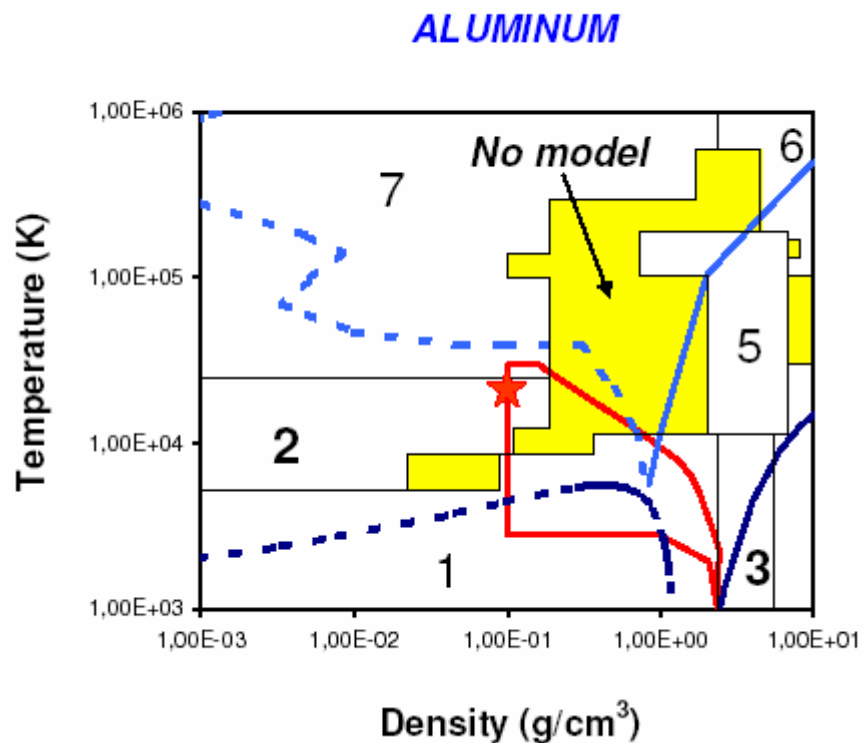


**ВЫСОКТЕМПЕРАТУРНАЯ И НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ  
ХИМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ  
ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ ПАРОВ МЕТАЛЛОВ**

***Хомкин А.Л., Шумихин А.С.***

Теоретический отдел им Л.М. Бибермана  
**Объединенный институт высоких температур  
РАН**



- Vessel operating domain
  - - Saturation
  - Solidification
  - - Landau
  - Fermi
  - 1 Soft Spheres [\*]
  - 2 Saha [\*]
  - 3 Grüneisen-Debye [\*]
  - 5 Liquid Metal Perturbation Theory [\*]
  - 6 Thomas-Fermi [\*]
  - 7 ACTEX [\*]
- [\*] SESAME 3712 Aluminum EOS



**EXPERIMENTAL  
INVESTIGATION OF THERMAL  
LOSSES IN A PLASMA  
CLOSED-VESSEL**

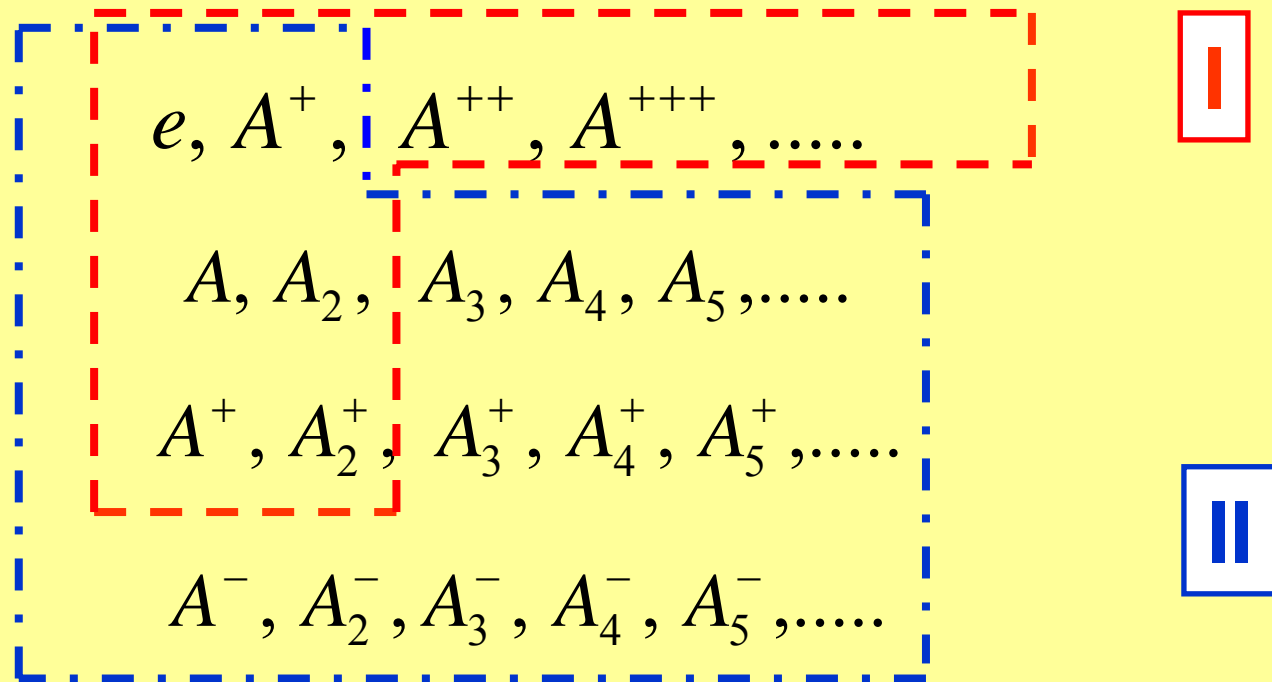
Pierre Noiret  
Department of applied and theoretical physics  
Atomic energy commission/DAM-Île-de-France  
Arpajon / France

## Цель работы:

Создание химической модели плотной плазмы сложного состава.

Конкретный объект исследования – плазма паров металлов

Много компонент, есть эксперимент, важно с общенаучной и прикладной точки зрения:





$$\beta F = -\sum_k N_k \ln \frac{eV \Sigma_k}{N_k \lambda_k^3} - \sum_k Z_k^2 N_k \Delta f(N_k) - \frac{N_i N_a}{V} B_{ia}(T) - \frac{N_e N_a}{V} B_{ea}(T)$$

$$V_{ia}^P(r) = -\frac{\alpha_D e^2}{2r^4}$$

$$B_{ia}^L(T) = 4\pi \int_0^\infty r^2 dr \left[ \exp(-\beta V_{ia}^P(r)) \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}, -\beta V_{ia}^P(r)\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} - 1 \right]$$

$$B_{ia}^L(T) = 4\pi C_1 \left( \frac{\alpha e^2 \beta}{2} \right)^{3/4}, C_1 = 1.61$$

$$V_{qa}^R(r) = -\frac{\alpha_D e^2}{2(r^2 + r_0^2)^2}$$

$$r_0^4 = \frac{\alpha_D a_B}{2Z^{1/3}}$$

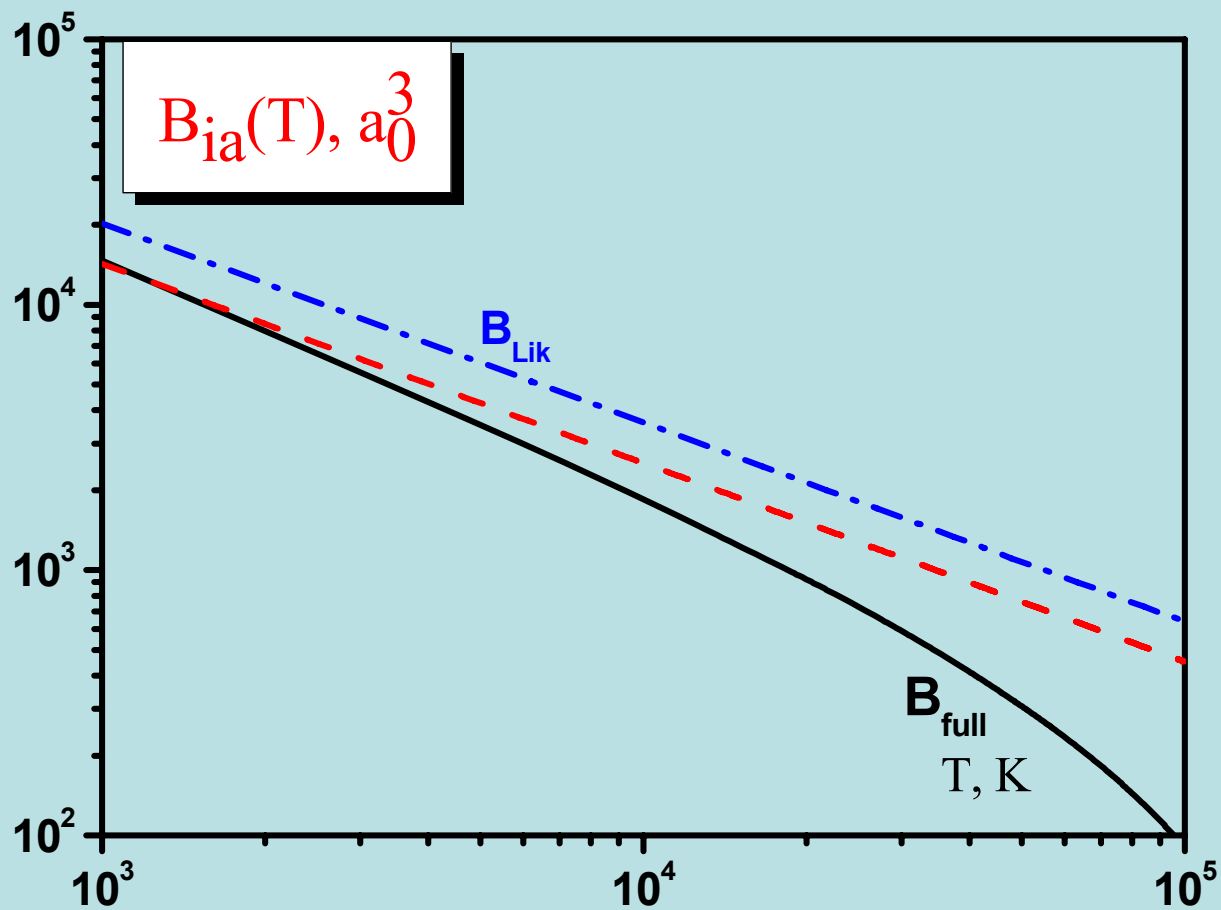
$$B_{qa}^R(T) = -4\pi \int_0^{\infty} \beta V_{qa}^R(T) r^2 dr$$

$$V_{ia}(r) = A \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^4 \right]$$

$$A = 3\sqrt{3} D_{m^+} / 2$$

$$\sigma = a_B \left( \frac{2\alpha_D Ry}{3\sqrt{3} D_{m^+}} \right)$$

$$B_{ia}(T) = 4\pi \int_0^{\sigma} r^2 dr [\exp(-\beta V_{ia}(r)) - 1] + 4\pi \int_{\sigma}^{\infty} r^2 dr \left[ \exp(-\beta V_{ia}(r)) \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}, -\beta V_{ia}(r)\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} - 1 \right]$$



$$B_{ea}(T) = \lambda_e^3 \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \sum_l (2l+1) \frac{d\delta_l}{dp} \exp\left(-\frac{\beta p^2}{2m_e}\right) dp$$

$$\text{ctg } \delta_0(p) = -\frac{\sqrt{2m_e \varepsilon}}{p} \quad B_{ea}(T) = \frac{\lambda_e^3}{2} (1 - \Phi(\sqrt{\beta \varepsilon}) \exp(\beta \varepsilon))$$

