

ЭФФЕКТ МЕТАЛЛИЗАЦИИ ПРИ СЖАТИИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

*А. Л. Хомкин**, *А. С. Шумихин*

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 16 мая 2018 г.,
после переработки 5 декабря 2018 г.
Принята к публикации 5 декабря 2018 г.

Рассмотрен эффект металлизации паров инертных газов, наблюдаемый при их ударном сжатии в области плазменного флюида. Предлагается объяснить скачкообразный рост проводимости эффектом уменьшения потенциала ионизации атомов, вызванным уширением основного уровня за счет возникновения диэлектрического желе. Поведение проводимости плазменного флюида приобретает полупроводниковые черты. Выполнен расчет состава и проводимости плотных паров инертных газов с использованием модифицированной модели «3+». Проведен сравнительный анализ эффекта в парах металлов и инертных газов.

DOI: 10.1134/S0044451019050109

1. ВВЕДЕНИЕ

В экспериментах, выполненных в последнее время [1–6], устойчиво зафиксирован высокий, близкий к металлическому, уровень проводимости плазмы паров инертных газов при сравнительно низких температурах ($T \approx 5000$ – 15000 К), но высоких плотностях и давлениях. Данные, полученные при ударно-волновом сжатии жидких инертных газов, демонстрируют резкий, почти скачкообразный рост проводимости [3–6] в отличие от высокотемпературных данных, полученных ранее при сжатии газообразных инертных газов [1]. Во многом наблюдаемый эффект напоминает металлизацию паров металлов, зафиксированную в экспериментах по электровзрыву проволок и фольг, заключенных в стеклянные капилляры или сапфировые пластины [7, 8], однако отличается от нее близким к скачкообразному росту проводимости. Естественно, встает вопрос о природе этих явлений. Важно подчеркнуть, что большинство важных измерений выполнено для состояний, которые мы называли плазменным флюидом. Это состояния вещества при давлениях, температурах выше критических и при плотностях выше критических, но меньше нормальных. Для регулярной теории это традиционно сложная область (нет малых параметров), в которой большую роль играет физическая интуиция. Физические модели эф-

фекта металлизации в парах металлов и в инертных газах были предложены в работах [2, 9–15]. В этих работах рост проводимости при сжатии объяснялся ростом концентрации свободных (термически ионизованных) электронов, вызванным снижением потенциала ионизации за счет эффектов взаимодействия свободных частиц — нейтральных и заряженных. В работах [9–15] это преимущественно кулоновское притяжение свободных зарядов, которое учитывается с использованием различных экстраполяционных соотношений. В [2] это преимущественно межатомное отталкивание и эффекты перестройки спектра в модели «ограниченного атома» при умеренной величине эффектов кулоновской неидеальности. Все перечисленные факторы неидеальности приводят к росту концентрации термически ионизованных электронов.

Недавно появилась работа [16], в которой дополнительно к эффекту снижения потенциала ионизации обсуждается влияние на величину проводимости в плотных инертных газах и водороде упорядочения «свободных» ионов. Зарождение дальнего порядка при сжатии плазмы, без сомнения, ведет к росту проводимости. Однако для наблюдения этого эффекта необходима достаточно высокая степень термической ионизации плазмы и превалирование столкновений электронов проводимости с ионами над их столкновениями с атомами. При низких температурах ($T \approx 5000$ К) такие условия вряд ли достижимы.

* E-mail: alhomkin@mail.ru

Таким образом, можно сказать, что в большинстве физических моделей [2, 9–15], предложенных в литературе для объяснения эффекта появления высокой проводимости в первоначально нейтральных газах при их сжатии, используется хорошо известный в физике неидеальной плазмы плотностной эффект снижения потенциала ионизации атома, вызванного взаимодействием «свободных» частиц или, как иногда говорят, взаимодействием зарядов и атомов с плазмой в непрерывном спектре. Применительно к плотной плазме инертных газов выполненное сравнение с экспериментом позволяет говорить о количественном согласии с экспериментом преимущественно при высоких ($T \geq 20000$ К) температурах. Скачкообразный рост проводимости, зафиксированный в эксперименте [5], теоретически описывается лишь качественно, поскольку результаты расчетов лежат вне экспериментальных значений, при более высоких плотностях.

В серии работ [17–19] для описания эффекта металлизации плотных паров металлов нами была предложена необычная физическая модель — модель «3+», главной особенностью которой является учет в модели плазменного флюида (газоплазменное состояние с плотностью жидкости) некоторых твердотельных свойств, таких, например, как когезионная (коллективная) связь атомов и электронное желе — зачаток зоны проводимости. Предложен способ расчета плотности электронного желе как части электронной плотности валентных электронов, лежащей вне атомарной ячейки Вигнера–Зейтца. Эти хвосты дают вклад в электронную плотность всех окружающих ячеек. Происходит их случайное наложение — образуется желе. В парах металлов возникающая зона заполнена частично и электроны желе могут проводить ток. С ростом плотности электроны желе доминируют над термически ионизованными электронами и именно их проводимость обеспечивает согласие с экспериментом для плотных паров металлов в области плазменного флюида.

