

УДК 533.93

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ, СОСТАВ И ПРОВОДИМОСТЬ СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ПАРОВ ЖЕЛЕЗА В РАМКАХ МОДЕЛИ ПЛАЗМЕННОГО ФЛЮИДА

© 2018 г. А. Л. Хомкин*, А. С. Шумихин**

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: alhomkin@mail.ru

**E-mail: shum_ac@mail.ru

Поступила в редакцию 26.09.2017 г.

С использованием ранее предложенной химической модели «3+» выполнен расчет калорического и термического уравнений состояния, состава и проводимости сверхкритических паров железа. В модели «3+» рассматриваются атомы, электроны, ионы и электронное желе с учетом межатомных и межзарядовых взаимодействий. Введение электронного желе позволяет описать ионизацию давлением и объяснить рост проводимости флюида при сжатии. Обусловленная электронным желе когезионная связь атомов приводит к ослаблению влияния межзарядовых взаимодействий на уравнение состояния. Проведенное сопоставление с экспериментальными данными позволяет рекомендовать предложенную плазменную модель для расчетов свойств плазменного флюида – необычного газоплазменного состояния вещества с плотностью жидкости.

DOI: 10.31857/S004036440002723-9

ВВЕДЕНИЕ

При изотермическом сжатии паров газообразное состояние вещества меняется радикально. Если температура ниже критической температуры перехода пар–жидкость, происходит скачкообразный переход в жидкое состояние. При температуре выше критической газ при сжатии переходит в состояние флюида. Так принято называть газ с плотностью жидкости. Большое внимание в последнее время уделяется термодинамическим, переносным и оптическим свойствам паров металлов при температурах выше критической и с плотностью, близкой к плотности жидкости или даже твердого тела [1]. Это связано как с общефизическим интересом к физике плотных сред, так и с рядом прикладных задач. Состояние вещества при плотности, давлении и температуре выше критических называется сверхкритическим флюидом (СКФ) [2]. В иностранной литературе применяется термин Warm Dense Matter (WDM), хотя он и несколько шире СКФ. Главная отличительная особенность СКФ паров металлов заключается в преобладании когезионных сил сцепления между атомами и наличии процессов ионизации, что обусловлено их высокой критической температурой [3]. Можно говорить о плазменном или ионизованном флюиде.

На рис. 1 в координатах T (температура), $1/\rho$ (обратная удельная плотность) схематично изображена фазовая диаграмма вещества. Нанесены

бинодаль с критической точкой, кривые плавления и сублимации. Отмечены области твердого (SS), жидкого (L) и газообразного (ГАЗ) состояний. Отдельно отмечена область СКФ (ФЛЮИД). Для удобства ориентации нанесены критическая температура (T_{cr}), а также критическая (ρ_{cr}) и нормальная (ρ_0) плотности.

Теоретически и экспериментально наиболее исследована газовая область справа от обратной критической плотности. В этой области справедливо вириальное разложение, и, естественно, здесь

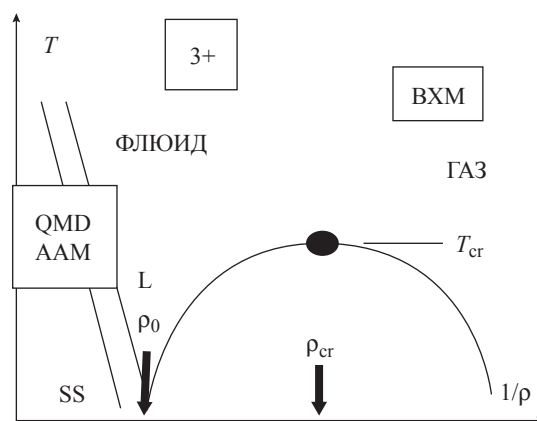


Рис. 1. Фазовая диаграмма вещества в координатах «обратная удельная плотность (удельный объем) – температура».

предложено большое число теоретических моделей как для паров металлов, так и для других веществ. Большинство этих моделей построено на основе химической модели смеси, поэтому назовем их виртуальными химическими моделями (ВХМ). Достаточно подробный обзор этих моделей можно найти в [1]. Применительно к парам металлов отметим недавние работы [4–7]. Довольно много и весьма удачных теоретических моделей предложено для инертных газов и водорода [8–11].