$$B_{ea}(T) = \lambda_e^2 L$$

$$L = a_B \sqrt{Ry / \varepsilon}$$

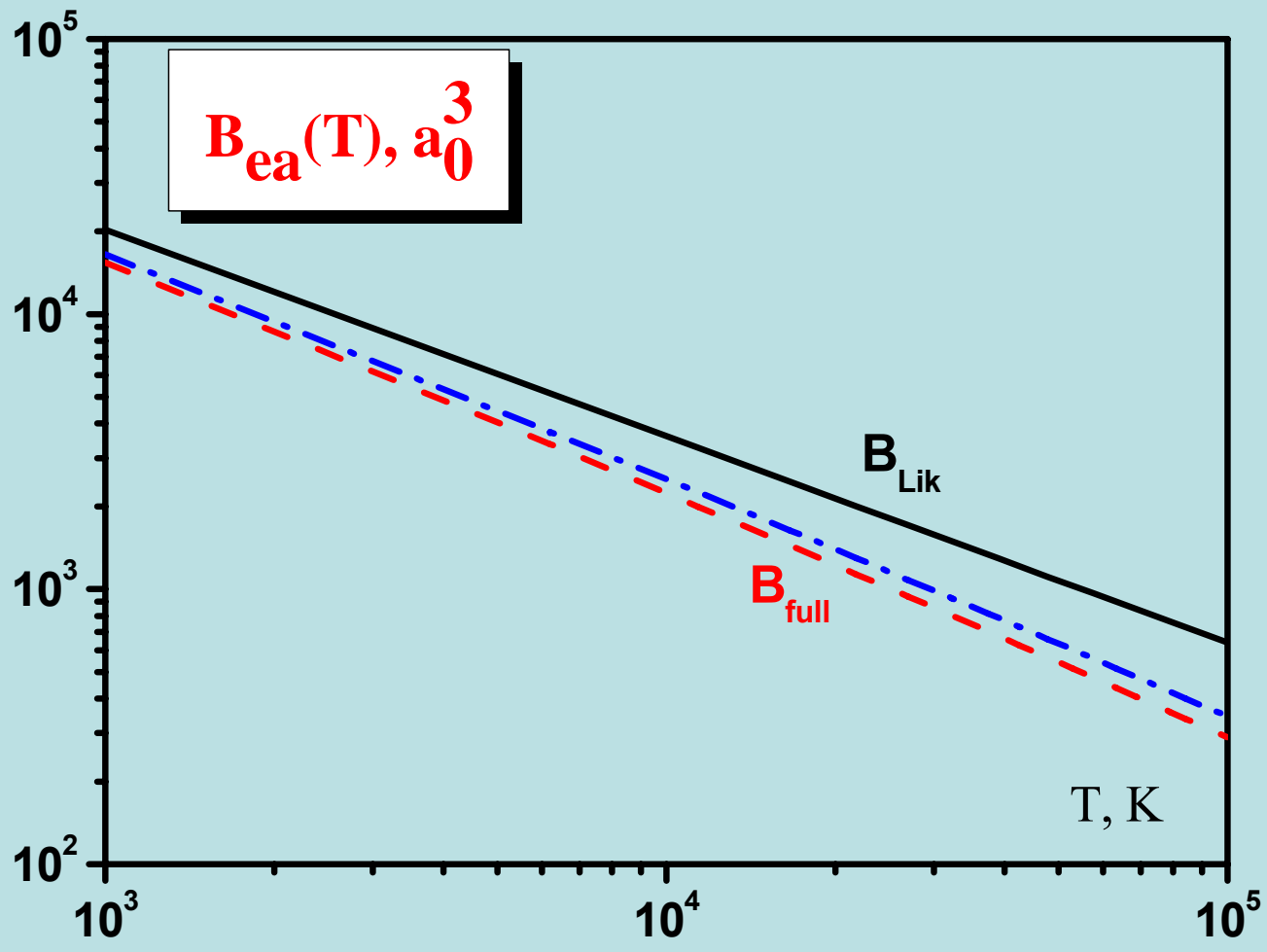
$$k_B T \ll 2.8 eV$$

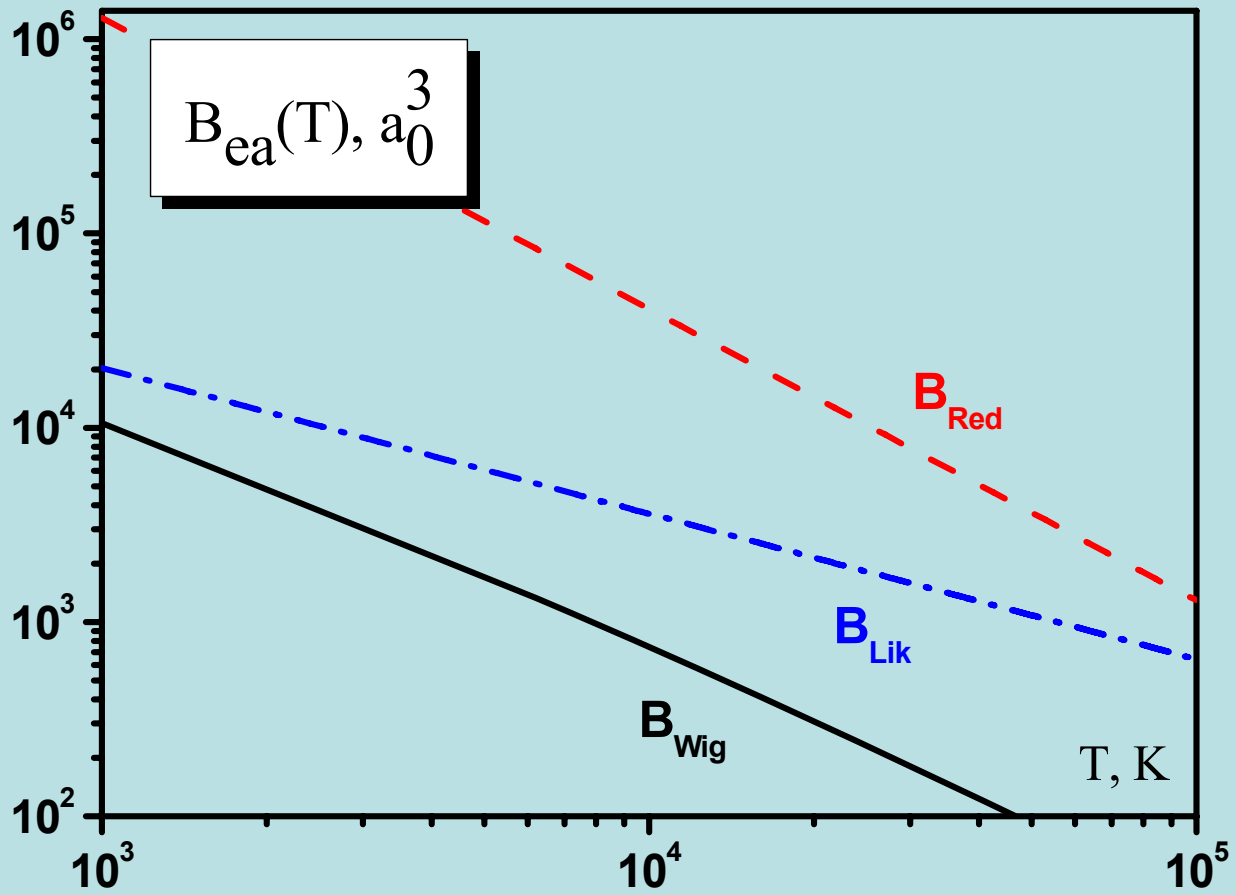


$$k_B T > 2.8 eV$$

$$B_{ea}^R(T) = -4\pi \int_0^{\infty} \beta V_{ea}^R(T) r^2 dr$$

$$B_{ea}^{RH}(T) = 4\pi \int_0^{\infty} r^2 dr \left[ \exp(-\beta V_{ea}^R(r)) \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}, -\beta V_{ea}^R(r)\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} - 1 \right]$$





БД

$$\beta\Delta\mu_{Z_k} = -\ln\left(1 + Z_k^2 \frac{\tilde{\Gamma}_D}{2}\right),$$

$$\beta\Delta\mu_e = -\ln\left(1 + \frac{\tilde{\Gamma}_D}{2}\right),$$

$$\beta\Delta P = -\frac{\tilde{\Gamma}_D}{6} \sum_k \frac{Z_k^2 n_k}{1 + Z_k^2 \tilde{\Gamma}_D / 2},$$

$$\tilde{\Gamma}_D^2 = 4\pi(\beta e^2)^3 \sum_k \frac{Z_k^2 n_k}{1 + Z_k^2 \tilde{\Gamma}_D / 2}.$$

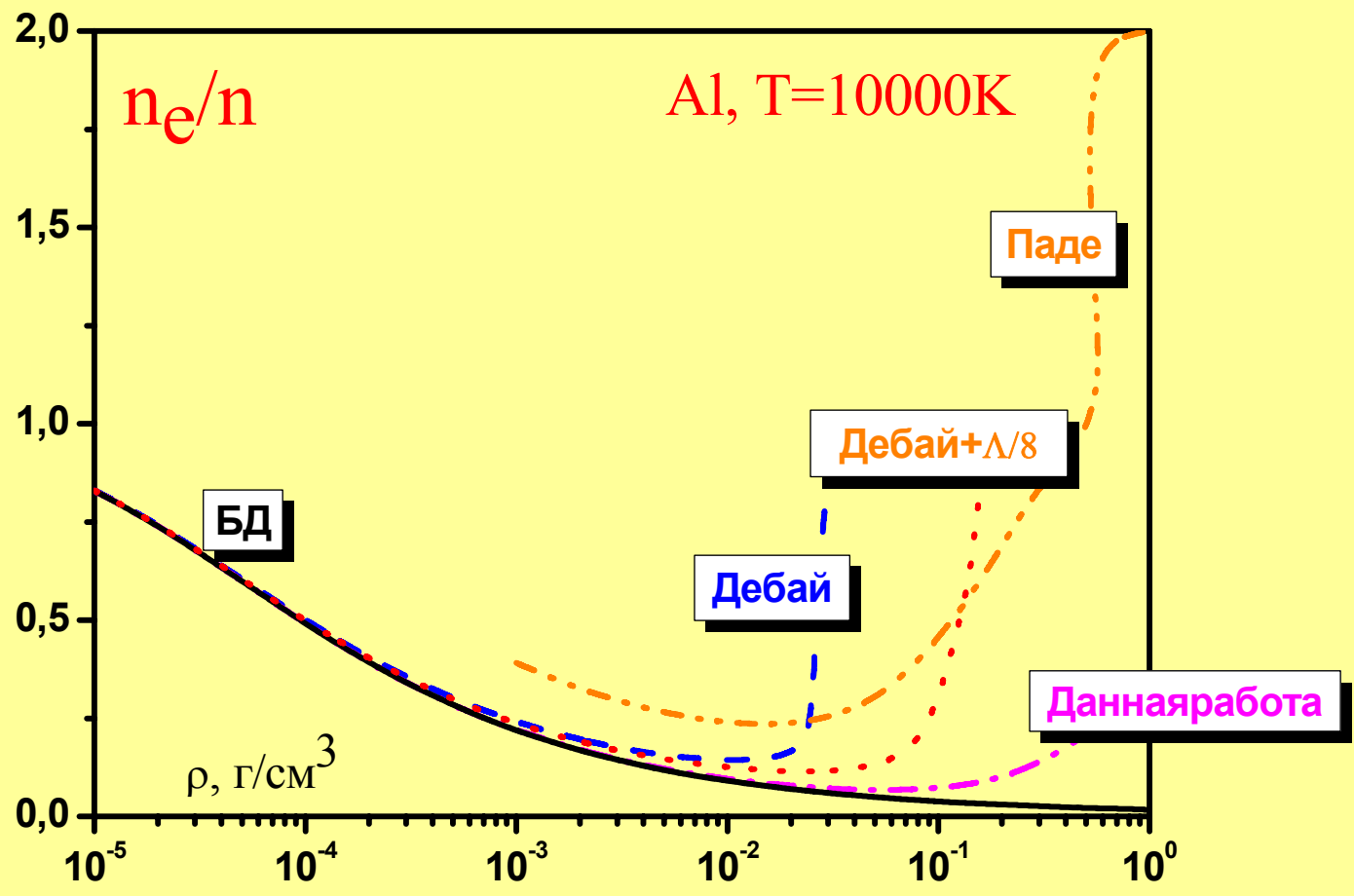
ЛД

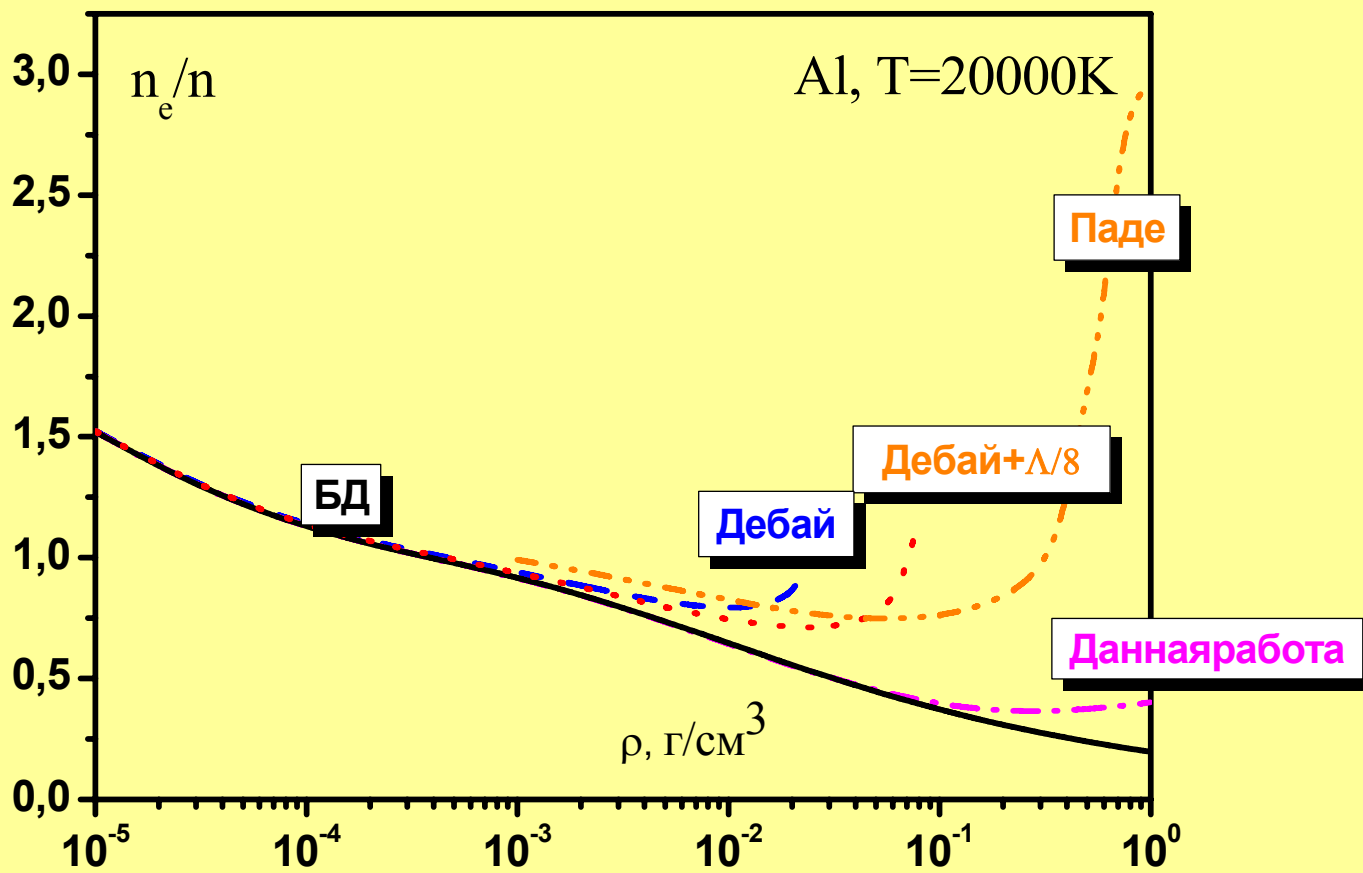
$$\beta\Delta\mu_{Z_k} = -Z_k^2 \frac{\Gamma}{2},$$

