———— ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАЗМЫ ———

УДК 533.93

Посвящается академику Фортову В.Е.

ПРОЦЕССЫ ТЕРМИЧЕСКОЙ И "ХОЛОДНОЙ" ИОНИЗАЦИИ ПАРОВ МЕТАЛЛОВ В ОКРЕСТНОСТИ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ПЕРЕХОДА ПАР-ЖИДКОСТЬ

© 2021 г. А. Л. Хомкин^{1,} *, А. С. Шумихин¹

¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия *E-mail: alhomkin@mail.ru Поступила в редакцию 09.03.2021 г. После доработки 30.08.2021 г. Принята к публикации 23.11.2021 г.

Выполнен совместный учет эффектов термической и "холодной" ионизации в околокритической области паров металлов. Проведенное сравнение с результатами эксперимента и численного моделирования может служить подтверждением выдвинутой гипотезы о существовании электронного желе в газоплазменной области и его сосуществовании с термически ионизованными электронами. Сделан вывод о том, что насыщенные пары металлов, вероятнее всего, являются газообразным металлом с достаточно высокой проводимостью.

DOI: 10.31857/S0040364421060090

ВВЕДЕНИЕ

Исследования перехода пар—жидкость и процессов металлизации паров металлов начались еще в середине прошлого века. Особенно исследователей интересовала околокритическая область, где одновременно происходят два перехода: пар—жидкость и диэлектрик—металл. Хенселем с сотрудниками [1–3] были измерены плотность и проводимость на бинодали фазового перехода пар—жидкость для Cs и Rb, имевшими сравнительно низкие (~2000 K) критические температуры. Наиболее полная информация о термодинамических и переносных свойствах цезия и рубидия в твердом, жидком и газообразном состоянии представлена в фундаментальном коллективном труде [4].

Зная плотность и температуру на жидкой ветви бинодали, можно рассчитать проводимость и сравнить ее с экспериментальными данными. Используя современные варианты теории Займана [5] для металлов, удается достаточно успешно описать проводимость на жидкой ветви бинодали (см., например, [6, 7]) вплоть до критической точки. Однако в самой критической точке расчеты дают существенно более высокие значения проводимости по сравнению с экспериментом.

Данные о проводимости паров щелочных металлов на газовой ветви бинодали и в околокритической области сразу привлекли внимание теоретиков, поскольку демонстрировали необычный и достаточно яркий эффект — экспоненциальный рост проводимости на несколько порядков на околокритических изотермах при сжатии паров. В большинстве работ (например, [8-14]) этот рост связывался с хорошо известным в физике плазмы эффектом - снижением потенциала ионизации атома, что действительно вело к экспоненциальному росту концентрации термически ионизованных электронов, а следовательно, и к росту проводимости. Среди рассмотренных эффектов упомянем вклад в снижение потенциала ионизации от взаимодействий электрон-атом и ион-атом [8-10]. Критические точки и бинодаль эта модель не давала, да и проводимость была невелика. Отметим серию работ по кластерно-капельным моделям [11-14]. Предполагалось, что конверсия ионов в кластерные [11, 13] или капельные [14] ионы приведет к более существенному росту концентрации свободных электронов. Кластерно-капельная модель также не позволяла рассчитать ни критические точки, ни бинодаль, ни проводимость. Последующие расчеты [15] показали, что конверсия ионов действительно происходит, причем одновременно и положительных и отрицательных ионов. Нейтральная компонента плазмы паров шелочных металлов вблизи бинодали оказалась преимущественно атомарной с малой примесью молекул (димеров), что подтверждалось и другими независимыми расчетами [16]. Концентрация заряженной компоненты была невелика, она оказалась ионной по составу [15], что вело к весьма низким значениям проводимости в кластерной модели.

Экспериментальное исследование процессов металлизации в парах практически всех других металлов осложнялось высокими значениями ожидаемых критических температур (см., например, [17, 18]). По этой причине широкое распространение получили импульсные методы исследования. Для ряда металлов выполнены эксперименты по электровзрыву проволочек и фольг (Al, Cu, Ni, Fe, W) [19-23]. В [19, 20] измерены проводимость и плотность, а в [21, 22] – давление, внутренняя энергия и удельное сопротивление. На околокритических изотермах был обнаружен экспоненциальный рост электропроводности с ростом плотности [19, 20]. Этот рост был объяснен в рамках химических моделей [23-25] влиянием сильной кулоновской неидеальности, ведущей к большому (даже аномальному) снижению потенциала ионизации. Параметр неидеальности достигал нескольких десятков, что приводило к потере термодинамической (но не ионизационной) устойчивости при приближении к критической области.

