Заседание Научного совета РАН
по физике низкотемпературной плазмы

21 декабря, 2021г.

Плазменный фазовый переход

Норман Г.Э., Саитов И.М.







Содержание

1. Введение.

2. Фазовый переход
в разогретом плотном водороде/дейтерии

2.1. Протонные кластеры и ионы

2.2. Метастабильные состояния

3. Плазменный фазовый переход
в системах многоэлектронных атомов

3.1. Гелий

3.2. Алюминий

3.3. Цезий

3.4. Кремний

4. Выводы.

1. Введение

Плазменный фазовый переход

Плазменный фазовый переход предсказан Норманом и Старостиным в 1968 году.

История вопроса изложена в

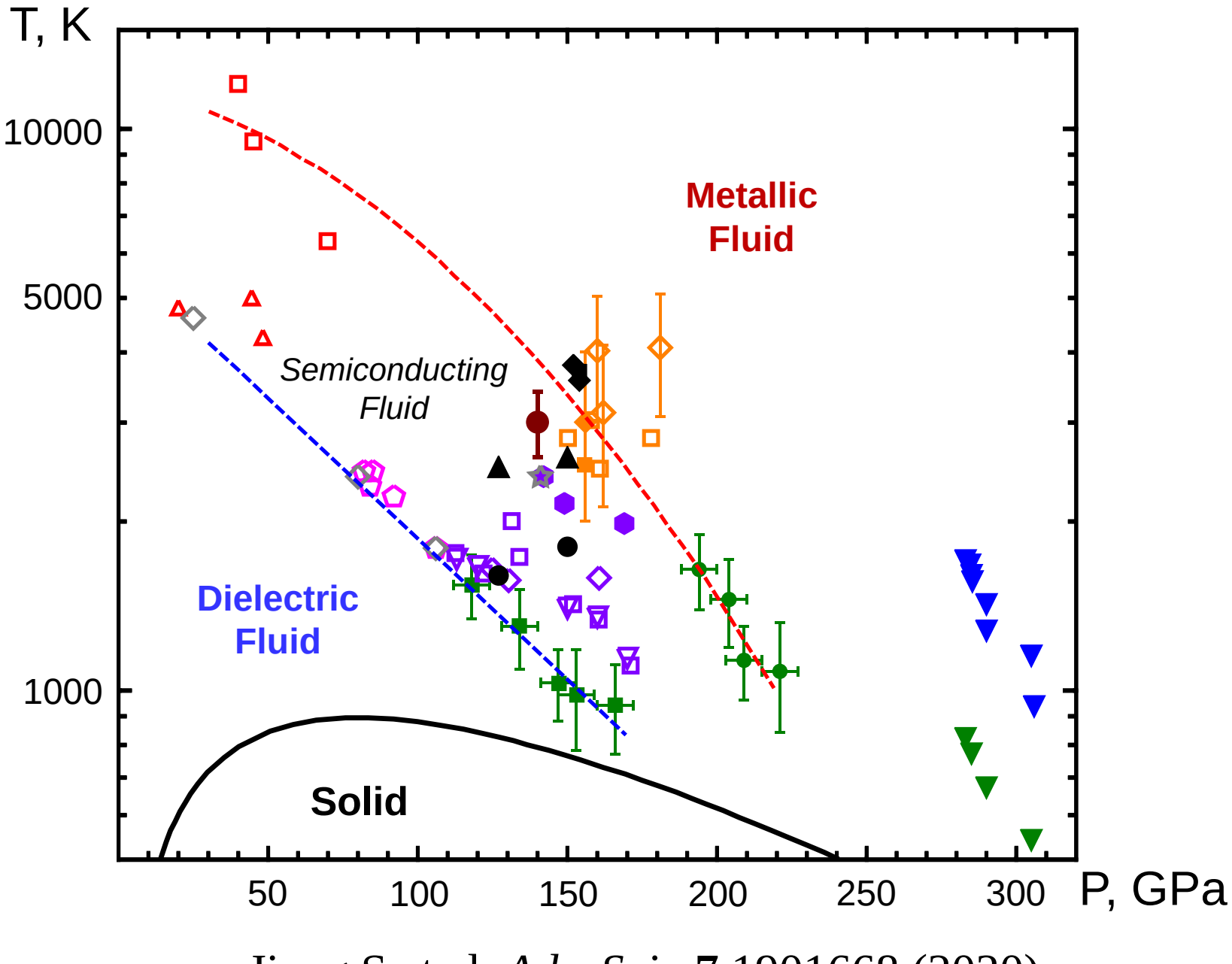
1. Л.А. Большов, Е.П. Велихов, В.И. Ильгисонис, А.Н. Лагарьков, В.Б. Минцев, А.П. Напартович, Г.Э. Норман, О.Ф. Петров, В.П. Смирнов, Э.Е. Сон, В.Е. Фортов, В.Е. Черковец «Памяти Андрея Никоновича Старостина» // УФН. 2020. Т.190. С. 781–782.

