кластерная модель плазмы паров ртути на линии насыщения

Хомкин А.Л., Шумихин А.С.

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

В данной работе построена химическая модели плазмы ртути с поштучным учётом нейтральных, положительно и отрицательно заряженных кластеров, используя литературные данные [1] о свойствах металлических кластеров для расчета термодинамических и переносных свойств плотной плазмы. Максимальное число атомов в кластерах равно 6. С помощью развитой модели получены калорическое и термическое уравнения состояния и состав плазмы на линии насыщения ртути. Для учёта взаимодействия ион-атом использовалось модифицированное приближение Ликальтера. Для взаимодействия электрон-атом рассчитано с использованием приближения Вигнера для описания резонансного рассеяния электронов с импульсом  на атомной системе, с которой он образует слабосвязанное состояние с энергией связи . Для учёта взаимодействия нейтрал-нейтрал использован потенциал Леннард-Джонса с применением формулы Хилла. Показано, что на линии насыщения пары ртути в основном состоят из атомов и молекул. Зарядовая компонента ионная. Но количество заряженных комплексов ртути на порядки меньше, чем атомов. Рассчитано термическое уравнение состояния плазмы паров ртути на кривой насыщения и проведена оценка проводимости плазмы паров ртути. Выполнено сравнение с различными экспериментальными данными [2]. При расчете проводимости использовалась интерполяционная формула Фроста. Для столкновений электронов с ионами использовалось Резерфордовское сечение рассечения. Для учёта электронных столкновений с атомами и молекулами в литературе существует множество приближений. Мы проанализировали различные способы расчёта сечения рассеяния электрона на нейтральных частицах. В итоге было использовано квазиклассическое сечение рассеяния в приближении Вигнера. Показано удовлетворительное согласие наших расчётов с данными других авторов.

Эта работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда грант № 14-12-01235.

Литература

1. Wang Yixuan, Flad Heinz-Jurgen and Dolg M. Phys. Rev. B, 2000, **61**, p. 2362.
2. Tamura K. And Inui M. J. Phys.: Condens. Matter, 2001, **13**, p. 337.