фазовый переход диэлектрик-металл в парах щелочных и обычных металлов, водороде и экситонах

Хомкин А.Л., Шумихин А.С.

Объединённый институт высоких температур РАН, Москва, Россия, alhomkin@mail.ru

Предложена единая термодинамическая модель, позволяющая рассчитать параметры критической точки и бинодаль перехода диэлектрик-металл (пар-жидкость) в парах щелочных и других металлов, атомарном водороде и экситонах. В основу модели положено предположение о том, что главной причиной перехода является появление в плотном атомарном газе (в газовой окрестности критической точки) особого вида притяжения между атомами металла, обусловленного возникновением зоны проводимости и появлением электронов проводимости. При жидкометаллических плотностях такое притяжение хорошо известно – это когезия (cohesive energy). Для атомарного водорода [1], паров щелочных металлов [2] и газа экситонов когезию можно рассчитать аналитически при всех плотностях атомов. Для металлов, имеющих многоэлектронную валентную оболочку, когезия может быть рассчитана только численно с использованием методов Хартри-Фока и функционала плотности. Применительно к таким металлам мы воспользовались скейлинговыми зависимостями для энергии сцепления. Универсальное расчетное выражение для когезии определяется через энергию испарения, нормальную плотность и изотермический модуль упругости металла при нормальной плотности.

Изотермы предложенной модели применительно ко всем рассмотренным веществам, как и в [1, 2], при понижении температуры демонстрируют появление петли Ван-дер-Ваальса, что однозначно свидетельствует о наличии фазового перехода первого рода пар-жидкость и позволяют сразу оценить критическую температуру, плотность и давление. Расчеты выполнены для щелочных и щелочноземельных металлов, металлов группы Бора и переходных металлов, а также благородных металлов I группы. Мы применили нашу модель также к расчёту критических параметров перехода пар-жидкость в газе экситонов. Получено неплохое согласие с экспериментом.

Рассчитанные параметры критической точки неплохо согласуются с экспериментальными данными для щелочных металлов и с оценками параметров критической точки остальных металлов, выполненных другими авторами. Модель позволяет аналитически рассчитать бинодали фазового перехода пар-жидкость для всех рассмотренных веществ, т.е. получить плотности жидкой и газовой фазы в окрестности критической точки. Жидкая фаза является металлической, поскольку в ней присутствуют электроны проводимости. Переходу в жидкометаллическое состояние предшествует образование новой, необычной субстанции – газообразного металла Ликальтера. Обсуждается аналогия этого фазового перехода для паров металлов, атомарного водорода и экситонов. Заметим, что экспериментальная информация о свойствах паров металлов в окрестности критической точки практически отсутствует, впрочем, как и информация о положении самой критической точки.

Предложенная модель дает определенный ответ на вопрос, поставленный Ландау и Зельдовичем [3] о возможном несовпадении перехода пар-жидкость и диэлектрик-металл. В нашей модели они совпадают с одним уточнением: превращение газа атомов в металлическую жидкость идет через промежуточное и необычное состояние – газообразный металл Ликальтера.

Литература

1. Хомкин А.Л., Шумихин А.С. Физика плазмы, 2013, **39**, № 10, с. 958.
2. Хомкин А.Л., Шумихин А.С. ЖЭТФ, 2014, **145**, с. 84.
3. Ландау Л.Д., Зельдович Я.Б. ЖЭТФ, 1944, **14**, с. 32.