2. Г.Э. Норман, И.М. Саитов «Плазменный фазовый переход» // УФН. 2021. Т.191. С.1153–1186.

Рассмотрим современное состояние

2. Фазовый переход в разогретом плотном водороде/дейтерии

Фазовая диаграмма водорода/дейтерия - эксперимент



Jiang S et al. *Adv. Sci.*, **7** 1901668 (2020)

Численное моделирование фазового перехода в разогретом плотном водороде

Квантовый метод молекулярной динамики в рамках теории функционала плотности

Расчет протон протонных парных корреляционных функций g(r)

Давление, Электропроводность, …

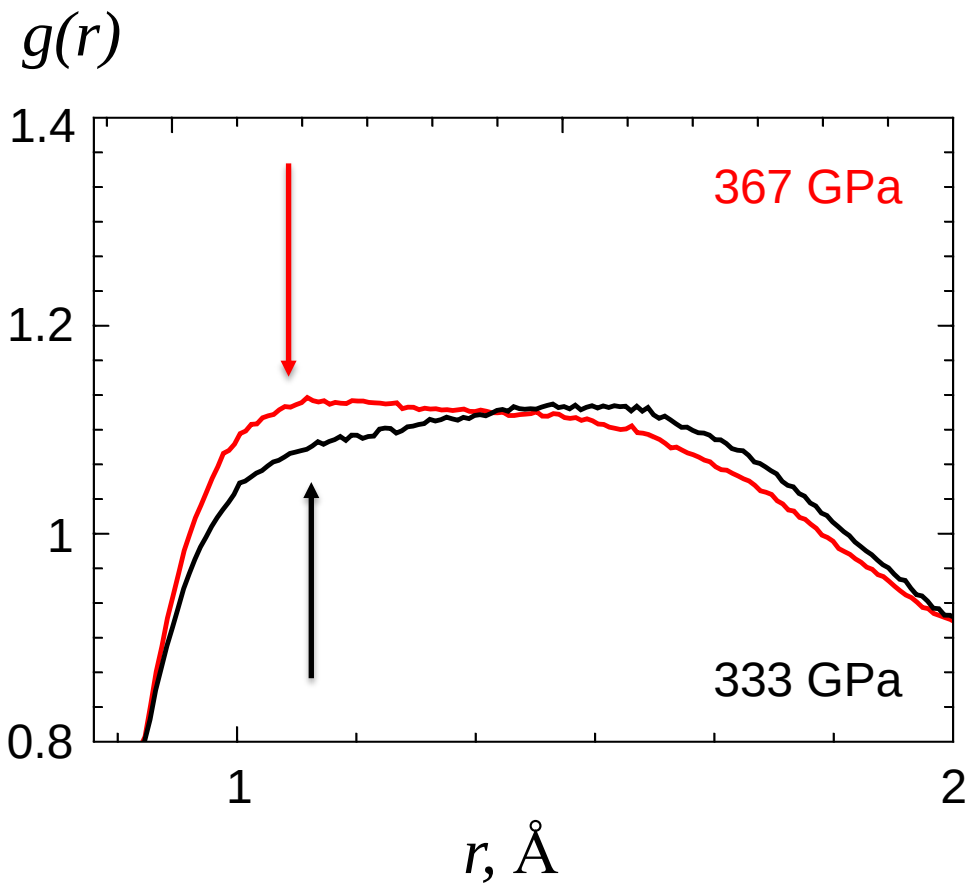
