

Научно-координационная сессия «Исследование неидеальной плазмы»
(26 ноября 2008, Президиум РАН, пл. Гагарина 32а, Москва)

МЕТАЛЛИЗАЦИЯ ГИДРИДА АЛЮМИНИЯ AlH_3 ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ СТУПЕНЧАТОГО УДАРНОГО СЖАТИЯ

А.М. Молодец¹, Д.В. Шахрай¹, А.Г. Храпак²

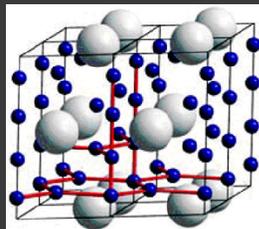
⁻¹ *Институт проблем химической физики, РАН, Черноголовка*

⁻² *Объединённый институт высоких температур, РАН, Москва*

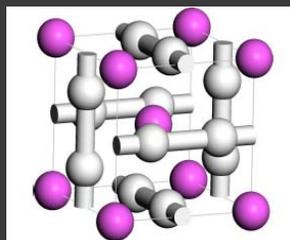
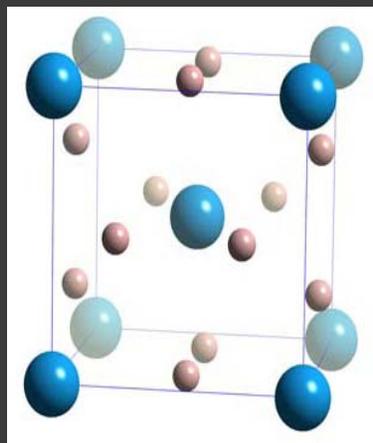
Черноголовка-Москва-2008

МЕТАЛЛИЗАЦИЯ «ХИМИЧЕСКИ СЖАТОГО» ВОДОРОДА В ГИДРИДЕ АЛЮМИНИЯ AlH_3

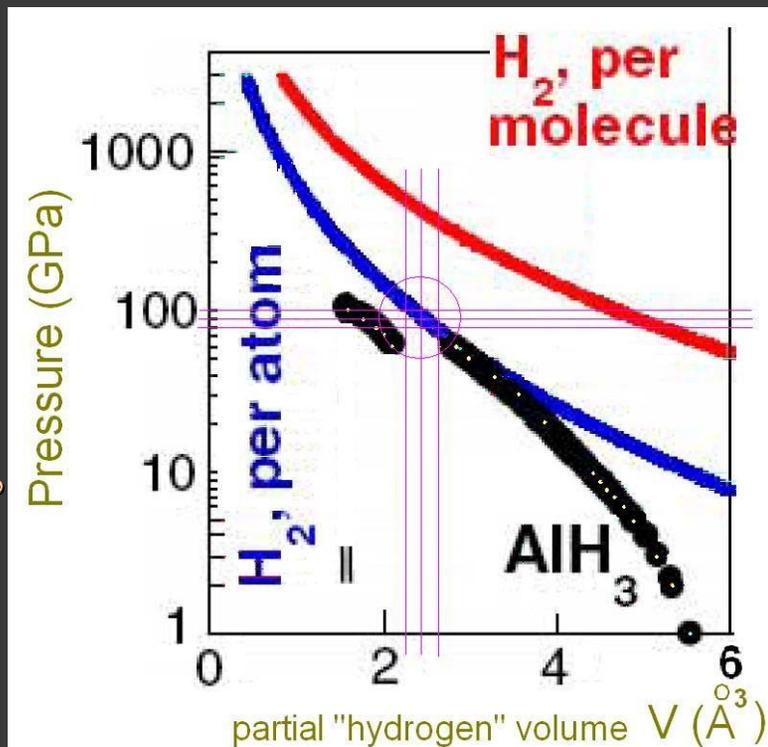
N. W. Ashcroft,
Phys. Rev. Lett.
92, 187002
2004.