Слева от обратной нормальной плотности применимы приближения, основанные на ячеечных моделях. Это *ab initio* численные подходы. Среди них метод квантовой молекулярной динамики (QMD), реализованный, например, в пакете VASP [12–15], а также методы, основанные на модели среднего атома (AAA) и реализованные в пакете RESEOS [16]. Следует сразу отметить, что и *ab initio* (QMD, AAA) и ВХМ-подходы испытывают определенные трудности в области плазменного флюида. Появление свободных электронов и ионов нарушает ячеечное приближение и представление о «среднем атоме», что приводит к необходимости перенастройки методов QMD и AAA. Экстраполяция ВХМ также требует осторожности, так как в области плазменного флюида появляются разного рода неустойчивости (см., например, [9, 11]), обусловленные существенным ростом параметров взаимодействия, особенно межзарядового и межатомного. Общепринятых теоретических моделей плазменного флюида пока нет, их теоретический поиск, во многом эвристический, продолжается.

Появление экспериментальных работ [17–19] по импульсному взрыву проволок, помещенных в стеклянные капилляры для некоторых металлов (Al, Cu, Ni, Fe), где впервые были достигнуты флюидные состояния, внесло заметную активность в область исследований ионизованного флюида. На изотермах проводимости $T \approx (10000–30000)$ был обнаружен необычный эффект: после ожидаемого падения проводимости с ростом плотности начиналось ее увеличение вплоть до минимальных металлических значений. Данные по давлению в [17–19] не приводились. По многим предсказаниям [20] именно в этой области параметров следует ожидать появления плазменного фазового перехода [21].

В большинстве теоретических работ [22–25] рост проводимости паров металлов при сжатии объяснялся ростом концентрации свободных электронов, вызванным снижением потенциалов ионизации атомов и ионов за счет кулоновского взаимодействия свободных зарядов. Теоретические модели были основаны на том или ином варианте ВХМ и содержали экстраполяционные выражения для описания межзарядовых взаимодействий, такие, например, как паде-аппроксимация [26]. В моделях [22–25] авторы ограничились лишь расчетом

состава и проводимости. Уравнение состояния не рассматривалось.

В недавно появившихся экспериментах [27–30] по электровзрыву металлических фольг из Al и Fe, зажатых сапфировыми пластинами, получены данные для проводимости (сопротивления) и калорического уравнения состояния. Для паров Al в [28] выполнены *ab initio* расчеты с использованием математического пакета VASP, которые неплохо согласовались с данными эксперимента. Для железа такие расчеты не проводились. Подчеркнем, что область плазменного флюида является трудной для теории: отсутствуют малые параметры и дальний порядок. Успех в построении физических моделей в этой области во многом определяется интуицией. Результаты численных *ab initio* расчетов служат полезным дополнением к экспериментальным результатам, но несколько не отменяют создание простых аналитических моделей, необходимых как для понимания физики процессов в СКФ, так и для проведения экспресс-расчетов.

Для объяснения металлизации паров металлов при сжатии в экспериментах [17–19] была предложена химическая модель «3+» [31], содержащая помимо традиционных компонент (атомов, электронов и ионов) новую компоненту — электронное желе. Электронное желе образовано хвостами электронной плотности связанных состояний атомов вне атомарной ячейки Вигнера–Зейтца. Электроны желе обеспечивают появление коллективной энергии связи атомной компоненты — когезии и дают вклад в проводимость. В модели «3+» атомарная компонента полностью аналогична модели атомарных паров металлов в [32, 33], где межатомное взаимодействие описывалось когезией — квантовой коллективной энергией сцепления, зависящей от плотности через параметр разрежения. Представление об электронном желе использовано еще в [33], что позволило оценить проводимость атомарных паров металлов в критической точке и ее окрестности.

Плазменные эффекты, связанные с процессами ионизации, учтены в модели «3+» наличием свободных электронов и ионов. Взаимодействие между свободными зарядами описывается в приближении ближайшего соседа (ПБС). Рассчитанная в рамках модели «3+» проводимость неплохо описала данные экспериментов [17–19] в плотных парах металлов [31].