2.1. Протонные кластеры и ионы

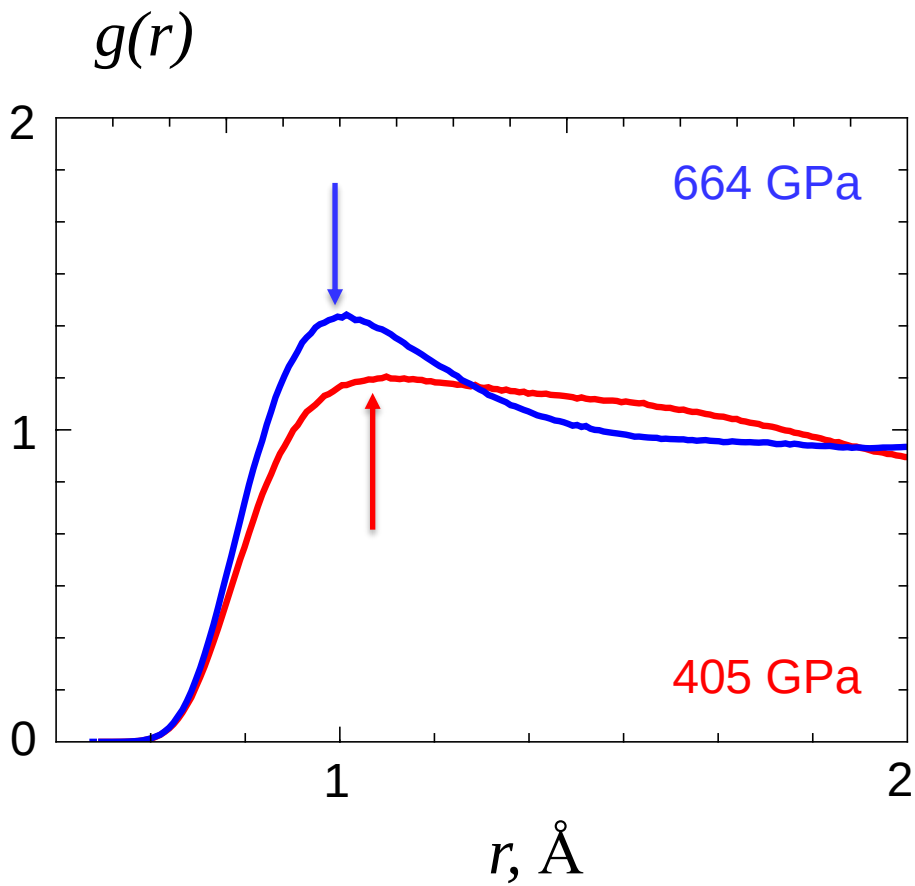
Разность

Протон-протонных парных корреляционных функций при значениях плотности ближайших к переходу до $g_1(r)$ и после $g_2(r)$ перехода.

Формирование атомарного флюида водорода

T = 1000 K





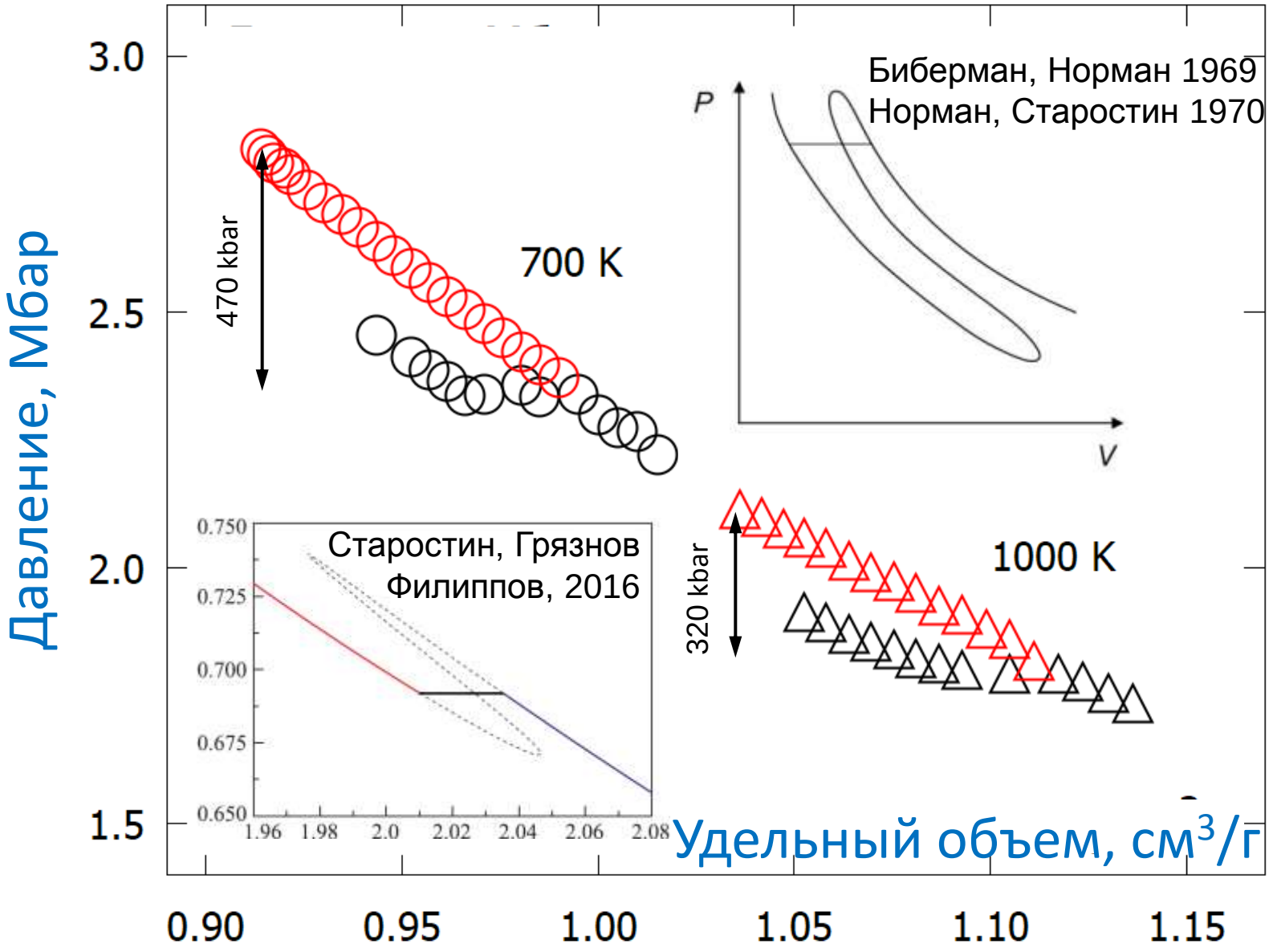
Результаты моделирования в рамках ТФП указывают на переход молекулярного флюида водорода в состояние атомарного флюида при сжатии через образование *промежуточного состояния*, *содержащего молекулы, атомы и протонные кластеры (включая молекулярные ионы)*

