

Thermophysical Properties of the Mixture of Diluted Gases on the Basis of Model Potentials. Mercury – Helium System

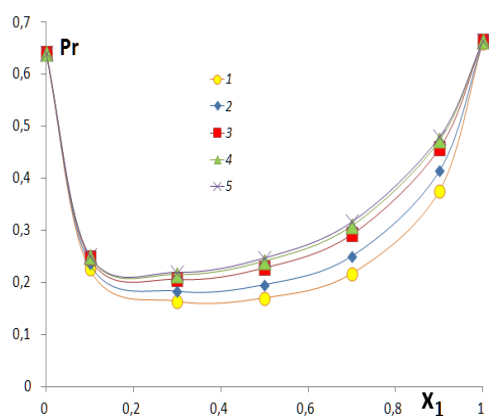
V.N. Popov, L.R. Fokin

Joint Institute for High Temperatures RAS, Moscow, 125412, Russia
popov.valentin29@mail.ru, lfokin@mail.ru

Abstract

The mercury – helium mixture are considered as «test-bed » system for transport properties of binary diluted gas mixtures. Three interatomic potentials Hg -Hg, He -He and Hg -He in the ground state were analyzed. For these potentials the collision integrals were calculated, and then based on the ratio of molecular - kinetic theory the transport properties of mercury, helium and a mercury -helium gas mixture were calculated: viscosity, thermal conductivity, coefficients of self- and mutual diffusion of the components. For convenience, in an article on the five isotherms in the range of 300 ÷ 2000 K the tables of properties in the range of concentrations of a mixture of 0.001 ÷ 0.999 are given. The tables also contain the values of the second virial coefficient, thermal diffusion factor, the Prandtl number Pr and the Schmidt number Sc used in modeling heat and mass transfer in gases and gas mixtures. The peculiarities of the behavior of properties on isotherms were considered also.

Keywords: gas mixture, mercury, helium, interatomic potentials, transport properties, Prandtl number.



Prandtl number : 1 – $T = 300$ K;
2 – $T = 500$ K; 3 – $T = 1000$ K;
4 – $T = 1500$ K; 5 – $T = 2000$ K

The properties of the mixture of diluted gases mercury-helium

$[\mu]_2 = \text{Pa s}$, $[\lambda]_2 = \text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$, $[D_{12}]_2 = \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$, $[c_p] = \text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$, $[B] = \text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$								
T , K	x (Hg)	0.001	0.1	0.3	0.5	0.7	0.9	0.999
300	$[\mu]_2 \cdot 10^6$	20.04	28.16	29.98	29.10	28.06	27.15	26.75
	$[\lambda]_2 \cdot 10^3$	154.7	109.7	60.84	35.08	19.16	8.357	4.198
	$[D_{12}]_2$	0.5628	0.5677	0.5732	0.5761	0.5779	0.5791	0.5796
	α_T	0.9852	0.7660	0.5284	0.4033	0.3261	0.2737	0.2535
	c_p^*	4950	878.5	330.0	203.2	146.8	114.9	103.7
	Pr	0.6412	0.2263	0.1640	0.1704	0.2173	0.3761	0.6611
	Sc	2.087	0.5160	0.2044	0.1216	0.0844	0.0638	0.0567
	B	11.58	10.38	-22.33	-95.54	-209.3	-363.5	-454.8

УДК 546.212 + 533.16

Теплофизические свойства смеси разреженных газов на основе модельных потенциалов. Ртуть – гелий

В.Н. Попов, Л.Р. Фокин

*Объединенный институт высоких температур РАН,
Россия, Москва, 125412, Ижорская 13, стр. 2
popov.valentin29@mail.ru, lfokin@mail.ru*

Аннотация

Свойства смеси ртуть – гелий рассматривается как система сравнения при моделировании транспортных свойств бинарных смесей разреженных газов. Проанализированы три межатомных потенциала Hg - Hg, He - He и Hg - He для атомов в основном электронном состоянии. Рассчитаны необходимые интегралы столкновений и затем на базе строгих соотношений молекулярно - кинетической теории рассчитаны транспортные свойства ртути, гелия и смеси ртуть - гелий: вязкость, теплопроводность, коэффициенты само - или взаимной диффузии компонентов. В статье на пяти изотермах в интервале $300 \div 2000$ К приведены подробные таблицы свойств в интервале концентраций смеси $0.001 \div 0.999$. Таблицы свойств содержат также значения второго вириального коэффициента, термодиффузионного фактора, а также критериев Прандтля Pg и Шмидта Sc , которые используются при моделировании тепло – и массопереноса в газах и в газовых смесях. Рассмотрены особенности поведения свойств на изотермах в зависимости от состава.

Ключевые слова: смесь газов, ртуть, гелий, межатомные потенциалы, транспортные свойства, число Прандтля.

1. Введение

Смеси нейтральных газов при относительно невысоких давлениях широко распространены в природе, являются рабочими веществами и теплоносителями многих процессов, в частности, процессов высокотемпературной аэротермодинамики. В рамках молекулярной физики свойства таких газовых систем рассматриваются с позиций парных столкновений атомов и молекул. При расчете транспортных свойств смесей молекулярных газов необходимо учитывать несферичность парных потенциалов взаимодействия и роль неупругих столкновений при моделировании процессов переноса тепла (теплопроводность, коэффициент термодиффузии и т.п.). В этой связи представляют принципиальный интерес смеси нейтральных газов, атомы которых имеют замкнутые электронные оболочки с внешними s – электронами, к которым относятся атомы благородных газов и атомы второй группы элементов (группы бериллия и цинка) в основном электронном состоянии. Сферически – симметричные потенциалы однородных и разнородных взаимодействия этих атомов являются базой для расчета интегралов столкновений и транспортных свойств чистых газов и смесей в рамках строгой молекулярно - кинетической теории без поправок на несферичность потенциалов и релаксационные процессы, возникающие при столкновении молекул [1–2]. Транспортные свойства смесей рассматриваемых атомарных газов, их зависимости от температуры и состава можно использовать в качестве систем сравнения, эталонов по отношению к свойствам смесей молекулярных газов.

Смесь газов Hg - He является уникальной системой с резко отличающимися характеристиками компонентов: отношением масс атомов $m(\text{Hg})/m(\text{He})=50$, параметров потенциалов $\varepsilon(\text{Hg})/\varepsilon(\text{He})\sim 50\div 60$, $R_e(\text{Hg})/R_e(\text{He})\sim 1.4\div 1.5$. Как и для многих других пар элементов периодической системы свойства смеси газов ртуть – гелий мало изучены и не систематизированы в должной степени. Нами проведен анализ и согласование потенциалов $V(\text{Hg}-\text{Hg})$, $V(\text{He}-\text{He})$, $V(\text{Hg}-\text{He})$ на основе разнородных опытных данных о рассеянии атомов, колебательно-вращательных спектрах молекул, данных о транспортных свойствах (вязкость, теплопроводность, коэффициенты диффузии D_{ij} чистых компонентов и бинарных смесей), а также результатов квантово-химических расчетов потенциальных функций. На основе этих потенциалов рассчитаны необходимые наборы интегралов столкновений $\Omega^{(ls)*}$ и далее с использованием соотношений теории подробные таблицы указанных выше транспортных свойств, а также значения термодиффузионного фактора, теплоемкости, критериев Прандтля и Шервуда, второго вириального коэффициента в интервале температур $300\div 2000$ К и концентраций $x=0.001\div 0.999$.

