	-2,315	-1,659	-0,1075·10 <sup>2</sup>	-2,032	-1,312	-0,1042·10 <sup>5</sup>	-1,804	-1,088		
1,00	-0,1146·10 <sup>2</sup>	-2,110	-1,459	-0,9206·10 <sup>1</sup>	-1,872	-1,244	-0,9231·10 <sup>4</sup>	-1,653	-1,040		
1,30	-0,1031·10 <sup>2</sup>	-1,960	-1,409	-0,9206·10 <sup>1</sup>	-1,729	-1,180	-0,8282·10 <sup>4</sup>	-1,534	-1,011		
1,40	-0,9363·10 <sup>1</sup>	-1,821	-1,322	-0,8352·10 <sup>1</sup>	-1,603	-1,120	-0,7508·10 <sup>4</sup>	-1,421	-0,9492		
1,50	-0,7902·10 <sup>1</sup>	-1,697	-1,187	-0,7141·10 <sup>1</sup>	-1,494	-1,060	-0,6865·10 <sup>4</sup>	-1,326	-0,9026		
					-1,400	-1,008	-0,6323·10 <sup>4</sup>	-1,243	-0,8591		

23 = 3,8						4,0			4,2		
T*	B*(T*)	B <sub>Hecc</sub> *	B <sub>Choo6</sub> *	B*(T*)	B <sub>Hecc</sub> *	B <sub>Choo6</sub> *	B*(T*)	B <sub>Hecc</sub> *	B <sub>Choo6</sub> *		
0,10	-0,2320·10 <sup>4</sup>	-11,06	-1,220	-0,2190·10 <sup>4</sup>	-9,936	-0,6883	-0,2073·10 <sup>5</sup>	-9,078	-0,1967		
0,15	-0,1148·10 <sup>4</sup>	-7,957	-1,526	-0,1078·10 <sup>4</sup>	-7,042	-1,0325	-0,1016·10 <sup>5</sup>	-6,396	-0,4705		
0,20	-0,2833·10 <sup>3</sup>	-6,212	-1,424	-0,2646·10 <sup>3</sup>	-5,578	-1,1297	-0,2482·10 <sup>5</sup>	-5,067	-0,6525		
0,25	-0,1279·10 <sup>3</sup>	-5,098	-1,303	-0,1189·10 <sup>3</sup>	-4,716	-1,0807	-0,1114·10 <sup>5</sup>	-4,297	-0,7887		
0,30	-0,7633·10 <sup>2</sup>	-4,336	-1,251	-0,7063·10 <sup>2</sup>	-3,978	-1,0240	-0,6577·10 <sup>5</sup>	-3,620	-0,8088		
0,35	-0,5287·10 <sup>2</sup>	-3,781	-1,206	-0,4887·10 <sup>2</sup>	-3,475	-0,9536	-0,5320·10 <sup>5</sup>	-3,152	-0,8088		
0,40	-0,3970·10 <sup>2</sup>	-3,380	-1,169	-0,3601·10 <sup>2</sup>	-3,083	-0,9064	-0,4320·10 <sup>5</sup>	-2,801	-0,7602		
0,45	-0,3166·10 <sup>2</sup>	-3,031	-1,138	-0,2819·10 <sup>2</sup>	-2,783	-0,8664	-0,3394·10 <sup>5</sup>	-2,529	-0,7401		
0,50	-0,2624·10 <sup>2</sup>	-2,768	-1,108	-0,2242·10 <sup>2</sup>	-2,531	-0,8311	-0,2637·10 <sup>5</sup>	-2,305	-0,7201		
0,60	-0,1943·10 <sup>2</sup>	-2,509	-1,064	-0,1785·10 <sup>2</sup>	-2,149	-0,7920	-0,1647·10 <sup>5</sup>	-2,005	-0,7010		
0,70	-0,1543·10 <sup>2</sup>	-2,297	-1,022	-0,1413·10 <sup>2</sup>	-1,886	-0,8454	-0,1300·10 <sup>5</sup>	-1,705	-0,6799		
0,80	-0,1275·10 <sup>2</sup>	-1,992	-0,990	-0,1168·10 <sup>2</sup>	-1,689	-0,8122	-0,1072·10 <sup>5</sup>	-1,520	-0,6608		
0,90	-0,1086·10 <sup>2</sup>	-1,722	-0,940	-0,9924·10 <sup>1</sup>	-1,574	-0,7801	-0,9113·10 <sup>4</sup>	-1,411	-0,6462		
1,00	-0,9456·10 <sup>1</sup>	-1,465	-0,904	-0,8629·10 <sup>1</sup>	-1,456	-0,7562	-0,7916·10 <sup>4</sup>	-1,310	-0,6295		
1,10	-0,8387·10 <sup>1</sup>	-1,381	-0,869	-0,7639·10 <sup>1</sup>	-1,338	-0,7323	-0,6993·10 <sup>4</sup>	-1,209	-0,6129		
1,20	-0,7501·10 <sup>1</sup>	-1,361	-0,838	-0,6817·10 <sup>1</sup>	-1,222	-0,7068	-0,6299·10 <sup>4</sup>	-1,102	-0,5924		
1,30	-0,6735·10 <sup>1</sup>	-1,261	-0,799	-0,6187·10 <sup>1</sup>	-1,131	-0,6781	-0,5682·10 <sup>4</sup>	-1,019	-0,5726		
1,40	-0,6210·10 <sup>1</sup>	-1,177	-0,763	-0,5687·10 <sup>1</sup>	-1,053	-0,6487	-0,5167·10 <sup>4</sup>	-0,930	-0,5526		
1,50	-0,5716·10 <sup>1</sup>	-1,102	-0,726	-0,5197·10 <sup>1</sup>	-0,983	-0,6171	-0,4730·10 <sup>4</sup>	-0,858	-0,5327		