2.2. Метастабильные состояния

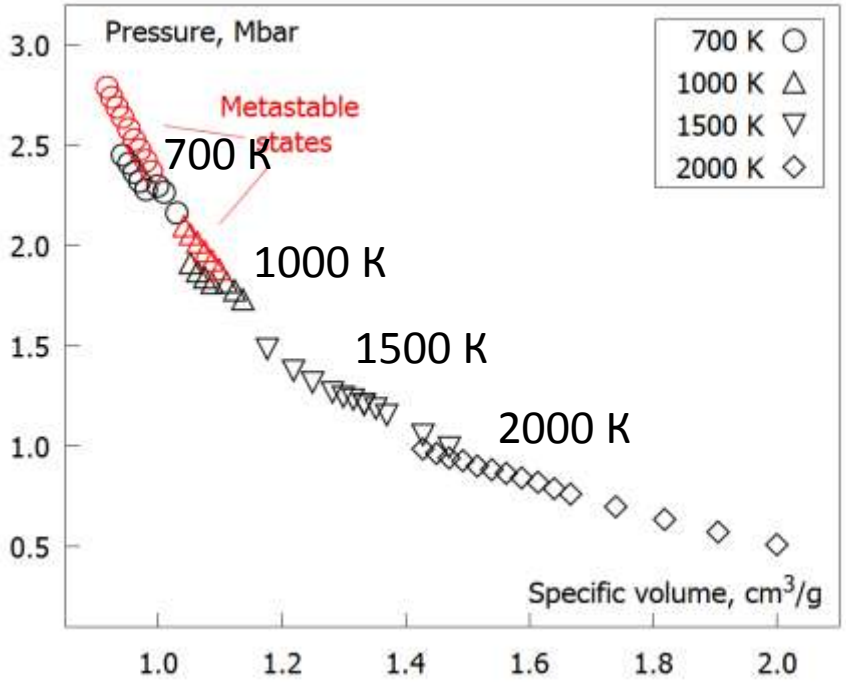
Сильное перекрытие метастабильной и стабильной ветвей изотермы

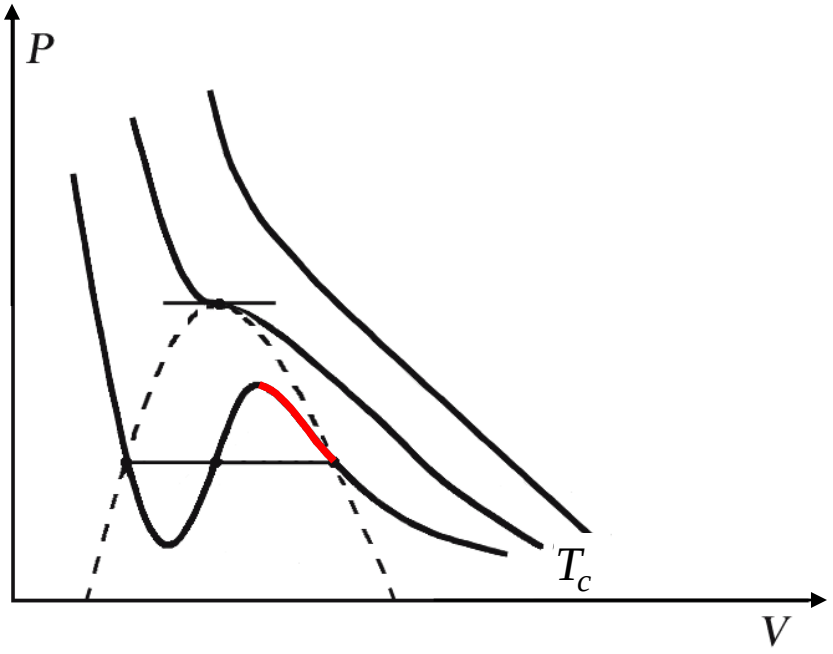
Красные точки – метастабильные состояния

Черные точки – стабильные состояния



«Перевернутые» петли уравнения ван-дер-Ваальса





- Относительно малый скачек плотности при переходе.
- Сильное перекрытие стабильной и метастабильной ветвей изотермы.
- “Перевернутый” вид бинодали и

отрицательный наклон кривой фазового равновесия в плоскости P(V):
при приближении к критической температуре давление падает.