2. Ртуть, потенциал, свойства

Ранее [3] для расчета второго вириального коэффициента, вязкости и теплопроводности паров ртути был использован модельный потенциал Танга – Тоенниса (ТТ) представляющий собой композицию сил отталкивания в виде потенциала Борна – Майера и сил притяжения в виде суммы членов дисперсионной энергии с их демпфированием при малых межатомных расстояниях R

$$V(R) = Ae^{-bR} - \sum_{n=3}^5 f_{2n}(bR) \frac{C_{2n}}{R^{2n}},$$

$$f_{2n}(bR) = 1 - e^{-bR} \sum_{k=0}^{2n} \frac{(bR)^k}{k!} \quad (1)$$

Параметры этого потенциала для ртути [4] в атомной системе единиц, где 1 а.е. $V=3.1578 \times 10^5$ К, 1 а.е. $R=0.5292$ Å, равны $A=19.35$, $b=1.2727$, $C_6=392$, $C_8=12920$, $C_{10}=537000$. При этом глубина потенциальной ямы потенциала $\varepsilon=380\pm 15$ см⁻¹ = 546.7 К, равновесное расстояние $R_e=3.69\pm 0.01$ Å. Этот потенциал был построен на основе спектроскопических данных для молекулы Hg₂ и результатов квантово - химических расчетов функции $V(R)$. Несколько позже в работе [5] для восстановления потенциала были использованы новые спектроскопические данные для молекулы [6] и для отталкивательной ветви потенциальной функции (1) предложены следующие параметры [5] $A=12.55$, $b=1.2312$. Для этого варианта глубина ямы $\varepsilon=407.39$ см⁻¹ = 586.16 К, равновесное расстояние $R_e=3.605$ Å, диаметр столкновений $\sigma=3.044$ Å. Наш опыт применения потенциала (1) с параметрами из работы [5] показал, что МНК- функционал весового метода наименьших квадратов, построенный на массиве опытных данных по вязкости и теплопроводности паров ртути (табл. 1), уменьшается приблизительно в два раза по сравнению с его аналогом в работе [3], расчеты в которой проводились для потенциала [4]. Для ртути дальнейшие расчеты проведены с уточненным потенциалом [5].

По стандартным выражениям молекулярно – кинетической теории атомарного газа [1, 2] рассчитаны в интервале температур $300\div 2000$ К вязкость, теплопроводность и коэффициент самодиффузии во втором приближении теории (табл. 2). При этом значения приведенной температуры $T^*=T/\varepsilon$ для паров ртути находятся в интервале $T^*=0.5\div 3$ и поправки на второе приближение, например, для вязкости не превышают 0.2 %. Здесь и далее коэффициенты само - и взаимной диффузии (КВД) относятся к давлению 1 атм (760 мм рт.ст.).

Таблица 1

Исходные данные по теплопроводности и вязкости паров ртути, использованные для расчета МНК-функционала

№	Авторы, год, ссылка	Свойство	ΔT , К	Число точек	Погрешность	Примечания
1	GSSSD [7]	$\mu(T)$	400 ÷ 2000			
2	Кох, 1885, [8]	$\mu(T)$	574 ÷ 653	17	$\delta\mu = 4\%$	метод капилляра, разреженный газ
3	Брауне и др., 1928, [9]	$\mu(T)$	491 ÷ 861	13	$\delta\mu = 2.5\%$	метод диска
4	Люстерник, 1979, [10]	$\mu(T)$	693 ÷ 1054	15	$\delta\mu = 3.5\%$	метод капилляра
5	Тимрот и др., 1979, [11]	$\mu(T)$	625 ÷ 800	5	$\delta\mu = 3.5\%$	метод диска
6	Зайцева, 1959, [12]	$\lambda(T)$	567 ÷ 717	6	$\delta\lambda = 4\%$	метод нагретой нити
7	Варгафтик, Якуш, 1970, [13]	$\lambda(T)$	606 ÷ 1184	17	$\delta\lambda = 5\%$	метод нагретой нити
8	Ергиноз, Бонилла, 1970, [14]	$\lambda(T)$	627 ÷ 677	4	$\delta\lambda = 6\%$	метод нагретой нити
9	Заркова, Стефанов, 1976, [15]	$\lambda(T)$	600 ÷ 2400	10	$\delta\lambda = 7\%$	метод нагретой нити, вариант Блейса и Манна

Таблица 2

Транспортные свойства ртутного пара

$[\mu] = \text{Pa s}$, $[\lambda] = \text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$, $[D_{11}] = \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$							
T , К	$[\mu]_2 \times 10^6$	$[D_{11}]_2$	$[\lambda]_2 \times 10^3$	T , К	$[\mu]_2$	$[D_{11}]_2$	$[\lambda]_2 \times 10^3$
300	26.75	0.04236	4.159	1200	121.8	0.8280	18.94
400	37.01	0.08225	5.758	1300	131.4	0.9692	20.43
500	47.92	0.1337	7.454	1400	140.8	1.117	21.89
600	59.06	0.1965	9.185	1500	150.0	1.276	23.32
700	70.09	0.2743	10.90	1600	158.9	1.444	24.71
800	80.93	0.3632	12.58	1700	167.6	1.621	26.07
900	91.52	0.4674	14.23	1800	176.1	1.808	27.40
1000	101.8	0.5767	15.83	1900	184.5	2.002	28.70
1100	112.0	0.6982	17.41	2000	192.7	2.206	29.98

Отклонения опытных данных из табл. 1 от расчетных представлены на рис. 1.

На рисунке показаны также отклонение данных по вязкости пара, рассчитанных в работах [3, 6, 17] от данных таблицы; [76] – данные ГСССД 57-83.

Потенциал в форме (1) с параметрами из работы [5] был использован также для расчета второго вириального коэффициента (ВВК) $B(T)$ ртутного пара в широком интервале температур от 300 К до 3600 К.

В табл. 3 приведены значения ВВК при характерных температурах. При этом оценка значения температуры Бойля T_B ($B=0$), представляющей интерес при анализе термодинамической поверхности при низкой плотности пара, равна ~ 3500 К.