Цель настоящей работы — применить ранее предложенную модель «3+» к расчету проводимости плотной плазмы инертных газов с учетом их специфики. Инертные газы принципиально отличаются от паров металлов. В газовом состоянии они являются диэлектриками и остаются таковыми при охлаждении и сжатии вплоть до жидкого и твердого состояний. Коллективная энергия связи согласно теории Ленард-Джонса–Девоншира [20] формируется за счет попарно аддитивного взаимодействия пробного атома с его ближайшим окружением из первых координационных сфер. Использование по-

тениала Ленард-Джонса для расчета энергии связи приводит к разумным результатам в рамках классической статистической физики [1].

Использование предложенной нами в работе [17] методики расчета плотности электронного желе приводит к его появлению и при сжатии инертных газов. Однако возникающее при этом желе следует считать диэлектрическим, поскольку оно возникает из полностью заполненной электронной оболочки. Непосредственный вклад в проводимость и в коллективную энергию связи атомов при этом электроны желе не дают.

Возникающее в инертных газах желе образовано из хвостов электронной плотности связанных состояний и его положение на энергетической оси непосредственно примыкает к основному уровню. В работе предлагается рассмотреть новый, необычный для физики плазмы эффект, связанный с уширением основного уровня атома за счет образования электронного желе, в уравнении ионизационного равновесия. Появление такого уширения будет облегчать термическую ионизацию, приближая энергию основного состояния связанного электрона к континууму, действуя как своего рода снижение потенциала ионизации, но с другой стороны энергетической шкалы. С учетом этого эффекта рассчитаны состав и проводимость плотных, ионизованных паров инертных газов. Установлено, что уширение основного состояния, вызванное появлением желе, играет важную роль при металлизации паров инертных газов.

При низких температурах ($T \approx 4000$ – 5000 К) металлизация носит почти скачкообразный характер. В определенном смысле проводимость проявляет полупроводниковый характер. С ростом температуры процесс ионизации становится более плавным. Проведено сопоставление результатов с экспериментальными данными для Ag, Xe, Kr и получено удовлетворительное согласие с ними.

2. УРАВНЕНИЕ ИОНИЗАЦИОННОГО РАВНОВЕСИЯ ДЛЯ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

Рассмотрим неидеальную смесь N_e электронов, N_i ионов, N_a атомов, плюс (+) N_j электронов желе, являющихся частью валентных электронов атомов $N_j = \alpha_j N_a$. Плазма находится в объеме V при температуре T . Плотности компонент соответственно равны $n_{a,e,i} = N_{a,e,i}/V$, $n_j = N_j/V$. Радиусы Вигнера–Зейтца для атомарной и заряженной компо-

нент определяются через плотности соответствующих компонент $R_{a,i} = (3/4\pi n_{a,i})^{1/3}$. Радиус Вигнера–Зейтца для нормальной плотности металла n_0 обозначим через R_0 . В дальнейших выкладках используются радиусы в атомных единицах $y_{a,i,0} = R_{a,i,0}/a_0$, где a_0 — боровский радиус.

2.1. Плотность электронного желе

Кратко напомним методику расчета плотности электронов желе. Зная волновую функцию i -го электрона $\Psi_i(\mathbf{r})$ изолированного атома, которые вычислены в приближении Хартри–Фока для многих атомов и представлены в [21] в виде разложения по слэтеровским орбиталам, можно рассчитать долю электронной плотности, участвующей в образовании электронного желе в ячеечном приближении. Эта доля α_j^i определяется интегрированием $|\Psi_i(r)|^2$ вне ячейки Вигнера–Зейтца и вкладом постоянного фона внутри ячейки $\Psi(y_a)^2$:

$$\alpha_j^i = \int_{y_a}^{\infty} |\Psi_i(r)|^2 r^2 dr + \frac{y_a^3}{3} \Psi_i(y_a)^2, \quad (1)$$

где y_a [ат. ед.] — радиус ячейки Вигнера–Зейтца для текущей атомарной плотности. В принципе, таким способом можно вычислить вклад всех атомных электронов в желе, но мы при расчетах использовали данные [21] только для восьми валентных электронов, поскольку вклад электронов ионного остова в наших условиях мал и не влияет на итоговую величину $\alpha_j = \sum_i \alpha_j^i$.

Концентрация электронов желе n_j в этом варианте расчета связана непосредственно с концентрацией атомов n_a и определяется соотношением

$$n_j = \alpha_j n_a. \quad (2)$$

Возможны и другие методы оценки плотности электронного желе, которые обсуждаются в работах [17, 18].