Аргументы ***за***

Плазменный фазовый переход

Резкое увеличение протонных кластеров, включающих структуры с межпротонными расстояниями как в H_2^+ и H_3^+

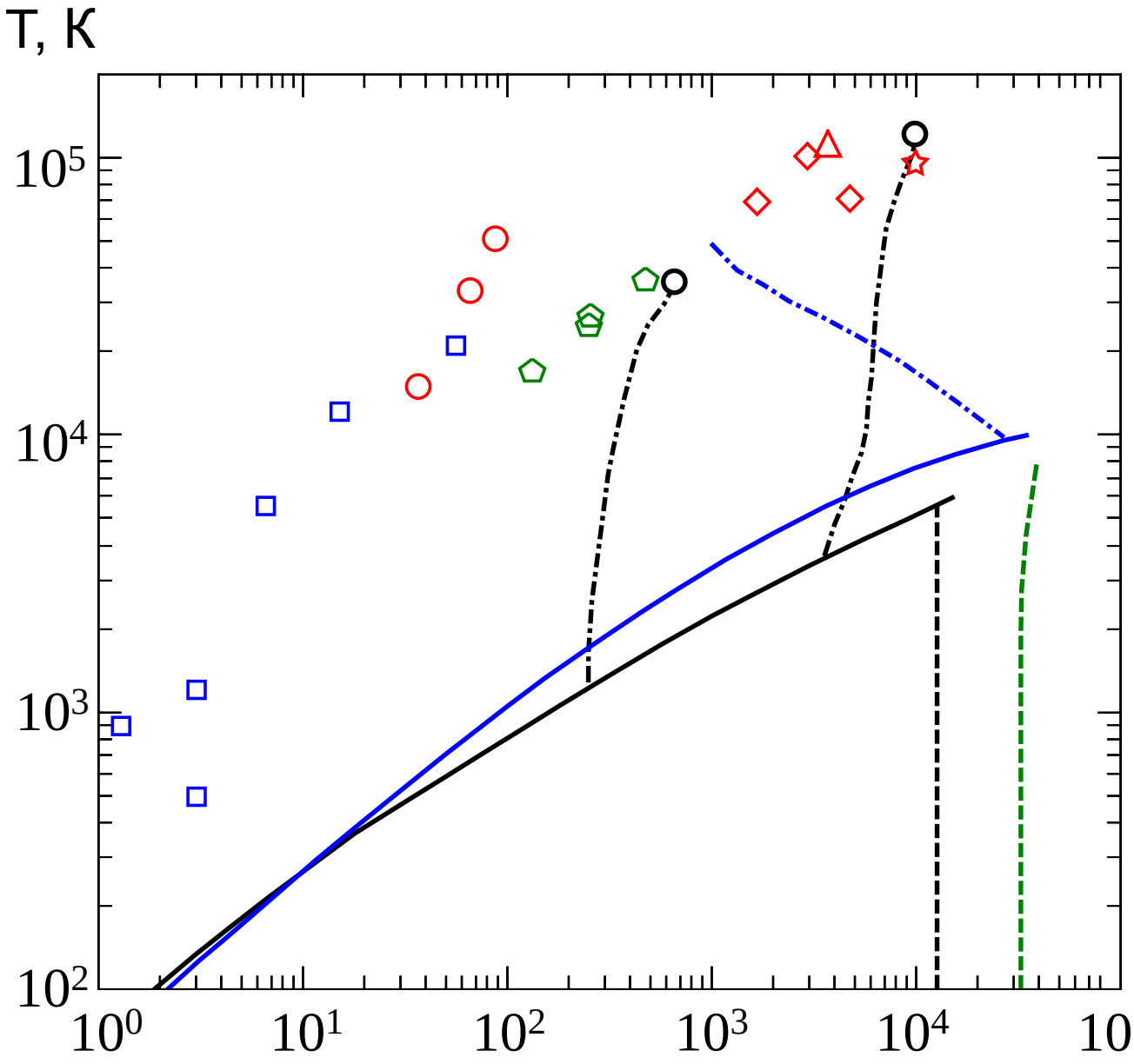
Сильное перекрытие стабильной и метастабильной ветвей изотерм получено при расчетах в рамках ТФП

Данный результат также воспроизводится в рамках химической модели

Рассматриваемое состояние водорода можно отнести к плазме, несмотря на величину $T_c \approx 10^3$К!