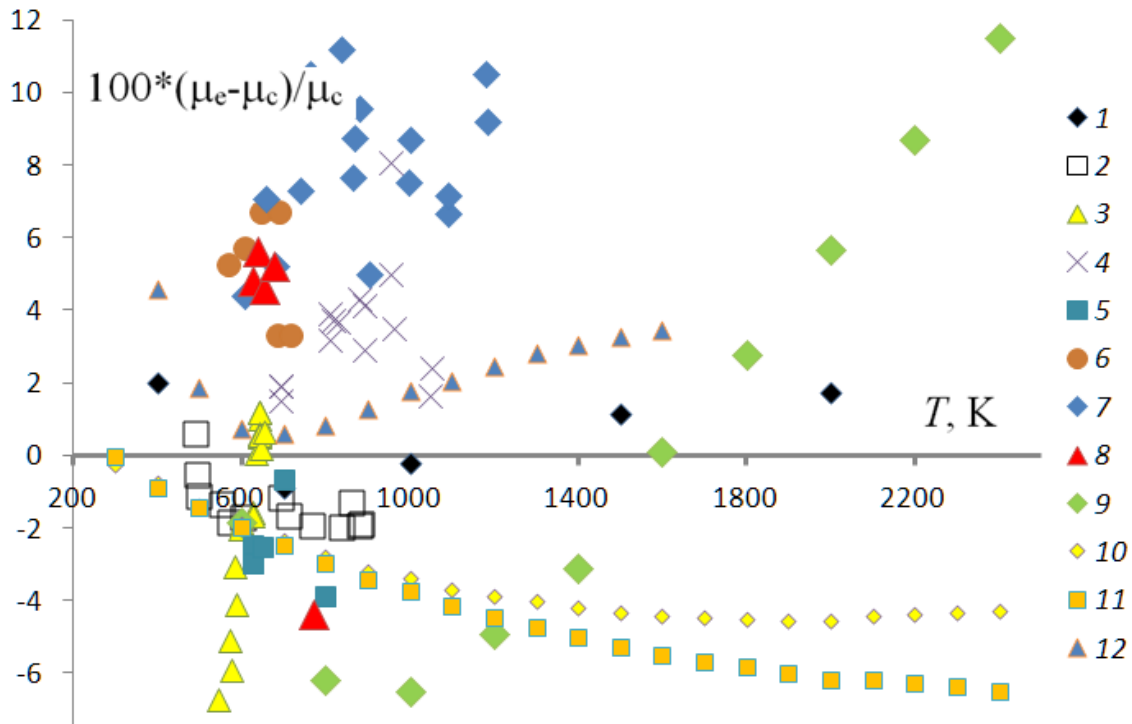


Рис. 1. Отклонения а) экспериментальных данных по вязкости паров ртути от данных табл. 2: 1 – [76], 2 – [9], 3 – [8], 4 – [10], 5 – [11], 6 – [12], 7 – [13], 8 – [14], 9 – [15]; б) расчетных данных от данных табл. 2: 10 – [6], 11 – [3], 12 – [17]. Данные по теплопроводности пересчитана на вязкость

Таблица 3

Значения ВВК для паров ртути

T, K	300	500	1000	1500	2000
B, см ³ /моль	-455.8	-190.2	-63.5	-30.9	-16.4

В последнее время рассматриваются возможности применения модифицированного потенциала Танга – Тоенниса (МТТ) с более сложной функцией для отталкивательной ветви по сравнению с простой экспонентой Борна – Майера. Такой потенциал опубликован и для ртути [6]

$$V(R) = TR^{\frac{7}{2\beta}-1} \exp(-2\beta R) \sum_{n=3}^5 f_{2n}(bR) \frac{C_{2n}}{R^{2n}},$$

$$b = 2\beta - \frac{\frac{7}{2\beta}-1}{R}, \quad f_{2n}(bR) = 1 - e^{-bR} \sum_{k=0}^{2n} \frac{(bR)^k}{k!} \quad (2)$$

В (2) для дисперсионных членов использованы параметры исходного потенциала [4]. Параметры потенциала $T=0.356301$ а.е., $\beta=0.820833$ были найдены с учетом спектроскопических данных для молекулы Hg_2 , а также табличных значений вязкости из работы [3], $\varepsilon=369$ см⁻¹ и $R_e=3.77$ Å. Нами для потенциала (2) была проведена независимая МНК- аппроксимация опытных данных по вязкости и теплопроводности пара (см. табл. 1) также с

фиксированными значениями дисперсионных коэффициентов. Найденные параметры $T=0.1926$ а.е., $\beta=0.80274$, МНК - функционал ~ 90.5 , $\varepsilon=371\text{ см}^{-1}=533\text{ К}$ и $R_e=3.725\text{ \AA}$. Рассчитанные значения вязкости на 0.5 % выше значений, приведенных в табл. 2. В 2010–2011 гг. нами были опубликованы результаты совместной обработки опытных данных по транспортным свойствам разреженного пара (см. табл. 1) и давлений насыщения ртути до $\sim 1650\text{ К}$ [16, 17]. Согласование данных проводилось на базе потенциала Леннарда–Джонса $m-6$ с варьируемой жесткостью отталкивательной ветви. Уравнение состояния пара включало три вириальных коэффициента. Были найдены следующие параметры потенциала: глубина ямы $\varepsilon=892\text{ К}$, диаметр столкновения $d=2.729\text{ \AA}$, показатель отталкивательной ветви $m=9.17$. Рассчитанные значения вязкости разреженного пара, как можно видеть на рис. 1, лежат до 2 % выше справочных данных из таблицы 2.

Наши оценки погрешностей данных табл. 2 с учетом разброса опытных данных и неопределенности потенциала не превышают $3 \div 4\%$. Данные по вязкости пара из табл. 2 отклоняются от результатов предыдущего расчета [3] вначале вниз на 0.7 % при 200 К. С ростом температуры новые данные выше, чем в работе [3], и при 2000 К отклонения достигают 4 %.

3. Гелий, потенциал, свойства

Для атомов гелия с молекулярной массой $m=4.0026$ а.е. параметр де Бюра

$$\Delta^* = \frac{h}{\sigma(2m\varepsilon)^{1/2}},$$

где h – постоянная Планка; $\varepsilon \sim 10\text{ К}$ – глубина ямы; $\sigma \sim 2.6\text{ \AA}$ – диаметр столкновений. При этом, как показывает опыт, уже при $T > 200\text{ К}$ можно с хорошей точностью не учитывать квантовые эффекты при расчете интегралов столкновений и пользоваться аппаратом классической механики. В области температур $T \gg \varepsilon$ свойства разреженного газа в значительной степени зависят от взаимодействия частиц на отталкивательной ветви потенциальной кривой, и именно этот участок потенциала атомов гелия представляет интерес для проводимых нами расчетов свойств. Значительный вклад в изучение отталкивательной ветви потенциала $V(\text{He}-\text{He})$ внесли проведенные у нас в стране и за рубежом экспериментальные исследования по рассеянию тепловых и высокоэнергетических пучков атомов. В 80-е годы прошлого столетия в результате совместной обработки и согласования разнородных экспериментальных данных о рассеянии атомных пучков, информации о спектрах димеров, опытных данных о ВВК, вязкости и теплопроводности атомарных газов при невысоких давлениях для многих атомов в основном электронном состоянии, в частности, для гелия были восстановлены с хорошей точностью сферически симметричные потенциалы парных взаимодействий. Для гелия результаты таких расчетов были представлены серией публикаций, в первую очередь, Азизом и его коллегами, например, [18]. Как показал анализ, форма отталкивательной ветви потенциала имеет более сложный вид, чем простая экспонента по Борну–Майеру (1). Соответствующие потенциалы для гелия в дальнейшем были использованы при моделировании теплофизических свойств газа. В частности, в 1990 г. для гелия и других инертных газов были рассчитаны в широком интервале температур таблицы транспортных свойств [19], которые в дальнейшем были от имени международного коллектива представлены и опубликованы в виде таблиц ГСССД 138-89 [20]. Для гелия проведены полные квантово–химические расчеты потенциалов атомов, которые в первом приближении согласуются друг с другом и позволяют с высокой точностью рассчитывать транспортные свойства. Для расчетов свойств смеси газов нами для гелия был использован потенциал авторов NIST US 2007 г. [21] в следующем виде:

$$\phi_{07}(r) = \begin{cases} \phi_{rep}(r) + \phi_{atr}(r), & r_0 \leq r < \infty; \\ \phi_{rep}(r_0) + \phi_{atr}(r_0), & 0 \leq r < r_0; \end{cases}$$

$$\phi_{rep} = A \exp \left(\sum_{n=-2}^2 a_n r^n \right),$$

$$\phi_{att} = -A \sum_3^8 \frac{f_{2n}(r) C_{2n}}{r^{2n}} \left[1 - \left(\sum_{k=0}^{2n} \frac{(\delta r^k)}{k!} \right) e^{-\delta r} \right], \quad (3)$$

где обрезаящий радиус $r_0 = 0.3$ радиуса Бора введен, чтобы исключить нефизическое поведение потенциала при малых межатомных расстояниях. Ниже приведены значения параметров уравнения (3) в атомной системе единиц:

δ	1.992657	a_{-2}	0.081212
A	1	a_{-1}	-0.28755
C_6	1.462122853192	a_0	2.14735
C_8	14.12578806	a_1	-1.97272
C_{10}	183.781468	a_2	-0.051787
C_{12}	3267.13274		
C_{14}	76501.2887		
C_{16}	2277412.86		

$$\sigma = 2.641 \text{ \AA}, \quad \varepsilon = 11.011 \text{ К.}$$

Для этого потенциала во втором приближении теории нами рассчитаны ВВК и транспортные свойства газообразного гелия, которые представлены в табл. 4.