2.2. Термически ионизованные электроны. Формула Саха

Для расчета концентраций компонент и зависимости проводимости от плотности на изотермах нам понадобится уравнение ионизационного равновесия. Воспользуемся вариантом этого уравнения, полученным в [17–19], модернизировав его с учетом новой роли электронного желе. Вводя степень термической ионизации $\alpha = n_e/n$ и учитывая уравнения

электронейтральности $n_e = n_i$ и баланса $n = n_i + n_a$, получим

$$\frac{1 - \alpha}{\alpha^2} = n \lambda_e^3 \frac{g_a}{2g_i} \exp(\beta I_{eff}), \quad (3)$$

где λ_e — тепловая длина волны электрона, g_a, g_i — статистические веса атома и иона, $\beta = 1/kT$ — обратная температура. Эффективный потенциал ионизации атома I_{eff} выражается через потенциал ионизации изолированного атома I и его изменения за счет эффектов взаимодействия ΔI :

$$I_{eff} = I + \Delta I. \quad (4)$$

В качестве слагаемых в ΔI мы используем тот же набор, который применялся к парам металлов [18, 19], конечно, несколько изменив его для плазмы инертных газов:

$$\Delta I = \Delta I_{coul} + \Delta I_{coll} + \Delta I_{HS} + \Delta I_{Fermi}. \quad (5)$$

Первое слагаемое, связанное со взаимодействием свободного электрона с ближайшим ионом, остается без изменений:

$$\Delta I_{coul} = -\frac{2Ry}{y_i}, \quad (6)$$

где Ry — потенциал ионизации атома водорода. Второе слагаемое в (5), обусловленное коллективным взаимодействием атомов, формально также не меняется:

$$\Delta I_{coll} = -\frac{E_{uber}}{2} \left(1 - \frac{y_a}{3E_{uber}} \frac{\partial E_{uber}}{\partial y_a} \right), \quad (7)$$

однако при расчетах надо иметь в виду, что природа сил сцепления в инертных газах отличается от таковой в парах металлов. Она определяется попарно аддитивным взаимодействием центрального атома с атомами первых координационных сфер и была успешно описана в теории Ленард–Джонса–Девоншира [20]. Эта теория была проверена в *ab initio* численных расчетах [22]. В работах [23, 24] предложена универсальная формула для описания сил сцепления применительно к широкому кругу состояний и систем. Это атомы в молекулах, межатомные силы в твердых телах и жидкостях, силы адгезии и т. д. В упомянутом перечне встречаются и инертные газы. Это универсальное соотношение получило название *universal bind energy relation* — E_{uber} . Через него и выражаются энергии сцепления для всех перечисленных выше систем:

$$E_{uber}(\Delta E, a^*) = \Delta E E^*(a^*), \quad (8)$$

Таблица 1

Элемент	N	ΔE , К	y_0, a_0	l_0, a_0
Ne	10	232.1	3.304	0.396
Ar	18	928.4	3.926	0.451
Kr	36	1346	4.169	0.488
Xe	54	1915	4.533	0.537

$$E^*(a^*) = -(1 + a^*) \exp(-a^*), \quad (9)$$

$$a^* = (R_a - R_0)/l. \quad (10)$$

В формулах (8), (9) $E^*(a^*)$ — универсальная безразмерная скейлинговая функция, ΔE — энергия испарения вещества при нормальных условиях. Безразмерный параметр разрежения a^* выражается через радиусы ячейки Вигнера–Зейтца для нормальной R_0 и текущей R_a плотностей. В (10) l — длина масштабирования, связанная с изотермическим модулем упругости B соотношением: $l = \sqrt{\Delta E/12\pi B R_0}$. В боровских радиусах все скейлинговые множители становятся безразмерными: $l_0 = l/a_0$, $y_0 = R_0/a_0$, $y_a = R_a/a_0$. В результате энергия связи зависит от текущей плотности атомов (y_a) и трех параметров ($\Delta E, y_0, l_0$). Необходимые для расчета параметры $\Delta E, y_0, l_0$ для многих металлов приведены в работе [24], а для инертных газов представлены в табл. 1. В литературе имеется небольшой разброс этих параметров, но для описания эффекта металлизации он не играет существенной роли.

При $a^* = -1$ когезия (9) обращается в нуль. Это происходит при определенной величине радиуса $R_{HS} = R_0 - l$, в боровских радиусах $y_{HS} = y_0 - l_0$. Этот радиус связан в нашей модели с параметром упаковки η .

Следующее слагаемое описывает вклад исключенного объема и описывается традиционно с использованием формулы Карнахана–Старлинга для модели твердых сфер:

$$\Delta I_{HS} = -\frac{8\eta - 9\eta^2 + 3\eta^3}{(1 - \eta)^3} kT. \quad (11)$$

Здесь $\eta = 4\pi n_a R_\eta^3/3$ — параметр упаковки, где $R_\eta = cR_{HS}$. Параметр c выбран из сравнения с экспериментом. Оказалось, что $c \approx 0.7 \div 0.8$ для всех рассмотренных инертных газов.

