

# ВЛИЯНИЕ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НА КРИТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПАР–ЖИДКОСТЬ

*А. Л. Хомкин<sup>\*</sup>, А. С. Шумихин<sup>\*\*</sup>*

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

Поступила в редакцию 31 мая 2016 г.

На основе базы данных для параметров критических точек практически всех металлов, а также переходных металлов и полупроводников получен ряд эмпирических соотношений, связывающих эти параметры с теплотой испарения, нормальной плотностью и изотермическим модулем упругости рассмотренных веществ в твердом состоянии при нормальных условиях. База данных получена на основе ранее предложенной термодинамической модели.

DOI: 10.7868/S0044451016120000

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время [1] заметно возрос интерес к исследованию свойств сверхкритического флюида — СКФ (иногда говорят об околокритическом флюиде). Под этим термином принято понимать состояние вещества в непосредственной окрестности критической точки перехода пар–жидкость. Активно обсуждаемыми и до конца не решенными являются вопросы о границах СКФ, уравнении состояния и т. д. Весьма интересным представляется вопрос о том, чем скорее является СКФ: неидеальным газом или расширенной жидкостью или даже расширенным твердым телом. От решения этого вопроса зависит выбор теоретических подходов для исследования термодинамики СКФ. Численное моделирование показывает, что по крайней мере со стороны кривой плавления СКФ присущи многие свойства конденсированного вещества, в частности сохранение ближнего порядка. Обсуждаются в основном нейтральные атомарные и молекулярные вещества. Пары металлов практически не рассматриваются.

В серии работ авторов был рассмотрен фазовый переход пар–жидкость (диэлектрик–металл), проходящий в парах щелочных металлов [2], атомарном водороде [3], газе экситонов [4] и в парах металлов с

многоэлектронной валентной оболочкой атомов [5]. В основу физической модели перехода была положена гипотеза об определяющей роли в термодинамике СКФ когезии — квантовой коллективной энергии сцепления атомов паров металла в конденсированном состоянии. Свободная энергия флюида строилась во многом аналогично ван-дер-ваальсовой: эффект исключенного объема учитывался в приближении Карнахана–Старлинга для твердых шаров, притяжение — в приближении среднего поля как когезионное, коллективное притяжение атомов; при этом, что принципиально, учитывалась достаточно сложная зависимость когезии от плотности. В разреженном газе, когда исчезает перекрытие волновых функций соседних атомов, когезия исчезает, обращаясь в нуль, и свободная энергия переходит в свободную энергию газа твердых шаров.

Когезионная энергия сцепления мала в разреженном газе и становится заметной величиной, когда начинается перекрытие волновых функций валентных электронов. При дальнейшем увеличении плотности когезия достигает минимума и дальше начинает расти. Минимум когезии соответствует нормальной плотности металла, а значение когезии в минимуме равно теплоте испарения. В работе [6] предлагается использовать когезионную энергию в качестве свободной энергии холодного металла. Давление металла при нормальной плотности равно нулю (производная свободной энергии в минимуме когезии). Использование когезии в серии наших работ, посвященных свойствам плотных паров ме-

<sup>\*</sup> E-mail: alhomkin@mail.ru

<sup>\*\*</sup> E-mail: shum\_ac@mail.ru

таллов, позволило впервые учесть в термодинамике давно обсуждаемый эффект зарождения зоны проводимости и появление электронов проводимости при сжатии атомов. Появление последних и ведет к коллективному притяжению атомов. Для традиционной термодинамики плотных газов появление в свободной энергии когезии — величины твердотельной — первоначально вызывало критику. Однако предложенная, пусть и на основе гипотезы, свободная энергия оказалась весьма конструктивной, поскольку позволила рассчитать критические точки и бинадали практически всех металлов. Для атомов с одним  $s$ -электроном, таких как атомарный водород, экситоны и пары щелочных металлов, когезия рассчитывалась аналитически [2–4]. Для большинства других металлов таблицы Менделеева была использована универсальная скейлинговая функция для энергии связи UBER (universal bind energy relation) [7]. UBER хорошо описывает данные многочисленных *ab initio* расчетов зависимости когезии от плотности и определяется тремя экспериментально измеряемыми при нормальных условиях параметрами твердого состояния: энергией сублимации, нормальной плотностью и изотермическим модулем упругости. Перечисленные параметры известны для большинства металлов периодической системы и приведены в работе [8]. На основе этих результатов можно утверждать, что связь твердотельных характеристик с параметрами критической точки установлена и СКФ приближенно можно рассматривать как расширенный металл.

