

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В ОКОЛОКРИТИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ С ПОМОЩЬЮ ХИМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ «3+»

А. С. Шумихин

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

В настоящей работе предложена химическая модель (названная «3+» модель), позволяющая в рамках единого подхода получить состав, термодинамические и транспортные свойства флюида благородных металлов. Модель основана на гипотезе о существовании электронного желе, предложенной в работах [1, 2]. Электронное желе возникает в результате перекрытия хвостов волновых функций связанных электронов, его концентрация не зависит явным образом от температуры и не участвует в уравнении баланса. Межатомное взаимодействие учтено посредством когезии – коллективной связи атомов в металле. Когезия является следствием электронного желе. Модель позволила получить уравнение состояния флюида благородных металлов (Ag, Au), включая критическую точку фазового перехода пар-жидкость и его бинадаль. Получены термодинамические и транспортные свойства флюида серебра и золота. Для серебра отсутствуют надежные экспериментальные данные и численные расчеты. Недавно были опубликованы работы [3, 4], в которых с помощью численного моделирования была рассчитана электропроводность флюида золота. На рис. 1. представлена зависимость электропроводности флюида золота на различных изотермах в сравнении с последними результатами численного моделирования [3]. Расчеты электропроводности в рамках предложенной модели неплохо согласуются с недавними результатами численного моделирования [3] до плотностей $\rho = \rho_0/3$ ($\rho_0 = 19,32 \text{ г/см}^3$ – плотность металла при н. у.). При больших плотностях необходимо учитывать структурный фактор с использованием более точных формул, например, Займана или Кубо-Гринвуда.

Показано, что переход от металлической проводимости к плазменной происходит через область газообразного металла, что впервые было показано в работе [1].

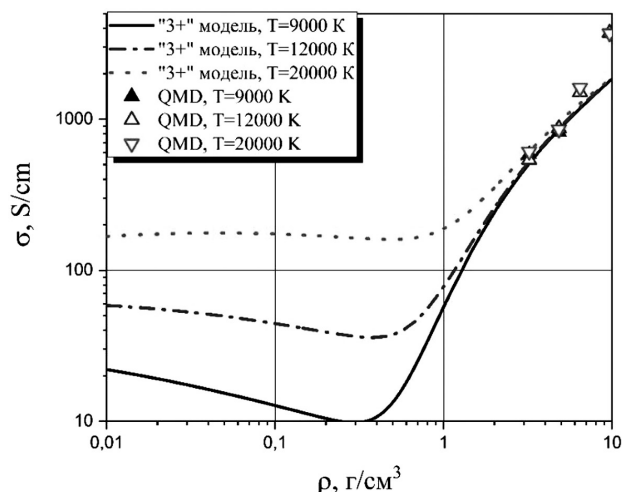


Рис. 1. Электропроводность флюида золота на изотермах:

сплошная, штрихпунктирная и пунктирная кривые – расчет для температур $T = 9000$, 12000 и 20000 K , соответственно; символы – результаты численного моделирования [3].

Литература

1. Хомкин, А. Л. Газообразный металл и проблема перехода пар-жидкость (диэлектрик-металл) в парах металлов [Текст] / А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин // ЖЭТФ. – 2020. – Т. 157. – С. 717–725.
2. Хомкин, А. Л. Сверхкритический флюид плазмы паров металлов, инертных газов и экситонов [Текст] / А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин // УФН. – 2021. – Т. 191. – С. 1187–1211.
3. Liu, D. *Ab initio* simulations for expanded gold fluid in metal-nonmetal transition regime [Text] / D. Liu, W. Fan, L. Shan et al. // Phys. Plasmas. – 2019. – Vol. 26. – P. 122705.

4. **Migdal, K. P.** Electrical resistivity of liquid expanded metals by Ziman approach [Text] / K. P. Migdal, Yu. V. Petrov, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov // J. Phys.: Conf. Ser. – 2019. – Vol. 1147. – P. 012005.
-