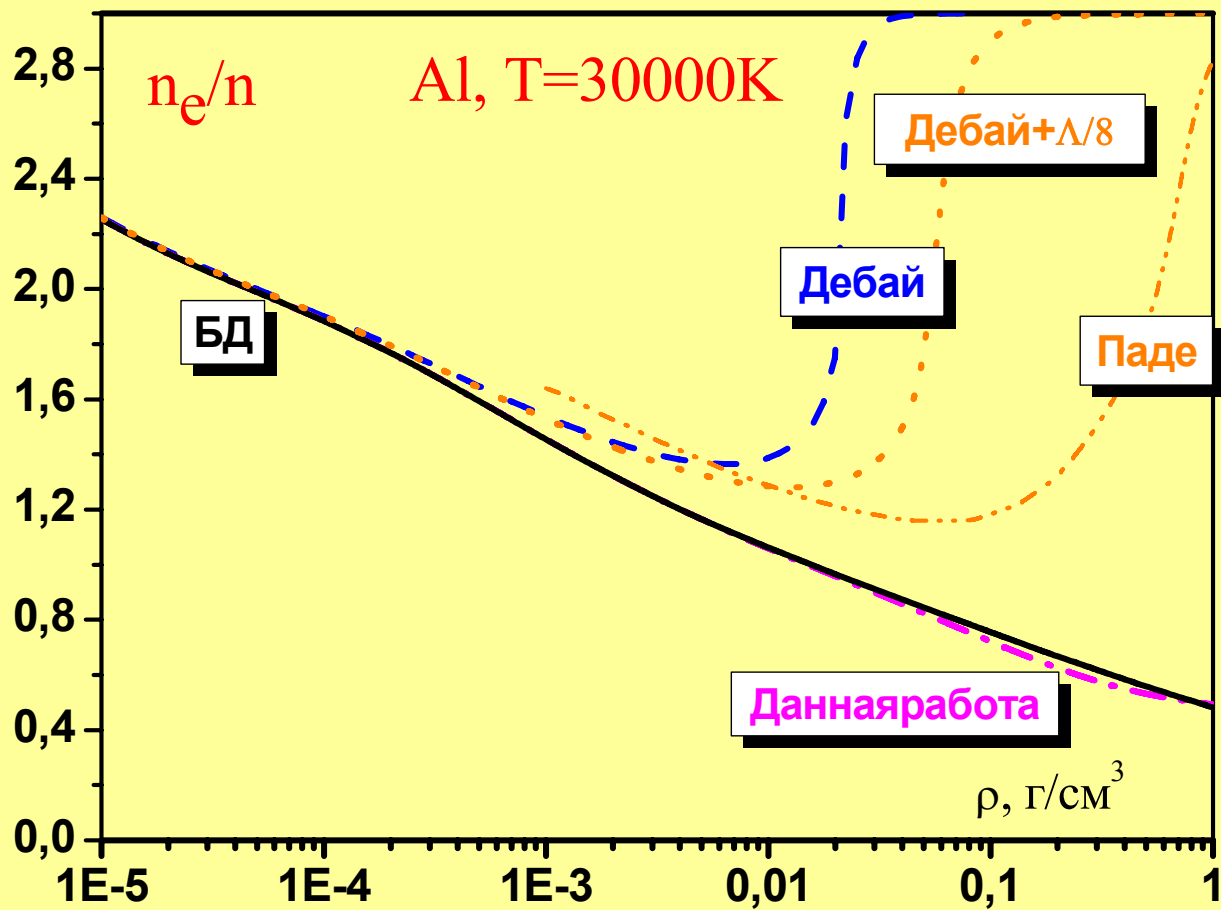
$$\beta\Delta\mu_e = -\frac{\Gamma}{2},$$

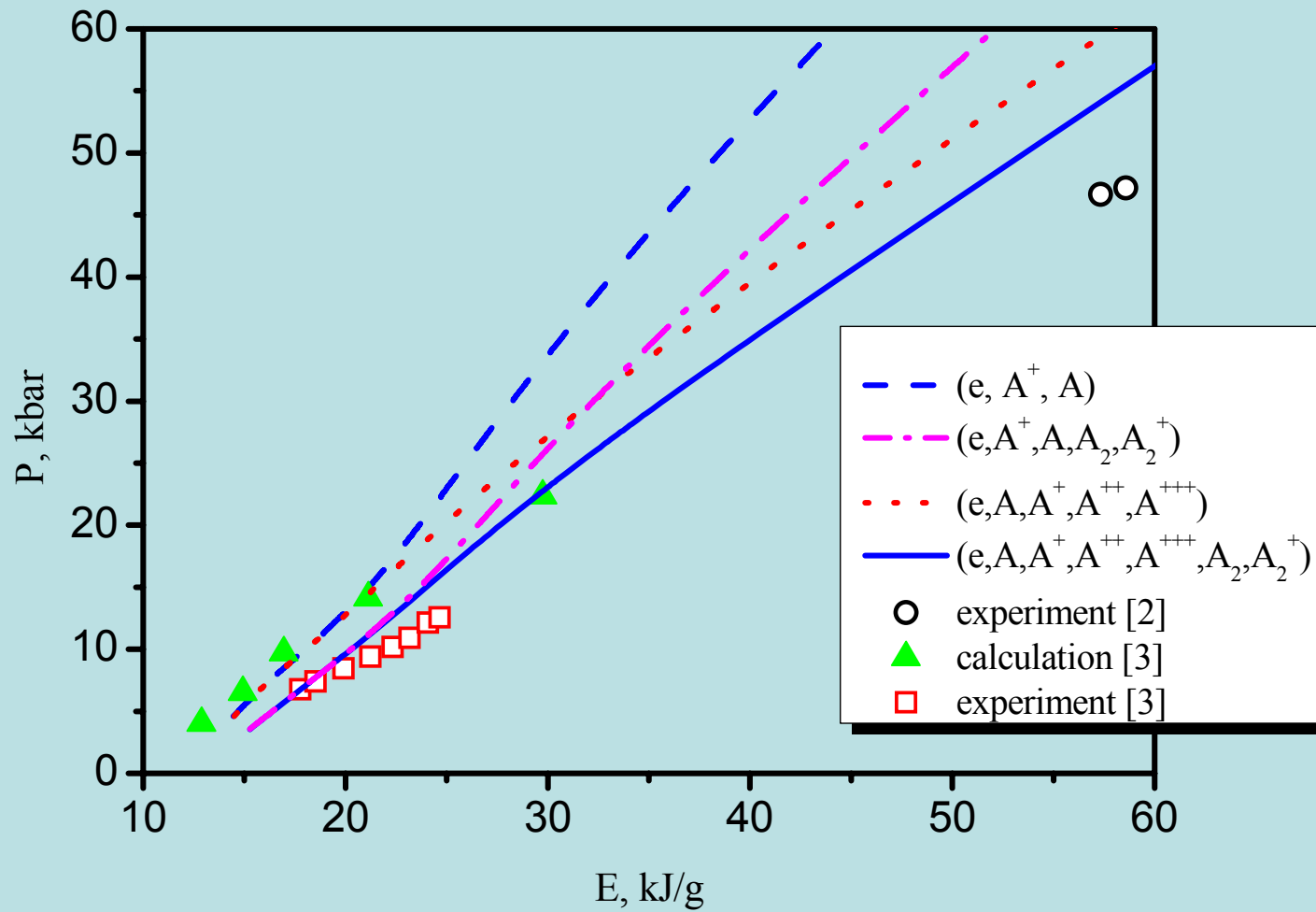
$$\beta\Delta P = -\frac{\Gamma}{6} \sum_k Z_k^2 n_k,$$

