

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ВОДОРОДНОЙ И ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНОЙ ПЛАЗМЕ КВАНТОВЫМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Филинов В.С.¹, Бониц М.², Левашов П.Р.^{1*}, Фортос В.Е.¹,
Эбелинг В.³, Кох С.⁴

¹ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²РУ, Росток, Германия,
³Университет Гумбольдта, Берлин, Германия, ⁴МУ, Марбург, Германия
*pasha@ihed.ras.ru

Предположения о возможности существования фазовых переходов в неидеальной плазме, основанные на анализе моделей, справедливых для слабонеидеальной плазмы, известны достаточно давно [1]. Однако исследование подобных переходов экспериментально сильно затруднено. В данной работе представлены результаты численного моделирования термодинамических свойств сильнонеидеальной вырожденной водородной плазмы квантовым методом Монте-Карло [2]. На изотерме $T = 10$ кК обнаружен диапазон плотностей $\rho = 0.1\text{--}1.5$ г/см³, в котором расчетное давление плазмы становится отрицательным (следует отметить, что добавление в ячейку Монте-Карло 33% атомов гелия стабилизирует систему и ликвидирует аномалии в поведении давления). При температурах от $T = 50$ кК и выше этот эффект исчезает. Такое поведение термодинамических функций в методе Монте-Карло обычно имеет место при фазовом переходе. При визуализации ячейки Монте-Карло в этой области обнаруживается образование протонных кластеров с локализованными в них электронами. Если в расчете запретить образование кластеров, то полная энергия системы повышается. Как показывают эксперименты по ударному сжатию водорода [3, 4], в диапазоне плотностей $\rho = 0.3\text{--}0.5$ г/см³ происходит переход из низко- в высокопроводящее (квазиметаллическое) состояние с чрезвычайно резким возрастанием проводимости (примерно на 5 порядков). Аналогичный фазовый переход с ростом проводимости наблюдается экспериментально в лазерно-возбуждаемой электронно-дырочной плазме полупроводников при низких температурах [5]. Расчеты квантовым методом Монте-Карло достаточно хорошо воспроизводят фазовую границу такого перехода при температурах ниже критической.

1. Норман Г.Э., Старостин А.Н. // ТВТ. 1970. Т.8. С.413.
2. Замалин В.М., Норман Г.Э., Филинов В.С. Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. М.: Наука, 1977.
3. Weir S.T., Mitchell A.C., Nellis W.J. // Phys. Rev. Lett. 1996. V.76. P.1860.
4. Ternovoi V.Ya., Filimonov A.S., Fortov V.E., Kvitov S.V., Nikolaev D.N., Pyalling A.A. // Physica B. 1999. V.265. P.6.
5. Электронно-дырочные капли в полупроводниках / Под ред. Джеффриса К.Д., Келдыша Л.В. М.: Наука, 1988.