Таблица 4

Транспортные свойства гелия

$[\mu] = \text{Pa s}, [\lambda] = \text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}, [D_{11}] = \text{cm}^2 \text{ s}^{-1}$							
$T, \text{ К}$	$[\mu]_2 \times 10^6$	$[D_{11}]_2$	$[\lambda]_2 \times 10^3$	$T, \text{ К}$	$[\mu]_2$	$[D_{11}]_2$	$[\lambda]_2 \times 10^3$
100	9.433	0.2661	73.74	1100	49.65	16.22	387.7
200	15.07	0.8637	117.8	1200	52.90	18.89	413.1
300	19.87	1.723	155.3	1300	56.09	21.74	438.0
400	24.23	2.818	189.3	1400	59.23	24.76	462.5
500	28.30	4.134	221.2	1500	62.32	27.95	486.6
600	32.17	5.661	251.3	1600	65.38	31.32	510.4
700	35.88	7.390	280.3	1700	68.39	34.86	533.9
800	39.47	9.315	308.3	1800	71.37	38.57	557.1
900	42.94	11.43	335.4	1900	74.31	42.44	580.1
1000	46.34	13.73	361.9	2000	77.23	46.48	602.9

Отклонение рассчитанных значений свойств от табличных данных исходной работы [21] не превышает 0.1 %. В 2007 г были опубликованы новые результаты расчетов потенциала гелия, ВВК и транспортных свойств (standard values!) в интервале температур 11 ÷ 10000 К [22]. Сравнение при характерных температурах данных по вязкости гелия из табл. 4, таблиц

ГСССД [20] и работы [22] показано в табл. 5. Надо иметь в виду, что значения вязкости в табл. 4 нами были рассчитаны с классическими интегралами столкновений.

Сравнение данных показывает, что есть основания принять данные табл. 4 для дальнейших расчетов свойств смеси газов.

Одно из направлений работ по межатомным потенциалам связано с поиском форм с более гибкой отталкивательной ветвью по сравнению с ТТ - потенциалом (1). В качестве такого модифицированного выражения рассматривался модифицированный МТТ - потенциал вида (2). Для гелия параметры такого потенциала, ориентируясь в первую очередь на спектроскопические данные, были предложены в работе [23]: $C_6 = 1.46$, $C_8 = 14.11$, $C_{10} = 183.6$, $T = 13.13488$, $S = 2\beta = 2.782054$, $\beta = 1.391027$.

С помощью этого потенциала были проведены расчеты свойств гелия, которые, например, для вязкости значительно отклоняются от данных, приведенных в табл. 5. Как можно видеть на рис. 2. Значения ВВК, рассчитанные с помощью МТТ - потенциала, в рассматриваемом интервале температур систематически выше, чем по потенциалу из работы NIST [21]. Надо отметить, что значения ВВК, приведенные в монографии 1969 г. по свойствам гелия [24], хорошо согласуются с новыми рекомендациями [21] (см. рис. 2).

Таблица 5

Сравнение табличных данных по вязкости гелия μ , $\mu\text{Pa s}$

T , К	300	500	1000	1500	2000
μ , табл. 4	19.27	28.30	46.34	62.32	77.23
μ , [20]	19.92	28.32	46.23	62.07	76.84
μ , [22]	19.91	28.331	46.357		77.253

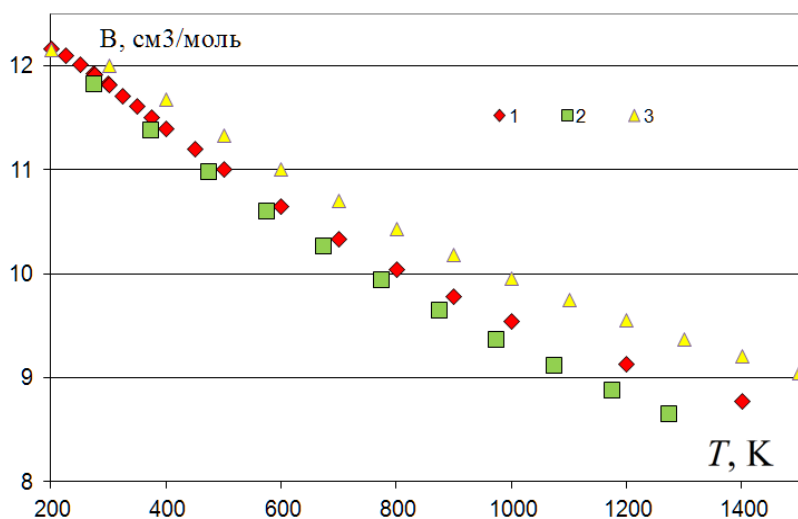


Рис. 2. ВВК гелия. 1 – [21], 2 – [24], 3 – [23]

В целом наш опыт показывает, что потенциалы типа (1, 2), с параметрами, основанными в основном на спектроскопических данных, надо очень осторожно применять при расчете транспортных свойств атомарных газов при высоких в масштабе $T^* = T/\varepsilon$ температурах.

4. Ртуть – гелий, потенциал, свойства

Для смесей разреженных газов при расчете транспортных свойств последовательно используются модели взаимодействия однородных и разнородных (перекрестных) потенциалов и связанные с ними интегралы столкновений $\Omega^{(ls)*}$. Например, расчет вязкости бинарной смеси газов проводится с помощью алгебраических выражений в виде отношения определите-

лей или в матричной форме [1, 2], где на диагонали стоят коэффициенты H_{ii}^{00} , представленные в основном интегралами столкновений $\Omega^{(22)*}$ за счет однородных i, i и j, j взаимодействий атомов, а вне диагонали – интегралы H_{ij}^{00} за счет разнородных i, j взаимодействий. Для вязкости бинарной смеси газов состава x_1, x_2 при заданной температуре T , молекулярных весах m_1, m_2 компонентов недиагональный член имеет вид [1, 2]

$$H_{12}^{00} = -\frac{2x_1x_2}{\mu_{12}} \frac{m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2} \left(\frac{5}{3A^*} - 1 \right), \quad (4)$$

где коэффициент $A^* = \Omega^{(22)*} / \Omega^{(11)*}$; μ_{12} – условная вязкость для частиц с приведенной массой $m_1m_2 / (m_1 + m_2)$ и с перекрестным потенциалом $V_{12}(R)$. Аналогичный вид имеет выражение для недиагонального члена Δ_{12}^{00} в матрице для теплопроводности смеси.

Информация о потенциале $V_{12}(R)$ HgHe содержится в работах по рассеянию пучков [25], по спектроскопии молекул [26, 27], в работах, связанных с измерениями коэффициента взаимной диффузии атомов [28–30]. В статьях [31–33] приведены результаты квантово-химических расчетов потенциала. Ниже в табл. 6 указаны работы и их характеристики, использованные нами при восстановления потенциала $V_{12}(R)$ HgHe.

