Диссоциативный фазовый переход и металлизация в молекулярных газах

А.Л. Хомкин, А.С. Шумихин

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия,  
 [alhomkin@mail.ru](mailto:alhomkin@mail.ru)

Работа посвящена исследованию процессов диссоциации и металлизации в плотных молекулярных газах. В экспериментах по сжатию молекулярного водорода, дейтерия, азота и кислорода [1], были достигнуты рекордные степени сжатия этих газов. Зафиксированы, вызванные давлением, диссоциация молекул при низких температурах и появление состояний с высокой, близкой к минимальной металлической проводимостью. Применительно к водороду и дейтерию нами была выдвинута и опубликована идея о важной роли когезии, возникающей в плотном газе атомов, диссоциированных из молекул [2, 3]. Когезионная связь (металлизация) между свободными, диссоциированными атомами при сильном сжатии стимулирует диссоциацию молекул и ведет к образованию металлизированной атомарной компоненты, что качественно соответствует эксперименту. Переход в металлизированную компоненту носит характер фазового перехода первого рода, но принципиально нового типа – диссоциативно-перколяционного фазового перехода диэлектрик-металл (металлизация через диссоциацию). Бинодаль такого перехода, рассчитанная нами для дейтерия принципиально отличается от бинодали Ван-дер-Ваальса [3]. В частности, производные критического давления по критической температуре имеют разный знак.

Прямые расчёты когезионной энергии для азота и кислорода в литературе отсутствуют по той причине, что плотные атомарные газы N, O в природе не встречаются (впрочем, как и H, D, рассмотренные нами ранее), но в виде диссоциированной компоненты существовать могут. Трудности такого расчета для азота и кислорода связаны в первую очередь с многовалентностью рассматриваемых атомов. Нам удалось решить эту проблему с использованием скейлинговых соотношений для энергии сцепления атомов азота, кислорода и др. с электронным желе различной плотности. Такие данные имеются в литературе [4]. Используя некоторые подходы метода погруженного атома мы выполнили расчеты, позволившие установить связь плотности электронного желе и плотности ядер. Для расчета распределения электронной плотности использовались хорошо известные аппроксимации Хартри-Фоковских орбиталей изолированного атома. В результате была получена когезионная энергия связи атомарных азота и кислорода в зависимости от плотности ядер.

Используя молекулярно-атомарную модель [2, 3], были решены уравнения диссоциативного равновесия, рассчитаны изотермы и адиабаты ударно-волнового сжатия. Убедительно показано наличие диссоциативно-перколяционного фазового перехода первого рода в азоте и кислороде.

Выполнен сравнительный анализ адиабат и изоэнтроп сжатия водорода, дейтерия, азота и кислорода. Сделано заключение о наличии диссоциативно-перколяционного фазового перехода во всех рассмотренных газах и его влияние на ударные адиабаты и изоэнтропы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда грант № 14-50-00124.

Литература

1. Weir S.T., Mitchel A.C., Nellis W.J., PRL, 2002, **76**, 1860.
2. Хомкин А.Л., Шумихин А.С., ЖЭТФ, 2012, **141**, 101.
3. Хомкин А.Л., Шумихин А.С., ЖЭТФ, 2014, **145**, 518.
4. Puska M.J., Niemenen R.M., PRB, 1991, **43**, 12221.