$$\Gamma^2 = 4\pi(\beta e^2)^3 \sum_k Z_k^2 n_k$$

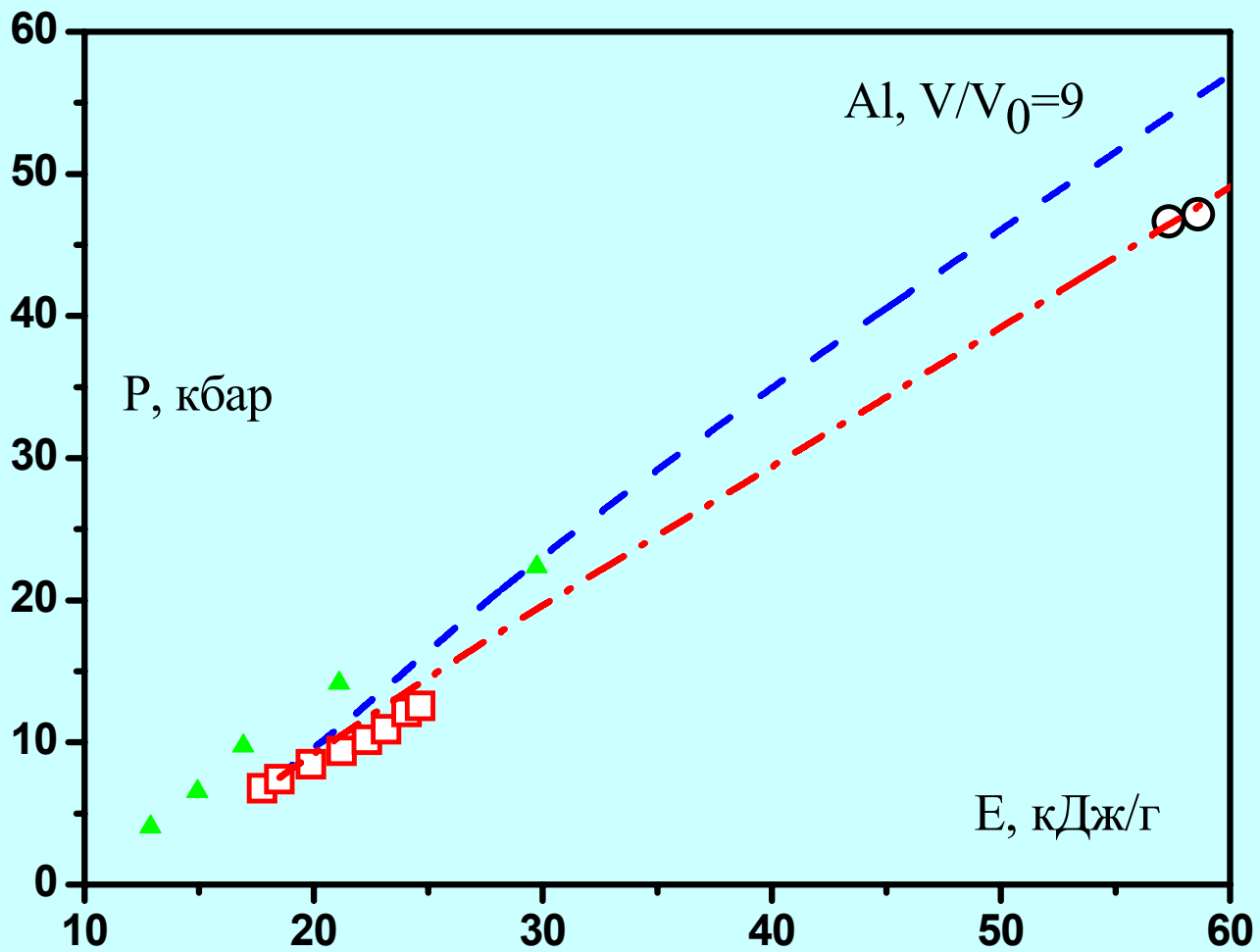




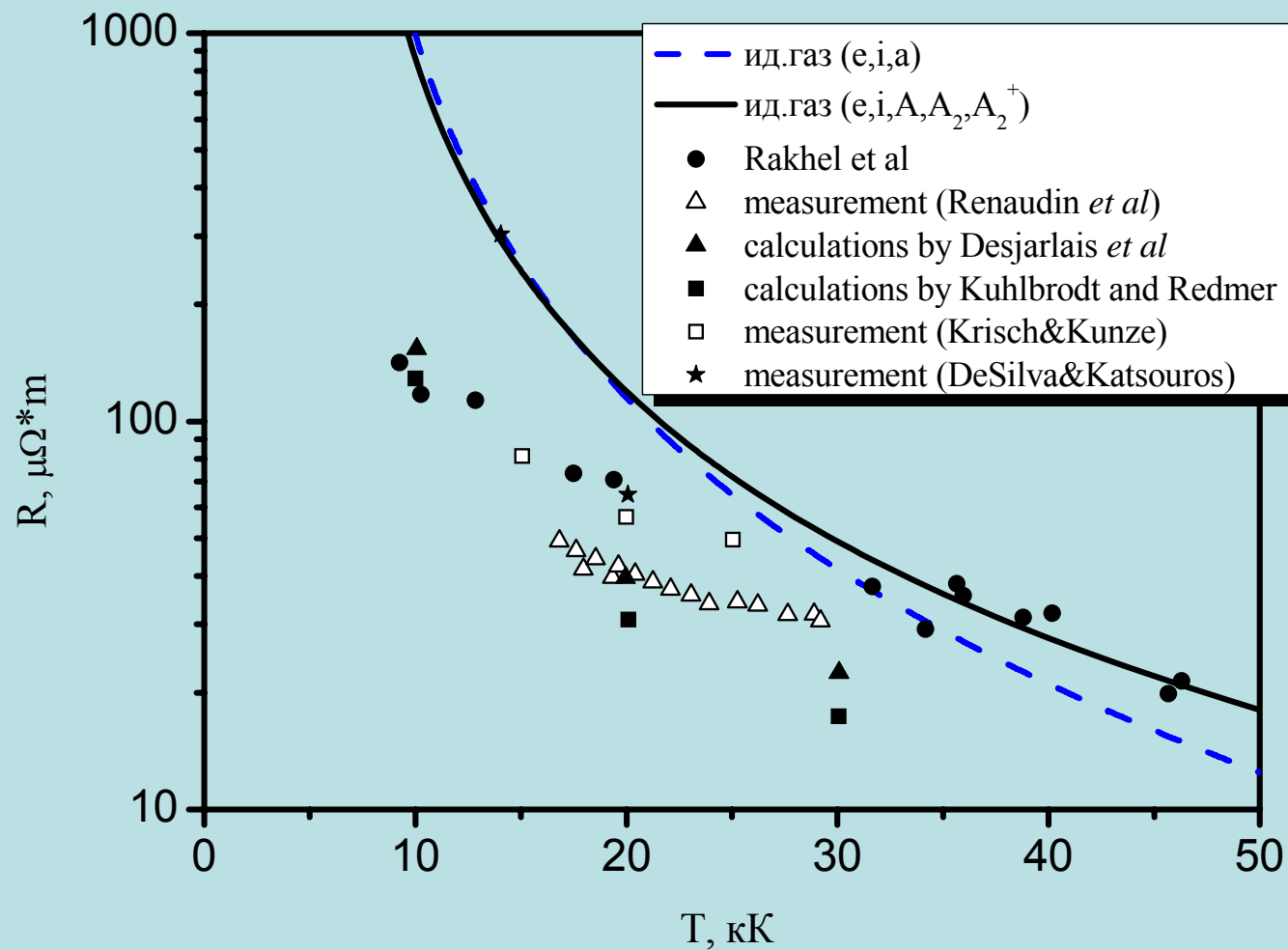




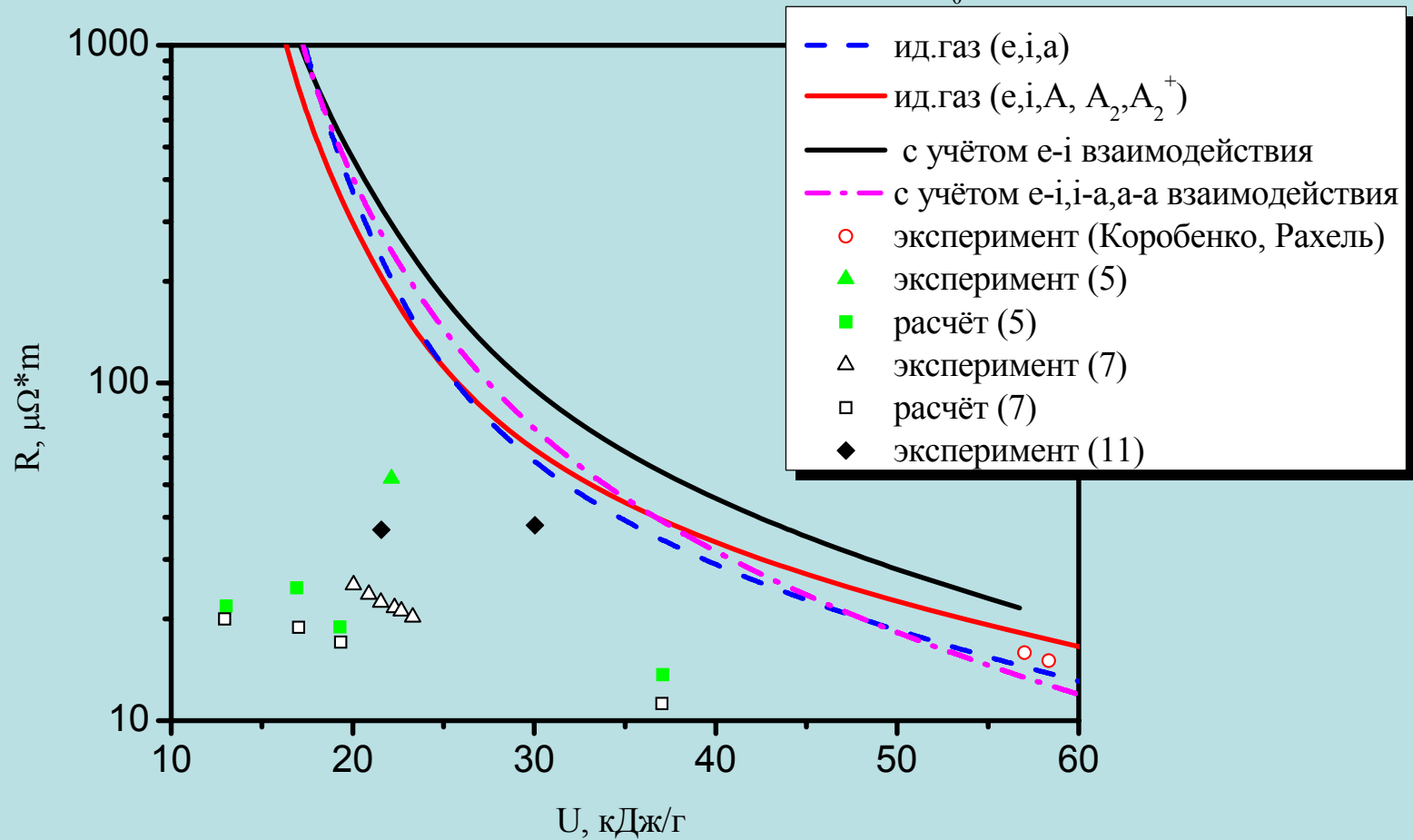




Зависимость сопротивления от температуры при  $V/V_0=27$



Зависимость сопротивления от внутренней энергии при  $V/V_0 = 9$





$$\beta F = -N_e \ln \frac{2eV}{N_e \lambda_e^3} - N_i \ln \frac{eV}{N_i \lambda_i^3} - N_a \ln \frac{eV \Sigma_a}{N_a \lambda_a^3} - \sum_{n=2}^6 N_n \ln \frac{eV \Sigma_n}{N_n \lambda_n^3} - \sum_{n=2}^6 N_n^+ \ln \frac{eV \Sigma_n^+}{N_n^+ \lambda_n^3},$$

$$\Sigma_n = \exp(\beta D_n) Z_{rot} Z_{vib} \exp(\beta \varepsilon_n),$$

$$Z_{rot} = \frac{(2k_B T)^{3/2} (\pi I_1 I_2 I_3)^{1/2}}{\sigma \hbar^3},$$

$$Z_{vib} = \prod_{j=1}^{3i-6} \frac{1}{1 - \exp(-\beta \omega_j)},$$

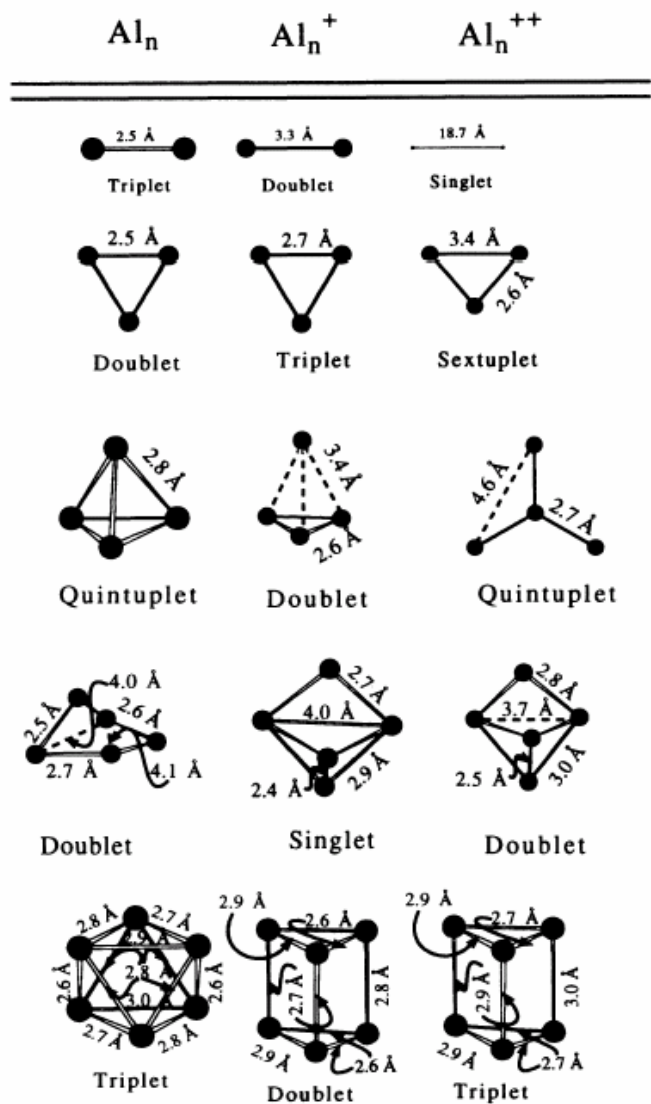


FIG. 1. Equilibrium geometries for neutral, single-, and double-ionized Al clusters. Ground-state spin multiplicities and some relevant interatomic distances are indicated.

TABLE I. Ionization potentials for (neutral)  $Al_{2-6}$  clusters. All values are in eV.

	Cluster size				
	$Al_2$	$Al_3$	$Al_4$	$Al_5$	$Al_6$
	Experimental values <sup>a</sup>				
Cox	6.0–6.42	6.42–6.5	6.5–7.87	6.42–6.5	6.0–6.42
Jarrold	5.6	6.3	6.4	6.5	6.7
Hanley	5.2	5.9	6.1	6.0	6.2
	Theoretical values				
Upton <sup>a</sup>	6.02	6.31	6.46	5.57	6.55
This work					
adiabatic	6.08	6.49	6.05	6.42	6.48
vertical	5.85	5.89	5.91	5.66	6.33

<sup>a</sup>From Table III in Ref. 2.

TABLE II. Atomization energies (in eV) of neutral and charged Al clusters for the lowest-energy equilibrium configurations.

$n$	$Al_n$	$Al_n^+$	$Al_n^{2+}$
2	1.702	1.696	-0.769
3	4.011	3.588	-6.889
4	5.734	5.757	0.104
5	8.722	8.371	3.765
6	11.605	11.199	6.566

### Stability of charged aluminum clusters

Ana Martínez and Alberto Vela

*Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Apartado Postal 55-534 México, Distrito Federal 09340 Mexico*

(Received 8 February 1994)

**Table 1.** Atomization energies and bond distances of Al clusters

$n$	$A_n$		$A_n^+$	
	$D_n$	$r_e$	$D_n$	$r_e$
2	1.702	2.5	1.696	3.3
3	4.011	2.5	3.588	2.7
4	5.734	2.8	5.757	3.4
5	8.722	2.7	8.371	2.8
6	11.065	2.7	11.199	2.7