Таблица 6

Информация, использованная для восстановления потенциала $V_{12}(R)$ Hg-He

№	Авторы, год, ссылка	Свойство	Интервал, число точек n	Оценка погрешности	Примечания
1	Powers T.R., Cross R., 1972, [25]	пучки	$\Delta R = 2.3 \div 2.9 \text{ \AA}$, $n = 7$	$\delta V = 30 \%$	высокоэнергетические пучки, потенциал, $V = C/R^{7.25}$
2	Арефьев К.М., Ремарчук Б.Ф., Галкин А.И., 1977, [28]	$D(T)$	$374 \div 539 \text{ K}$ $n = 4$	$\delta D = 5 \%$	метод Стефана
3	Крюков Н.А., 1983, [29]	$D(T)$	298 K , $n = 1$	$\delta D = 10 \%$	метод катафореза в смеси Hg-He
4	Gardner P.J., Pang P Preston S.R., 1991, [30]	$D(T)$	$430 \div 565 \text{ K}$ $n = 8$	$\delta D = 10 \%$	метод Стефана
5	Czuchaj E., Kronsnicki M., 2000, [31]	$V_{12}(R)$	$\Delta R = 2.1 \div 3.7 \text{ \AA}$, $n = 12$	$\delta V_{12} = 30 \%$	расчет функции $V_{12}(R)$, метод CCSD(T), $R = 1.6 \div 25 \text{ \AA}$, $R_e = 4.26 \text{ \AA}$, $\varepsilon = 19.7 \text{ K}$
6	Sladek V., Lukes V., Ilchin M., Biskupic S., 2012, [32]	$V_{12}(R)$	$\Delta R = 2.4 \div 3.5 \text{ \AA}$, $n = 8$	$\delta V_{12} = 30 \%$	расчет функции $V_{12}(R)$, метод CCSD(T), $R = 0.8 \div 35 \text{ \AA}$, $R_e = 4.2 \div 4.4 \text{ \AA}$, $\varepsilon = 19.7 \text{ K}$
7	Мешков В.В., 2013–2014, [33]	$V_{12}(R)$	$\Delta R = 2.5 \div 3.5 \text{ \AA}$, $n = 3$	$\delta V_{12} = 30 \%$	расчет функции $V_{12}(R)$, метод CCSD(T), $R = 0.8 \div 20 \text{ \AA}$, $R_e = 4.1 \text{ \AA}$, $\varepsilon = 21.6 \text{ K}$

При проведении квантово - химических расчетов потенциала HgHe использовалась та же модель атома ртути, что и для молекулы Hg₂, т.е. 20 внешних электронов + псевдопотенциал для остатка. Для анализа качества расчетов авторы проводили в первую очередь сравнение со спектроскопическими данными по равновесному расстоянию R_e и теплоте диссоциации D_e молекулы, полученными при рассмотрении первых колебательно - вращательных уровней [26, 27]. Мы рассматриваем свойства смеси газов ртуть – гелий при относительно высоких температурах $T \gg \varepsilon(\text{HgHe})$ и при согласовании свойств использовали высокоэнергетические участки потенциалов [31–33]. Приводимые в табл. 6 оценки погрешностей этих данных приняты ориентируясь на расхождение результатов расчетов.

Мешков В.В. (химфак МГУ) в рамках грантов РФФИ 11-11-08-0021а и 12-08-31407-мол-а провел на суперкомпьютере МГУ «Ломоносов» серию квантово - химических расчетов, в частности, потенциалов He - (Zn, Cd, Hg) и на их основе расчеты квантовых и классических интегралов столкновений и затем коэффициентов взаимной диффузии рассматриваемых пар атомов. Расчеты в интервале межатомных расстояний $2 \div 20 \text{ \AA}$ выполнены методом связанных кластеров CCSD(T) с использованием расширенных корреляционно–согласованных валентных базисных наборов aug-cc-PVnZ, $n = D, Q$ и 5 с последующей экстраполяцией к полному базисному набору (программный пакет MOLPRO 2010.1).

В 2009 г. опубликована работа [34], в которой была рассмотрена возможность описания потенциалов взаимодействия атомов ртути и инертных газов с помощью ТТ-потенциалов (1). Параметры потенциалов перекрестных взаимодействий были определены с использованием правил комбинирования параметров ртути и инертных газов. Для потенциала $V(\text{Hg} - \text{He})$ параметры в атомной системе единиц: $A = 17.715$, $b = 1.6316$, $C_6 = 22.148$, $C_8 = 456.87$, $C_{10} = 13\,550$ ($R_e = 3.94 \text{ \AA}$, $\varepsilon = 28.2 \text{ K}$). МНК – функционал, построенный на массиве исходных данных таблицы 6 с указанными выше параметрами, равен $S = 1581$. Мы провели независимую аппроксимацию тех же данных варьируя два параметра A и b . Функционал $S = 48$ (!), параметры $A = 17.768$, $b = 1.5856$. С этими параметрами рассчитаны транспортные свойства во втором приближении теории для газа изолированной пара атомов Hg–He. Результаты приведены в табл. 7. Эти данные использованы далее при расчете свойств смеси ртуть - гелий.

Таблица 7

Перекрестные транспортные свойства системы ртуть-гелий

$T, \text{ K}$	$[\mu_{12}]_2 \times 10^6, \text{ Pa s}$	$[D_{12}]_2, \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$	$[\lambda_{12}]_2 \times 10^3, \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$	$T, \text{ K}$	$[\mu_{12}]_2 \times 10^6, \text{ Pa s}$	$[D_{12}]_2, \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$	$[\lambda_{12}]_2 \times 10^3, \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$
100	6.044	0.085	24.100	1100	31.89	5.246	127.13
200	9.77	0.281	38.995	1200	33.94	6.102	135.30
300	12.89	0.562	51.438	1300	35.95	7.014	143.30
400	15.71	0.919	62.649	1400	37.92	7.981	151.16
500	18.32	1.348	73.072	1500	39.86	9.002	158.89
600	20.79	1.843	82.931	1600	41.77	10.076	166.51
700	23.16	2.402	92.36	1700	43.66	11.203	174.01
800	25.44	3.024	101.44	1800	45.52	12.383	181.43
900	27.65	3.706	110.23	1900	47.36	13.614	188.75
1000	29.79	4.448	118.79	2000	49.18	14.897	195.98

Кроме транспортных свойств для смеси газов нами проведен расчет второго вириального коэффициента ВВК $B_{mix}(T, x)$, где

$$B_{mix} = x_1^2 B_{11} + 2x_1 x_2 B_{12} + x_2^2 B_{22} \quad (5)$$

В табл. 8 при характерных температурах приведены значения ВВК для гелия и пары HgHe (для ртути см. табл. 3).