В данной работе выполнен комплексный расчет уравнения состояния, состава и проводимости плазмы паров железа по модели «3+» и проведено сравнение с результатами экспериментов [29, 30]. Напомним, что нормальная плотность железа $\rho_0 = 7.87 \text{ г/см}^3$, критическая плотность по оценкам [31] $\rho_{\text{кр}} \approx 2.0 \text{ г/см}^3$, а в рассматриваемых экспериментах

достигнута плотность $\rho = 3.9 \text{ г/см}^3$, что соответствует СКФ железа.

**ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ МОДЕЛИ «3+»
ДЛЯ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ, СОСТАВА
И ПРОВОДИМОСТИ**

В модели «3+» рассматривается плазма, состоящая из N_a атомов, N_e электронов и N_i ионов, находящихся в объеме V , при температуре T . Через концентрации компонент определяются соответствующие радиусы Вигнера–Зейтца для атомарной $R_a = (3V / 4\pi N_a)^{1/3}$ и заряженной компонент $R_i = (3V / 4\pi N_i)^{1/3}$. Для нормальной плотности металла $n_0 = N_0 / V$ радиус ячейки Вигнера–Зейтца обозначим через R_0 . В атомных единицах $y_{a,i,0} = R_{a,i,0} / a_0$, где a_0 – борковский радиус.

Свободная энергия Гельмгольца F задается в аддитивном приближении [31]:

$$F = F_a + F_{ch}, \tag{1}$$

где

$$F_a = -N_a kT \ln \left(\frac{eVg_a \exp(\beta I)}{N_a \lambda_a^3} \right) + N_a kT \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2} + \frac{1}{2} N_a E_{\text{coh}}(y_a), \tag{2}$$

$$F_{ch} = -N_e kT \ln \left(\frac{eVg_e}{N_e \lambda_e^3} \right) - N_i kT \ln \left(\frac{eVg_i}{N_i \lambda_i^3} \right) - \Delta F_{ch}. \tag{3}$$

Здесь $\lambda_{a,e,i}$, $g_{a,e,i}$ – тепловая длина волны де Бройля и статистический вес атома, электрона, иона соответственно; I – потенциал ионизации изолированного атома; $\beta = 1/kT$ – обратная температура; $\eta = \frac{4}{3} \pi n_a R_{HS}^3$ – параметр упаковки, выраженный через радиус R_{HS} , при котором $E_{\text{coh}}(R_{HS}) = 0$; $E_{\text{coh}}(y_a)$ – коллективная энергия связи атомов, которая выражается через функцию $E_{\text{UBER}}(y_a)$, известную для большинства металлов Периодической системы (UBER – Universal Bind Energy Relation) [34, 35]; $n_{a,e,i} = N_{a,e,i} / V$ – плотности соответствующих компонент.

Второе слагаемое свободной энергии (1) описывает ионизованную компоненту смеси. В ПБС [36, 37] $\Delta F_{ch} = \Delta F_{NNA} = N_e c e^2 / R_i$. В области плазменного флюида выбор коэффициента c достаточно произволен. В модели «3+» $c = 3/4$, чтобы в снижение потенциала ионизации атома входила величина e^2 / R_i [31].

Плотность электронов желе $n_j = \alpha_j n_a$ рассчитывается через степень «холодной» ионизации α_j ,

которая, в свою очередь, определяется интегрированием квадрата модуля волновой функции валентных электронов $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ вне атомарной ячейки Вигнера–Зейтца радиусом y_a и вкладом постоянного фона внутри ячейки $\Psi(y_a)^2$ [31]:

$$\alpha_j = \int_{y_a}^{\infty} |\Psi(\mathbf{r})|^2 r^2 dr + \frac{y_a^3}{3} \Psi(y_a)^2. \tag{4}$$

Описание других способов расчета α_j можно найти в [31, 33]. В данной работе используется соотношение (4), которое вычисляется с хартри-фоковскими волновыми функциями связанных электронов из [38].