C. J. Pickard and
R. J. Needs, Phys.
Rev. B 76, 44114
2007.



I. Goncharenko et al
Phys. Rev. Lett. 100,
045504
2008.



СОДЕРЖАНИЕ ДОКЛАДА

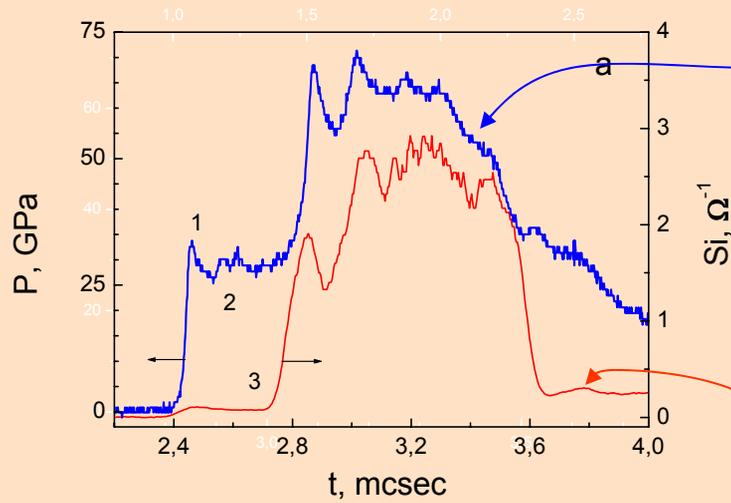
МЕТОДИКИ

- Первичная экспериментальная информация
- Используемое уравнение состояния
- Математическое моделирование

РЕЗУЛЬТАТЫ

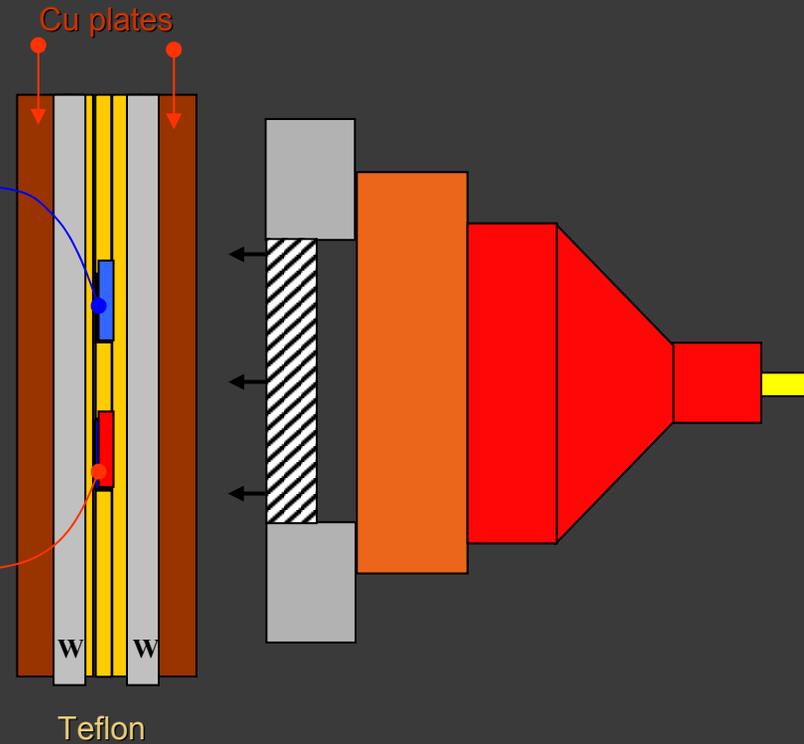
- Полупроводниковый механизм проводимости алана AlH_3 в ударных волнах
- Проводимость AlH_3 в области металлизации H_2 в ударных волнах
- Металлизация ударно сжатого AlH_3 может быть истолкована в рамках представлений о так называемой «диэлектрической катастрофе».

ПЕРВИЧНАЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

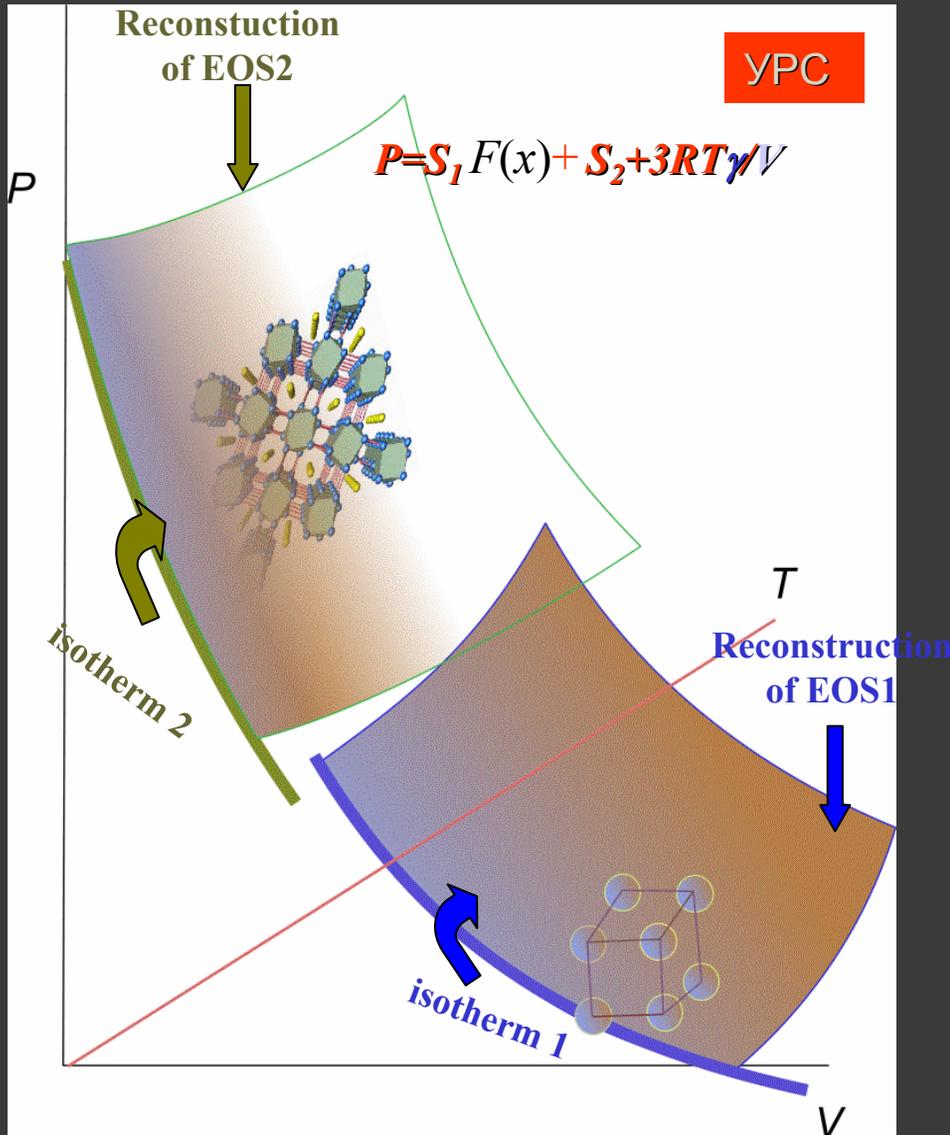


manganin gauge

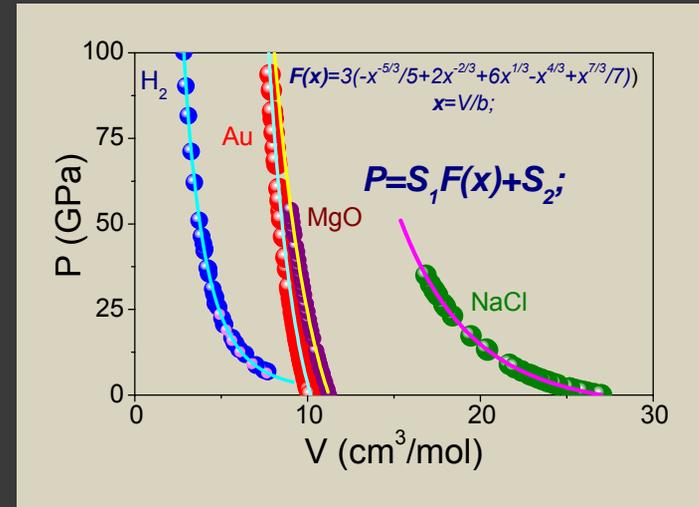
sample
 AlH_3



УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ РЕКОНСТРУИРУЕТСЯ по ИЗОТЕРМЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ

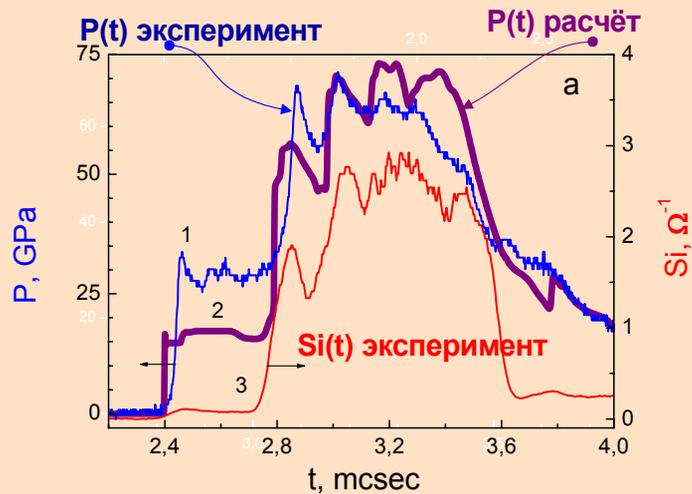
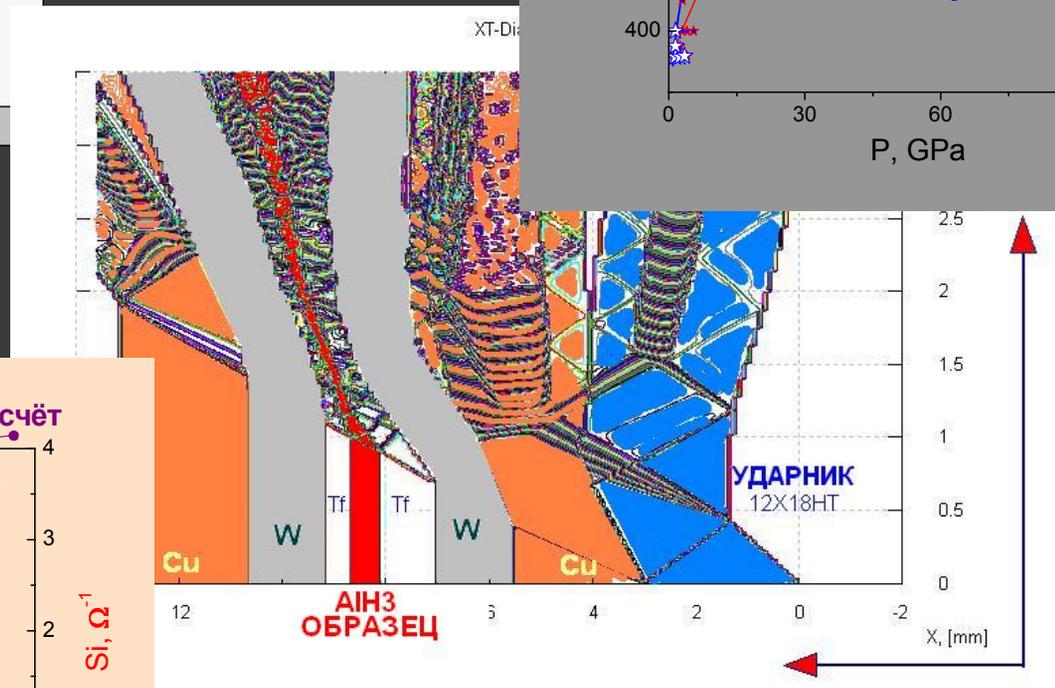
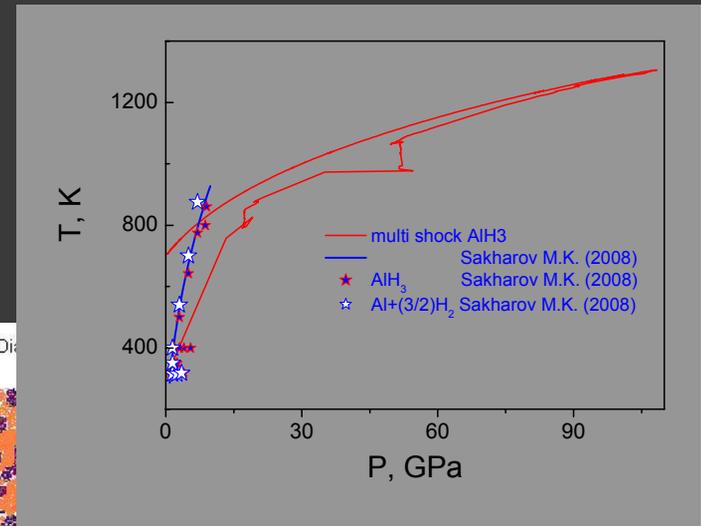
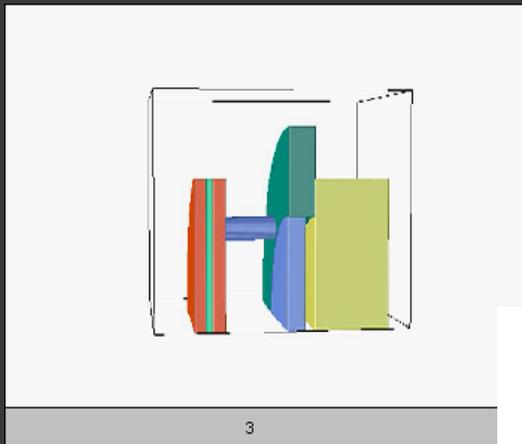