К настоящему времени предложен ряд эмпирических соотношений, связывающих параметры критической точки с различными характеристиками вещества в жидком и газовом состояниях. Особенно актуальны эти соотношения для веществ, у которых экспериментальные данные по критическим параметрам отсутствуют. Отметим среди этих соотношений правило Коппа – Лэнга [9], связывающее критическую температуру с энергией испарения. В работе [10] на основе принципа соответственных состояний и метода прямолинейного диаметра были рассчитаны критические точки практически всех металлов. Ликальтером установлена связь критических параметров паров металлов с потенциалом ионизации атомов [11]. Существует ряд законов подобия, связывающих характерные линии (например, линию единичной сжимаемости (Zeno-line)) газов и жидкостей с критическими параметрами (см., например, работу [12]), которые хорошо выполняются для инертных и молекулярных газов.

В рамках предложенной модели нами были рассчитаны критические параметры практически всех металлов, а недавно добавились расчеты критических параметров полупроводников и некоторых переходных металлов [13]. В результате возникла достаточно большая база данных для критических параметров паров металлов, приведенная в табл. 1 Приложения, что делает актуальной задачу об их анализе.

Цель настоящей работы — установить на основе выполненных расчетов аналитические связи критических параметров паров металлов с характеристиками металлов в твердом состоянии, такими как теплота испарения  $\Delta E$ , нормальная плотность  $\rho_0$  и изотермический модуль упругости  $B$ . Полученные соотношения позволят лучше понять физику СКФ, а также могут оказаться полезными для оценок критических параметров веществ, для которых критические параметры неизвестны.

## 2. ЭНЕРГИЯ СЦЕПЛЕНИЯ И ОСНОВНЫЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СООТНОШЕНИЯ

Энергия сцепления атома с веществом является фундаментальной характеристикой конденсированного состояния. Простейшим примером является энергия связи атомов в молекуле. Сюда же относится энергия связи атома с поверхностью металла — адгезия, а также хемосорбция. Особенно важной характеристикой является когезия — энергия сцепления атома с окружением в конденсированном состоянии, твердом и жидком. Она зависит от плотности и уменьшается по мере разрежения вещества. При нормальной плотности когезия имеет минимум, который определяет энергию сублимации или испарения. Расчету всевозможных энергий сцепления посвящены сотни работ. Особенно возрос этот поток информации в связи с развитием прямых численных методов расчета, связанных с методом функционала плотности. Мы воспользовались, предложенным в работе [7] универсальным соотношением для энергии связи  $E_{UBER}(\Delta E, a^*)$ , которое обобщает в аналитическом виде данные множества численных расчетов и достаточно хорошо описывает различные виды энергии связи в металлах в зависимости от плотности атомов  $n_a = N_a/V$  и от ряда физических величин, характерных только для рассматриваемого вещества:

$$E_{UBER}(\Delta E, a^*) = \Delta E \cdot E^*(a^*), \quad (1)$$

$$E^*(a^*) = -(1 + a^*) \exp(-a^*), \quad (2)$$

$$a^* = (r_{WZ} - r_{WZ0})/l. \quad (3)$$

В выражениях (1), (2)  $E^*(a^*)$  — универсальная безразмерная скейлинговая функция,  $\Delta E$  — энергия испарения металла при нормальных условиях. Безразмерный параметр разрежения  $a^*$  выражается через радиусы ячейки Вигнера–Зейтца для нормальной  $r_{WZ0}$  и текущей  $r_{WZ}$  плотностей металла;  $(4/3)\pi n_a r_{WZ}^3 = 1$ . В выражении (3)  $l$  — длина масштабирования, связанная с изотермическим модулем упругости  $B$  соотношением  $l = \sqrt{\Delta E/12\pi B r_{WZ0}}$ . В боровских радиусах  $a_0$  все скейлинговые множители становятся безразмерными:

$$l_0 = \frac{l}{a_0}, \quad y_0 = \frac{r_{WZ0}}{a_0}, \quad y = \frac{r_{WZ}}{a_0}.$$

В результате энергия связи зависит от текущей плотности  $y$  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 [8].