На основе базовых термодинамических соотношений для давления $P = -\partial F / \partial V$ и внутренней энергии $E = \partial \beta F / \partial \beta$ получим

$$P = n_a kT \left(1 + \frac{4 - 2\eta}{(1 - \eta)^3} \eta \right) - \frac{1}{2} n_a \frac{y_a}{3} \frac{\partial E_{\text{coh}}}{\partial y_a} + (n_e + n_i) kT \left(1 - \frac{1}{6} c \frac{2\beta R y}{y_i} \right).$$

Здесь $R y$ – потенциал ионизации атома водорода. Для внутренней энергии имеем

$$E = \frac{3}{2} kT (N_a + N_e + N_i) - I N_a + \frac{1}{2} N_a E_{\text{coh}}(y_a) - N_e \frac{4}{3} \frac{2\beta R y}{y_i}.$$

С учетом уравнений баланса

$$n_e = n_i, \tag{5}$$

$$n = n_i + n_a, \tag{6}$$

вводя степень термической ионизации $\alpha = n_{e,i} / n$, из (1)–(3) получим уравнение ионизационного равновесия – формулу Саха

$$\frac{\alpha^2}{1 - \alpha} = n \lambda_e^3 \frac{g_a}{2g_i} \exp[\beta I - \frac{2\beta R y}{y_i} - \frac{\beta E_{\text{coh}}}{2} \left(1 - \frac{y_a}{3E_{\text{coh}}} \frac{\partial E_{\text{coh}}}{\partial y_a} \right) - HS(\eta)], \tag{7}$$

где

$$HS(\eta) = \frac{8\eta - 9\eta^2 + 3\eta^3}{(1 - \eta)^3}. \tag{8}$$

Уравнения (5)–(8) полностью определяют состав газоплазменной смеси, а уравнение (4)

позволяет найти плотность электронного желе. Решением этих уравнений будут зависимости $n_{a,e,i}(n)$, а с использованием (4) и $n_j(n)$.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Отличительной особенностью экспериментов [29, 30] было одновременное исследование уравнения состояния и проводимости плотной плазмы паров железа с использованием установок по электровзрыву фольг, заключенных в сапфировые обкладки. В результате измерены зависимости давления и сопротивления (проводимости) от внутренней энергии на изохорах. Изохоры различаются параметром сжатия $V/V_0 = \rho_0/\rho$. Погрешность измерений, по утверждению авторов эксперимента, для удельного сопротивления не превышает 6%, для внутренней энергии – 7%.

Рассмотрим изохоры $V/V_0 = 6, 4, 3, 2$. Первая изохора лежит вдали от критической ($V_{cr}/V_0 \approx 3.9$), вторая – в районе критической, последние две – при закритических плотностях, но меньших нормальной. На рис. 2 для сравнительного анализа результатов ВХМ [6] и модели «3+» представлены данные расчетов и эксперимента для докритической изохоры ($V/V_0 = 6$), на границе газовой области они дают близкие значения.

На рис. 3 представлено сравнение рассчитанной зависимости давления от внутренней энергии плазменного флюида для степеней сжатия 2, 3 и 4. Можно утверждать, что согласие с экспериментом удовлетворительное для столь плотных и экзотических состояний. Важным моментом является устойчивость расчетных кривых в сравнении с однозначными экспериментальными данными.

Сделаем ряд оценок-поправок к термодинамическим функциям в дебаевском приближении, которое заложено в основу паде-аппроксимации [26]. Введем традиционный дебаевский параметр неидеальности $\Gamma = \beta e^2 \sqrt{4\pi\beta e^2 (n_e + n_i)}$. Рассмотрим изохору $V/V_0 = 3$ при температуре $T = 15000$ К. При этих условиях $\Gamma \sim 30$, а соответствующие поправочные множители к давлению $(1 - \Gamma/6)$ и внутренней энергии $(1 - \Gamma/3)$ оказываются существенно отрицательными. Эти аномалии – первый признак «плазменного фазового перехода». Надо заметить, что давление обращается в нуль уже при $\Gamma \sim 6$. Это соответствует плотности $\rho \sim 0.1$ г/см³. Несмотря на данную аномалию в уравнении состояния, решение уравнения Саха существует и приводит к конечным концентрациям зарядов, которые соответствуют полной и даже многократной ионизации. Именно в этом и состоит, по мнению авторов,

причина отсутствия оценок давления по моделям [22–25] в работах [27–30].

