Проводимость паров металлов в критической точке и еЁ окрестности

Хомкин А.Л., Шумихин А.С.

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

Когезионная связь (cohesive energy) — хорошо известное понятие в физике твердых и жидких металлов. Несколько лет назад нами была выдвинута гипотеза о том, что когезионная связь атомов сохраняется вплоть до достижения некоторой малой, но газовой окрестности критической точки пар-жидкость, совпадающей с критической точкой перехода диэлектрик-металл и поэтому величиной когезионной энергии можно воспользоваться для термодинамических расчетов параметров критической точки.

Нами оказалась затронута острая проблема современной теплофизики, которая сейчас активно обсуждается в литературе [1]. Речь идет о сверх- или околокритическом флюиде (СКФ) — состоянии вещества вблизи критической точки. Численные расчеты показывают, что со стороны кривой плавления вплоть до критических температур и плотностей СКФ присущи многие характеристики жидкости и даже твердого тела (сохраняется ближний порядок). Физической величиной связывающей конденсированное состояние с газовым (околокритическим) нами была выбрана когезия – коллективная энергия сцепления атомов.

С помощью предложенной на основе данной гипотезы свободной энергии Гельмгольца были рассчитаны критические параметры и бинодали практически для всех металлов таблицы Менделеева [2].

В настоящей работе рассмотрена задача о расчете проводимости металлов в критической точке и ее окрестности в рамках единой физической модели (комплексно). Подчеркнем, что проводимость невозможно ни получить, ни оценить с помощью традиционных термодинамических приемов, т.е. используя многочисленные законы подобия, закон соответственных состояний, метод половинного диаметра и т.д. Расчетные и тем более экспериментальные данные практически отсутствуют (кроме паров щелочных металлов и ртути). Являясь важной величиной сама по себе, проводимость в критической точке дополняет традиционный набор критических параметров и отличает переход пар-жидкость в парах металлов от традиционных переходов. Проводимость в критической точке можно назвать четвертым критическим параметром дополнительно к критическим давлению, плотности и температуре. Для расчета проводимости необходимо в первую очередь знать концентрацию электронов проводимости (говорят о плотности электронного желе). Для атомов с одним валентным электроном концентрация электронов проводимости является расчетной величиной. Для многоэлектронных атомов мы использовали как скейлинговые результаты обработки численных расчетов плотности электронного желе в зависимости от степени разряжения ядер [3], так и прямые расчеты электронной плотности внутри и вне ячейки Вигнера-Зейтца с использованием хорошо известных аппроксимаций Хартри-Фоковских орбиталей для электронов изолированного атома. Данный способ расчета плотности электронного желе хорошо зарекомендовал себя в известном методе погруженного атома. Проводимость рассчитывается с использованием формулы Риделя-Йоффе. Обсуждается связь газообразного металла Ликальтера и СКФ для паров металлов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Вещество при высоких плотностях энергий».

Литература

1. Бражкин В.В. и др., УФН, 2012, **182**, 1137.
2. Хомкин А.Л., Шумихин А.Л., ЖЭТФ, 2015, **148**, 597.
3. Puska M.J., Niemenen R.M., PRB, 1991, **43**, 12221.