3. Плазменный фазовый переход в системах многоэлектронных атомов

3.1. Гелий



Förster A, Kahlbaum T, Ebeling W *High Pressure Res.* **7** 375 (1991)

Preising M, Redmer R *Phys. Rev. B* **102** 224107 (2020)

Khairallah S A, Militzer B *Phys. Rev. Lett.* **101** 106407 (2008)

эксперимент

Ternovoi V Ya et al. *AIP Conf. Proc.* **620** 107 (2002)

Zhernokletov M V et al. *JETP Lett.* **96** 432 (2012)

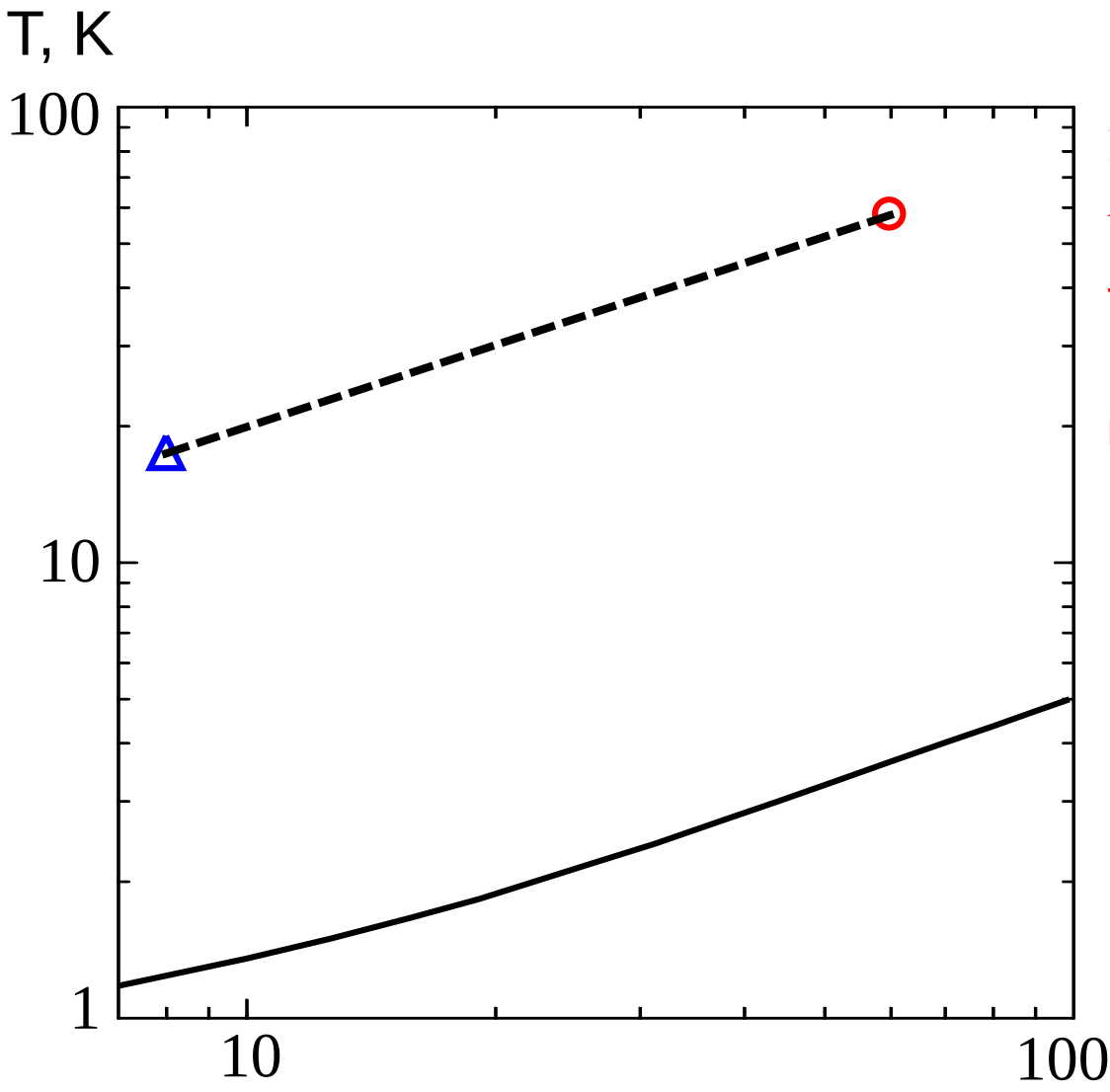
Mochalov M A et al. *JETP Lett.* **96** 158 (2012)

Mochalov M A et al. *JETP Lett.* **101** 519 (2015)

Mochalov M A et al. *JETP* **125** 948 (2017)

Mochalov M A et al. *JETP Lett.* **108** 656 (2018)

3.2. Алюминий



Perrot F, Dharma-wardana M W C *Phys. Rev. E* **52** 5352 (1995)