Уравнение состояния, проводимость и теплопроводность металлов преимущественно в твердом, но и в жидком состоянии исследуются в настоящее время численными методами, например, с помощью квантового метода молекулярной динамики (QMD) [26–30] и метода среднего атома (AAM) (см., например, [31, 32]). В работах [26, 28– 30] с некоторыми модификациями метод QMD был использован для расчета как проводимости, так и уравнения состояния плотной плазмы паров металлов.

Существенный прогресс в понимании процессов металлизации в парах щелочных и других металлов произошел после появления серии работ Ликальтера А.А. (см. обзоры [33, 34]). Он первый предположил, что в околокритической области решающий вклад в проводимость будут давать не термически ионизованные свободные электроны, даже с учетом эффекта снижения потенциала ионизации, а часть связанных электронов, у которых классические траектории движения начинают перекрываться. Было предложено уравнение состояния для "квазиатомов" – атомов с перекрывающимися классическими орбитами [34, 35]. Фактически в его работах речь шла о появлении зачатка зоны проводимости в газовой фазе. Было введено [33] представление о газообразном металле – газе "квазиатомов" с перколяционной проводимостью.

В серии работ [36–38] предложена несколько иная, но близкая по духу модель паров металлов, в которой вводится представление об электронном желе в газовой фазе. Электронное желе с концентрацией n_j в газе атомов с концентрацией n_a образуется за счет перекрытия хвостов волновых функций связанных электронов от всех атомов, лежащих вне атомарной ячейки Вигнера–Зейтца (ВЗ) с радиусом

$$R_a = \left(\frac{3}{4\pi n_a}\right)^{1/3}$$

В [36—38] предложено соотношение для расчета степени "холодной" ионизации $\alpha_j = n_j/n_a$ через волновые функции *i*-го электрона $\Psi^i(r)$ в приближении "изолированного" атома, данные для которых можно найти в [39]:

$$\alpha_{j} = \sum_{i} \left[\int_{y_{a}}^{\infty} \Psi^{i}(r)^{2} r^{2} dr + \frac{y^{3}}{3} \Psi^{i}(y_{a})^{2} \right], \qquad (1)$$

где $y_a = R_a/a_0$ — радиус атомарной ячейки ВЗ в атомных единицах. Суммарная электронная плотность сохраняется, и атомарная ячейка ВЗ остается электронейтральной. Суммирование в (1) распространяется на валентные электроны атома. В [37, 38] можно найти расчеты зависимостей $\alpha_j(y_a)$ для паров различных металлов.

В настоящей работе рассмотрены состав и проводимость паров металлов, в том числе насыщенных паров цезия, с учетом процессов термической и "холодной" ионизации. Сначала излагаются расчетные модели, использованные для расчета состава паров. Далее приводятся и анализируются результаты расчетов для степеней ионизации и проводимости насыщенных паров цезия и ряда металлов в зависимости от температуры и плотности, проводится сопоставление процессов термической и "холодной" ионизации. В заключении формулируются выводы по работе.

СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА В "3+" МОДЕЛИ

Рассмотрим систему, состоящую из N_a атомов, N_e электронов и N_i ионов, находящихся в объеме V при температуре T. Введем важные для дальнейшего радиусы ячейки ВЗ для атомарной $R_a = (3V/4\pi N_a)^{1/3}$ и заряженной $R_i = (3V/4\pi N_i)^{1/3}$ компонент. Для нормальной плотности металла $n_0 = N_0/V$ радиус ячейки ВЗ обозначим через R_0 . Плюс в названии модели "3+" означает возможность учета наличия электронного желе.