Свободная энергия Гельмгольца для  $N_a$  атомов в объеме  $V$  при температуре  $T$ , предложенная в работах [2–5], имеет вид

$$F = -N_a kT \ln \left( \frac{eV g_a}{N_a \lambda_a^3} \right) + N_a kT \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2} + \frac{1}{2} N_a E_{coh}(y), \quad (4)$$

где  $\lambda_a$  и  $g_a$  — соответственно тепловая длина волны де Бройля и статистический вес атомов,  $\eta$  — параметр упаковки,  $E_{coh}(y) = E_{UBER}(\Delta E, y_0, l_0, y)$  — когезионная энергия сцепления (когезия). При  $a^* = -1$  когезия (2) обращается в нуль. Это происходит при определенной величине радиуса  $r_{HS} = r_{WZ0} - l$  ( $y_{HS} = y_0 - l_0$ ). Этот радиус определяет размер твердой сердцевины атома и через него выражается параметр упаковки  $\eta = (4/3)\pi n_a r_{HS}^3$ .

С использованием выражения (4) для свободной энергии было получено уравнение состояния и рассчитаны параметры критических точек для паров щелочных металлов [2], атомарного водорода [3], экситонов [4] и практически для всех металлов периодической системы [5]. Для ряда металлов построены бинодали [5].

### 3. КРИТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ МЕТАЛЛОВ

На основе свободной энергии (4) можно считать все термодинамические функции и найти критические параметры, определив координаты  $(\rho_{cr}, T_{cr}, P_{cr})$  точки перегиба изотермы давления. В

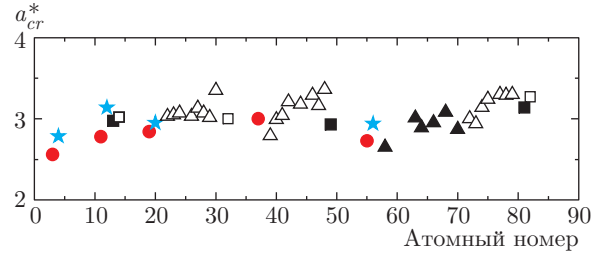


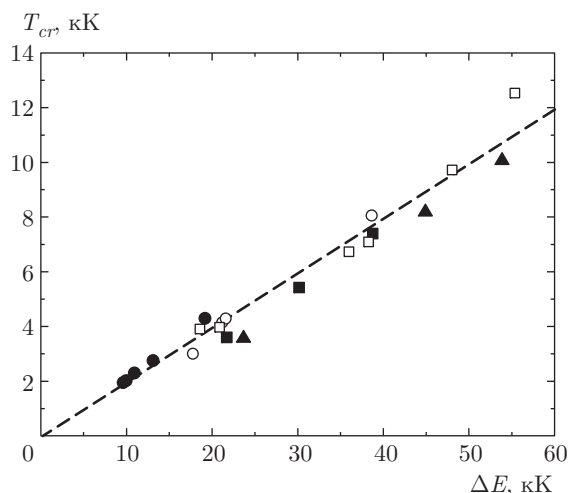
Рис. 1. Безразмерный параметр разрежения в критической точке для различных металлов: темные кружки — щелочные металлы; звездочки — щелочноземельные металлы; темные квадраты — металлы группы бора; темные треугольники — лантаноиды; светлые квадраты — элементы IV группы; светлые треугольники — переходные металлы

табл. 1 в Приложении приведены результаты наших расчетов для большинства металлов периодической таблицы. В первых столбцах представлены исходные данные для расчетов:  $\Delta E$  — энергия испарения (сублимации);  $y_0$  — радиус ячейки Вигнера–Зейтца, соответствующий нормальной плотности металла в боровских радиусах;  $l_0$  — масштабный фактор из выражения (3) в боровских радиусах. В последующих столбцах содержатся рассчитанные нами критические параметры перехода пар–жидкость [2, 5, 13]. Для щелочных металлов приведены известные экспериментальные данные [14, 15] (выделены жирным шрифтом).

#### 3.1. Критическая плотность

В соответствии с результатами Стишова [16] критическая плотность перехода пар–жидкость в парах металлов близка к плотности, при которой когезионная энергия обращается в нуль. К сожалению, у когезии в форме UBER (1) такой характерной точки нет в отличие от аналитического результата для паров щелочных металлов [2]. Тем не менее, поскольку единственным параметром, определяющим «малость» безразмерной когезии (2) является безразмерный параметр разрежения  $a^*$ , можно ожидать, что в критической точке он будет одинаков для всех металлов.