И, наконец, приведем новое слагаемое, описывающее уменьшение потенциала ионизации атома на величину

$$E_{Fermi}(\eta_j) = (\hbar^2/2m)(3\pi^2 n_j)^{2/3},$$

связанное с образованием диэлектрического желе. В безразмерных переменных оно имеет вид

$$\Delta I_{Fermi} = -Ry \left(\frac{9}{4\pi}\right) \left(\frac{\alpha_j}{y_a^3}\right)^{2/3}. \quad (12)$$

Решение уравнения Саха (нелинейного) позволяет найти зависимость степени термической ионизации α от плотности n и температуры T . Степень «желеобразования» α_j входит как промежуточный параметр и связана с концентрацией атомов n_a .

2.3. Снижение потенциала ионизации

Уравнение (3) однозначно определяет состав плазмы, а уравнение (2) позволяет найти плотность электронного желе. Решением этих уравнений будут зависимости $n_{a,e,i}(n)$, а с использованием (2) — и $n_j(n)$.

На рис. 1, 2 представлены результаты расчета слагаемых, формирующих снижение потенциала ионизации атома в плазме аргона. При $T = 5000$ К (рис. 1а) главными компонентами являются вклады от взаимодействия твердых сердцевин и ферми-энергия желе. С ростом плотности становятся заметными кулоновское притяжение и коллективные силы сцепления, которые немного компенсируют друг друга. Последний эффект отмечался в плазменном флюиде паров металлов. Для инертных газов суммарный эффект от взаимодействий частиц иллюстрируется на рис. 1б. Сближение континуума и основного состояния и приводит к резкому росту концентрации термически ионизованных (свободных) атомов. С ростом температуры (рис. 2) роль желе уменьшается. За счет ионизации концентрация атомов снижается, а вместе с ней снижается и концентрация электронов желе. На первый план выходят отталкивание сердцевин и кулоновское взаимодействие свободных зарядов.

3. ПРОВОДИМОСТЬ. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для расчета проводимости термических электронов σ_i воспользуемся широко используемой в приложениях формулой, которая в литературе называется по-разному: τ -приближение [1, 12], формула Лоренца–Блоха [16] и формула Фроста [17, 25]. По сути, они все одинаковы и используют приближение Лоренца для проводимости легкой частицы в среде тяжелых, подправленное (или нет) для учета

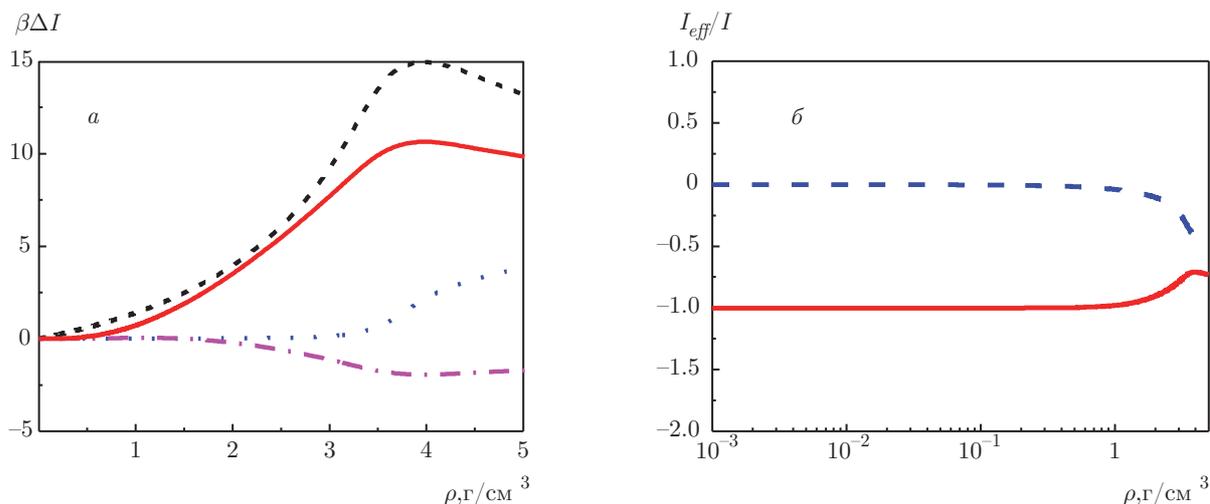


Рис. 1. Снижение потенциала ионизации атома в температурных единицах для плазмы аргона при $T = 5000$ К в зависимости от плотности. *а)* Вклады отдельных компонент в снижение потенциала ионизации: пунктирная кривая (ΔI_{coul}), штрихпунктирная кривая (ΔI_{cohes}), штриховая кривая (ΔI_{HS}), сплошная красная кривая (ΔI_{Fermi}). *б)* Положение континуума и основного состояния в единицах энергии связи изолированного атома: штриховая кривая — континуум с учетом снижения потенциала ионизации за счет взаимодействия частиц в непрерывном спектре, сплошная кривая — положение основного состояния с учетом ферми-энергии желе