Свободная энергия неидеальной смеси атомов, электронов и ионов была предложена в [36] и в аддитивном приближении записывается в виде суммы свободных энергий атомарной и заряженной компонент:

$$F = F_a + F_{\rm ch},\tag{2}$$

где

ПРОЦЕССЫ ТЕРМИЧЕСКОЙ И "ХОЛОДНОЙ" ИОНИЗАЦИИ

$$F_a = -N_a k T \ln\left(\frac{eVg_a \exp\left(\beta I\right)}{N_a \lambda_a^3}\right) +$$
(3)

+
$$N_a k T \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2} + \frac{1}{2} N_a E_{\text{coh}}(y_a),$$

$$F_{\rm ch} = -N_e k T \ln\left(\frac{eVg_e}{N_e\lambda_e^3}\right) -$$

$$- N_i k T \ln\left(\frac{eVg_i}{N_i\lambda_i^3}\right) - (N_e + N_i)\Delta f_{ei}.$$
(4)

Перекрестные слагаемые, связанные с взаимодействием атом—заряд, в первом приближении не учитываются, поскольку область, где одновременно высока концентрация атомов и зарядов, в рассматриваемых условиях невелика. Тем не менее такая химическая модель существует и будет использована при необходимости.

Первое слагаемое (3) в свободной энергии (2) точно такое же, как и для атомарной модели "1+" [40]; $n_{a,e,i} = N_{a,e,i}/V$ — плотности соответствующих компонент; η — параметр упаковки; $E_{\rm coh}(y)$ — когезионная энергия сцепления (когезия).

Зная плотность атомов, можно определить плотность электронного желе $n_j = N_j/V$ через степень "холодной" ионизации α_j (1):

$$n_j = \alpha_j n_a. \tag{5}$$

Второе слагаемое свободной энергии (2) описывает ионизованную компоненту газоплазменной смеси. В (4) λ_e , λ_i – тепловая длина волны электрона и иона, соответственно; g_e , g_i – статистические веса электрона и иона. Не вдаваясь в дискуссию о поправке на кулоновское взаимодействие между электроном и ионом, используем для Δf_{ei} приближение ближайшего соседа [41, 42]: $\Delta f_{ei} = ce^2/(R_i kT)$. Константу (c = 3/4) выберем аналогично [36].

УРАВНЕНИЕ ИОНИЗАЦИОННОГО РАВНОВЕСИЯ

Равновесный состав газоплазменной смеси определяется из решения уравнений баланса, главным из которых является связь химических потенциалов атомов μ_a , электронов μ_e и ионов μ_i в реакции ионизации:

$$\mu_a = \mu_e + \mu_i. \tag{6}$$

циалы определяются из свободной энергии как

$$\beta \mu_{a,e,i} = \partial \beta F / \partial N_{a,e,i}$$
 и имеют вид

$$\begin{split} \beta \mu_{a} &= -\ln \frac{Vg_{a}}{N_{a}\lambda_{a}^{3}} + HS\left(\eta_{a}\right) - \\ &- \frac{\beta E_{\mathrm{coh}}}{2} \left(1 - \frac{y_{a}}{3E_{\mathrm{coh}}} \frac{\partial E_{\mathrm{coh}}}{\partial y_{a}}\right), \\ \beta \mu_{e,i} &= -\ln \frac{Vg_{e,i}}{N_{e,i}\lambda_{e,i}^{3}} - \frac{2Ry}{y_{i}}, \\ HS\left(\eta\right) &= \frac{8\eta - 9\eta^{2} + 3\eta^{3}}{\left(1 - \eta\right)^{3}}. \end{split}$$

Вводя степень термической ионизации $\alpha = n_{e,i}/n$, из (6) получим уравнение ионизационного равновесия — формулу Саха:

$$\frac{1-\alpha}{\alpha^2} = n\lambda_e^3 \frac{g_a}{2g_i} \exp\left(\beta I - \frac{2\beta Ry}{y_i} - \frac{\beta E_{\rm coh}}{2} \times \left(1 - \frac{y_a}{3E_{\rm coh}} \frac{\partial E_{\rm coh}}{\partial y_a}\right) - HS(\eta_a)\right),$$
(7)

которую необходимо дополнить уравнениями электронейтральности и баланса:

$$n_e = n_i, \tag{8}$$

$$n = n_i + n_a. (9)$$

Уравнения (7)—(9) полностью определяют состав газоплазменной смеси, а уравнение (5) позволяет найти плотность новой компоненты — электронного желе. Решением этих уравнений будут зависимости $n_{a,e,i}(n)$, а с использованием (5) и $n_i(n)$.

ХИМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

В основе нашей концепции процессов металлизации паров металлов при сжатии лежит представление о существовании электронного желе в газовой фазе [37, 38]. Электронное желе образуется в результате наложения хвостов электронной плотности связанных состояний, лежащих вне атомарной ячейки Вигнера—Зейтца, от всех атомов. Формально эти "хвосты" присутствуют во всех химических моделях, использующих приближение "изолированного" атома для расчета спектра связанных состояний, и, следовательно, можно рассчитать степень "холодной" ионизации в дополнение к имеющимся расчетам термической степени ионизации практически для большинства химических моделей.