Этот вывод подтверждается нашими расчетами, результаты которых представлены на рис. 1. Видно, что с достаточно хорошей точностью этот параметр меняется в районе величины, равной трем. Используя этот факт и соотношение для  $a_{cr}^* = (y_{cr} - y_0)/l_0$ , получим для безразмерного радиуса ячейки, соответствующей критической плотности  $y_{cr}$ , соотношение, связывающее его с табличными значениями  $y_0$ ,  $l_0$ :



**Рис. 2.** Зависимость критической температуры от энергии испарения: темные кружки — щелочные металлы; светлые кружки — щелочноземельные металлы; темные квадраты — металлы группы бора; темные треугольники — элементы IV группы; светлые квадраты — лантаноиды. Прямая линия — аппроксимация по формуле (8)

$$y_{cr} = y_0 + 3l_0. \tag{5}$$

Используя (5) для критической плотности  $\rho_{cr}$ , получим соотношение, связывающее эту плотность с твердотельными характеристиками:

$$\rho_{cr} \left[ \frac{\text{г}}{\text{см}^3} \right] = 2.68 \frac{A}{y_{cr}^3} = 2.68 \frac{A}{(y_0 + 3l_0)^3}, \tag{6}$$

где  $A$  — атомный вес.

### 3.2. Критическая температура

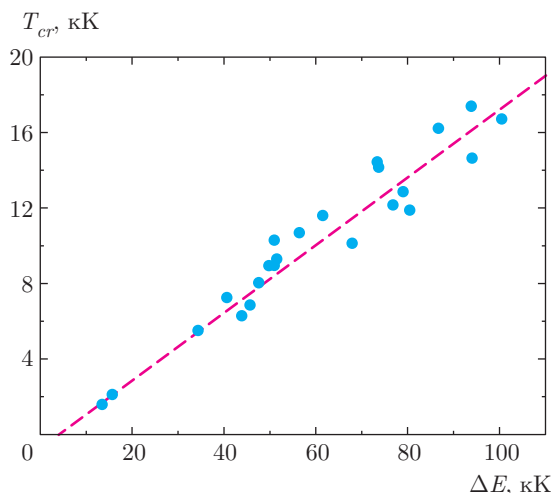
Из литературы известно правило Копша–Лэнга [9], связывающее критическую температуру  $T_{cr}$  и энтальпию испарения, которая при нормальных условиях совпадает с энергией испарения (сублимации)  $\Delta E$ . Правило утверждает, что между ними имеется линейная зависимость:

$$T_{cr} = \eta \Delta E. \tag{7}$$

Величина  $\eta$  немного различается для разных веществ. Но в целом близка к 0.15–0.25. Используя полученный нами массив данных для паров металлов, мы построили графики зависимости критической температуры от энергии испарения  $\Delta E$ , выделив в отдельную группу переходные металлы.

На рис. 2 хорошо просматривается прямая пропорциональность этих величин. Коэффициент  $\eta \approx 0.2$ . Это значение удивительным образом совпадает с эмпирическим правилом Копша–Лэнга, полученным для нейтральных газов.

Вычислим, чему равна когезия при критической плотности,  $E_{coh}^{cr} = \Delta E E^*(a_{cr}^*)$ . Мы установили, что



**Рис. 3.** Зависимость критической температуры от энергии испарения для переходных металлов: прямая линия — аппроксимация имеющихся данных по критической температуре и теплоте испарения (см. табл. 1)

$a_{cr}^* \approx 3$ , следовательно,  $E^*(a_{cr}^*) \approx (1 + 3)e^{-3} = 0.199$ , что близко к величине  $\eta = 0.2$ . Результат достаточно неожиданный. Если принять правило Копша–Лэнга, то критическая температура оказывается равной когезии (энергии сцепления) при критической плотности:

$$T_{cr} = E_{coh}^{cr}. \tag{8}$$

При температурах ниже критической когезия в критической точке превосходит температуру и возможен переход в жидкое состояние. При температуре выше критической энергия сцепления в критической точке мала и пар остается в газовом состоянии.

