критические точки перехода пар-жидкость в полупроводниках

Хомкин А.Л., Шумихин А.С.

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

В настоящей работе предложена термодинамическая модель, позволяющая рассчитать параметры критической точки и бинодаль перехода диэлектрик-металл (пар-жидкость) в парах полупроводников и полуметаллов (С, Si, Ge, Sb, Te, S). 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, обусловленного возникновением зоны проводимости и появлением электронов проводимости. При твердо и жидкометаллических плотностях такое притяжение хорошо известно – это когезия (cohesive energy). Для атомарного водорода [1], паров щелочных металлов [2] когезию можно рассчитать аналитически при всех плотностях атомов. Мы считаем, что это предположение справедливо и для полуметаллов, т.е. в жидком состоянии они являются металлами и затем, при охлаждении, уже в твердом состоянии становятся полупроводниками. О металлизации селена и йода упоминал в своих работах Ликальтер [3]. Есть предположения о существовании металлического углерода [4]. Для элементов, имеющих многоэлектронную валентную оболочку, когезия может быть рассчитана только численно. Применительно к ним мы воспользовались скейлинговыми зависимостями для энергии сцепления, обобщающими результаты многочисленных численных расчётов и описываемыми простым и универсальным выражением для различных видов энергии связи, которое определяется через энергию испарения, нормальную плотность и изотермический модуль упругости вещества при нормальной плотности.

Изотермы модели демонстрируют появление петли Ван-дер-Ваальса, что однозначно свидетельствует о наличии фазового перехода первого рода пар-жидкость. Анализ изотерм позволяет сразу оценить критическую температуру, плотность и давление. Расчеты выполнены для ряда элементов. Учитывая, что оценки критической точки имеются только для Ge и Se, можно сказать, что расчёты выполнены впервые.

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.

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

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. Ликальтер A.A. УФН, 2000, **170,** с. 831.
4. Bundy F.P. et al, Carbon, 1996, **34**, No. 2, p. 141.