23 = 4,4						4,6			4,8		
T*	B*(T*)	B <sub>Hecc</sub> *	B <sub>Choo6</sub> *	B*(T*)	B <sub>Hecc</sub> *	B <sub>Choo6</sub> *	B*(T*)	B <sub>Hecc</sub> *	B <sub>Choo6</sub> *		
0,10	-0,1969·10 <sup>4</sup>	-7,894	+0,1068	-0,1874·10 <sup>4</sup>	-7,592	+0,2040	-0,1789·10 <sup>5</sup>	-6,983	+0,4189		
0,15	-0,9869·10 <sup>3</sup>	-5,844	-0,1560	-0,9117·10 <sup>3</sup>	-5,368	+0,0198	-0,8665·10 <sup>5</sup>	-4,943	+0,1667		
0,20	-0,2326·10 <sup>3</sup>	-4,638	-0,3254	-0,2207·10 <sup>3</sup>	-4,247	-0,1482	-0,2091·10 <sup>5</sup>	-3,913	+0,0234		
0,25	-0,1022·10 <sup>3</sup>	-3,929	-0,4491	-0,9807·10 <sup>2</sup>	-3,603	-0,2383	-0,9230·10 <sup>5</sup>	-3,314	+0,1003		
0,30	-0,6150·10 <sup>2</sup>	-3,305	-0,5470	-0,3972·10 <sup>2</sup>	-3,031	-0,3304	-0,4346·10 <sup>5</sup>	-2,785	+0,1806		
0,35	-0,4216·10 <sup>2</sup>	-2,874	-0,5846	-0,3949·10 <sup>2</sup>	-2,631	-0,3862	-0,3711·10 <sup>5</sup>	-2,443	+0,2527		
0,40	-0,3160·10 <sup>2</sup>	-2,561	-0,5610	-0,2934·10 <sup>2</sup>	-2,106	-0,4227	-0,2772·10 <sup>5</sup>	-2,151	+0,2857		
0,45	-0,2508·10 <sup>2</sup>	-2,305	-0,5403	-0,2341·10 <sup>2</sup>	-1,612	-0,4451	-0,2103·10 <sup>5</sup>	-1,932	+0,3196		
0,50	-0,1525·10 <sup>2</sup>	-1,776	-0,5621	-0,1419·10 <sup>2</sup>	-1,612	-0,4468	-0,1326·10 <sup>5</sup>	-1,485	+0,3394		
0,60	-0,1203·10 <sup>2</sup>	-1,529	-0,5420	-0,1117·10 <sup>2</sup>	-1,412	-0,4488	-0,1041·10 <sup>5</sup>	-1,162	+0,3624		
0,70	-0,9906·10 <sup>1</sup>	-1,126	-0,5409	-0,9189·10 <sup>1</sup>	-1,270	-0,4475	-0,8565·10 <sup>4</sup>	-1,015	+0,3811		
0,80	-0,8409·10 <sup>1</sup>	-1,126	-0,5282	-0,7791·10 <sup>1</sup>	-1,145	-0,4470	-0,7272·10 <sup>4</sup>	-0,976	+0,3861		
0,90	-0,7299·10 <sup>1</sup>	-1,096	-0,5292	-0,6753·10 <sup>1</sup>	-0,999	-0,4392	-0,6274·10 <sup>4</sup>	-0,908	+0,3862		
1,00	-0,6439·10 <sup>1</sup>	-1,096	-0,5000	-0,5919·10 <sup>1</sup>	-0,908	-0,4284	-0,5323·10 <sup>4</sup>	-0,825	+0,3888		
1,200	-0,5263·10 <sup>1</sup>	-0,922	-0,4632	-0,4804·10 <sup>1</sup>	-0,808	-0,4045	-0,4430·10 <sup>4</sup>	-0,761	+0,3427		
1,400	-0,4786·10 <sup>1</sup>	-0,858	-0,4647	-0,4377·10 <sup>1</sup>	-0,718	-0,3839	-0,4051·10 <sup>4</sup>	-0,707	+0,3233		
1,500	-0,4360·10 <sup>1</sup>	-0,802	-0,4473	-0,4018·10 <sup>1</sup>	-0,726	-0,3713	-0,3716·10 <sup>4</sup>	-0,659	+0,3085		