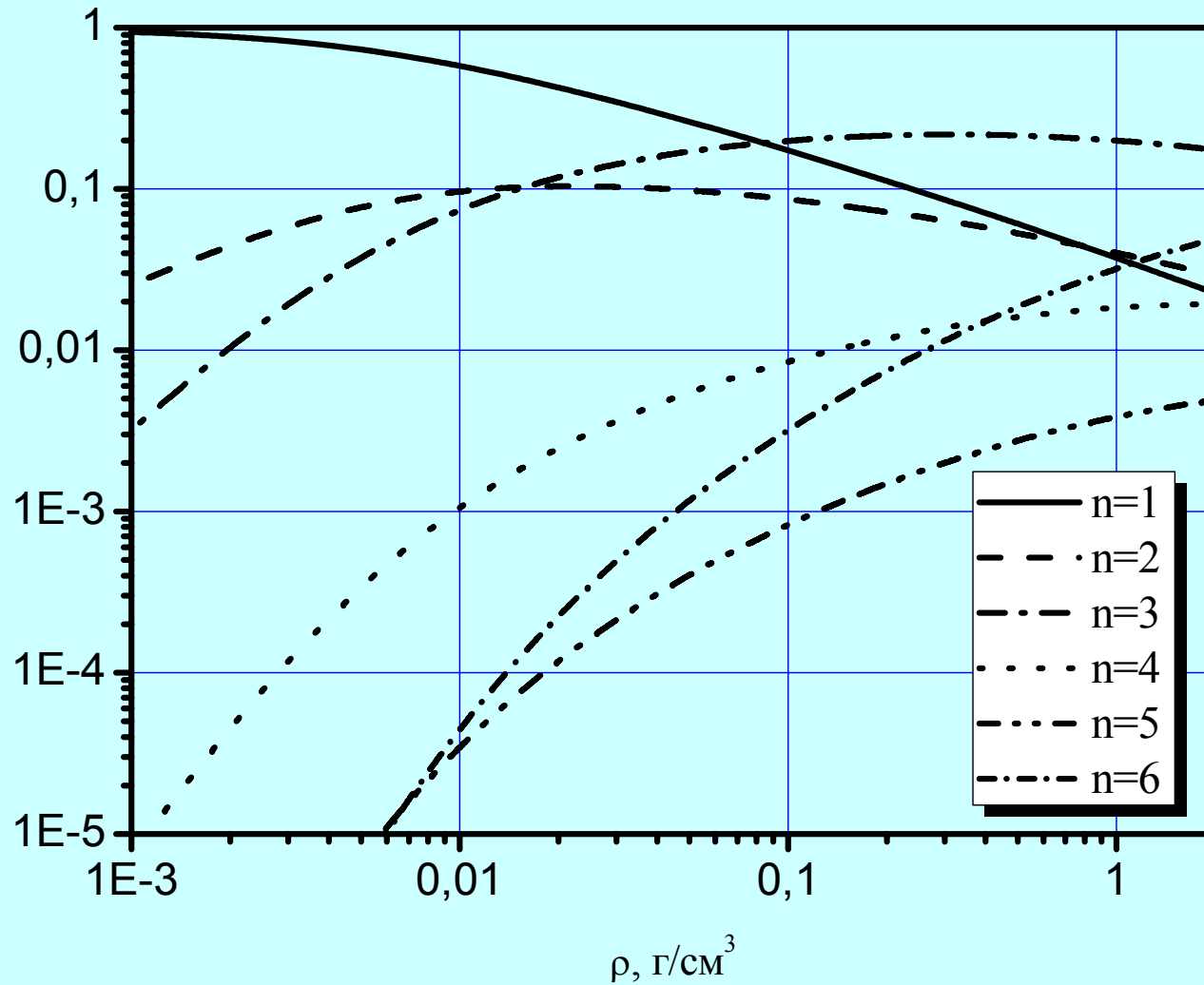
**Table 2.** Principal moments of inertia of Al clusters

$n$	2	3	4	5	6
$I_1$	1/2	1/2	1	7/5	2
$I_2$	1/2	1/2	1	7/5	2
$I_3$	0	1	1	2	2

**Table 3.** Characteristic oscillating frequencies of Al clusters

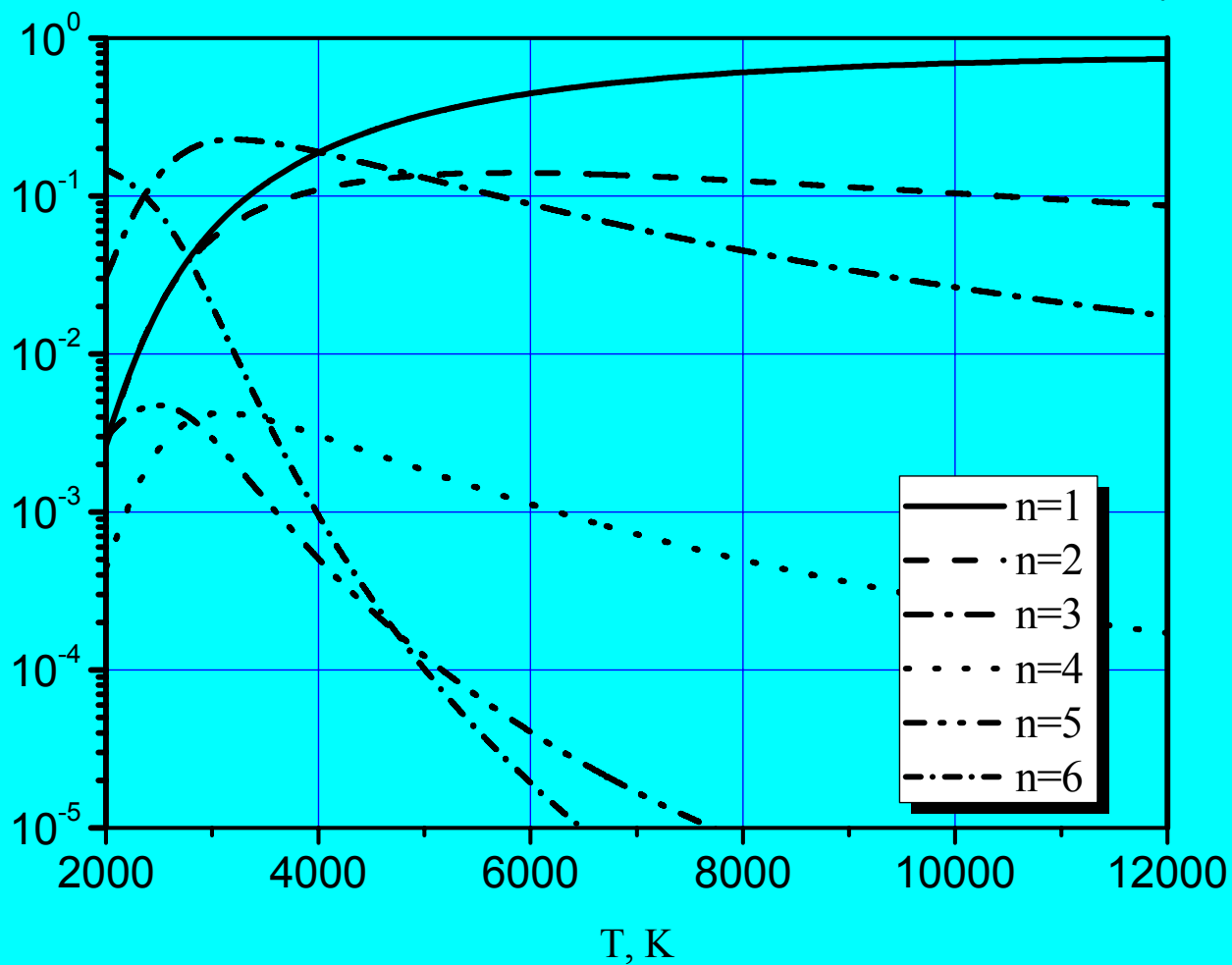
$n$	3	4	5	6
$\omega_1$	3/2	1	1	1
$\omega_2$	3/2	1	3	1
$\omega_3$	3	2	3	1.13
$\omega_4$	-	2	1.178	1.13
$\omega_5$	-	2	1.178	1.228
$\omega_6$	-	4	1.178	1.228
$\omega_7$	-	-	8.489	2.124
$\omega_8$	-	-	8.489	2.124
$\omega_9$	-	-	8.489	3.5
$\omega_{10}$	-	-	-	9.772
$\omega_{11}$	-	-	-	11.245
$\omega_{12}$	-	-	-	11.245

Composition of neutral clusters vs density along isotherm  $T=3000$  K

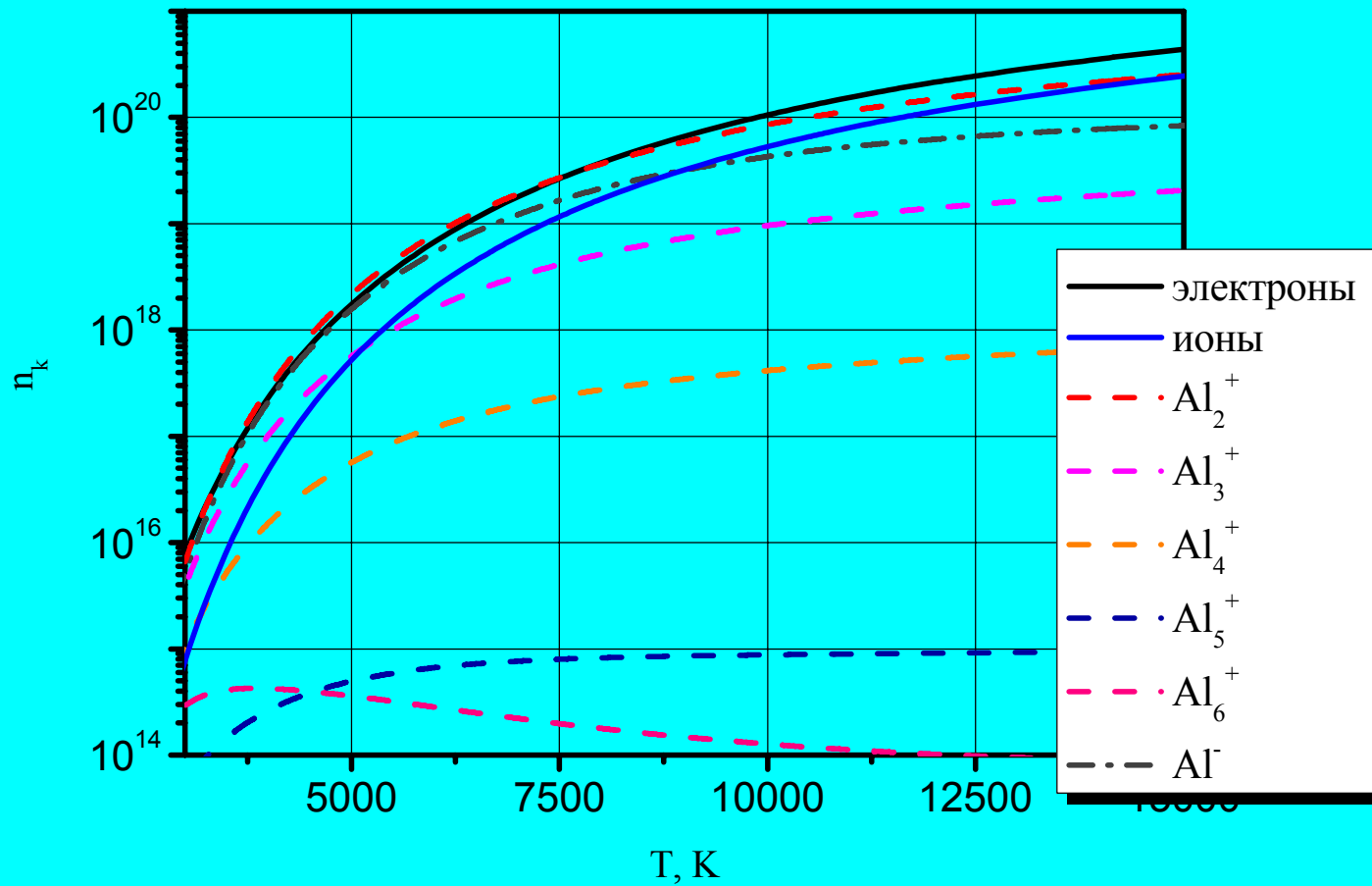




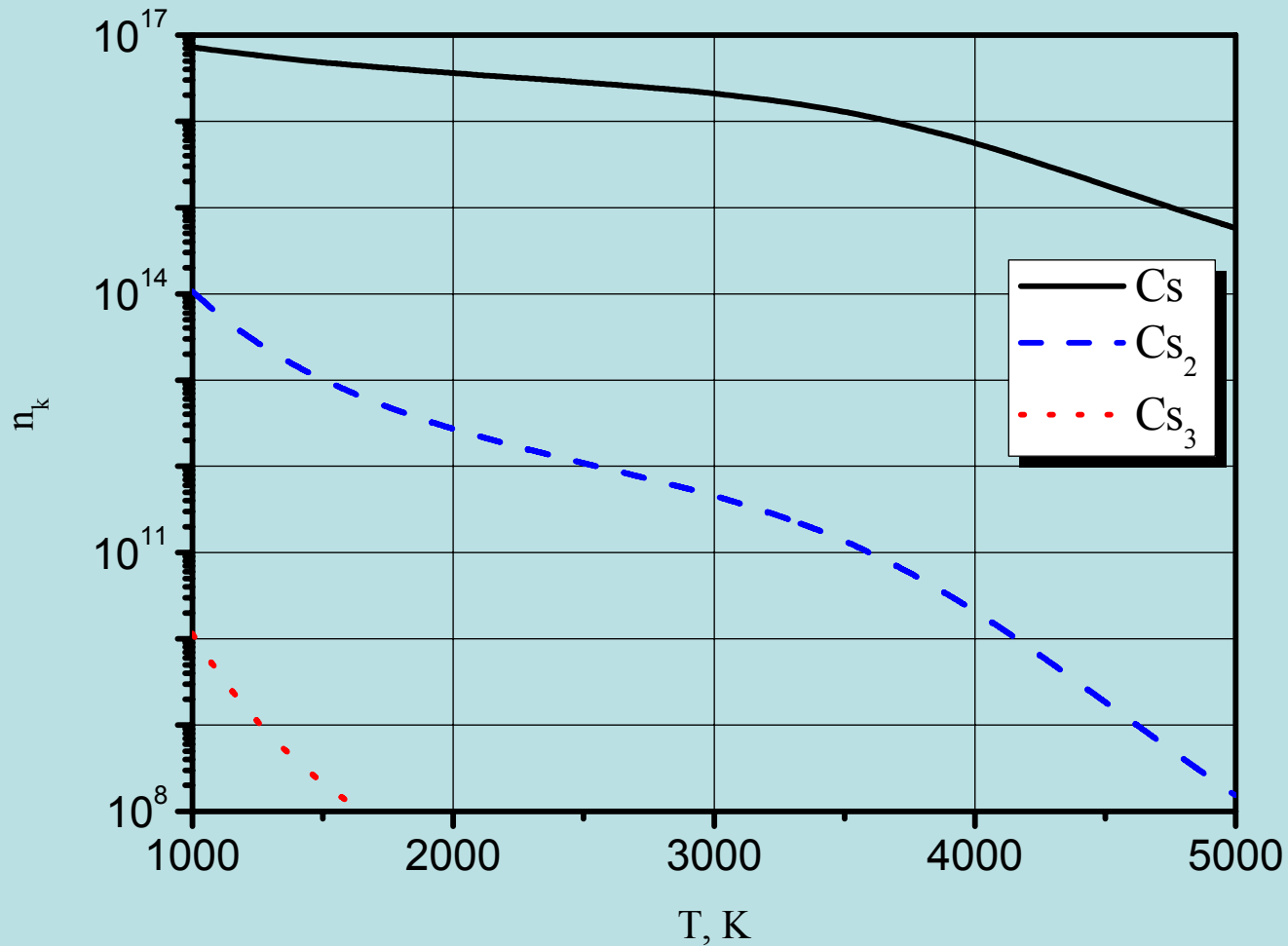
Composition of neutral clusters vs temperature along isochore  $V/V_0=5.4$