На рис. 3 представлена зависимость критической температуры от энергии испарения для переходных металлов. Приблизительно можно говорить о прямолинейной зависимости, но коэффициент  $\eta \approx 0.14 \div 0.16$ .

Стишовым [16] на примере паров щелочных металлов было установлено, что критическая плотность перехода пар–жидкость близка к плотности, при которой когезия обращается и нуль. Используя когезию для свободной энергии Гельмгольца паров щелочных металлов [2], мы установили координату точки перегиба изотермы давления. Когезия при найденной критической плотности была мала, но в нуль не обращалась. Этот результат и подтверждается соотношением (8) для рассмотренных нами металлов.

### 3.3. Критическое давление

В рамках термодинамической модели (4) мы получаем несколько завышенное значение критического давления по сравнению с экспериментальными

данными для паров щелочных металлов. Наши попытки улучшить модель (4) не привели к заметному успеху. Корректируя давление, мы меняем критические плотность и температуру. В этой ситуации мы предлагаем воспользоваться эмпирической формулой Тиммермана [17]:

$$P_{Tim}^{cr} = P_0^{cr} (y_0/y_{cr})^3 = P_0^{cr} (\rho_{cr}/\rho_0), \quad (9)$$

где  $P_0^{cr} = n_{cr} k T_{cr} = (82.6 \rho_{cr} T_{cr})/A$ . Здесь плотность измеряется в  $\text{г}/\text{см}^3$ , температура в К, давление получается в атмосферах.

Для щелочных металлов в табл. 1 (см. Приложение) приведены параметры критической точки, рассчитанные тремя способами: по уравнению состояния (4) (первая строка), во второй строке — по формулам (6), (8), (9), в третьей строке приведены экспериментальные данные [14] (выделены жирным шрифтом, кроме данных для лития, где они отсутствуют). Для остальных металлов в табл. 1 приведены расчетные данные, полученные из уравнения состояния (4).

#### 4. ИНЕРТНЫЕ ГАЗЫ, РТУТЬ И УРАН

В этом разделе мы воспользуемся полученными соотношениями (6), (8), (9) и оценим критические параметры инертных газов, у которых физическая природа сил сцепления существенно отличается от природы сил сцепления в парах металлов. Так, в инертных газах в соответствии с теорией Леннарда-Джонса – Девоншира (ЛДД) [18] связь в жидкости и в твердом теле носит классический характер и возникает за счет аддитивного сложения потенциалов взаимодействия пробного атома и атомов в первой и в последующих координационных сферах. На основе теории ЛДД для инертных и других газов можно определить и рассчитать энергию испарения  $\Delta E$ , нормальную плотность  $n_0$  и модуль упругости  $B$ , через который выражается длина масштабирования  $l$ . Тем самым, воспользовавшись соотношениями (6), (8), (9), можно рассчитать все критические параметры.

В табл. 2 в Приложении представлены данные по необходимым константам, взятым из литературы [19], и результаты расчета критических параметров. В последней строке жирным шрифтом приведены экспериментальные значения [20]. Хотелось бы отметить неплохое согласие с экспериментом для весьма необычной расчетной схемы. Для инертных газов характерное значение  $\eta = 0.16$  (т.е.  $\Delta E/T_{cr} \approx 6$ , что характерно для переходных металлов) явно следует из экспериментальных данных. Как видно, согласие с экспериментом для инертных газов хуже, чем для

щелочных металлов, но и схема расчета необычна для инертных газов. Вероятно, причина такого расхождения лежит в классической природе сил связи. Тем не менее связь критических параметров с твердотельными характеристиками, хотя и не такая явная, как для металлов, в случае инертных газов также просматривается.

Для ртути имеется большое количество измерений, в которых подробно промерены критическая область и бинадаль [21]. Но в работе [8] отсутствуют данные UBER для ртути, поэтому ранее нами не были выполнены расчеты критических параметров с помощью уравнения состояния (4). Вместе с тем в литературе имеется большое количество данных для ртути в твердом состоянии: теплота испарения, нормальная плотность и изотермический модуль упругости [22–24]. Правда эти данные довольно разрознены, особенно велик разброс данных по теплоте испарения и для модуля упругости (см. табл. 2). Используя полученные нами соотношения (6), (8), (9), мы выполнили расчет параметров критической точки ртути, которые приведены в табл. 2, из которой видно, что расчеты неплохо согласуются с экспериментальными данными.

В последнее время идет активная дискуссия о критических параметрах урана. Отмечается существенное расхождение критических температур, получаемых при экстраполяции термических и калорических величин [25]. Мы рассчитали критические параметры урана двумя способами: с использованием уравнения состояния (4) (первая строка в табл. 2), а также на основе предложенных формул (6), (8), (9) (вторая строка). Наши расчеты критических параметров попадают в область предсказаний калорического варианта экстраполяции [25]. Экстраполяция термических величин приводит к критической температуре около 6000 К.

#### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе рассчитанной базы данных для критических параметров паров металлов установлены аналитические связи параметров критических точек паров металлов с характеристиками металлов в твердой фазе при нормальных условиях. Полученные соотношения апробированы на инертных газах — веществах с совершенно иной физической природой сил сцепления, а также на парах ртути и урана. Полученное уравнение состояния можно рекомендовать для описания СКФ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 14-50-00124).

## Приложение

Таблица 1

Элемент	№	$\Delta E$ , К	$y_0$ , $a_0$	$l_0$ , $a_0$	$\rho_c$ , г/см <sup>3</sup>	$T_c$ , К	$P_{cr}$ , атм
Щелочные металлы							
Li	3	19148	3.245	1.044	0.095 0.072	4330 3830	1900 432
Na	11	13113.65	3.926	1.06	0.18 0.172 <b>0.3</b>	2750 2623 <b>2485</b>	900 287 <b>248</b>
K	19	10920.3	4.857	1.23	0.18 0.168 <b>0.17</b>	2300 2184 <b>2178</b>	450 143 <b>150</b>
Rb	37	9957	5.191	1.242	0.36 0.32 <b>0.29</b>	2020 1991 <b>2017</b>	350 123 <b>124.5</b>
Cs	55	9597.3	5.619	1.348	0.43 0.395 <b>0.38</b>	1950 1919 <b>1924</b>	250 93 <b>92.5</b>
Щелочноземельные металлы							
Be	4	38645	2.36	0.59	0.38	8060	14000
Mg	12	17756	3.35	0.597	0.46	3000	3260
Ca	20	21179	4.12	0.913	0.34	4150	1700
Ba	56	21585	4.65	1.05	0.8	4290	1150
Металлы группы бора							
Al	13	38761	3.02	0.634	0.60	7400	8500
In	49	30173	3.48	0.68	1.9	5420	4400
Tl	81	21701	3.59	0.62	3.2	3600	3300
Переходные металлы							
Ti	22	56400.3	3.06	0.643	1.02	10690	11500
V	23	61506.5	2.817	0.586	1.4	11600	16200
Cr	24	47580.5	2.68	0.48	1.93	8040	16800
Fe	26	49785.5	2.665	0.518	1.98	8950	16500
Co	27	50945.95	2.628	0.495	2.2	8960	18200
Ni	28	51468.2	2.609	0.51	2.2	9300	18200
Cu	29	40617.5	2.665	0.514	2.3	7250	13500
Zn	30	15667	2.91	0.406	2.25	2120	5400
Y	39	50946	3.76	0.888	1	10300	4900
Zr	40	73343.6	3.346	0.747	1.4	14440	10700

Таблица 1. Продолжение

Элемент	№	$\Delta E$ , К	$y_0, a_0$	$l_0, a_0$	$\rho_c$ , г/см <sup>3</sup>	$T_c$ , К	$P_{cr}$ , атм
Nb	41	86689.35	3.08	0.635	2	16230	17600
Mo	42	79030	2.93	0.50	2.8	12870	22450
Ru	44	76825	2.8	0.463	3.5	12160	25800
Pd	46	45677.3	2.87	0.448	3.5	6860	14900
Cd	48	13461.8	3.27	0.404	3	1600	3620
Ag	47	34350.8	3.025	0.508	3	5510	9000
Hf	72	73691.7	3.29	0.705	3.03	14160	11800
Ta	73	93872.8	3.06	0.624	4.15	17400	19550
W	74	100499.3	2.95	0.518	5.2	16720	27200
Re	75	94000.5	2.873	0.467	5.92	14640	29600
Ir	77	80422.65	2.835	0.435	6.63	11890	27780
Pt	78	67912.5	2.892	0.448	6.26	10130	21900
Au	79	43867	3.0	0.446	5.9	6290	13100

