

РАСЧЕТ ПРОВОДИМОСТИ И ЗАРЯДОВОГО СОСТАВА ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ И ГАЗОВ В ЗАКРИТИЧЕСКОЙ И ЖИДКОЙ ОБЛАСТИ В МОДЕЛИ СРЕДНЕГО ИОНА

Апфельбаум Е.М.

*ИТЭС ОИВТ РАН, Москва
apfel_e@mail.ru*

Различные свойства в многокомпонентной среде (электроны, положительные ионы, атомы и т.д.) могут существенно меняться по сравнению со случаем 2-х компонентной среды (только электроны и один сорт ионов) [1, 2]. При этом металлы в твердом и жидком состоянии (низкие температуры, высокие плотности) обычно предполагаются двухкомпонентными, а в газообразном или плазменном состоянии (высокие температуры, низкие плотности) — многокомпонентными. Для описания промежуточной области, в которую входит, например, состояние плотного флюида, ранее была предложена модель среднего иона, в которой заряд иона менялся в зависимости от плотности и температуры [3]. В зависимости от этого заряда менялись и потенциалы электрон–ионного и электрон–электронного взаимодействия. В основу модели [3] был положен формализм Займана [4], для металлов в твердой и жидкой фазах с постоянным зарядом иона, но эффективной массой электрона (последняя вводится в зонной теории твердых тел и не определена при отсутствии энергетических зон).

Для применения этой модели при более низких плотностях, а так же для приложения к газам, в данной работе в модель были введены нейтральные атомы. Для описания взаимодействия электронов с атомами брался поляризационный потенциал, параметры которого хорошо известны для различных сред [1]. На его основе строились потенциалы взаимодействия атом–ион, атом–атом так же, как это делалось для потенциала ион–ион в [3]. Дальнее вычислялись параметры ионных потенциалов. Затем с помощью интегральных уравнений теории жидкости и диэлектрической проницаемости электронной подсистемы рассчитывались структурные факторы. Проводимость рассчитывалась по стандартной схеме [4].

Результаты расчетов сравнивались с экспериментом и расчетами других авторов.

1. Фортов В.Е., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы. Черноголовка: ОИХФ РАН, 1984.
2. Апфельбаум Е.М., Иванов М.Ф. // Физика плазмы. 2001. Т.27. С.79.
3. Апфельбаум Е.М. // Научные труды ИТЭС ОИВТ РАН. Вып. 4–2001. М., 2002. С.23.
4. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1972.