Традиционные выражения для расчета вязкости и теплопроводности смеси газов приведены для первого приближения теории [1, 2] и включают, например, для бинарной смеси коэффициенты вязкости $[\mu_{11}]_1, [\mu_{22}]_1, [\mu_{12}]_1$ и теплопроводности $[\lambda_{11}]_1, [\lambda_{22}]_1, [\lambda_{12}]_1$. Для соблюдения логики расчетов транспортных свойств ртути, гелия и системы Hg–He с необходимыми для соблюдения точности поправками на второе приближение при расчете свойств смеси была использована эмпирическая схема Мейсона–Сторвика [35]. При этом в выражения для транспортных свойств смеси (см., например, коэффициент H_{12}^{00} (4)) входят вместо парциальных коэффициентов $[\mu_{11}]_1, [\mu_{22}]_1, [\mu_{12}]_1$ те же коэффициенты во втором приближении, т.е. $[\mu_{11}]_2, [\mu_{22}]_2, [\mu_{12}]_2$ – см. таблицы (4, 5, 8) (то же для теплопроводности). При этом, кроме всего прочего, обеспечивается внутренняя согласованность свойств чистых газов и смеси при стремлении концентраций смеси $x \rightarrow 0$ или $x \rightarrow 1$. КВД для смеси газов рассчитывался во втором приближении теории [1, 2].

Таблица 8

Значения вириальных коэффициентов B_{12} и B_{22} (He), см³/моль

T, К	300	500	1000	1500	2000
B_{12}	31.05	31.10	28.55	26.35	24.64
B_{22} (He)	11.54	10.86	9.49	8.58	7.93

На основании полученных результатов для потенциалов с помощью известных [1, 2] соотношений молекулярно - кинетической теории рассчитаны полные таблицы справочных данных о транспортных свойствах смеси ртуть-гелий в разреженном состоянии в интервале концентраций $x(\text{Hg})=0.001 \div 0.999$ и температур $300 \div 2000$ К, где во втором приближении теории μ – вязкость, λ – теплопроводность, коэффициент взаимной диффузии D_{12} (1 атм), термодиффузионный фактор α_T в первом исчезающем приближении, а также c_p – удельная изобарная теплоемкость. Кроме того были рассчитаны число (критерий) Прандтля $Pr = \mu c_p / \lambda$ и число Шмидта $Sc = \mu / (\rho D)$, где ρ – плотность смеси. Последние два коэффициента (критерии подобия) входят во многие критериальные зависимости процессов тепло- и массопереноса при конвективном или вынужденном движении жидкостей и газов [36].

Расчет второго вириального коэффициента смеси ртуть - гелий выполнен по (5). Расчет термодинамических свойств (ρ, c_p) проведен для смеси одноатомных идеальных газов. Молекулярная масса смеси $m = m_1 x_1 + m_2 x_2$, где m_1 (Hg) = 200.59 а.е.м., m_2 (He) = 4.0026 а.е.м.,

$$\rho = \frac{p(1\text{атм})}{R/mT}, \quad c_p = \frac{5}{2R} / m, \quad \text{газовая постоянная } R = 8.31451 \text{ Дж/(моль К)}.$$

На рис. 3 приведен график изотерм числа Прандтля для рассматриваемой смеси газов в зависимости от состава. В смеси газов действующие одновременно градиенты температуры и концентраций порождают перекрестный коэффициент термодиффузии D_T . Этот коэффициент участвует при анализе многих процессов связанных, в частности, с формированием пограничного слоя при течении неизотермического потока газа и т.п. [37]. Реально при анализе этих явлений обычно используется термодиффузионный фактор α_T , который для бинарной смеси газов равен $\alpha_T = D_T / D_{12} (x_1 x_2)^{-1}$, и именно этот коэффициент приведен в табл. 9.

Таблица 9

Свойства смеси разреженных газов ртуть-гелий

$[\mu]_2 = \text{Pa s}$, $[\lambda]_2 = \text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$, $[D_{12}]_2 = \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$, $[c_p] = \text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$, $[B] = \text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$								
T , К	$x(\text{Hg})$	0.001	0.1	0.3	0.5	0.7	0.9	0.999
300	$[\mu]_2 \times 10^6$	20.04	28.16	29.98	29.10	28.06	27.15	26.75
	$[\lambda]_2 \times 10^3$	154.7	109.7	60.84	35.08	19.16	8.357	4.198
	$[D_{12}]_2$	0.5628	0.5677	0.5732	0.5761	0.5779	0.5791	0.5796
	α_T	0.9852	0.7660	0.5284	0.4033	0.3261	0.2737	0.2535
	c_p^*	4950	878.5	330.0	203.2	146.8	114.9	103.7
	Pr	0.6412	0.2263	0.1640	0.1704	0.2173	0.3761	0.6611
	Sc	2.087	0.5160	0.2044	0.1216	0.0844	0.0638	0.0567
	B	11.58	10.38	-22.33	-95.54	-209.3	-363.5	-454.8
500	$[\mu]_2 \times 10^6$	28.54	42.19	48.49	49.16	48.79	48.21	47.92
	$[\lambda]_2 \times 10^3$	220.4	157.1	87.99	51.43	28.81	13.43	7.509
	$[D_{12}]_2$	1.348	1.359	1.372	1.378	1.383	1.385	1.387
	α_T	0.9531	0.7442	0.5158	0.3947	0.3196	0.2686	0.2489
	Pr	0.6411	0.2366	0.1830	0.1957	0.2505	0.4145	0.6619
	Sc	2.069	0.5382	0.2303	0.1430	0.1022	0.0789	0.0708
	B	10.90	12.49	1.265	-29.29	-79.16	-148.4	-189.8
	1000	$[\mu]_2 \times 10^6$	46.74	72.72	91.39	97.58	100.2	101.4
$[\lambda]_2 \times 10^3$		360.6	258.3	146.4	87.09	50.41	25.50	15.92
$[D_{12}]_2$		4.448	4.481	4.517	4.537	4.549	4.557	4.561
α_T		0.8901	0.6981	0.4863	0.3732	0.3028	0.2548	0.2362
Pr		0.6416	0.2476	0.2067	0.2287	0.2930	0.4582	0.6636
Sc		2.053	0.5628	0.2636	0.1725	0.1276	0.1009	0.0914
B		9.527	12.19	10.93	0.78	-18.25	-46.17	-63.28
1500		$[\mu]_2 \times 10^6$	62.86	99.36	128.9	140.2	145.8	148.9
	$[\lambda]_2 \times 10^3$	484.8	348.2	198.2	118.7	69.58	36.25	23.44
	$[D_{12}]_2$	9.003	9.062	9.129	9.165	9.187	9.203	9.209
	α_T	0.8463	0.6652	0.4646	0.3570	0.2899	0.2441	0.2264
	Pr	0.6417	0.2510	0.2153	0.2410	0.3088	0.4731	0.6636
	Sc	2.046	0.5704	0.2759	0.1841	0.1379	0.1101	0.1000
	B	8.619	11.39	12.49	7.59	-3.306	-20.21	-30.80
	2000	$[\mu]_2 \times 10^6$	77.89	123.8	162.6	178.3	186.3	191.0
$[\lambda]_2 \times 10^3$		600.7	432.1	246.57	148.1	87.24	45.98	30.13
$[D_{12}]_2$		14.90	14.99	15.09	15.15	15.18	15.20	15.21
α_T		0.8127	0.6397	0.4475	0.3442	0.2796	0.2355	0.2185
Pr		0.6418	0.2522	0.2190	0.2466	0.3160	0.4795	0.6635
Sc		2.043	0.5728	0.2807	0.1889	0.1423	0.1140	0.1037
B		7.963	10.69	12.76	10.20	3.022	-8.778	-16.33

Для смеси идеальных одноатомных газов, находящихся в основном электронном состоянии, удельная теплоемкость зависит только от состава смеси и поэтому в табл. 9 приведена только в блоке величин при 300 К.