На рис. 4 приведены результаты расчетов термического уравнения состояния для серии изо терм. Символы показывают положение экспериментальных изохор $V/V_0 = 2, 3, 4, 6$. Указано положение критической точки железа по оценке [39] и бинадаль, полученная в [30]. Две изотермы для 8 и 9 КК близки к критической и демонстрируют появление петли Ван-дер-Ваальса. Предсказанное в [30] критическое давление существенно отличается от оценок других авторов [32, 39–41], а критические плотности (экспериментальная и расчетные) весьма близки. Оценка критической температуры в [39] $T_{cr} = 9600 \pm 800$ К близка к нашей оценке 8950 К [32]. Объяснения сильного различия оценок критического давления нет. Возможно, это свидетельство раздельного существования фазовых

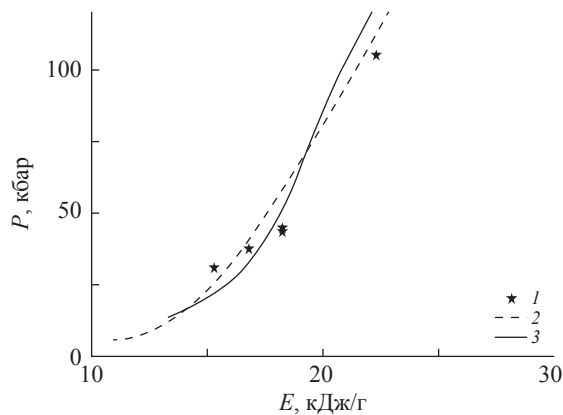


Рис. 2. Зависимость давления от внутренней энергии для изохоры $V/V_0 = 6$: 1 – эксперимент [29]; 2 – теория, ВХМ [6]; 3 – «3+» модель.

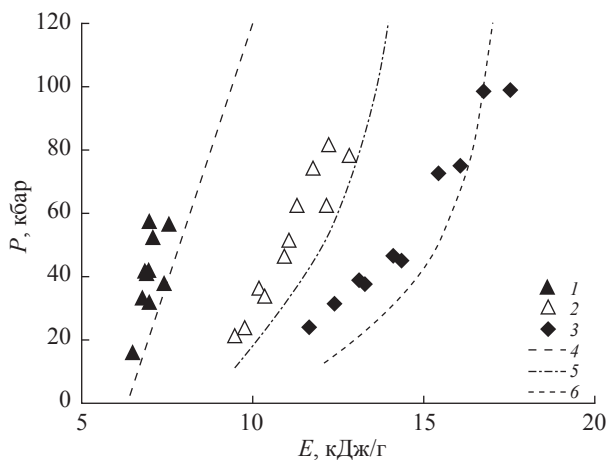


Рис. 3. Зависимость давления от внутренней энергии для изохор $V/V_0 = 2$ (1, 4), 3 (2, 5), 4 (3, 6): 1–3 – эксперимент [29], 4–6 – теория.

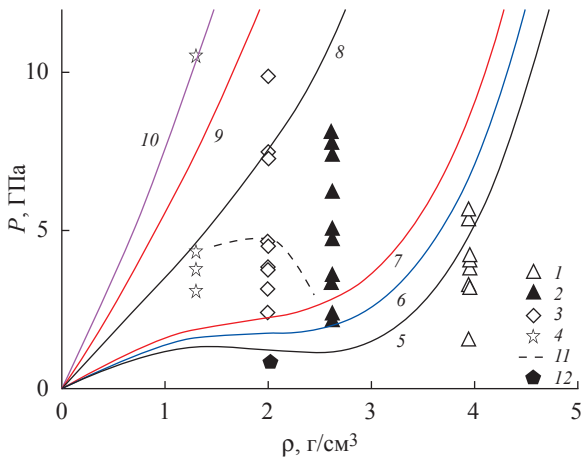


Рис. 4. Экспериментальные изохоры [30] (1 – $V/V_0 = 2$, 2 – 3, 3 – 4, 4 – 6) и изотермы, рассчитанные по «3+» (5 – $T = 8$ кК, 6 – 9, 7 – 10, 8 – 20, 9 – 30, 10 – 40); 11 – бинадаль [30] и 12 – критическая точка [39].

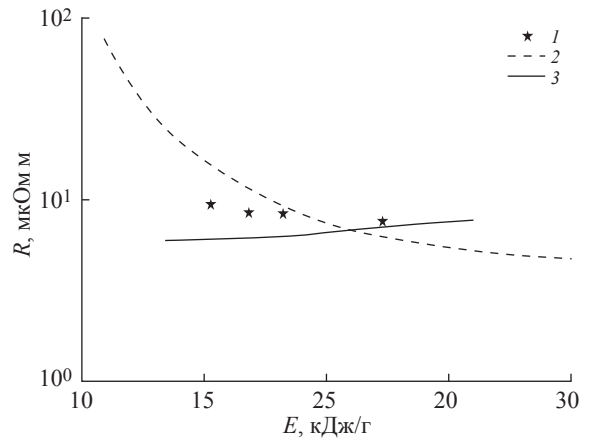


Рис. 5. Зависимость удельного сопротивления от внутренней энергии для изохоры $V/V_0 = 6$: 1 – эксперимент [29]; 2 – теория, ВХМ [6]; 3 – модель «3+», концентрация электронов желе по (4).

переходов пар–жидкость и диэлектрик–металл, предсказанного Зельдовичем и Ландау [42].

Проводимость σ в модели «3+» складывается из проводимости термических электронов σ_t и электронов желе σ_j . Для расчета σ_t предлагается использовать хорошо зарекомендовавшую себя для низкотемпературной плазмы формулу Фроста, учитывающую рассеяние термических электронов на атомах и ионах, а также межэлектронные столкновения. Электроны желе, перемещаясь от ячейки к ячейке, также участвуют в проводимости. Для ее расчета предлагается использовать формулу Регеля–Иоффе для минимальной металлической проводимости. Детали расчета обоих слагаемых проводимости и необходимые формулы можно найти в [31, 33].

На рис. 5, 6 показаны данные расчета сопротивления плазменного флюида железа на изохорах $V/V_0 = 2, 3, 4, 6$ и эксперимента [29]. Для докритической изохоры $V/V_0 = 6$ (рис. 5) расчеты проводимости на основе модели «3+» удовлетворительно описывают экспериментальные данные. Расчет по ВХМ также демонстрирует неплохое согласие с экспериментом, но наклон кривой существенно отличается от данных расчета по модели «3+» и эксперимента. Можно сделать вывод, что район критической плотности соответствует границе применимости вириальных моделей паров металлов, предложенных в [4, 6].

На рис. 6 представлены расчеты и данные экспериментов для изохор $V/V_0 = 2, 3, 4$. Можно говорить об удовлетворительном согласии с экспериментальными данными, учитывая закритические плотности флюида. Максимальное различие между расчетом и экспериментом составляет 20–25% для максимального разрежения $V/V_0 = 4$. Приведем некоторые данные, характеризующие состояние

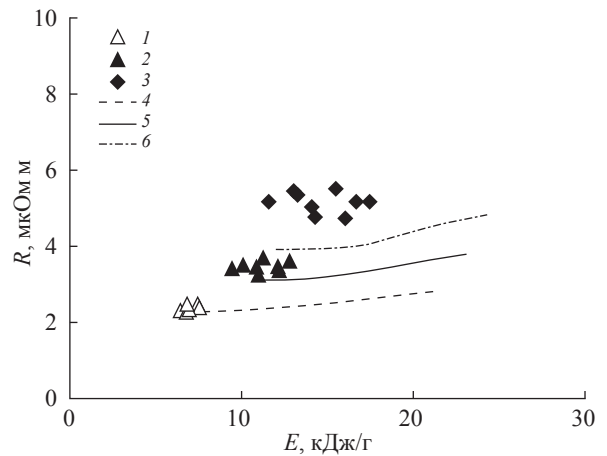


Рис. 6. Зависимость удельного сопротивления от внутренней энергии для изохор $V/V_0 = 2$ (1, 4), 3 (2, 5), 4 (3, 6): 1–3 – экспериментальные данные [29], 4–6 – расчет по модели «3+» с концентрацией электронов желе по (4).

паров железа в области плазменного флюида. Для изохоры $V/V_0 = 3$ параметр неидеальности достигает максимума $\Gamma \approx 5$ при $T \approx 15000$ К. При этом концентрации атомов $n_a = 2.7 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$, термических электронов $n_e = 6.9 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и электронов желе $n_j = 3.0 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$.