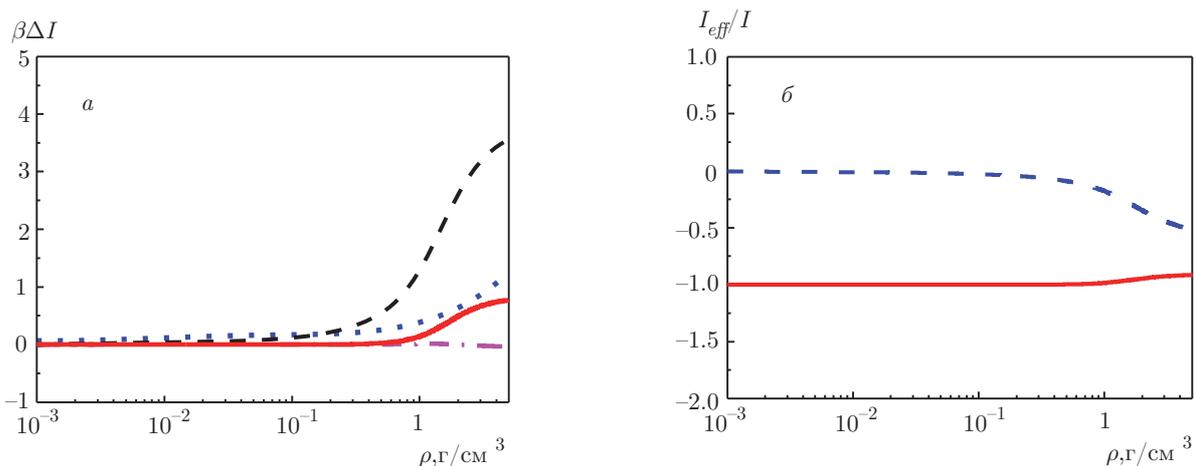


Рис. 2. Снижения потенциала ионизации атома плазмы аргона при $T = 20000$ К в зависимости от плотности. Обозначения те же, что и на рис. 1

электрон-электронных столкновений и учета функции распределения электронов по скоростям Ферми-Дирака. Последний фактор становится существенным лишь при экстремально высоких плотностях. Мы будем использовать формулу Лоренца, подправленную на $e-e$ -столкновения, с классической функцией распределения Максвелла [25]. Для краткости она называется «формулой Фроста»:

$$\sigma_t = \frac{4\alpha n e^2 \beta^{5/2}}{3\sqrt{2\pi} m_e} \frac{1}{9 \cdot 10^{11}} \times \int_0^\infty \frac{\exp(-\beta \varepsilon) \varepsilon^{3/2} d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} [(1 - \alpha)n Q_{ea}(\varepsilon) + \alpha n \gamma e^{-1} Q_{ei}(\varepsilon, \Gamma)]}, \quad (13)$$

где ε — энергия термического электрона, $Q_{ea}(\varepsilon)$ — транспортное сечение рассеяния электрона на

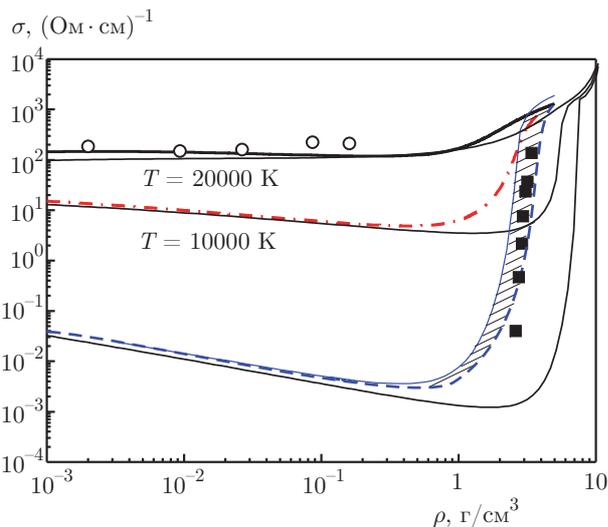


Рис. 3. Проводимость плазмы аргона. Эксперимент: «высокотемпературные» данные (температура $T \approx 17000 \div 22000$ К) — светлые кружки [26], «низкотемпературные» данные (температура $T \approx 3000 \div 10000$ К) — темные квадраты [3]. Теория: тонкие черные линии — расчет с использованием кода «САХА» [2], штриховая, штрихпунктирная и жирная сплошная кривые отвечают расчету по модели «3+» для температур соответственно $T = 5000, 10000, 20000$ К ($c = 0.7$). Заштрихованная область соответствует расчету для $T = 5000$ К для коэффициента $c = 0.7 \div 0.8$

