термодинамические и Транспортные свойства СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ПАРОВ бериллия

Хомкин А.Л., Шумихин А.С.

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

Вещество при температуре и плотности выше критических называется сверхкритическим флюидом (СКФ) или warm dense matter (WDM). В этой области выполнено довольно большое количество измерений проводимости на изотермах для различных металлов (Al, Cu, Fe, Ni) [1]. На изотермах электропроводности наблюдается непрерывный переход от газо-плазменной к металлической проводимости при повышении плотности. Отмечено существование минимума проводимости. В большинстве предложенных теорий [2, 3] появление металлической проводимости объясняется аномальной кулоновской неидеальностью (Γ ~ 100), которая приводит к двух-трех кратной ионизации атомов металлов уже при T = 10000 K и обеспечивает, таким образом, высокую, но газоплазменную проводимость. Но, например, для бериллия (тугоплавкий металл с высокой температурой критической точки) практически отсутствуют экспериментальные данные выше температуры плавления. В то же время, свойства бериллия в режиме плазменного флюида имеют особое значение из-за его технологического применения.

В этой работе мы предлагаем обобщенную модель для описания фазового перехода пар-жидкость (диэлектрик-металл) в бериллии, основанную на модели плазменного флюида, предложенной нами в [4]. Рассчитываются параметры критических точек. Предлагаемая свободная энергия Гельмгольца для плотной атомарной плазмы паров металлов описывает смесь из атомов, погруженных в электронное желе, а также неидеальных свободных ионов и электронов. Электроны желе возникают на хвостах волновых функций валентных электронов и существуют при отрицательной энергии, а свободные, термические электроны при положительной энергии и они сосуществуют независимо друг от друга. Выдвигается утверждение о том, что электронное желе присутствует в нейтральном атомарном газе при любой плотности. Причина тривиальная: изолированный атом занимает все пространство, а в ансамбле других атомов объем, ограниченный радиусом ячейки Вигнера-Зейтца. Концентрация электронов желе определяется различными способами. Концентрация тепловых электронов определяется по формуле Саха с учетом всех видов корреляции. Взаимодействие свободных зарядов описывается в приближении ближайшего соседа. Уравнение состояния, транспортные и оптические свойства плазмы паров бериллия рассчитаны в широком диапазоне температур и плотностей. Наши результаты показывают удовлетворительное согласие с результатами численного моделирования [5] и описывают непрерывный переход от газо-плазменной проводимости (термические электроны, маленькие плотности) к металлической проводимости (электроны желе, высокие плотности).

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. Fu Z.J. et al., Acta Physica Sinica, 2016, **65**, 065201.
4. Хомкин А.Л., Шумихин А.С., ЖЭТФ, 2017, **151**, 1169.
5. Li D. et al., Sci. Rep., 2015, **4**, 5898.