Использование модели среднего атома для исследования фазовых переходов в цезиевой плазме квазизонным методом

Воробьев В. С.\*, Грушин А. С.\*\*, Новиков В. Г.\*\*

*\*ОИВТ РАН, Москва, Россия, e-mail:* *vrbv@mail.ru**, \*\*Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН*

Средняя модель атома (квазизонная модель) используется для расчета термодинамических функций цезия при высоких давлениях. Выбор такого элемента, как цезий, не случаен. Это один из немногих металлов, для которых параметры фазового перехода жидкость-пар были измерены [1]. Кроме того, в ряде исследований [2, 3] было показано, что при повышении температуры и давления возможен еще один фазовый переход. Чтобы проверить это предположение был проведен квантово-статистический расчет термодинамических функций цезия методом среднего атома. При этом обнаружено два фазовых перехода. Параметры первого соответствуют обычному фазовому переходу жидкость-пар и хорошо согласуются с таковыми, измеренными в [1]. При больших температурах и давлениях обнаружен второй фазовый переход. В нем ионизованная неидеальная плазма цезия с вырожденными электронами и со средним зарядом иона Z~1.5 скачком переходит в более высоко ионизованное состояние с Z~3. Критические давление, температура и плотность этого фазового перехода равны соответственно ~ 65000 атм, ~ 6500 К и ~ 5.3 г/cм3. С понижением температуры высоко и низко ионизованные ветви выходят на линию плавления при значении плотностей 2.5 и 7.5 г/cм3. В критической точке параметр электрон-электронного взаимодействия достигает значений порядка единицы, электрон-ионного – 3, а ион-ионного – 30.

1. Kozhevnikov, V. F. Equation of State and Sound Speed of Cesium at Temperatures up to 2200 K and Pressures up to 60 MPa. Sov. Phys. JETP 1990, 70, 298-310.
2. Bobrov V.B., Trigger S.A., Zagorodny A.G. Metal - nonmetal transition and the second critical point in expanded metals // EPL - Europhys. Lett. 2013. V.101. P. 16002 (1-5).
3. Хомкин А. Л., Шумихин А. С. Физика плазмы, 2013, Т. 39, № 10, с. 958.

Публикации по теме проекта:

1. V. S. Vorob’ev, A.S.Grushin, V. G. Novikov. The phase transition in cesium at high pressures. J. Chem Phys. (in press)

2. V. S. Vorob’ev, A.S.Grushin, V. G. Novikov. Warm dense matter, formed by compressed nitrogen to megabar pressures, ICPIG, Granada, 14-19 Julay, 2013.