T_c = 58000 K,
P_c = 60 ГПа
ρ_c = 1.2 г/см^3

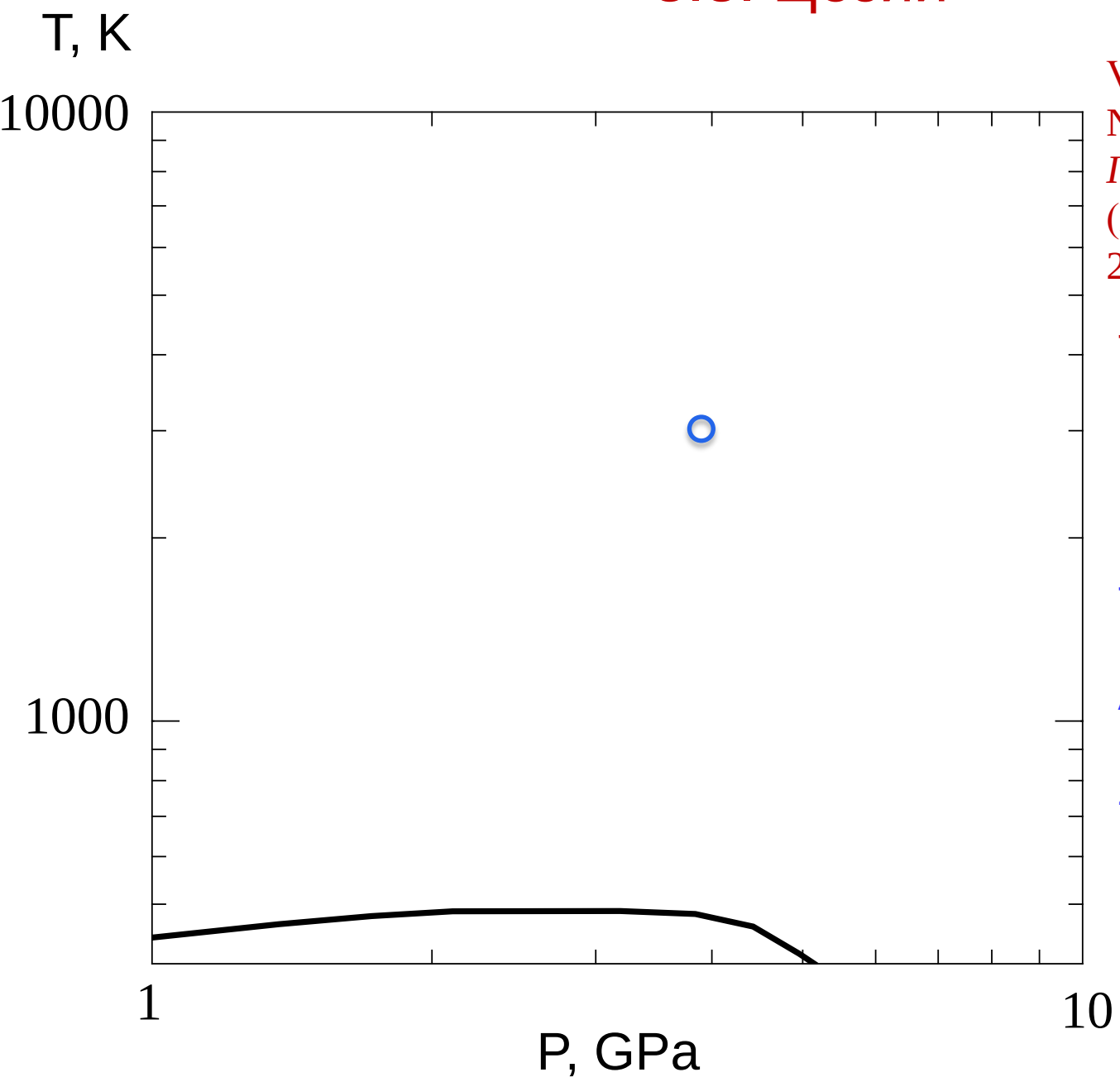
T = 17400 K, P = 8 ГПа

$\Delta\rho$ = 0.35 г/см^3

Z_1 = 1.2; Z_2 = 3

Линия плавления – расчет Karavaev A.V., Dremov V.V., Pravishkina T.A. *Comp. Mat. Sci.* **124** 335 (2016)

3.3. Цезий



Vorob'ev V S, Grushin A S, Novikov V G *Keldysh Institute Preprints* **No. 100** (M.: Keldysh Institute, 2016)

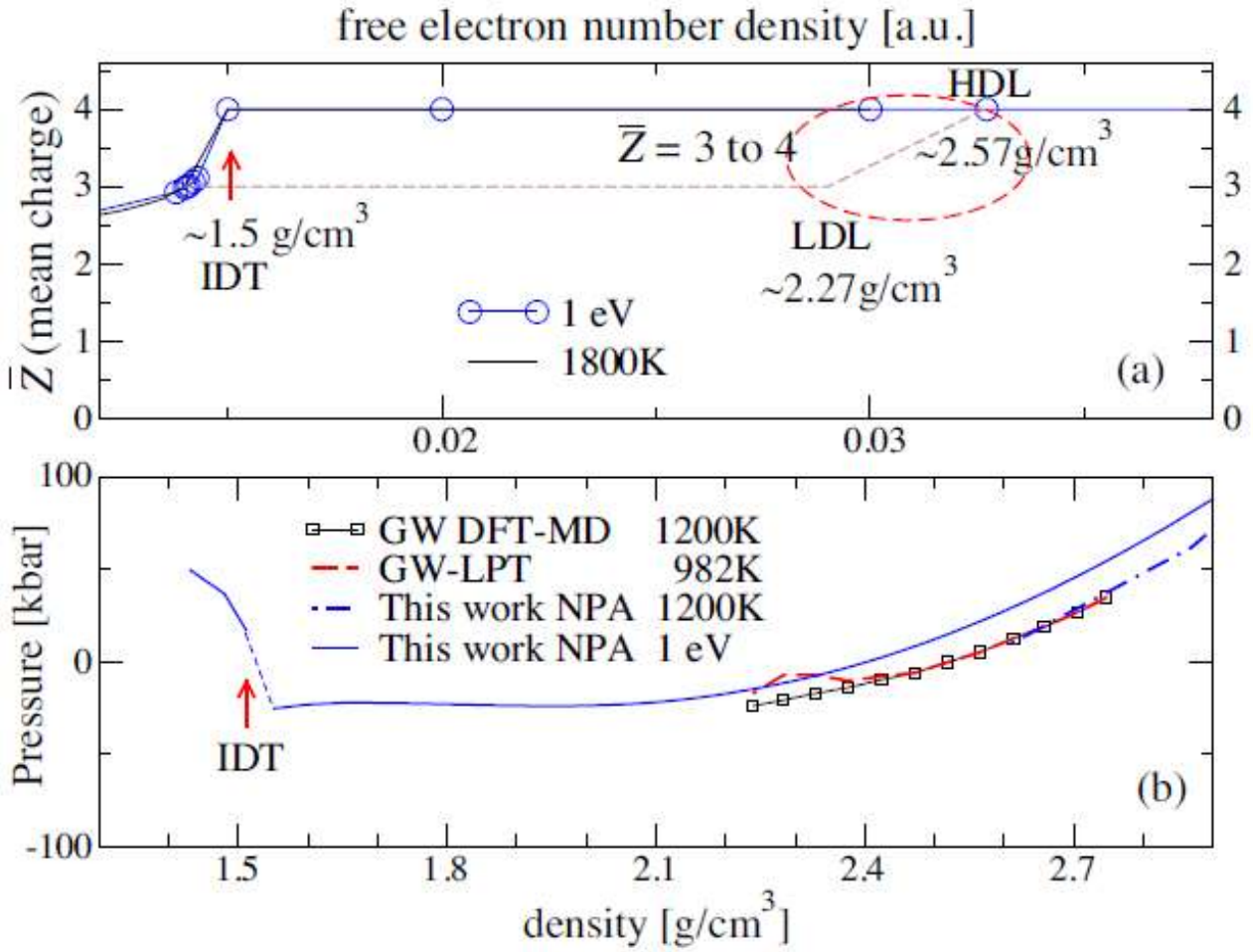
T_c = 6400 К,
P_c = 6,1 ГПа
ρ_c = 5.3 г/см^3

T = 3000 К, P = 3.8 ГПа

$\Delta\rho$ = 4 г/см^3

Z_1 = 1.5; Z_2 = 3.5;

3.4. Кремний



Dharma-wardana MW C, Klug D D, Remsing R C *Phys. Rev. Lett.* **125** 075702 (2020)

4. Выводы

I. Анализ совокупности экспериментальных данных и результатов моделирования позволяет сделать вывод, что фазовый переход флюид – флюид в разогретом плотном водороде/дейтерии является плазменным фазовым переходом.

II. Исследования ПФП в других веществах не выявили каких-либо особенностей, новых по сравнению с ПФП в водороде/дейтерии. При этом не все особенности ПФП в водороде/дейтерии воспроизводятся в других веществах.

(а) все переходы связаны с ионизацией, это обязательно, при этом рассмотрены как однократная, так и многократная ионизации,

(б) метастабильные ветви изотермы мало исследованы,

(в) кривые фазового равновесия T(P) могут иметь как отрицательный, так и положительный наклон,

(г) тройные точки лежат на линии плавления,

(д) переход может приводить не только к ионизации, но и к изменению структуры ионизованной фазы по сравнению с неионизованной,

(е) в твёрдом теле также наблюдаются фазовые переходы, связанные с ионизацией, с тройной точкой на линии плавления.