Для насыщенных паров щелочных металлов вдали от критической точки результаты расчетов по различным химическим моделям близки (см., например, [15, 16]). Анализируя полученный состав, можно утверждать, что плазма насыщенных паров – это преимущественно атомарный газ с незначительной примесью молекул и молекулярных ионов [15, 16]. Для анализа влияния номенклатуры частиц и эффектов неидеальности вдали от критической точ-



Рис. 1. Ионизационный состав насыщенных паров цезия в зависимости от температуры; степень термической ионизации: *1* – идеальный газ, *2* – вклад термических электронов по модели "3+", *3* – вириальная химическая модель [15], *4* – степень "холодной" ионизации (1).

ки использовались модель идеальной смеси, а также предложенная в [15] девятикомпонентная модель с вириальными поправками на межчастичные взаимодействия и модель "3+", предложенная в [36] и изложенная выше. Главный вопрос: что определяет высокую проводимость насыщенных паров? Итак, имеем:

 модель идеальной смеси электронов, ионов и атомов;

вириальную химическую модель, учитывающую молекулы, молекулярные ионы и их взаимодействия в вириальном приближении [15];

3) модель "3+" с использованием приближения ближайшего соседа для учета межзарядового взаимодействия, когезионной, коллективной энергии связи атомов и эффекта исключенного объема.

Модель под номером 3 выбрана основной для около- и сверхкритических состояний паров всех металлов, что можно считать гипотезой. Детали расчетов и используемых формул можно найти, например, в [36]. Степень "холодной" ионизации рассчитывается по соотношению (1) для всех моделей одинаково, как и в других работах авторов [36–38]. Добавим, если не рассматривать процессы термической ионизации, а они невелики в околокритической области, то можно ограничиться и моделью "1+" плотного атомарного газа [40], которая достаточно успешно использована для расчета критических параметров паров металлов [40, 43].

Расчетный алгоритм в данной работе единый и строится следующим образом: по известной плотности паров металлов рассчитывается состав и проводимость. Для насыщенных паров цезия используется интерполяционная формула для плотности насыщенных паров вдоль бинодали $\rho_g(T)$, приведенная в [4], а для других металлов — рассчитанная в [40].

СТЕПЕНИ ТЕРМИЧЕСКОЙ И "ХОЛОДНОЙ" ИОНИЗАЦИИ НАСЫЩЕННЫХ ПАРОВ

Для расчета ионизационного состава насыщенных паров цезия применяются модели 1, 2, 3. Полная электропроводность рассчитывается как сумма вкладов термических электронов и электронов желе. Для учета проводимости термических электронов используется формула Фроста, проводимость электронов желе определяется по формуле Регеля-Иоффе.

На рис. 1 представлены результаты расчетов степеней ионизации $\alpha = n_e/n$ насыщенных паров цезия, выполненных по различным химическим молелям. Вклалы процессов термической и холодной ионизации хорошо видны. При низких температурах T < 1400 K хотя формально и преобладает термический механизм ионизации. скорее можно говорить о его отсутствии. При приближении к критической точке в рамках модели "3+" вклад термической ионизации становится несущественным, и она превращается в модель "1+", которая позволяет рассчитать критические параметры паров щелочных металлов [40] и "холодную" проводимость [38] в критической точке. Преобладание процессов "холодной" ионизации на линии насыщения дает возможность сделать весьма важный вывод: насыщенные пары цезия вблизи критической точки, по-видимому, являются газообразным металлом [37].

На рис. 2 представлены аналогичные расчеты, но в зависимости от плотности паров на бинодали.



Рис. 2. Ионизационный состав насыщенных паров цезия в зависимости от плотности: обозначения те же, что на рис. 1.

При $\rho < 0.04 \ г/cm^3$ преобладает термическая ионизация, а при приближении к критической плотности ($\rho \approx 0.38 \ г/cm^3$) определяющей становится ионизация "холодная".

На рис. 3 приведены расчеты степени "холодной" и термической ионизации для насыщенных паров алюминия. Фактическая картина аналогична парам щелочных металлов. Несмотря на высокую критическую температуру $T \sim 7500$ K, процессы "холодной" ионизации превалируют при приближении к критической точке.

ПРОВОДИМОСТЬ НАСЫЩЕННЫХ ПАРОВ ЦЕЗИЯ И АЛЮМИНИЯ

Расчеты проводимости насыщенных паров цезия прелставлены на рис. 4. Низкотемпературные экспериментальные точки Боржиевского [45] неплохо согласуются с проводимостью термически ионизованных электронов. С ростом плотности роль электронов желе становится преобладающей. Сравнение с экспериментом достаточно убедительно демонстрирует важную роль процессов холодной ионизации в насыщенных парах. Сплошной линией нанесена полная проводимость паров с учетом термический и "холодной" ионизации. Парциальный вклад в проводимость термически ионизованных электронов демонстрируется кривыми 1-3. Сопоставление кривых 1, 2 и 3 показывает влияние эффекта снижения потенциала ионизации на проводимость за счет взаимодействия свободных частиц.

Расчеты проводимости насыщенных паров алюминия представлены на рис. 5. Сплошной ли-



Рис. 3. Ионизационный состав насыщенных паров алюминия в зависимости от температуры; степень термической ионизации: *1* – вклад термических электронов по модели "3+", *2* – вириальная химическая модель [44], 3 – степень "холодной" ионизации (1).



Рис. 4. Проводимость паров цезия вдоль кривой насыщения; теория: 1 – расчет в идеально-газовом приближении, 2 – вклад термических электронов по модели "3+", 3 – вириальная химическая модель [15], 4 – полный расчет проводимости с учетом термических электронов и электронов желе; эксперимент: 5 - [1], 6 - [2], 7 - [45].

нией нанесена полная проводимость паров с учетом термической и "холодной" ионизации. Парциальный вклад в проводимость термически ионизованных электронов демонстрируется кривыми *1*, *2*. Их сопоставление показывает влияние эффекта снижения потенциала ионизации на проводимость за счет взаимодействия свободных частиц. Важно подчеркнуть, что формально расчет состава и проводимости возможен по всем моделям, но расчет по вириальной модели иногда приводит к поте-



Рис. 5. Проводимость паров алюминия вдоль кривой насыщения; теория: *1* – вклад термических электронов по модели "3+", *2* – вириальная химическая модель [44], *3* – полный расчет проводимости по модели "3+" с учетом термических электронов и электронов желе.



Рис. 6. Проводимость паров цезия на изотерме T = 2000 К; теория: 1 -расчет в идеально-газовом приближении, 2 -вклад термических электронов по модели "3+", 3 - вириальная химическая модель [15], 4 - полная проводимость по модели "3+"; эксперимент: 5 -[3].

ре термодинамической устойчивости в уравнении состояния при приближении к критической точке.

ПРОВОДИМОСТЬ ПАРОВ МЕТАЛЛОВ НА ОКОЛОКРИТИЧЕСКИХ ИЗОТЕРМАХ

На рис. 6 представлен расчет проводимости на околокритической изотерме цезия T = 2000 К. Неплохое согласие с экспериментальными данными



Рис. 7. Зависимость проводимости паров алюминия от плотности на различных изотермах: 1, 2 - результаты численных расчетов [26] для T = 6000 и 10000 K соответственно; 3, 4 - вириальная химическая модель [44] для изотерм T = 6000 и 10000 K; 5, 6 - расчет по модели "3+" для изотерм T = 6000 и 10000 K.

[3] расчета по модели "3+" с учетом электронов желе (сплошная кривая) позволяет утверждать о решающей роли процессов "холодной ионизации" при сжатии паров.

На рис. 7 представлены расчеты проводимости на различных изотермах для алюминия в сравнении с данными численных *ab initio* расчетов [26]. Предлагаемая модель неплохо согласуется с результатами численного моделирования.

