

1 Константа равновесия двухатомной молекулы в приближении ЖР-ГО

$$K_p = \Lambda^3 \frac{kT}{(h\omega)(hcB\chi)} \left[\exp\left(\frac{D_e}{kT}\right) - \left(1 + \frac{D_e}{kT}\right) \right],$$

$$\Lambda = \frac{h}{(2\pi\mu_c kT)^{\frac{1}{2}}}$$

Исходя из соображений размерности вращательная постоянная B должна быть выражена в см^{-1} . Тогда произведение $c \cdot B$ будет представлено в Hz .

Для потенциала Юли нашел следующие параметры потенциала и слабосвязанного комплекса:

$R_m, \text{\AA}$	$D_e, \text{см}^{-1}$	$\omega, \text{см}^{-1} // \text{Hz}$	$B, \text{см}^{-1} // \text{Hz}$
3.436	195.64	26.94 $8.081 \cdot 10^{11}$	6.809 $2.041 \cdot 10^{11}$

2 Полный фазовый интеграл для двухатомной молекулы

$$K_c = \frac{\frac{Q_{complex}}{N_A V}}{\frac{Q_{Ar}}{N_A V} \frac{Q_{CO_2}}{N_A V}} = N_A V \frac{Q_{complex}}{Q_{Ar} Q_{CO_2}}$$

$$K_p = \frac{N_A}{RT} \left(V \frac{Q_{complex}}{Q_{Ar} Q_{CO_2}} \right)$$

Скобка в выражении для константы K_p была рассчитана в атомных единицах, затем переведена в систему СИ (т.е. умножена на *atomic length unit*³, т.к. статсуммы безразмерны). При этом объемы, содержащиеся в поступательных статсуммах сокращаются с объемом перед дробью.

$$Q_{Ar} = \left(\frac{2\pi m_{Ar} kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} [CI] \rightarrow \left(\frac{m_{Ar} kT}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} [AC]$$

$$Q_{complex} = Q_{tr} \times \frac{32\pi^3}{h^4} \int_{H<0} \exp\left(-\frac{p_R^2}{2\mu kT}\right) dp_R \int_{H<0} J^2 \exp\left(-\frac{J^2}{2\mu R^2 kT} - \frac{U}{kT}\right) dJ dR [CI] \rightarrow$$

$$\rightarrow Q_{tr} \times \frac{2}{\pi} \int_{H<0} \exp\left(-\frac{p_R^2}{2\mu kT}\right) dp_R \int_{H<0} J^2 \exp\left(-\frac{J^2}{2\mu R^2 kT} - \frac{U}{kT}\right) dJ dR [AC]$$