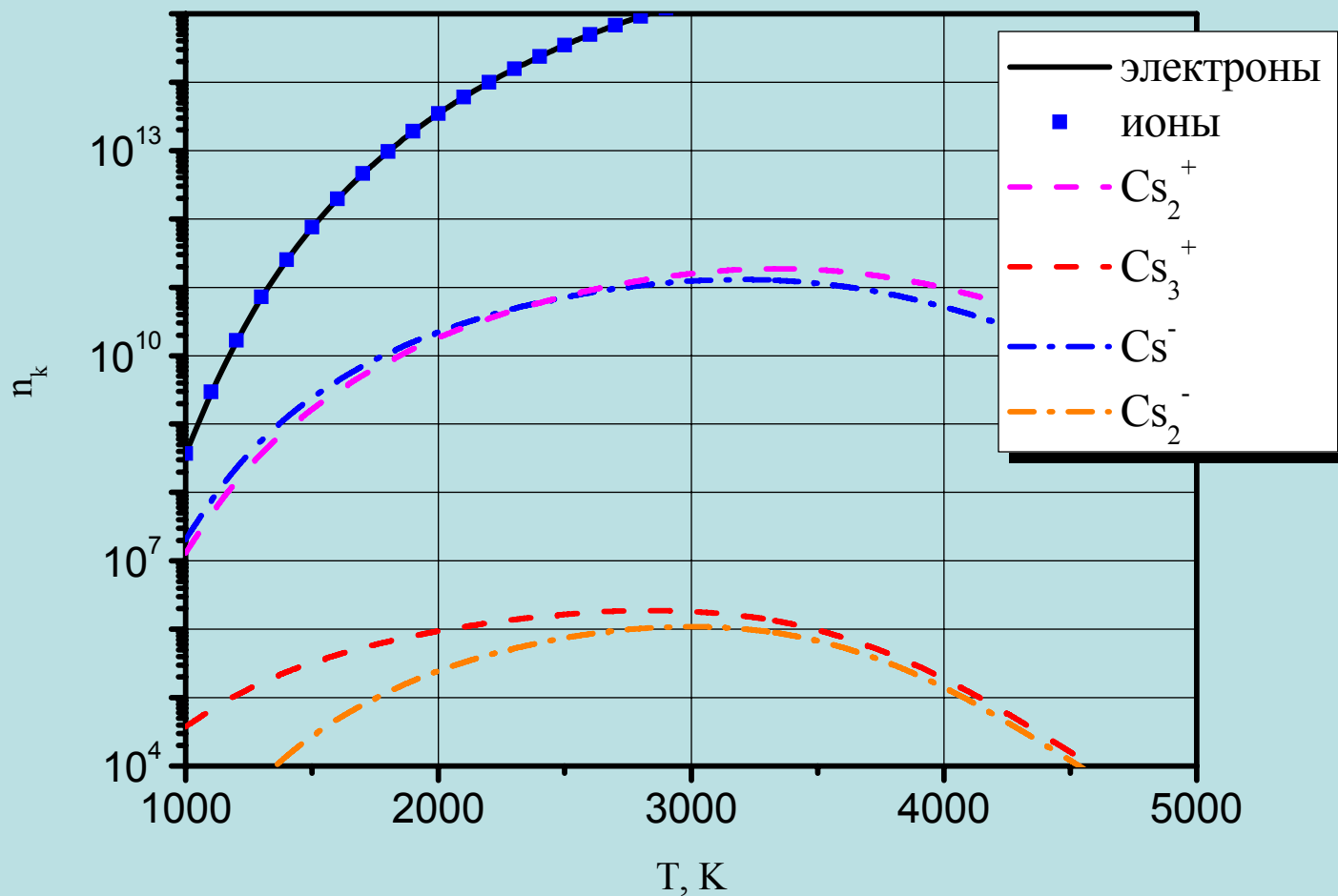
Состав заряженных кластеров вдоль температуры на изохоре  $V/V_0=5.4$



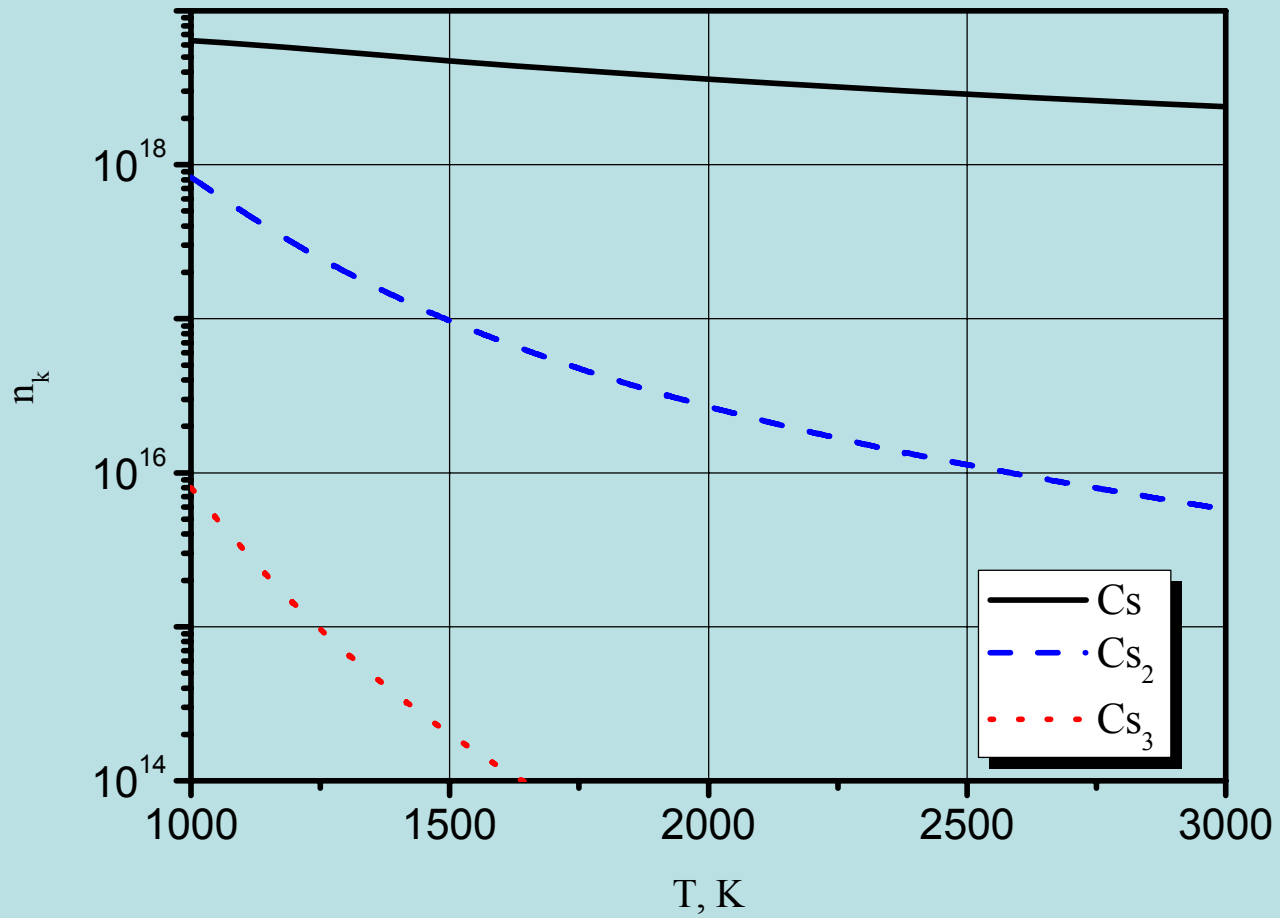
Состав плазмы цезия на изобаре 0,01 атм (нейтральные частицы)



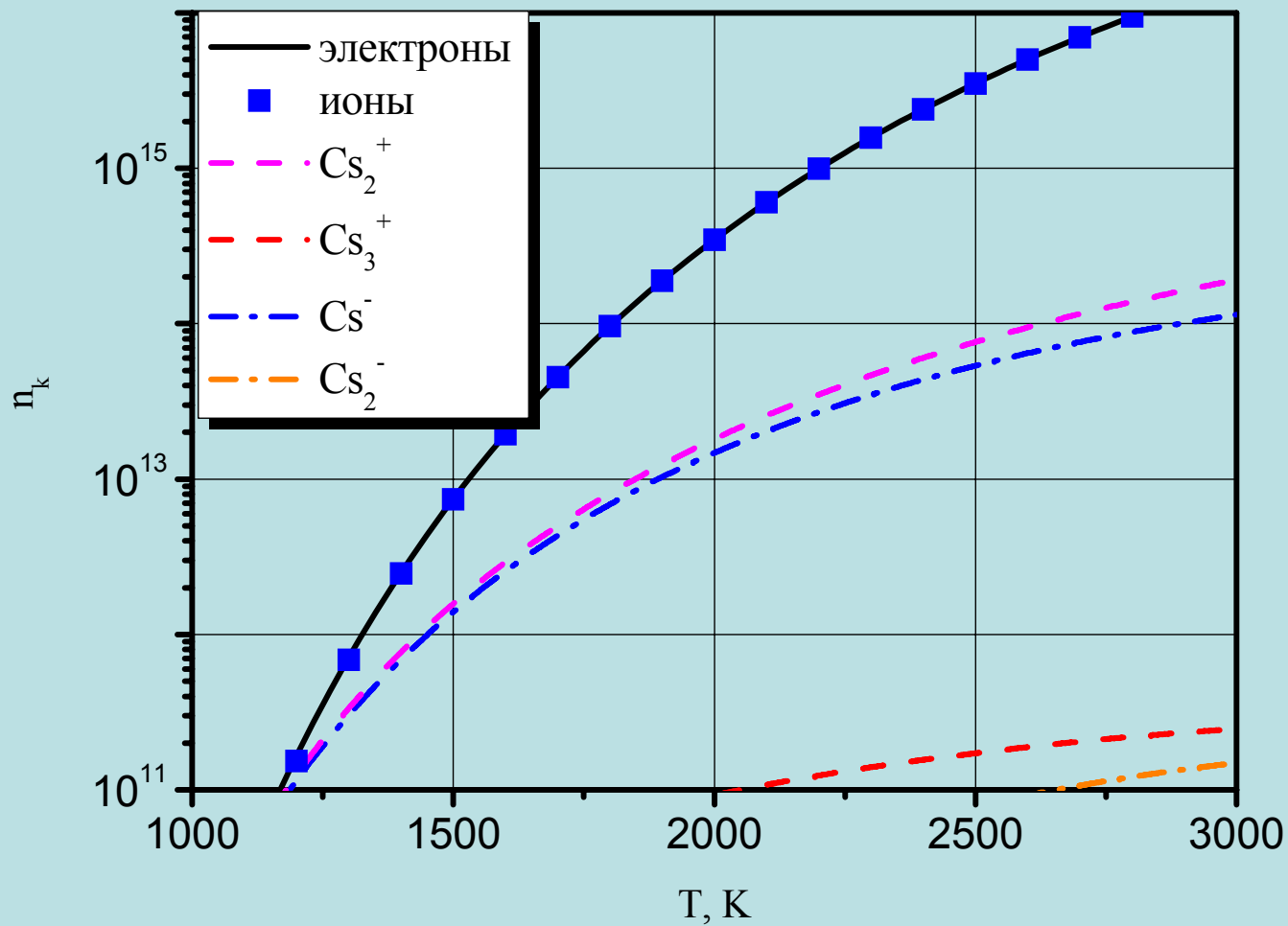
# Состав плазмы цезия на изобаре 0,01 атм (заряженные частицы)