Отметим важное для расчетов обстоятельство, в модели «3+» учитывается три вида неидеальности: кулоновская, связанная с взаимодействием зарядов; межатомная, связанная с когезионным сцеплением атомов, и неидеальность, связанная с учетом исключенного объема по Карнахану–Старлингу. В рассмотренной области состояний наиболее существенны первые две. Будучи притягивательными, они уменьшают давление по

сравнению с давлением идеального газа. А в уравнении ионизационного равновесия (7) межзатяговая и межзатомная неидеальности действуют в разные стороны, компенсируя друг друга. Действительно, кулоновское притяжение свободных электронов увеличивает ионизацию (уменьшая потенциал ионизации атома), а притяжение атомов ее уменьшает (увеличивая потенциал ионизации атома). Это обстоятельство и приводит к результатам расчета термодинамических функций и состава, близким к идеально-газовому. Высокую же проводимость обеспечивают электроны желе, в уравнении баланса не участвующие. Эффекты исключенного объема начинают играть заметную роль лишь при приближении плотности флюида паров металлов к нормальной (металлической), которая в эксперименте пока не достигнута.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен расчет и выполнено сравнение с экспериментальными данными для уравнения состояния и проводимости ионизованного флюида железа. Продемонстрирована возможность расчета в рамках ранее предложенной модели «3+» уравнения состояния, состава и проводимости плазмы паров железа в состоянии плазменного флюида. Введение представления об электронном желе позволило объяснить необычное поведение уравнения состояния и проводимости плазмы при увеличении плотности. Уравнение состояния подобно идеально-газовому, а проводимость демонстрирует экспоненциальный рост и слабую зависимость от температуры. Удовлетворительное согласие с экспериментальными результатами [29, 30] в определенной степени подтверждает гипотезу о существовании электронного желе в плотном атомарном газе.

Авторы благодарят участников семинара Теоретического отдела им. Л. М. Бибермана ОИВТ РАН за активное и конструктивное обсуждение работы.

Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 13 «Конденсированное вещество и плазма при высоких плотностях энергии».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фортв В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы. М.: Физматлит, 2010.
2. Бражкин В.В., Ляпин А.Г., Рыжов В.Н., Траченко К., Фомин Ю.Д., Циок Е.Н. Где находится область сверхкритического флюида на фазовой диаграмме? // УФН. 2012. Т. 182. С. 1137.
3. Хомкин А.Л., Шумихин А.С. Критические точки паров металлов // ЖЭТФ. 2015. Т. 148. С. 597.
4. Хомкин А.Л., Шумихин А.С. Уравнение состояния, состав и проводимость плотной плазмы паров металлов // ТВТ. 2014. Т. 52. № 2. С. 335.
5. Apfelbaum E.M. The Calculation of Thermophysical Properties of Nickel Plasma // Phys. Plasmas. 2015. V. 22. P. 092703.
6. Apfelbaum E.M. The Thermophysical Properties of Iron Plasma // Contrib. Plasma Phys. 2016. V. 56. № 3–4. P. 176.
7. Анфельбаум Е.М. Расчет теплофизических свойств плазмы титана и цинка // ТВТ. 2017. Т. 55. № 1. С. 3.
8. Фортв В.Е., Терновой В.Я., Жерноклетов М.В., Мочалов М.А., Михайлов А.Л., Филимонов А.С., Пялигин А.А., Минцев В.Б., Грязнов В.К., Иосилевский И.Л. Ионизация давлением неидеальной плазмы в мегабарном диапазоне динамических давлений // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. С. 288.
9. Saumon D., Chabrier G. Fluid Hydrogen at High Density: Pressure Dissociation // Phys. Rev. A. 1992. V. 46. P. 2084.
10. Potekhin A.Y., Chabrier G. Equation of State of Fully Ionized Electron-Ion Plasmas. II. Extension to Relativistic Densities and to the Solid Phase // Phys. Rev. E. 2000. V. 62. P. 8554.
11. Redmer R., Ropke G., Beule D., Ebeling W. Electrical Conductivity in Dense Hydrogen Fluid and Metal Plasmas // Contrib. Plasma Phys. 1999. V. 39. P. 25.
12. 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.
13. Minakov D.V., Levashov P.R., Khishchenko K.V., Fortov V.E. Quantum Molecular Dynamics Simulation of Shock-wave Experiments in Aluminum // J. Appl. Phys. 2014. V. 115. P. 223512.
14. Knyazev D.V., Levashov P.R. Transport and Optical Properties of Warm Dense Aluminum in the Two-Temperature Regime: Ab Initio Calculation and Semiempirical Approximation // Phys. Plasmas. 2014. V. 21. P. 073302.
15. Sjoström T., Crockett S., Rudin S. Multiphase Aluminum Equations of State via Density Functional Theory // Phys. Rev. B. 2016. V. 94. P. 144101.
16. 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.
17. Krisch I., Kunze H.-J. Measurements of Electrical Conductivity and the Mean Ionization State of Nonideal Aluminum Plasmas // Phys. Rev. E. 1998. V. 58. P. 6557.
18. DeSilva A.W., Katsourous J.D. Electrical Conductivity of Dense Copper and Aluminum Plasmas // Phys. Rev. E. 1998. V. 57. P. 5945.
19. DeSilva A.W., Rakhel A.D. Progress in Measurements of the Electrical Conductivity of Metal Plasmas // Contrib. Plasma Phys. 2005. V. 45. P. 236.