$2\beta = 5,0$				5,2		
$T^*$	$B^*(T^*)$	$B_{\text{несп}}^*$	$B_{\text{своб}}^*$	$B^*(T^*)$	$B_{\text{несп}}^*$	$B_{\text{своб}}^*$
0,10	-0,1710·10 <sup>3</sup>	-6,432	+0,5080	-0,1639·10 <sup>3</sup>	-6,026	+0,6202
0,15	-0,8281·10 <sup>3</sup>	-4,574	+0,2767	-0,7895·10 <sup>3</sup>	-4,353	+0,4004
0,20	-0,1987·10 <sup>3</sup>	-3,665	+0,1305	-0,1892·10 <sup>3</sup>	-3,462	+0,2525
0,25	-0,8768·10 <sup>3</sup>	-3,040	-0,0241	-0,8332·10 <sup>3</sup>	-2,840	+0,1469
0,30	-0,5137·10 <sup>3</sup>	-2,568	-0,0585	-0,4866·10 <sup>3</sup>	-2,400	+0,0586
0,35	-0,3499·10 <sup>3</sup>	-2,230	-0,1205	-0,3309·10 <sup>3</sup>	-2,069	-0,0041
0,40	-0,2609·10 <sup>3</sup>	-1,880	-0,1662	-0,2463·10 <sup>3</sup>	-1,830	-0,0594
0,45	-0,2081·10 <sup>3</sup>	-1,777	-0,2084	-0,1944·10 <sup>3</sup>	-1,641	-0,0984
0,50	-0,1686·10 <sup>3</sup>	-1,613	-0,2380	-0,1597·10 <sup>3</sup>	-1,488	-0,1289
0,60	-0,1242·10 <sup>3</sup>	-1,364	-0,2762	-0,1168·10 <sup>3</sup>	-1,257	-0,1769
0,70	-0,9746·10 <sup>3</sup>	-1,185	-0,2841	-0,9146·10 <sup>3</sup>	-1,091	-0,1964
0,80	-0,7994·10 <sup>3</sup>	-1,065	-0,2854	-0,7492·10 <sup>3</sup>	-0,969	-0,2080
0,90	-0,6761·10 <sup>3</sup>	-0,950	-0,2868	-0,6328·10 <sup>3</sup>	-0,861	-0,2196
1,00	-0,5848·10 <sup>3</sup>	-0,875	-0,2878	-0,5467·10 <sup>3</sup>	-0,801	-0,2230
1,10	-0,5145·10 <sup>3</sup>	-0,800	-0,2889	-0,4805·10 <sup>3</sup>	-0,740	-0,2265
1,20	-0,4588·10 <sup>3</sup>	-0,753	-0,2824	-0,4280·10 <sup>3</sup>	-0,685	-0,2228
1,30	-0,4136·10 <sup>3</sup>	-0,694	-0,2729	-0,3855·10 <sup>3</sup>	-0,634	-0,2180
1,40	-0,3762·10 <sup>3</sup>	-0,644	-0,2841	-0,3503·10 <sup>3</sup>	-0,588	-0,2106
1,50	-0,3447·10 <sup>3</sup>	-0,600	-0,2525	-0,3207·10 <sup>3</sup>	-0,546	-0,2024