Таблица 2

Элемент	№	$\Delta E$ , К	$y_0, a_0$	$l_0, a_0$	$\rho_c$ , г/см <sup>3</sup>	$T_c$ , К	$P_{cr}$ , атм	Ссылка
Ne	10	232.1	3.304	0.396	0.57	26	57	
					0.6	46.4	45	[19]
					<b>0.48</b>	<b>44.5</b>	<b>26.2</b>	[20]
Ar	18	928.4	3.926	0.451	0.66	124	155	
					0.728	185.7	115	[19]
					<b>0.53</b>	<b>153</b>	<b>48.9</b>	[20]
Kr	36	1346	4.169	0.488	1.1	150	181	
					1.26	269	135.6	[19]
					<b>0.91</b>	<b>209</b>	<b>55</b>	[20]
Xe	54	1915	4.533	0.537	1.34	216	198	
					1.51	383	146	[19]
					<b>1.1</b>	<b>290</b>	<b>58.4</b>	[20]
Hg	80	7775	3.347	0.387	5.87	1555	1539	[22]
		8054	3.399	0.391	5.63	1611	1536	[23]
		11210	3.337	0.565	4.22	2242	1139	[22]
		7532	3.28	0.396	6.03	1506	1478	[22]
		11628	3.326	0.564	4.26	2321	1185	[24]
					<b>5.8</b>	<b>1751</b>	<b>1650</b>	[21]
U	92	62725	3.212	0.595	4.84	10890	12460	[26]
					5.1	12545	5898	[26]

## ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Бражкин, А. Г. Ляпин, В. Н. Рыжов и др., УФН **55**, 1061 (2012).
2. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, ЖЭТФ **145**, 84 (2014).
3. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, Физика плазмы **39**, 958 (2013).
4. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, ЖЭТФ **147**, 775 (2015).
5. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, ЖЭТФ **148**, 597 (2015).
6. P. Vinet, J. Ferrante, J. R. Smith, and J. H. Rose, J. Phys. C **19**, L467 (1986).
7. A. Vanerjia and J. R. Smith, Phys. Rev. B **37**, 6632 (1988).
8. J. H. Rose, J. R. Smith, F. Guinea, and J. Ferrante, Phys. Rev. B **29**, 2963 (1984).
9. G. Lang, Z. Metallkd. **68**, 213 (1977).
10. В. Е. Фортов, А. Н. Дремин, А. А. Леонтьев, ТВТ **13**, 1072 (1975).
11. А. А. Ликальтер, ТВТ **23**, 465 (1985).
12. E. M. Apfelbaum and V. S. Vorob'ev, Chem. Phys. Lett. **467**, 318 (2009).
13. A. L. Khomkin and A. S. Shumikhin, Contrib. Plasma Phys. **56**, 228 (2016).
14. F. Hensel, E. Marceca, and W.C. Pilgrim, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 11395 (1998).
15. *Handbook of Thermodynamic and Transport Properties of Alkali Metals*, ed. by Ronald W. Ohse, New York, Blackwell Scientific (1985).
16. S. M. Stishov, Phys. Rev. B **47**, 12260 (1993).
17. Л. П. Филиппов, *Методы расчета и прогнозирования свойств веществ*, Изд-во МГУ, Москва (1988).
18. *Molecular Theory of Gases and Liquids*, ed. by J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, and R. Byron Bird, Wiley, New York (1954).
19. M. S. Anderson and C. A. Swenson, J. Phys. Chem. Sol. **36**, 145 (1975).
20. V. A. Rabinovich, A. A. Vasserman, and V. I. Nedostup, *Thermophysical Properties of Neon, Argon, Krypton, and Xenon*, Hemisphere, Berlin (1988).
21. И. К. Кикоин, А. П. Сенченков, ФММ **24**, 843 (1967).
22. S. Biering and P. Schwerdtfeger, Theor. Chem. Acc. **130**, 455 (2011).
23. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, New York (1971).
24. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **55**, 7539 (1997).
25. I. Iosilevskiy and V. Gryaznov, J. Nucl. Mater. **344**, 30 (2005).
26. M. D. Jones, J. C. Boettger, R. C. Albers, and D. J. Singh, Phys. Rev. B **61**, 4644 (2000).