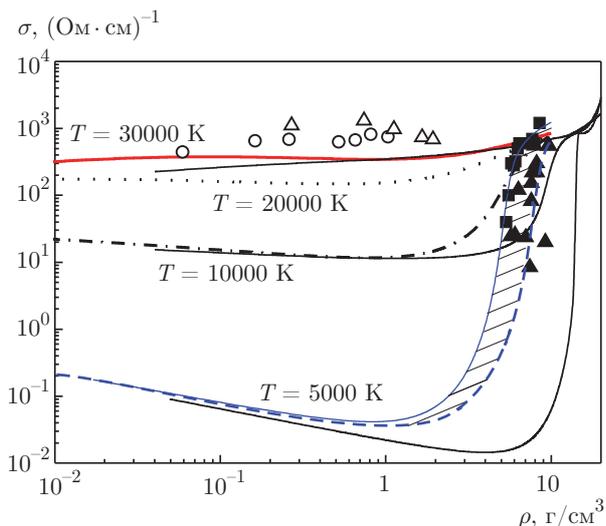


Рис. 4. Проводимость плазмы ксенона. Эксперимент: «высокотемпературные» данные (температура $T \approx 25000 \div 50000$ К) — светлые кружки [26], светлые треугольники [27]; «низкотемпературные» данные (температура $T \approx 5000 \div 15000$ К) — сплошные квадраты [5], сплошные треугольники [4]. Теория: тонкие черные линии — расчет с использованием кода «САХА» для $T = 5000, 10000, 30000$ К [2]; штриховая, штрихпунктирная, пунктирная, жирная сплошная кривые — расчет с использованием модели «3+» соответственно для $T = 5000, 10000, 20000, 30000$ К ($c = 0.7$). Заштрихованная область соответствует расчету для $T = 5000$ К для коэффициента $c = 0.7 \div 0.8$

атоме, $\gamma_e = 0.582$ — спитцеровский множитель, $Q_{ei}(\epsilon, \Gamma)$ — резерфордское транспортное сечение рассеяния электрона на ионе, $\Gamma = \beta e^2 \sqrt{4\pi\beta e^2(n_e + n_i)}$ — кулоновский параметр неидеальности, равный отношению дебаевской энергии к температуре.

Одним из достоинств этой формулы является возможность ее модификации при учете столкновений электронов с ионами, например, при выборе того или иного выражения для кулоновского логарифма. Транспортные сечения рассеяния электронов на атомах инертных газов известны экспериментально и их аналитические аппроксимации приведены, например, в работе [25]. Все величины в формуле (13) имеют размерность СГСЕ, а проводимость получается в $1/(\text{Ом} \cdot \text{см})$.

На рис. 3–5 представлены экспериментальные данные [2–6, 26] и результаты расчетов изотерм проводимости плазмы аргона, ксенона и криптона, выполненные по нашей модели «3+» и модели «САХА». Экспериментальные данные демонстрируют некоторую общую закономерность — расслоение на две группы, назовем их высокотемпературные и низкотемпературные. Это обусловлено различны-

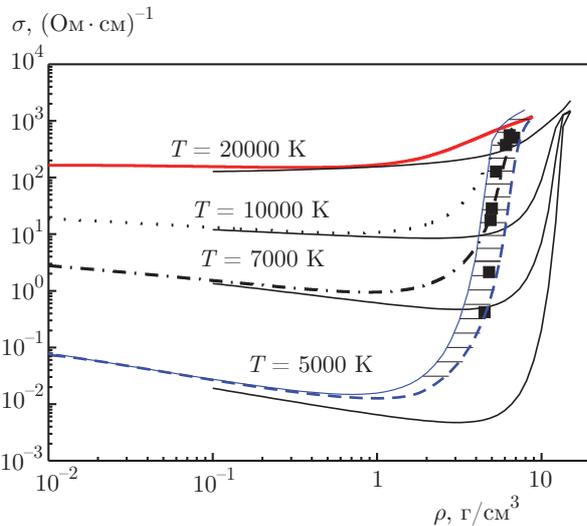


Рис. 5. Проводимость плазмы криптона. Эксперимент: «низкотемпературные» данные (температура $T \approx 6000 \div 20000$ К) — сплошные квадраты [6]. Теория: тонкие черные линии — расчет с использованием кода «САХА» [2]; штриховая, штрихпунктирная, пунктирная, сплошная кривые отвечают расчету по модели «3+» для температур соответственно $T = 5000, 7000, 10000, 20000$ К ($c = 0.7$). Заштрихованная область соответствует расчету для $T = 5000$ К для коэффициента $c = 0.7 \div 0.8$

Таблица 2

Взаимодействия	Модель «3+»	Модель «САХА»
Кулоновское взаимодействие	Приближение ближайшего соседа	Большой Дебай (Ликальтер)
Учет исключенного объема атомных остатков	Карнахан – Старлинг	Карнахан – Старлинг, мягкие сферы
Притяжение атомов	Коллективные силы – когезия	Аддитивные силы AV^{-n}
Внутриатомное состояние	Изолированный атом + желе	Ограниченный атом

ми начальными состояниями при сжатии: газовым [26] и конденсированным [2–6]. Сразу оговоримся, что измерения температуры в ударно-волновых экспериментах вещь сложная и не всегда осуществимая. Тем не менее, теоретические оценки позволяют использовать такие термины. Особенно расслоение видно для плазмы аргона и ксенона. «Высокотемпературные» данные почти горизонтальны и слабо зависят от плотности. «Низкотемпературные» данные почти вертикальны, что характерно для экспоненциальных зависимостей. На рисунках тонкой сплошной линией нанесены наилучшие к моменту начала данной работы теоретические расчеты по известному коду «САХА» [2]. Они вполне удовлетворительно описывают «высокотемпературные» данные и качественно — «низкотемпературные».

