эффекты металлизации в плотных, закритических парах металлов

Хомкин А.Л., Шумихин А.С.

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

Эксперименты [1] по измерению изотерм проводимости плазмы паров металлов (Al, Fe, Ni, Cu, W), находящихся в закритическом состоянии, которое называют WDM (Warm Dense Matter) или СКФ (сверхкритический флюид) продемонстрировали непрерывный переход от газоплазменной к металлической проводимости при увеличении плотности. Отмечается наличие минимума проводимости. В предложенных теориях (см., напр., [2]) появление металлической проводимости объясняется аномальным влиянием кулоновской неидеальности (Γ ~ 100), которая приводит к двух-трех кратной ионизации атомов металла уже при T = 10000 K и обеспечивает тем самым высокую, но газоплазменную по сути проводимость.

В [3] нами выполнен расчёт проводимости паров металлов непосредственно в критической точке. Проводимость в критической точке обеспечивается электронами электронного желе, возникающими в результате перекрытия волновых функций валентных электронов при сжатии атомов. Заметим, что тот же эффект приводит к когезионному сцеплению. Параметры критической точки рассчитываются одновременно с расчётом проводимости. Озвучена идея о возможном совместном существовании в WDM паров металлов электронов желе (холодная ионизация) и свободных электронов (термическая ионизация).

Предлагается обобщение предложенной ранее модели [4] для учета процессов термической ионизации. Свободная энергия Гельмгольца для плотной атомарной плазмы паров металлов описывает смесь атомов, связанных силами когезионного сцепления и электроны желе, а также неидеальных свободных ионов и электронов. Электроны желе, возникают на хвостах волновых функций валентных электронов и существуют при отрицательных энергиях, а свободные, термические электроны при положительных и они сосуществуют независимо.

Выдвигается утверждение, что электронное желе присутствует в нейтральном атомарном газе при любой плотности. Причина тривиальная: изолированный атом занимает бесконечный объём, а в ансамбле себе подобных на один атом приходится объём конечный — ячейка Вигнера-Зейтца. Концентрация электронов желе определяется различными способами: на основе скейлинговых соотношений, заимствованных из Embedded Atom Method и прямым интегрированием волновых функций валентных электронов, в приближении Хартри-Фока-Слеттера вне ячейки Вигнера-Зейтца с учётом вклада постоянного фона внутри ячейки. Концентрация термических электронов определяется формулой Саха.

Выполненные расчёты демонстрируют удовлетворительное согласие с экспериментами [1] и описывают непрерывный переход от газоплазменной проводимости (термические электроны, малые плотности) к проводимости металлической (электроны желе, высокие плотности). Расчёты уверенно демонстрируют наличие минимума проводимости на изотерме сжатия как результат смены сорта носителей: от термических электронов к электронам желе.

Литература

1. DeSilva A.W. and Rakhel A.D., Contrib. Plasma Phys., 2005, **45**, 236.
2. Redmer R., Phys. Rev. E. 1999, **59**, 1073.
3. Хомкин А.Л., Шумихин А.С., ЖЭТФ, 2016, **150**, вып 5(11).
4. Хомкин А.Л., Шумихин А.С., ЖЭТФ, 2015, **148**, 597.