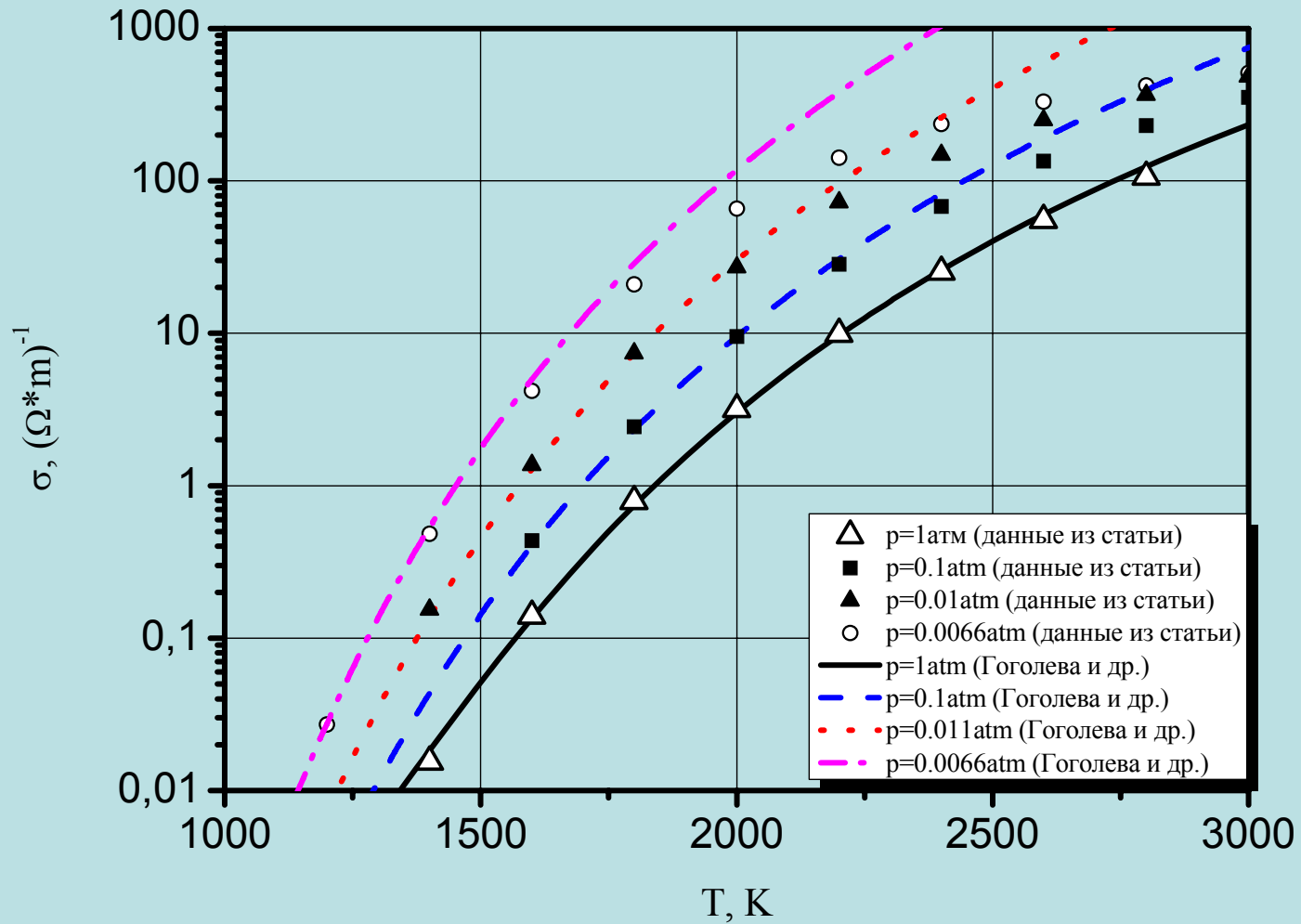
Состав плазмы цезия на изобаре 1 атм (нейтральные частицы)



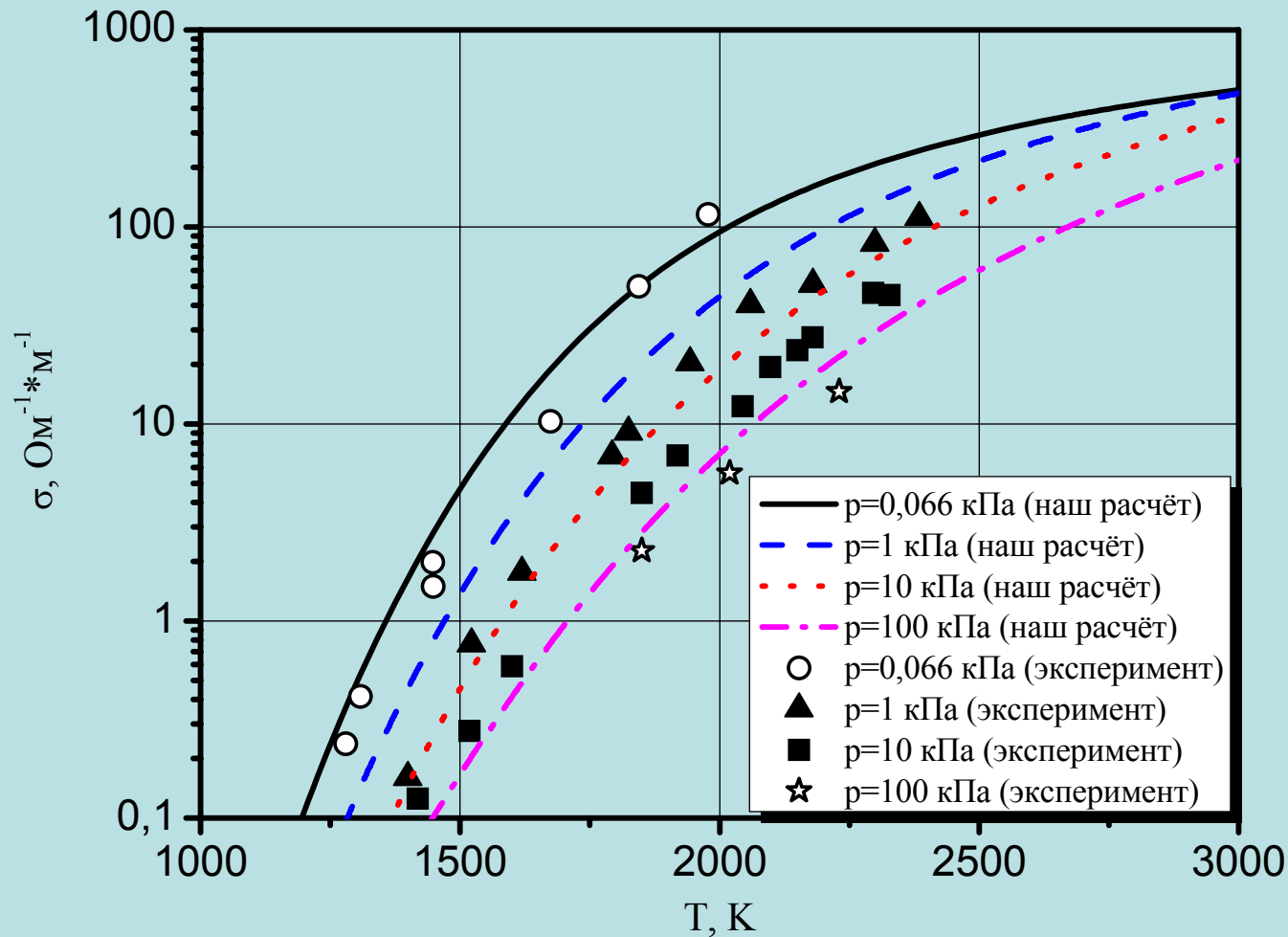
Состав плазмы цезия на изобаре 1 атм (заряженные частицы)



Зависимость проводимости от температуры (расчет по Гоголева и др.)

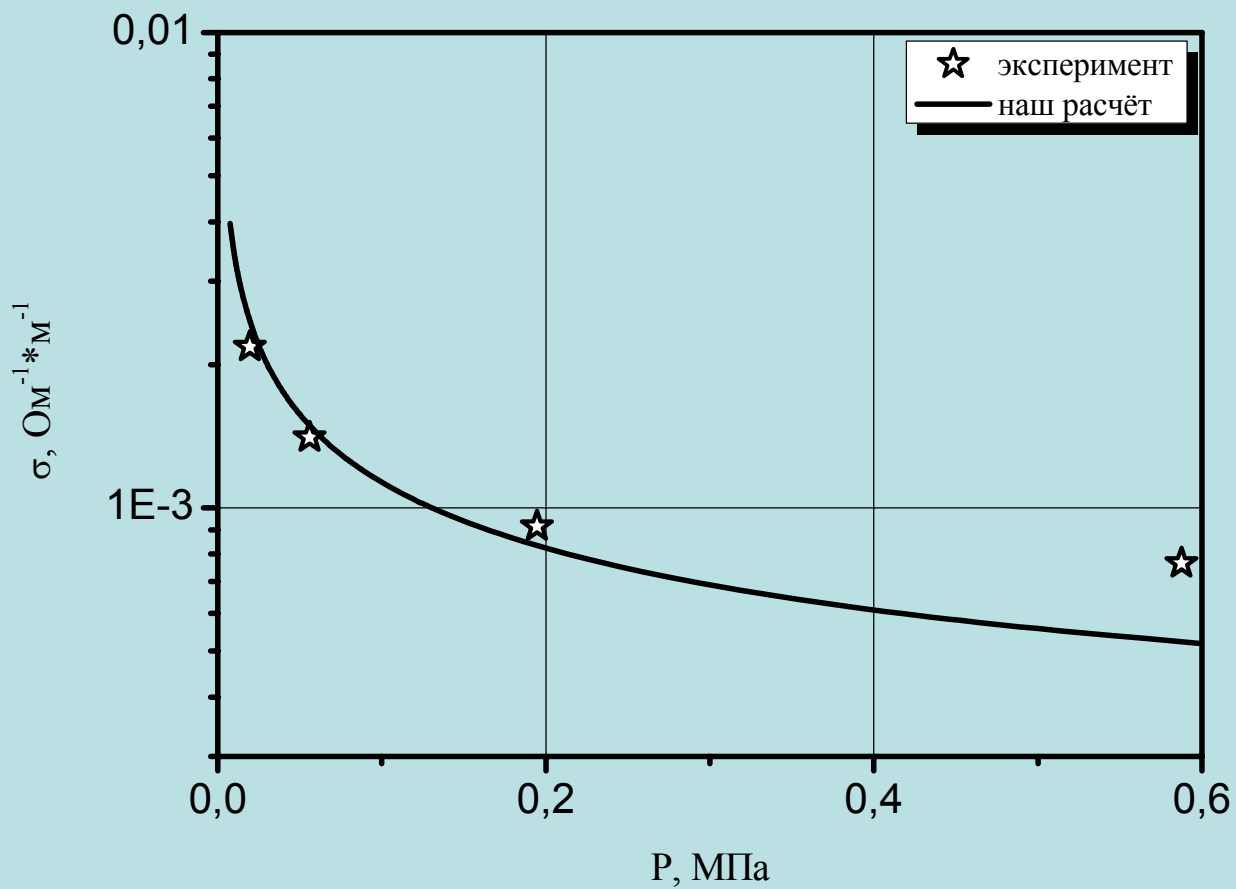


Зависимость проводимости от температуры на изобарах  
 ( $\sigma=4\pi L^2$ ,  $L=(Ry/E_A)^{1/2} * a_0$  - длина рассеяния определена из формулы Вигнера)