Все представленные расчеты для Ag, Kr, Xe подобны. Расчет по коду «САХА» [2] демонстрирует рост проводимости при сжатии, но при сравнительно высоких плотностях, лежащих правее области экспериментально зафиксированного роста проводимости. Решающим фактором роста проводимости термических электронов в коде «САХА» является эффект межатомного отталкивания — непосредственный, за счет поправок к свободной энергии в приближении либо твердых, либо мягких сфер, а также косвенный, за счет деформации связанных уровней атома в приближении ограниченного атома.

Учет в нашей модели эффекта уширения основного состояния заметно улучшает согласие с экспериментом. По сути, процедуры учета межатомных и межрядовых взаимодействий для рассмотренных моделей близки. Их отличает только добавленная ширина основного уровня, связанная с образованием электронного желе.

Сравнение с экспериментом позволяет сделать ряд выводов, которые мы обсудим, рассмотрев табл. 2. В ней проведено сравнение химических моделей «САХА» [2] и «3+». Сравнительное обсуждение модели «3+» и моделей с преимущественным влиянием кулоновской неидеальности на снижение потенциала ионизации содержится в работе [18].

Кулоновское взаимодействие учитывается в обеих моделях, хотя и по-разному, и, по существу, дает близкие результаты. Главное, что в используемых приближениях отсутствует аномальный рост, характерный как для классической дебаевской энергии [28], так и паде-аппроксимаций [29]. Если коротко, то используемые приближения не приводят к появлению плазменного фазового перехода. Учет кулоновского взаимодействия ведет к уменьшению потенциала ионизации атома и соответственно к увеличению степени термической ионизации.

Наличие исключенного объема учитывается в обеих моделях либо в приближении твердых сфер (Карнахан – Старлинг), либо в приближении мягких сфер. Надо сказать, что понятие «размер атома», через который выражается исключенный объем, плохо определено и это является слабым местом моделей. Формулы Карнахана – Старлинга с большой точностью описали данные численных расчетов для модели твердых сфер, что и сделало их весьма популярными, особенно в жидкостной теории возмущений. Использование аналогичных аппроксимаций для модели мягких сфер, конечно, улучшают описание сжатых состояний, но требуют введения дополнительных подгоночных параметров — степени отталкивательной ветви и энергетического множителя. Учет исключенного объема ведет к увеличению степени ионизации.

Межатомное притяжение учитывается по-разному. В модели «САХА» притяжение всех частиц учи-

тывается некоторым универсальным выражением AV^{-n} . Константы A , n подбираются применительно к рассматриваемому веществу. Этим достаточно оригинальным и простым способом авторы модели «САХА» обошли ряд нерешенных до настоящего времени проблем, связанных с выбором межчастичных потенциалов взаимодействия в плотных средах с химическими реакциями. В зависимости от знака константы A межатомное взаимодействие приводит либо к снижению, либо к увеличению потенциала ионизации. В модели «3+» межатомное притяжение применительно к парам как металлов, так и инертных газов учитывается с использованием когезионных (коллективных) сил, хотя и имеющих разную природу. Для расчета используются либо экспериментально измеренные, либо рассчитываемые константы. Коллективное притяжение атомов ведет к увеличению потенциала ионизации и в определенной степени компенсирует его уменьшение, вызванное кулоновским притяжением.

Ну и, наконец, обсудим весьма важный вид корреляций, связанный с внутриаомным строением. В модели «САХА» для расчета спектра связанных состояний используется модель ограниченного атома [1], в которой численно, в приближении Хартри–Фока решается уравнение Шредингера для нахождения спектра связанных электронов при условии, что их волновая функция обращается в нуль на некотором расстоянии (твердая стенка). Найденный спектр используется для расчета статистической суммы атома. Учет этого вида корреляций ведет к уменьшению потенциала ионизации и, следовательно, к увеличению степени термической ионизации. К аналогичному эффекту приводит и учет межатомного отталкивания. В модели «3+» используется приближение изолированного атома (как и в большинстве существующих химических моделей неидеальной плазмы) с одной особенностью — плотности связанных электронов, лежащих вне атомарной ячейки Вигнера–Зейтца, придан смысл дополнительной компоненты, которая названа электронным желе. Хотя в определенном смысле это приближение — антипод приближения ограниченного атома, тем не менее учет желе в уширении основного состояния ведет к росту концентрации термических электронов. Можно говорить о комбинации плотностных эффектов, ведущих к количественному описанию экспериментальных данных. Применительно к плазме инертных газов это эффект исключенного объема и уширение основного уровня диэлектрическим желе.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе выполнено исследование эффекта металлизации инертных газов при их сжатии. Для его рассмотрения использована предложенная ранее химическая модель «3+», которая позволила описать эффект металлизации, зафиксированный экспериментально при сжатии паров металлов. Понятие когезии, характерное для описания коллективных сил сцепления в парах металлов, обобщено на инертные газы, что позволило использовать ранее полученные аналитические соотношения для свободной энергии и других термодинамических функций. Решающий вклад в эффект металлизации сжатых инертных газов при низких температурах дают термические электроны, возникшие за счет ионизации давлением, вызванной эффектом исключенного объема и уширением основного уровня электронным диэлектрическим желе.