Все расчеты (рис. 6 и 7) демонстрируют интересный физический эффект смены типа носителей заряда при сжатии паров металлов. При малых плотностях перенос осуществляется термическими электронами, как в обычной частично ионизованной плазме. С ростом плотности начинают проявляться твердотельные эффекты — появляется заметное количество электронов желе. Зависимость проводимости от температуры практически исчезает, а зависимость от плотности становится на определенном интервале экспоненциальной.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Удовлетворительное согласие полученных расчетов с результатами физических и численных экспериментов является подтверждением гипотезы авторов о существовании электронного желе в газоплазменной области и его сосуществовании с электронами, термически ионизованными. Насыщенные пары металлов скорее являются газообразным металлом с достаточно высокой проводимостью, чем атомарным газом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Winter R., Hensel F., Bodensteiner T., Glaser W. The Static Structure Factor of Cesium over the Whole Liquid Range up to the Critical Point // Ber. Bunsenges, Phys. Chem. 1987. V. 91. P. 1327.
- Hensel F, Pilgrim W.C. Fluid Alkali Metals in the Liquid-vapour Critical Region // Int. J. Mod. Phys. B. 1992. V. 6. P. 3709.
- Franz G., Freyland W., Hensel F. Thermodynamic and Electric Transport Properties of Fluid Cesium and Rubidium in the M-NM Transition Region // J. de Phys. Coll. 1980. V. 41 (C8). P. 70.
- Handbook of Thermodynamic and Transport Properties of Alkali Metals / Ed. Roland W. Ohse: IUPAC, 1985. 987 p.
- 5. Ziman J.M. Principles of the Theory of Solids. London: Cambridge University Press, 1972.
- Redmer R., Reinholtz H., Roepke G., Winter R., Noll F., Hensel F. The Electrical Conductivity of Expanded Liquid Caesium // J. Phys.: Condens. Matter. 1992. V. 4. P. 1659.

- Apfelbaum E.M. The Calculation of Cs and Rb Conductivities in the Region of Liquid–Plasma Transition // Phys. Chem. Liquids. 2010. V. 48. № 4. P. 534.
- Алексеев В.А., Веденов А.А. Об электропроводности плотных паров цезия // УФН. 1970. Т. 102. С. 665.
- Popielawski J., Gryko J. The Semiconductor Model of Electric Conductivity Applied to the Supercritical Mercury Vapor // J. Chem. Phys. 1977. V. 66. P. 2257.
- Starzynski J., Redmer R., Schlanges M. Electrical Conductivity for Nonideal Partially Ionized Alkali Plasmas // Phys. Plasmas. 1996. V. 3. P. 1591.
- 11. Ликальтер А.А. Об электропроводности плотных паров щелочных металлов // ТВТ. 1978. Т. 16. № 6. С. 1219.
- 12. *Якубов И.Т.* К теории повышенной электропроводности плотных паров металлов вблизи насыщения // Докл. АН СССР. 1979. Т. 247. № 4. С. 841.
- 13. *Храпак А.Г.* Проводимость слабонеидеальной многокомпонентной плазмы паров щелочных металлов // ТВТ. 1979. Т. 17. № 6. С. 1147.
- 14. *Жуховицкий Д.И*. Электропроводность плотных паров цезия // ТВТ. 1993. Т. 31. № 1. С. 40.
- 15. *Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Термодинамические и переносные свойства паров цезия на бинодали и в ее окрестности // ТВТ. 2013. Т 51. № 5. С. 663.
- Семёнов А.М., Петкогло Н.П., Захарова О.Д. Малоконстантное полуэмпирическое уравнение состояния пара цезия // ТВТ. 2008. Т. 46. № 3. С. 374.
- Фортов В.Е., Дремин А.Н., Леонтьев А.А. Оценка параметров критической точки // ТВТ. 1975. Т. 13. № 3. С. 1072.
- 18. *Young D.A., Alder B.J.* Critical Point of Metals from the van der Waals Model // Phys. Rev. A. 1971. V. 3. P. 364.
- DeSilva A.W., Katsouros J.D. Electrical Conductivity of Dense Copper and Aluminum Plasmas // Phys. Rev. E. 1998. V. 57. P. 5945.
- DeSilva A.W., Rakhel A.D. Progress in Measurements of the Electrical Conductivity of Metal Plasmas // Contrib. Plasma Phys. 2005. V. 45. P. 236.
- Clerouin J., Noiret P., Korobenko V.N., Rakhel A.D. Direct Measurements and ab initio Simulations for Expanded Fluid Aluminum in the Metal-Nonmetal Transition Range // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 224203.
- Коробенко В.Н., Рахель А.Д. Переход расширенного железа в неметаллическое состояние при сверхкритических давлениях // ЖЭТФ. 2011. Т. 139. С. 746.
- Redmer R. Electrical Conductivity of Dense Metal Plasmas // Phys. Rev. E. 1999. V. 59. P. 1073.
- Kuhlbrodt S., Holst B., Redmer R. COMPTRA04 A Program Package to Calculate Composition and Transport Coefficients in Dense Plasmas // Contrib. Plasma Phys. 2005. V. 45. P. 73.
- Apfelbaum E.M. The Calculation of Electronic Transport Coefficients of Metals in the Process of Transition from Liquid to Plasma // J. Phys. A: Math. Gen. 2006. V. 39. P. 4407.
- Mazevet S., Desjarlais M.P., Collins L.A., Kress J.D., Magee N.H. Simulations of the Optical Properties of Warm Dense Aluminum // Phys. Rev. E. 2005. V. 71. P. 016409.
- 27. Minakov D.V., Levashov P.R., Khishchenko K.V., Fortov V.E. Quantum Molecular Dynamics Simulation of