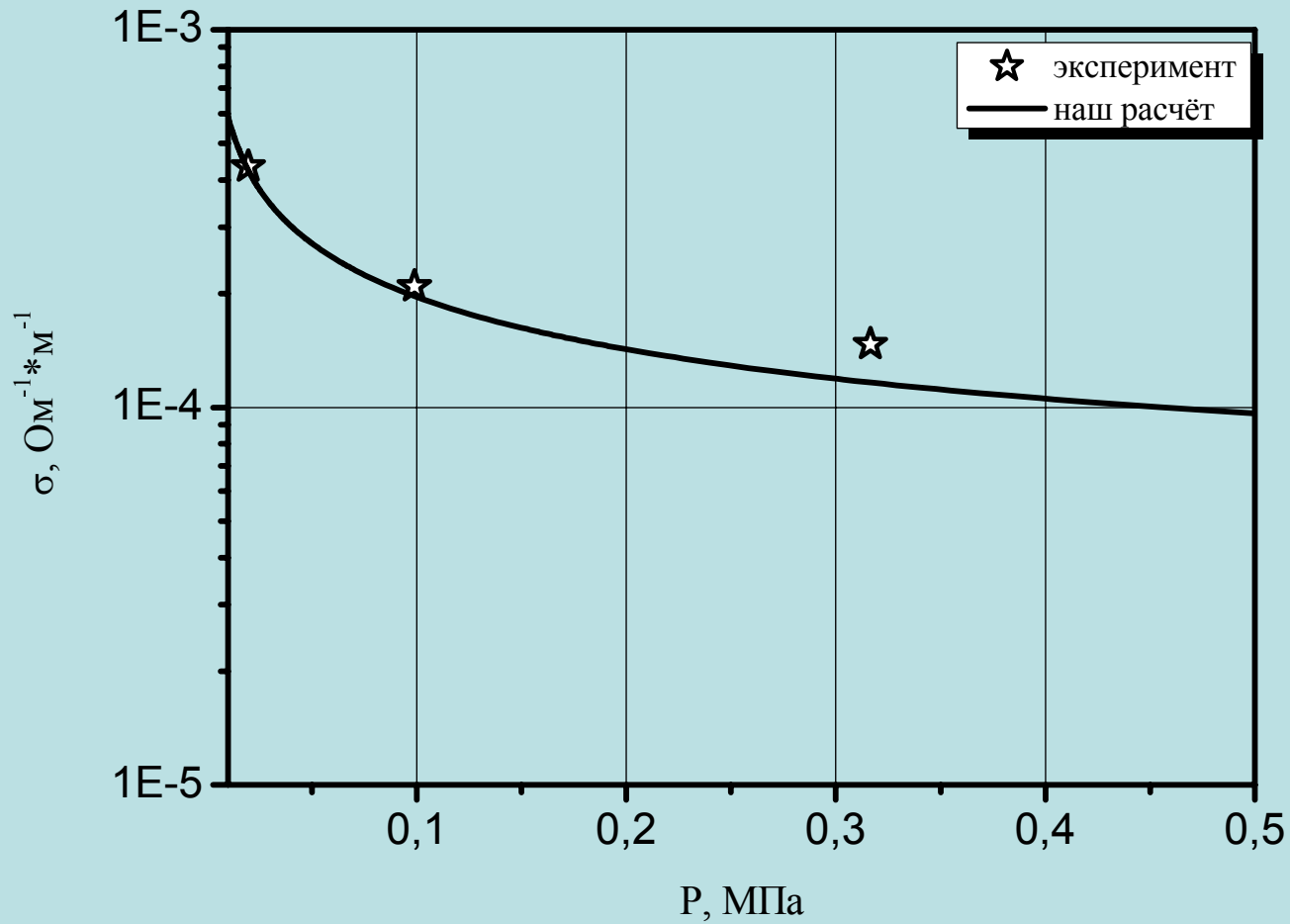




Зависимость проводимости от давления на изотерме T=1200 К

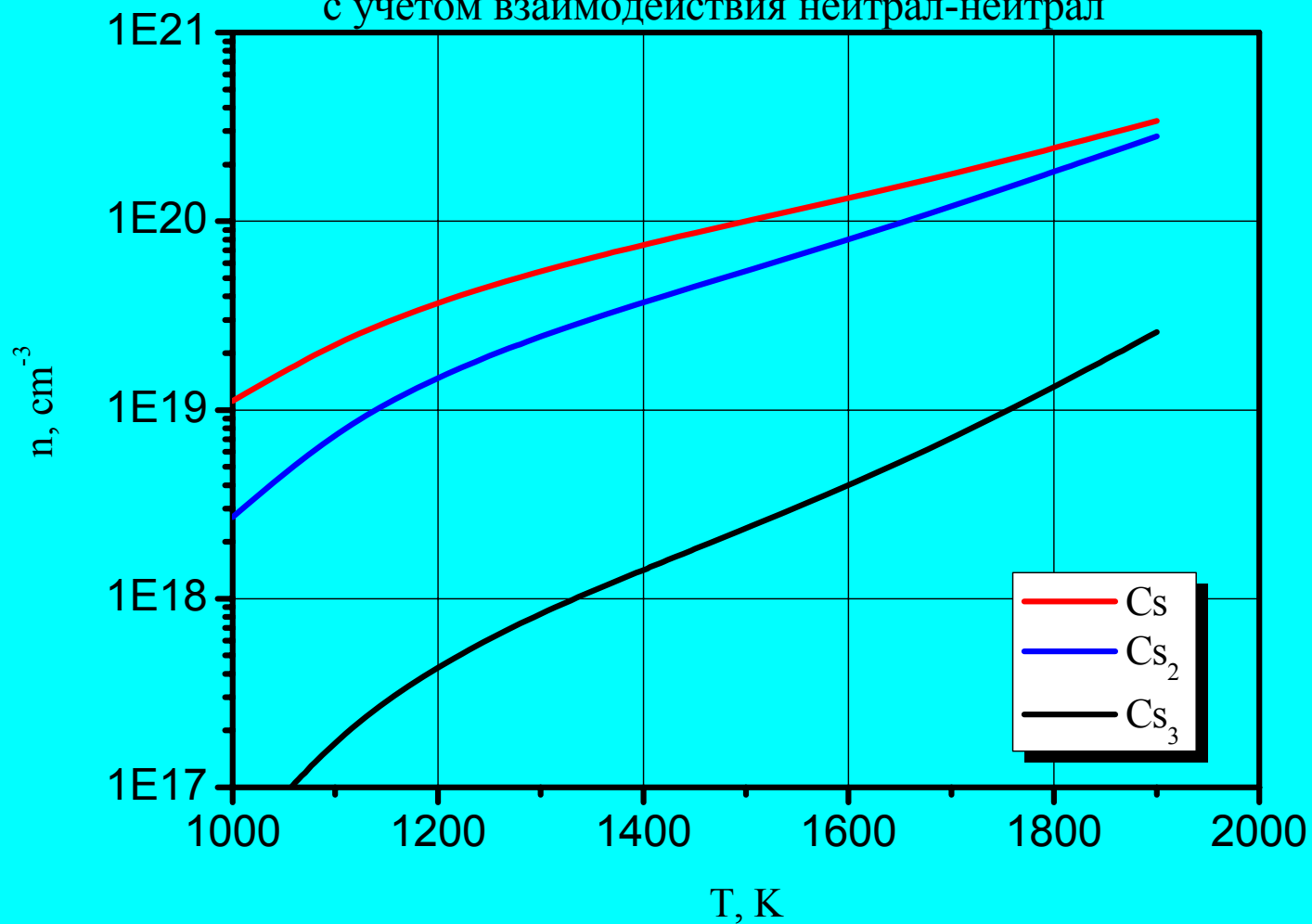


Зависимость проводимости от давления на изотерме T=1100 К



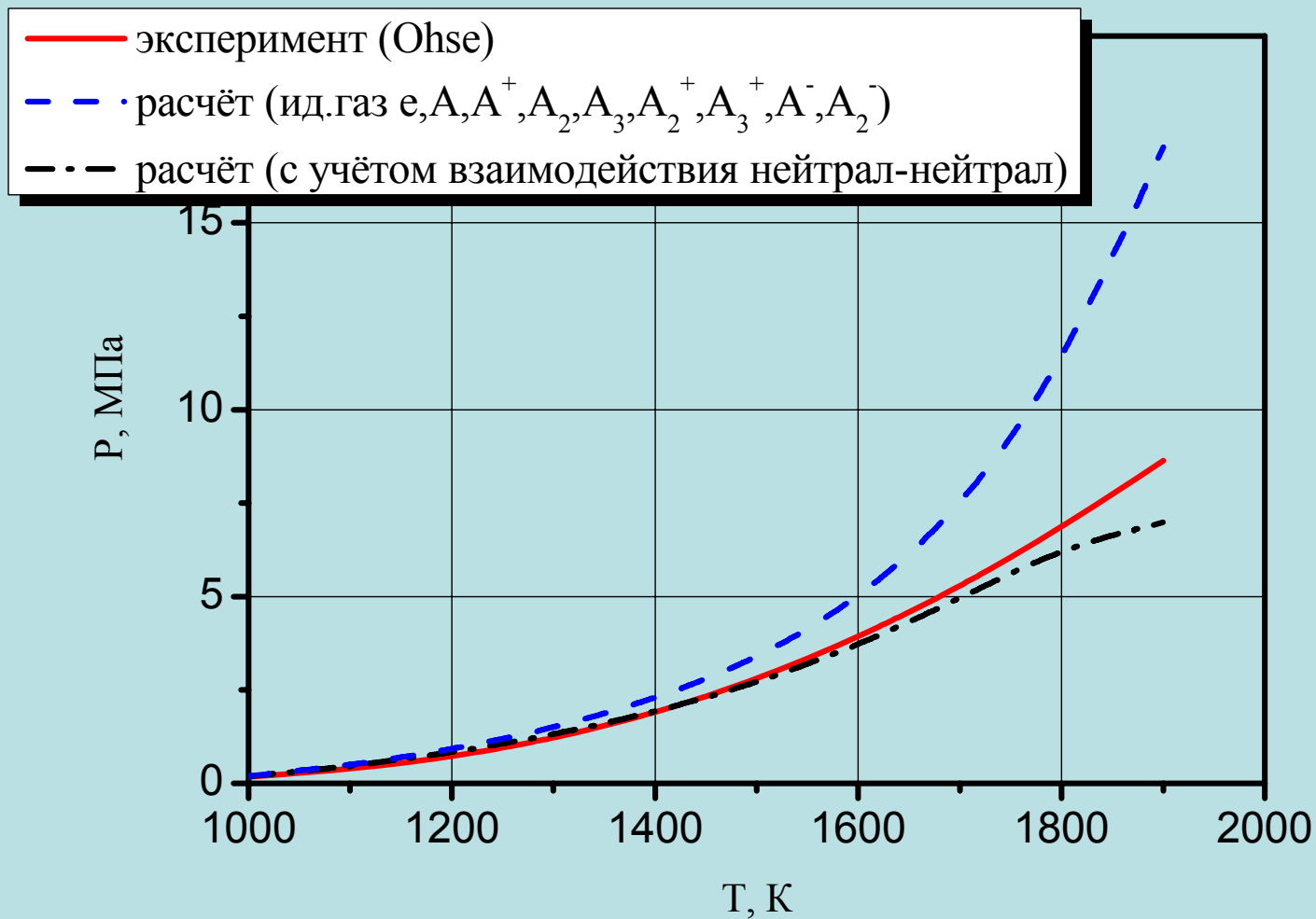
*Давление насыщенных паров,  
состав и проводимость паров цезия  
на бинодали*

Состав паров цезия на бинодали (нейтр.компоненты)  
с учётом взаимодействия нейтрал-нейтрал

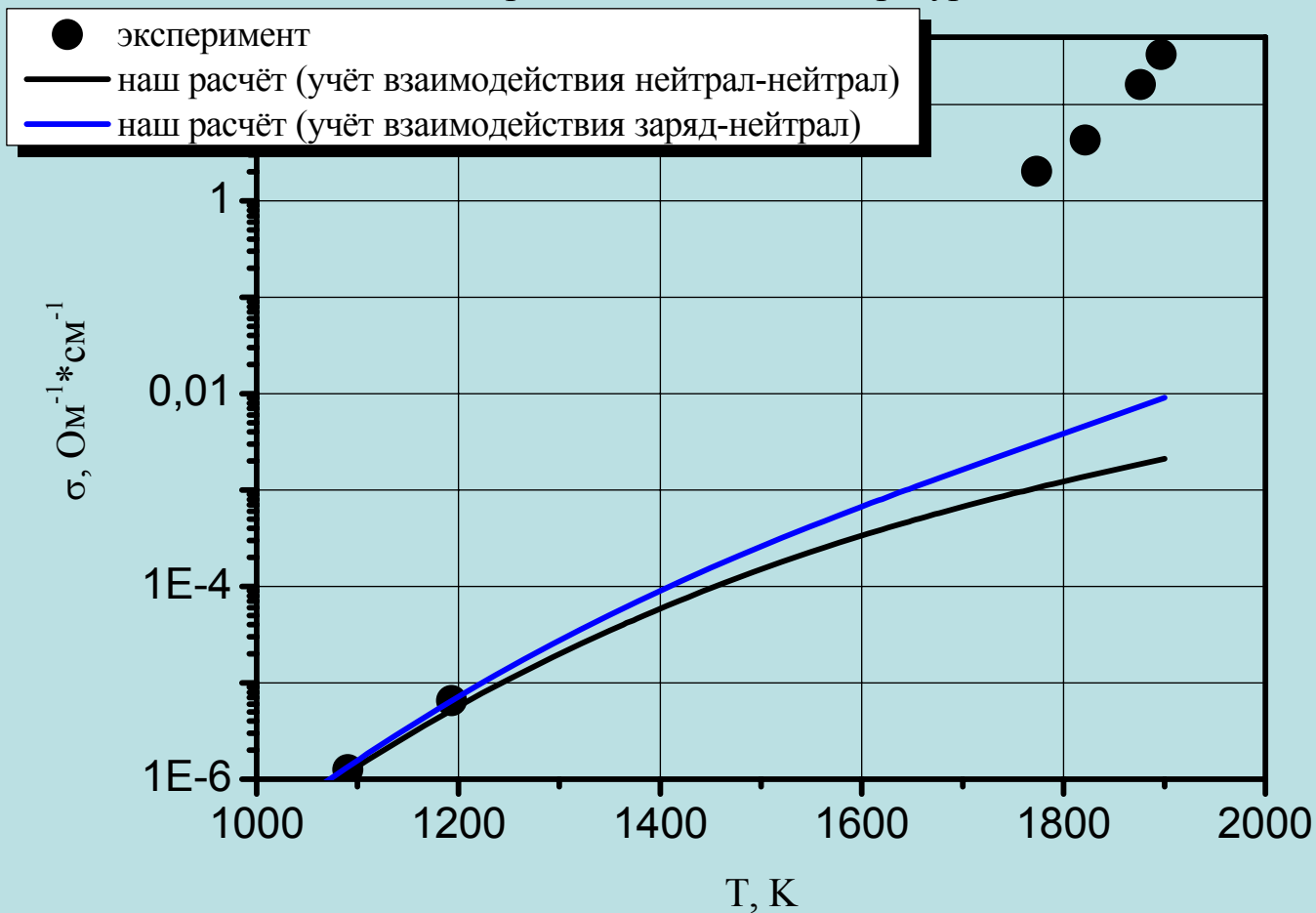




### Давление паров цезия вдоль линии насыщения



### Зависимость проводимости от температуры вдоль бинадали



*СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ*