

## Металлизация атомарного газа и переход пар-жидкость в парах щелочных металлов.

А.Л. Хомкин, А.С. Шумихин

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва*

Под металлизацией атомарного газа будем понимать процесс делокализации электронов, находящихся в основном состоянии при сжатии газа атомов. Физические причины металлизации обусловлены появлением блоховских электронов (за счет перекрытия волновых функций) и увеличением (по абсолютной величине) энергии основного состояния (электронного терма) системы атомов в целом.

Основы теории металлизации атомарного газа заложены в работах Вигнера-Зейтца и Дж. Бардина. Результатом этой теории стали расчеты коллективной квантовой энергии связи (cohesive energy), сжимаемости и пр. для жидких щелочных металлов. Проявление эффектов металлизации следует ожидать в условиях, когда среднее межчастичное расстояние сравнивается с диаметром частицы и, следовательно, традиционное, попарно аддитивное описание межчастичного взаимодействия с использованием центрально-симметричных потенциалов не работает.

В данной работе, распространяя понятие энергии связи атомов (cohesive energy) на газовую область, строится физическая модель паров щелочных металлов с учетом эффекта металлизации атомарной компоненты. В рамках единого подхода модель охватывает газовую и жидкометаллическую фазы, претендуя на описание фазового перехода пар-жидкость. Предлагаемая модель развивает модель газообразных металлов Ликальтера.

Трудности применения теории Вигнера-Зейтца-Бардина к жидким щелочным металлам связаны с необходимостью учета ионного кора. Используются численные методы и различные способы экстраполяции, например метод квантового дефекта. В настоящей работе, придавая большое значение аналитичности модели, нами предлагается использовать в качестве внутриатомного потенциала щелочных атомов потенциал Кратцера, успешно использованного ранее для описания ионных молекул. По аналогии с потенциалом Леннарда-Джонса его можно назвать потенциалом (2-1). На больших расстояниях он имеет кулоновскую асимптотику, а на малых расстояниях содержит отталкивание, моделирующее наличие ионного кора. Уравнение Шредингера с потенциалом Кратцера имеет точное решение, что позволяет определить множитель при отталкивательном члене, приравняв найденную аналитически энергию основного состояния изолированного атома экспериментально измеренной величине.

Используя теорию Вигнера-Зейтца-Бардина для упорядоченной системы атомов с внутриатомным потенциалом Кратцера, рассчитана квантовая коллективная энергия связи (cohesive energy) для всех щелочных металлов во всем диапазоне размеров ячейки Вигнера-Зейтца. Эта энергия имеет два экстремума: минимум при жидкометаллических плотностях и небольшой максимум при более низких, когда радиус классической орбиты связанного электрона сравнивается с радиусом ячейки Вигнера-Зейтца, проходя через ноль между ними. Плотность, при которой энергия связи обращается в ноль близка к критической.

Термодинамика паров рассчитывается по термодинамической теории возмущений для однокомпонентной системы с учетом исключенного объема и металлизированной энергии связи атомов. Модель содержит фазовый переход пар-жидкость (петлю Ван-дер-Ваальса), параметры которого качественно согласуются с известными значениями. Выполнен расчет проводимости с использованием формулы Йоффе. Проводимость при околокритических температурах демонстрирует переход металл-диэлектрик. Обсуждается корреляция этого перехода и перехода пар-жидкость.

На наш взгляд, предлагаемый подход для учета эффектов металлизации («ионизации» давлением) атомарного газа открывает интересную перспективу дальнейшего развития термодинамических моделей плотных газов и жидкостей.