Расчетное выражение для  $B_{\text{мет}}^*$  имеет вид

$$B_{\text{мет}}^* = -6\pi^{-1/2} T^{*-3/2} \int_0^{K_{\text{макс}}^*} \exp\left(-\frac{K^*}{T^*}\right) \times \\ \times \int_{r_f^*}^{r_h^*} \left\{ K^* - U^* - \left(\frac{r_h^*}{r^*}\right)^2 [K^* - U^*(r_h^*)]^{1/2} \right\} r^{*2} dr^* dK^*. \quad (4)$$

Координата максимума  $r_h^*(K^*)$  эффективной потенциальной функции  $U_{\text{эф}}^*$  [1] определялась как больший корень уравнения

$$K^* = (1 - 2\beta r_h^*) U^*(r_h^*) - 2\beta r_h^* \exp[-2\beta(r_h^* - 1)]. \quad (5)$$

Нижний предел  $r_f^*(K^*)$  находился из уравнения

$$(r_h^* - r_f^*) K^* = r_h^{*2} U^*(r_h^*) - r_f^{*2} U^*(r_f^*), \quad (6)$$

что соответствует условию  $U_{\text{эф}}^*(r_h^*) = U_{\text{эф}}^*(r_f^*)$  применительно к потенциалу Морзе. Предел внешнего интеграла  $K_{\text{макс}}^*(2\beta)$  можно получить из условия  $r_h^*(K_{\text{макс}}^*) = r_f^*(K_{\text{макс}}^*)$ , что дает

$$\exp[-2\beta(r_m^* - 1)] = 1 - 2\beta r_m^* / (4\beta r_m^* - 3). \quad (7)$$

Выражение (4) совместно с (5)–(7) было использовано для вычисления  $B_{\text{мет}}^*$  на ЭЦВМ.

Затем по данным [3] были рассчитаны значения

$$B_{\text{своб}}^* = B_{\text{несп}}^* - B_{\text{мет}}^*.$$

В таблице приведены результаты расчета  $B_{\text{своб}}^*$  в интервале  $0,1 \leq T^* \leq 1,5$  и  $1,4 \leq 2\beta \leq 5,2$ . Для полноты там же приведены значения  $B^*(T^*)$  [2] и  $B_{\text{несп}}^*$  [3], причем в последних исправлены некоторые неточности и опечатки.

Одесский технологический институт  
холодильной промышленности

Поступила в редакцию  
4 I 1971

#### ЛИТЕРАТУРА

1. D. E. Stogryn, J. O. Hirschfelder. J. of Chem. Phys., 31, 1531, 1959; 33, 942, 1960.
2. Е. В. Самуйлов, И. Б. Рождественский. В сб. Физическая газодинамика, теплообмен и термодинамика газов высоких температур. Изд. АН СССР, 1962, стр. 78.
3. П. М. Кессельман. В сб. Теплофизические свойства газов. «Наука», 1970, стр. 67.