расчёт критических параметров перехода пар-жидкость в парах металлов

А.Л. Хомкин, А.С. Шумихин

Объединённый институт высоких температур РАН, Москва, Россия, shum\_ac@mail.ru

Предлагается новая методика определения параметров критической точки паров различных металлов с использованием имеющихся в литературе многочисленных расчетов когезии и энергии погружения атомов для твердого и жидкого состояний. Эти данные имеются в литературе, как в виде численных массивов, так и в виде скейлинговых функциональных зависимостей от степени расширения металлов (плотности). Как правило, они многопараметрические и привязываются к тому или иному набору характеристик твердой фазы: энергия сублимации, нормальная плотность, коэффициент объемного сжатия, упругие характеристики и т.д. В работе выдвинута гипотеза о том, что когезия, хорошо известная в физике твердых и жидких металлов, сохраняется вплоть до некоторой малой, но газовой окрестности критической точки пар-жидкость, совпадающей с критической точкой диэлектрик-металл и этой величиной можно воспользоваться для термодинамических расчетов параметров критической точки.

Нам представляется, что в гипотезе о важной роли когезии для всех металлизированных состояний вещества: твердого, жидкого и вплоть до состояния газообразного металла Ликальтера есть физический смысл (а он весьма важен для решения проблемы перехода диэлектрик-металл, где общепринятая теория пока отсутствует). В обосновании гипотезы лежит когезия, рассчитанная в рамках теории Вигнера-Зейтца-Бардина (ВЗБ-теория: кристаллическая структура атомов с одним валентным s-электроном), а также в рамках энергично развиваемых новых методов физики металлов (Embedded Atom Method). Когезия является непрерывной функцией радиуса ячейки Вигнера-Зейтца вплоть до обращения этой энергии в нуль в газовой области. Стишовым [1] показано (для паров щелочных металлов), что значение плотности, при которой когезия обращается в ноль и даже меняет свой знак, однозначно коррелирует с критической плотностью перехода пар-жидкость в парах щелочных металлов. Используя когезионную энергия в качестве притягательного члена в газо-жидкостном уравнении состояния того или иного вида мы приходим к существованию (или отсутствию) фазового перехода пар-жидкость и соответственно к параметрам критической точки. Проведен массовый расчет параметров критических точек по известным из литературы данным о когезии и выполнено сравнение с экспериментом для щелочных металлов и существующими оценками для металлов других групп. Данная методика является альтернативой существующей [2], связанной с экстраполяцией жидкостной и газовой ветвей бинодали с использованием метода «половинного диаметра». Считаем, что в ситуации, когда для большинства металлов параметры критических точек экспериментально не известны, любой дополнительный способ их определения весьма важен, даже при наличии определенных погрешностей, связанных с приближенным знанием когезионной энергии.

Литература

1. Stishov S.M. Phys. Rev. B, 1993, Vol. 47, p. 12260.
2. Фортов В.Е., Якубов И.Т. Неидеальная плазма. – М.: Энергоатомиздат, 1994. -368 с.