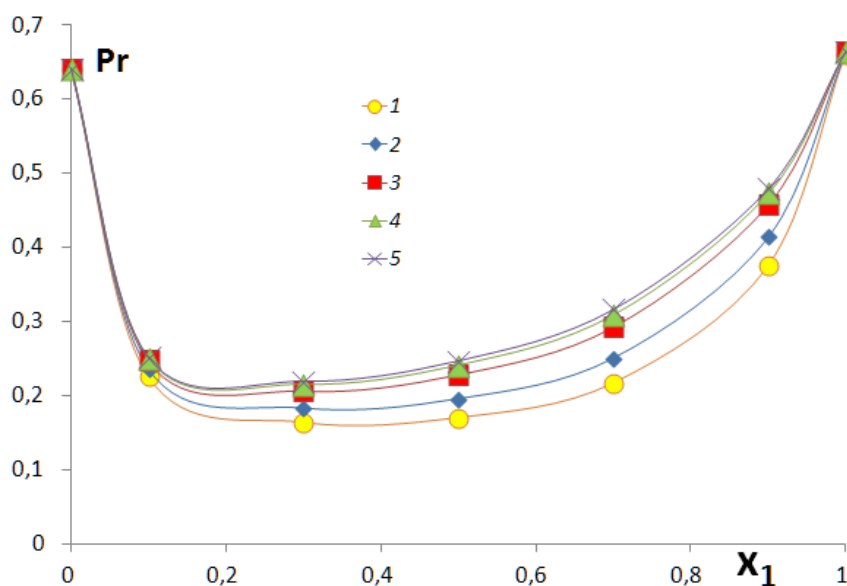


Рис. 3. Изотермы числа Прандтля:

1 – $T=300$ К; 2 – $T=500$ К; 3 – $T=1000$ К; 4 – $T=1500$ К; 5 – $T=2000$ К

В нашей работе все расчеты интегралов столкновений для рассмотренных выше потенциалов проведены с помощью модифицированной программы Тейлора [3, 38, 39], обеспечивающей необходимую точность и быстродействие в рамках вычислительного комплекса BASEPA.

Представленная в статье информация достаточна для воспроизведения всех приведенных выше результатов.

5. Заключение

Свойства смеси ртуть - гелий рассчитаны в рамках строгой молекулярно-кинетической теории газов для парных упругих столкновений атомов с использованием реалистичных сферически симметричных потенциал. В этом смысле эти данные (табл. 9) можно рассматривать как модельную систему для анализа характера зависимости отдельных свойств от температуры и на изотермах в зависимости от состава. Например, как и следовало ожидать, КВД на изотермах несколько увеличивается с ростом концентрации тяжелого компонента. Наоборот, значения термодиффузионного фактора α_T для гелия с малой примесью тяжелой ртути (квализорентцева смесь) выше, чем в парах ртути с примесью более легкого аргона (лорентцева смесь). Однако наиболее яркие особенности поведения свойств смеси газов можно наблюдать на изотермах числа Прандтля. Выражение этого критерия содержит два конкурирующих множителя (μ/λ) и c_p . Для чистых компонентов отношение $(\mu/\lambda)_i \sim m_i$ и для смеси, как можно видеть из табл. 9, монотонно возрастает от легкого гелия к тяжелой ртути. С другой стороны, значение удельной изобарной теплоемкости c_p на изотерме падает при переходе от легкого компонента к тяжелому. В результате произведение этих множителей на изотерме порождает минимум, который мы наблюдаем для числа Прандтля. В табл. 9 и на рис. 3 для смеси газов ртуть - гелий при 300 К мы видим рекордно низкое значение $Pr = 0.164$ при концентрации ртути ~ 0.3 . В настоящее время повышенный интерес к характеру зависимо-

стей кинетических коэффициентов от состава, в частности, на изотермах числа Прандтля $Pr(x)_T$ можно наблюдать в работах, посвященных анализу температурной стратификации в газовых смесях [37, 40, 41].

При разработке таблиц справочных данных нами использована модель разреженного газа в рамках парных упругих столкновений, взаимодействующих по сферически симметричным потенциалам. Для анализа справочных данных надо располагать оценками границ применимости модели, в частности, в переменных давление - плотность – концентрация в смеси газов. Специфика рассматриваемой системы связана с тем, что ртутный пар находится ниже критической температуры < 1750 К, что надо учитывать при анализе. Во всяком случае, парциальное давление ртути в смеси газов не должно превышать давление насыщения. Для ртути давление насыщения p_s при 300 К равно [16,17] $3.04 \cdot 10^{-6}$ бар, при 500 К – 0.052 бар, при 1000 К – 66 бар, при 1500 К – 778 бар. Существует обширная литература, посвященная влиянию давления и температуры на транспортные свойства газов. В кинетической теории и на практике грубая оценка поправок по отношению к модели свойств разреженного газа включает множитель [1,2] $(1 + b\rho)$, где ρ – плотность, b – собственный объем атомов. Требования к точности данных таблицы 9 зависят от неопределенности вычислительных процедур или опытных данных, с которыми проводится сравнение результатов расчета свойств. Если принять для поправки условие $b\rho \leq 0.005$, то при заданных параметрах смеси газов ограничение по плотности рассматриваемых данных принимает вид $\rho \leq 0.005b^{-1}$. Для рассматриваемых газов можно принять средний диаметр столкновений $\sigma = 3 \text{ \AA}$, и тогда в расчете на моль смеси оценка $b = 1.12(\sigma, \text{ \AA})^3 \cong 30 \text{ см}^3 \text{ моль}^{-1}$. При температуре 1000 К граница давлений сверху для рассматриваемой модели составит $p_{\text{гр}} = 0.005b^{-1}RT = 14$ бар. В этой ситуации мольная концентрация паров в ртути в смеси ртуть-гелий не должна превышать $x = 14/66 \cong 0.2$. Рассмотренная выше оценка $p_{\text{гр}}$ является весьма приближенной. Однако здесь можно видеть общую картину: при сделанных допущениях верхняя граница давлений для применения разработанных таблиц составляет несколько бар, а при высоких температуре и давлении насыщения ртути надо учитывать дополнительное ограничение для концентрации ртути в смеси газов.

Литература

1. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей / Пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит. 1961. 930 с.
2. Физико-химические процессы в газовой динамике. Том 3. Под ред. С.А. Лосева // В.М. Жданов, В.С. Галкин, О.А. Гордеев, И.А. Соколова. М.: Физматлит. 2012. 213 с.
3. Попов В.Н. Теплофизические свойства ртути на основе модельного потенциала // Теплофиз. высоких температур. 2012. Т. 50. № 5. С. 752–761.
4. Tang K.T., Toennies J.P. The dynamical polarisability and van der Waals dimer potential of mercury // Molec. Phys. 2008. V. 106. Pp. 1645–1652.
5. Wei L.M., Li P., Qiao L.W., Tang K.T. Corresponding states principle and van der Waals potentials of Zn₂, Cd₂, and Hg₂ // J. Chem. Phys. 2013. V. 139. Pp. 154306 (6).
6. El-Kader M.S.A. Collision-induced light scattering spectra of mercury vapor at different temperatures // Molec. Phys. 2015. V. 113. Pp. 1368–1377.
7. а) Теплофизические свойства ртути / М.П. Вукалович. А.И. Иванов. Л.Р. Фокин. А.Т. Яковлев. М.: Изд-во стандартов. 1971. 312 с.
б) ГСССД 57-83. Ртуть. Коэффициенты вязкости, теплопроводности, самодиффузии и второй вириальный коэффициент в диапазоне температур 4 ÷ 2000 К при низких давлениях в газообразном состоянии / Л.Р. Фокин. В.Е. Люстерник. М.: Изд-во стандартов. 1985. 15 с.