Благодарности. Авторы благодарят участников семинара теоретического отдела им. Л. М. Бибермана Объединенного института высоких температур Российской академии наук за активное и конструктивное обсуждение работы.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке программы фундаментальных исследований президиума Российской академии наук № 13 «Конденсированное вещество и плазма при высоких плотностях энергии».

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Е. Фортов, А. Г. Храпак, И. Т. Якубов, *Физика неидеальной плазмы*, Физматлит, Москва (2010).
2. В. Е. Фортов, В. Я. Терновой, М. В. Жерноклетов и др., *ЖЭТФ* **124**, 288 (2003).
3. Л. А. Гатилов, В. Д. Глуходедов, Ф. В. Григорьев и др., *ПМТФ* № 1, 99 (1985).
4. V. B. Mintsev, V. Ya. Ternovoi et al., in *Shock Compression of Condensed Matter-1999*, ed. by S. C. Schmidt, D. P. Dandekar, and J. W. Forbes, Woolbury, New York (1999), p. 987.
5. V. D. Urlin, M. A. Mochalov, and O. L. Mikhailova, *High Press. Res.* **8**, 595 (1992).
6. В. Д. Глуходедов, С. И. Киршанов, Т. С. Лебедева, М. А. Мочалов, *ЖЭТФ* **116**, 551 (1999).
7. A. W. DeSilva and A. D. Rakhel, *Contrib. Plasma Phys.* **45**, 236 (2005).

8. J. Clerouin, P. Noiret, V. N. Korobenko, and A. D. Rakhel, *Phys. Rev. B* **78**, 224203 (2008).
9. R. Redmer, *Phys. Rev. E* **59**, 1073 (1999).
10. E. M. Apfelbaum, *Czech. J. Phys.* **56**, B618 (2006).
11. S. Kuhlbrodt, B. Holst, and R. Redmer, *Contrib. Plasma Phys.* **45**, 73 (2005).
12. E. M. Apfelbaum, *Contrib. Plasma Phys.* **56**, 176 (2016).
13. E. M. Apfelbaum, *Contrib. Plasma Phys.* **51**, 395 (2011).
14. S. Kuhlbrodt, R. Redmer, H. Reinholz et al., *Contrib. Plasma Phys.* **45**, 61 (2005).
15. S. Rosmej, H. Reinholz, and G. Röpke, *Phys. Rev. E* **95**, 063208 (2017).
16. А. В. Филиппов, А. Н. Старостин, В. К. Грязнов, *ЖЭТФ* **153**, 514 (2018).
17. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, *ЖЭТФ* **151**, 1169 (2017).
18. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, *ЖЭТФ* **152**, 1393 (2017).
19. A. L. Khomkin and A. S. Shumikhin, *Contrib. Plasma Phys.* **58**, 143 (2018).
20. *Molecular Theory of Gases and Liquids*, ed. by J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, and R. Byron Bird, Wiley, New York (1954).
21. E. Clementi and C. Roetti, *Atom. Data Nucl. Data Tabl.* **14**, 177 (1974).
22. P. Schwerdtfeger, N. Gaston, R. P. Krawczyk, R. Tonnner, and G. Moyano, *Phys. Rev. B* **73**, 064112 (2006).
23. A. Banerjia and J. R. Smith, *Phys. Rev. B* **37**, 6632 (1988).
24. J. H. Rose, J. R. Smith, F. Guinea, and J. Ferrante, *Phys. Rev. B* **29**, 2963 (1984).
25. А. Л. Хомкин, *ТВТ* **16**, 37 (1978).
26. В. Е. Фортов, А. А. Леонтьев, А. Н. Дремин, В. К. Грязнов, *ЖЭТФ* **71**, 225 (1976).
27. В. Б. Минцев, В. Е. Фортов, В. К. Грязнов, *ЖЭТФ* **79**, 116 (1980).
28. W. Ebeling and G. E. Norman, *J. Stat. Phys.* **110**, 861 (2003).
29. W. Ebeling and W. Richert, *Phys. Lett. A* **108**, 80 (1985).