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР том 59

Shock-wave Experiments in Aluminum // J. Appl. Phys. 2014. V. 115. P. 223512.

- French M., Mattsson T.R. Thermoelectric Transport Properties of Molybdenum from *ab initio* Simulations // Phys. Rev. B. 2014. V. 90. P. 165113.
- Li D., Liu H., Zeng S., Wang C., Wu Z., Zhang P., Yan J. Quantum Molecular Dynamics Study of Expanded Beryllium: Evolution from Warm Dense Matter to Atomic Fluid // Sci. Rep. 2015. V. 4. P. 5898.
- Minakov D.V., Paramonov M.A., Levashov P.R. Consistent Interpretation of Experimental Data for Expanded Liquid Tungsten near the Liquid-gas Coexistence Curve // Phys. Rev. B. 2018. V. 97. P. 024205.
- Ovechkin A.A., Loboda P.A., Falkov A.L. Transport and Dielectric Properties of Dense Ionized Matter from the Average-Atom RESEOS Model // High Energy Density Phys. 2016. V. 20. P. 38.
- 32. Hou Y., Fu Y., Bredow R., Kang D., Redmer R., Yuan J. Average-atom Model for Two-temperature States and Ionic Transport Properties of Aluminum in the Warm Dense Matter Regime // High Energy Density Phys. 2017. V. 22. P. 21.
- 33. Ликальтер А.А. Газообразные металлы // УФН. 1992. Т. 162. № 7. С. 119.
- Ликальтер А.А. Критические точки конденсации в кулоновских системах // УФН. 2000. Т. 170. С. 831.
- 35. *Likalter A.A.* Electric Conductivity of Expanded Transition Metals // Phys. Scr. 1997. V. 55. P. 114.
- 36. Хомкин А.Л., Шумихин А.С. Переход от газокинетической к минимальной металлической проводимости в сверхкритическом флюиде паров металлов // ЖЭТФ. 2017. Т. 151. С. 1169.
- Хомкин А.Л., Шумихин А.С. Газообразный металл и проблема перехода пар-жидкость (диэлектрик-металл) в парах металлов // ЖЭТФ. 2020. Т. 157. С. 717.
- Khomkin A.L., Shumikhin A.S. Is the Atomic Metal Vapor a Dielectric State? // Phys. Scr. 2021. V. 96. № 3. P. 035806.
- Clementi E., Roetti C. Roothaan–Hartree–Fock Atomic Wavefunctions: Basis Functions and their Coefficients for Ground and Certain Excited States of Neutral and Ionized Atoms, Z < 54 // At. Data Nucl. Data Tables. 1974. V. 14. P. 177.
- Хомкин А.Л., Шумихин А.С. Критические точки паров металлов // ЖЭТФ. 2015. Т. 148. С. 597.
- 41. Хомкин А.Л., Шумихин А.С. Распределение электронов по энергиям в неидеальных кулоновских системах: теория и результаты численного эксперимента // ТВТ. 2016. Т. 54. № 6. С. 851.
- 42. *Муленко И.А., Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Базовые химические модели неидеальной атомарной плазмы // ТВТ. 2004. Т. 42. № 6. С. 835.
- Khomkin A.L., Shumikhin A.S. Features of the Vapor-Liquid (Dielectric-Metal) Phase Transition in Metal Vapors, Semiconductors and Rare Gases // Contrib. Plasma Phys. 2016. V. 56. P. 228.
- 44. *Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Ионно-молекулярная химическая модель плазмы плотных паров алюминия // ТВТ. 2012. Т. 50. № 3. С. 329.
- 45. Боржиевский А.А., Сеченов В.А., Хорунженко В.И. Электропроводность паров цезия // ТВТ. 1988. Т. 26. № 4. С. 722.

№ 6 2021