8. Koch S. Ueber die Reibungsconstante des Quecksilberdampfs und deren Abhangigkeit von der Temperatur // Ann. Phys. 1885. Bd 25. S. 857–872.
9. Braune S., Basch R., Wentzel W. Uber die inner Reibung einiger Gase und Dampfe // Z. phys. Chem. 1928. Bd A137. S. 447–457.
10. Люстерник В.Е. Измерение вязкости пара ртути и анализ полученных данных // Теплофиз. высоких температур. 1979. Т. 17. С. 50–53.
11. Тимрот Д.Л., Средницкая М.А., Беспалов М.С., Трактуева С.А. Измерение вязкости паров ртути методом колеблющегося диска // Теплофиз. высоких температур. 1979. Т. 17. С. 54–57.
12. Зайцева Л.С. Экспериментальное исследование теплопроводности одноатомных газов в широком интервале температур // ЖТФ. 1959. Т.29. С. 427–505.
13. Варгафтик Н.Б., Якуш Л.В. Экспериментальное исследование теплопроводности паров ртути // Теплофиз. высоких температур. 1970. Т.8. С. 1182–1185.
14. Erginoz H., Bonilla C. Thermal conductivity of mercury vapor // Proc. 5th Symp. Thermophys. Prop. NY: ASME. 1970. Pp. 64–76.
15. Заркова Л., Стефанов Б. Измерение теплопроводности газов и паров до 2500 К // Теплофиз. высоких температур. 1976. Т.14. С. 277–284.
16. Фокин Л.Р., Попов В.Н., Наурзаков С.П. Уравнение состояния и термодинамические свойства насыщенных и перегретых паров ртути до 1650 К и 125 МПа // там же. 2011. Т. 49(6). С. 862–871.
17. Фокин Л.Р., Попов В.Н., Наурзаков С.П. Уравнение состояния насыщенных и перегретых паров ртути до 1600 К и 100 МПа // Тяжелые жидкометаллические теплоносители в быстрых реакторах. Тезисы докладов межотр. семинара «Теплофизика - 2010». Обнинск: ГНЦ ФЭИ, 2010. С. 72–74 (Сборник докладов на CD- диске, Обнинск: ГНЦ ФЭИ, 2010. С 160-175. Портал <http://thermophysics.ru>)
18. Aziz R.A., McCourt F.R., Wong C.C.R. A new determination of the ground state intermolecular potential for He // Molec. Phys. 1987. V. 61(6). Pp. 1487–1551.
19. Bich E., Millat J., Vogel E. The viscosity and thermal conductivity of pure monoatomic gases from their normal boiling point up to 5000 K // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1990. V.19. Pp. 1289–1305.
20. ГСССД 138-89. Гелий, неон, аргон, криптон, ксенон. Динамическая вязкость и теплопроводность при атмосферном давлении (0.101325 МПа) в диапазоне температур от нормальных точек кипения до 5000 К / Е. Фогель, М. Миллат, Е. Бих, В.А. Рабинович и др. М.: Изд-во стандартов. 1992. 31 с.
21. Hurly J.J., Mehl J.B. ⁴He Thermophysical Properties: New Ab Initio Calculations // J. Res. NIST. 2007. V. 112. Pp. 75–94.
22. Bich E., Hellmann R., Vogel E. *Ab initio* potential energy curve for the helium atom pair and thermophysical properties for the dilute helium gas. II. Thermophysical standard values for low-density helium // Molec Phys. 2007. V.105 (23-24). Pp. 3035–3049.
23. Sheng X.W. and Li P. A new modification of the Tang – Toennies potential model to produce a more realistic repulsive wall. <http://www.paper.edu.cn>. 2015.
24. Цедербег Н.В., Попов В.Н., Морозова Н.А. Термодинамические и теплофизические свойства гелия. Атомиздат. 1969. 274 с.
25. Powers T.R., Cross R.J., Jr. Molecular – beam determination of mercury rare - gas intermolecular potentials // J. Chem. Phys. 1972. V. 56(6). Pp. 3181–3182.
26. van Zee R.D., Blankespoor S.C., Zwier T.S. Spectroscopic studies of the Hg-He and Hg-Ar van der Waals complexes. The Hg vapor fluorescence filter // Chem. Phys. Lett. 1989. V. 158. Pp. 306–311.
27. Koperski J. Study of diatomic van der Waals complexes in supersonic beams // Phys. Reports. 2002. V. 369. Pp. 177–326.
28. Арефьев К.М., Ремарчук Б.Ф., Галкин А.И. Диффузия паров ртути в газы // Инж.-физ. журнал. 1977. Т. 33(3). С. 495–500.

29. Крюков Н.А. Взаимодействие атомов ртути с атомами инертных газов. Автореф. дисс. к.ф.-м.н. Л.: ЛГУ, 1983. 16 с.
30. Gardner P.J., Pang P., Preston S.R. Binary gaseous diffusion coefficients of mercury and zink in H₂, He, Ar, N₂ and CO₂ // J. Chem. Eng. Data. 1991. V. 36. P. 265- 268.
31. Czuchaj E., Kronsnicki M. CCSD(T) calculation of the ground-state potential energies for the He-rare-gas van der Waals molecules // J. Phys. B, At. Mol. Opt. Phys. 2000. V. 33. Pp. 5425–5434.
32. Sladek V., Lukes V., Ilchin M., Biskupic S. *Ab initio* calculation of structure and transport properties of He...X (X = Zn, Cd, Hg) van der Waals complexes // J. Comput. Chemistry. 2012. V. 33. Pp. 767–778.
33. Мешков В.В., Попов В.Н., Фокин Л.Р. Коэффициент взаимной диффузии в смеси газов ртуть – аргон // Ж. Физ. химии. 2014. Т. 88(4). С. 694–698.
34. Sheng X.W., Li P., Tang K.T. A combining rule calculation of the ground state van der Waals potentials of the mercury rare-gas complexes // J. Chem. Phys. 2009. V. 130. P. 174310 (9).
35. Storvick T. N., Mason E.A. Determination of diffusion coefficients from viscosity measurements: effect of higher Chapman – Enskog approximations // J. Chem. Phys. 1966. V. 45. Pp. 3752–3756.
36. Теория теплообмена, п/р А. И. Леонтьева. 2е изд. М.: МГТУ им. Э.Н. Баумана, 1997. 352 с.
37. Liu J., Ahlers G. Reyleigh – Benard convection in binary-gas mixtures: Thermophysical properties and the onset of convection // Phys. Rev. E. 1997. V. 55. Pp. 6950–695.
38. Taylor W. Algorithms and FORTNAN programs to calculate classical collision integrals for realistic intermolecular potential. Mound Lab. US, 1979.
39. Славинская Н.А., Соколова И.А., Фокин Л.Р. Интегралы столкновений для потенциала Леннард – Джонса (6-6) // Матем. моделирование. 1998. Т. 10. № 5. С. 3–9.
40. Бурцев С.А., Кочуров Д.С., Щеголев Н.Л. Исследование влияния доли гелия на значение критерия Прандтля газовых смесей // ЭЖ. Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2014. № 5. С. 314–329 (<http://technomag.bmstu.ru/doc/71081.html>)
41. Марков А.А. Тепло- и массоперенос в субмикронных порах при движении теплового фронта в канале. Препринт № 1108. М.: ИПМ им. А.Ю. Ишлинского РАН, 2015. 44 с.

Статья поступила в редакцию 29 марта 2016 г.