20. *Beule D., Ebeling W., Foerster A.* Equation of State for Hydrogen below 10000 K: From the Fluid to the Plasma // *Phys. Rev. B.* 1999. V. 59. P. 14177.
21. *Ebeling W., Norman G.E.* Coulombic Phase Transitions in Dense Plasmas // *J. Stat. Phys.* 2003. V. 110. P. 861.
22. *Redmer R.* Electrical Conductivity of Dense Metal Plasmas // *Phys. Rev. E.* 1999. V. 59. P. 1073.
23. *Apfelbaum E.M.* The Calculation of the Metal Transport Coefficients in Warm Dense Matter // *Czech. J. Phys.* 2006. V. 56. P. 618.
24. *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.
25. *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.
26. *Ebeling W., Richert W., Kraeft W.D., Stolzman W.* Pade Approximations for the Thermodynamic Functions of Weakly Interacting Coulombic Quantum Systems // *Phys. Stat. Sol.* 1981. V. 104. P. 193.
27. *Renaudin P., Blancard C., Clerouin J., Faussurier G., Noiret P., Recoules V.* Aluminum Equation-of-State Data in the Warm Dense Matter Regime // *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 91. P. 075002.
28. *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.
29. *Коробенко В.Н., Рахель А.Д.* Переход расширенного железа в неметаллическое состояние при сверхкритических давлениях // *ЖЭТФ.* 2011. Т. 139. С. 746.
30. *Korobenko V.N., Rakhel A.D.* Observation of a First-Order Metal-to-Nonmetal Phase Transition in Fluid Iron // *Phys. Rev. B.* 2012. V. 85. P. 014208.
31. *Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Переход от газокинетической к минимальной металлической проводимости в сверхкритическом флюиде паров металлов // *ЖЭТФ.* 2017. Т. 151. С. 1169.
32. *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. № 3–4. P. 228.
33. *Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Проводимость паров металлов в критической точке // *ЖЭТФ.* 2016. Т. 150. С. 1020.
34. *Banerjia A., Smith J.R.* Origins of the Universal Binding-Energy Relation // *Phys. Rev. B.* 1988. V. 37. P. 6632.
35. *Rose J.H., Smith J.R., Guinea F., Ferrante J.* Universal Features of the Equation of State of Metals // *Phys. Rev. B.* 1984. V. 29. P. 2963.
36. *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.
37. *Муленко И.А., Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Базовые химические модели неидеальной атомарной плазмы // *ТВТ.* 2004. Т. 42. № 6. С. 835.
38. *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, $Z \leq 54$ // *At. Data Nucl. Data Tables.* 1974. V. 14. P. 177.
39. *Фортон В.Е., Дремин А.Н., Леонтьев А.А.* Оценка параметров критической точки // *ТВТ.* 1975. Т. 13. № 3. С. 1072.
40. *Young D.A., Alder B.J.* Critical Point of Metals from the Van der Waals Model // *Phys. Rev. A.* 1971. V. 3. P. 364.
41. *Apfelbaum E.M.* The Calculation of Vapor-liquid Coexistence Curve of Morse Fluid: Application to Iron // *J. Chem. Phys.* 2011. V. 134. P. 194506.
42. *Зельдович Я.Б., Ландау Л.Д.* О соотношении между жидким и газообразным состоянием у металлов // *ЖЭТФ.* 1944. Т. 14. С. 32.