ИЗОТЕРМА



Закон подобия изотерм –
основа реконструкции
уравнения состояния

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ AlH_3



ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЙ МЕХАНИЗМ ПРОВОДИМОСТИ

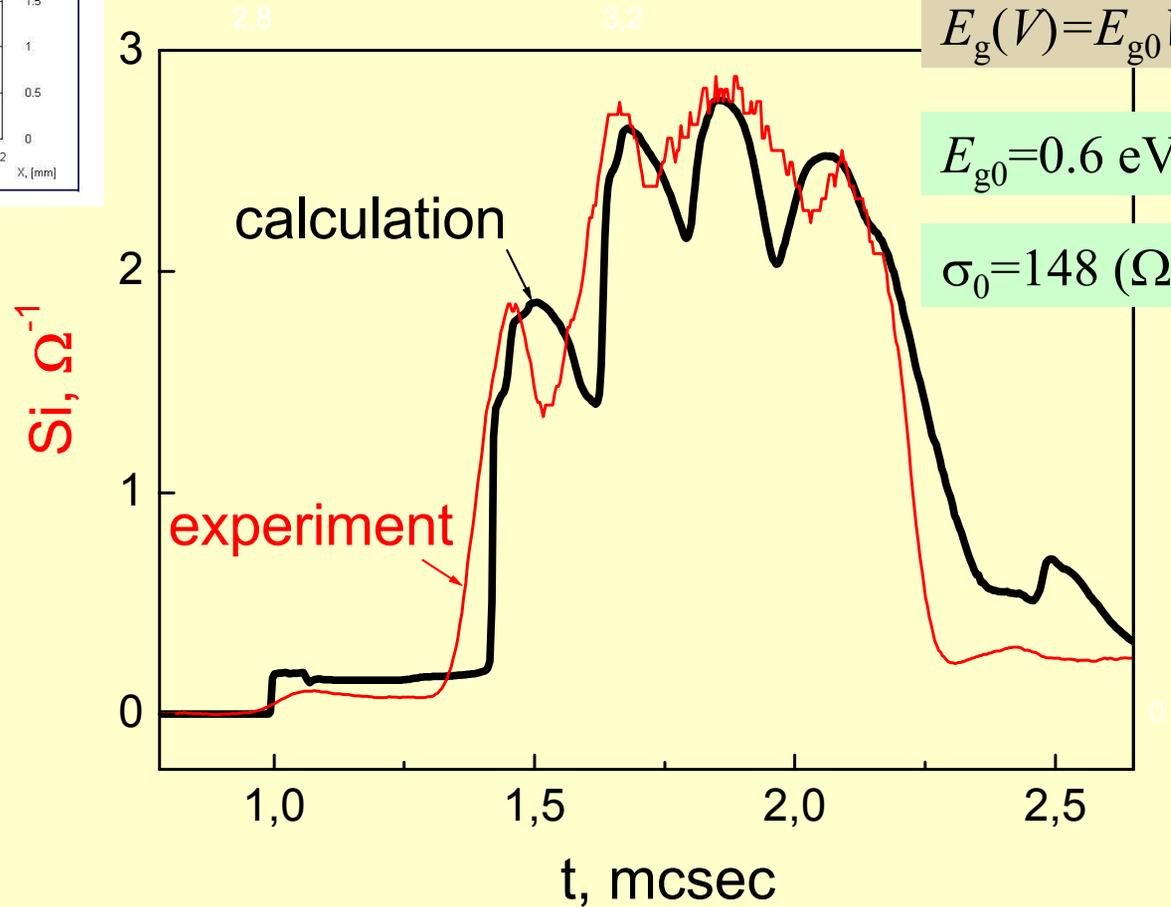
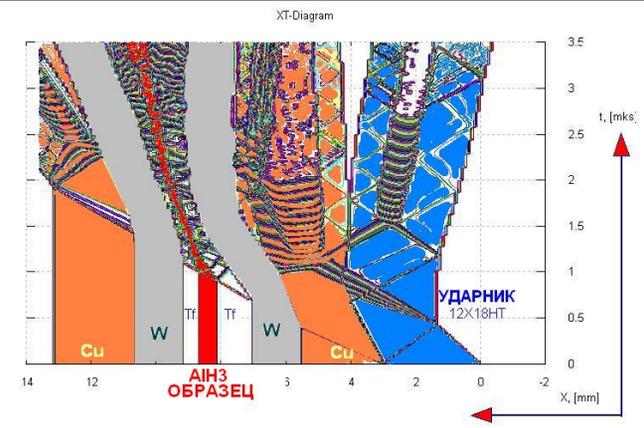


$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_g(V)}{2kT}\right)$$

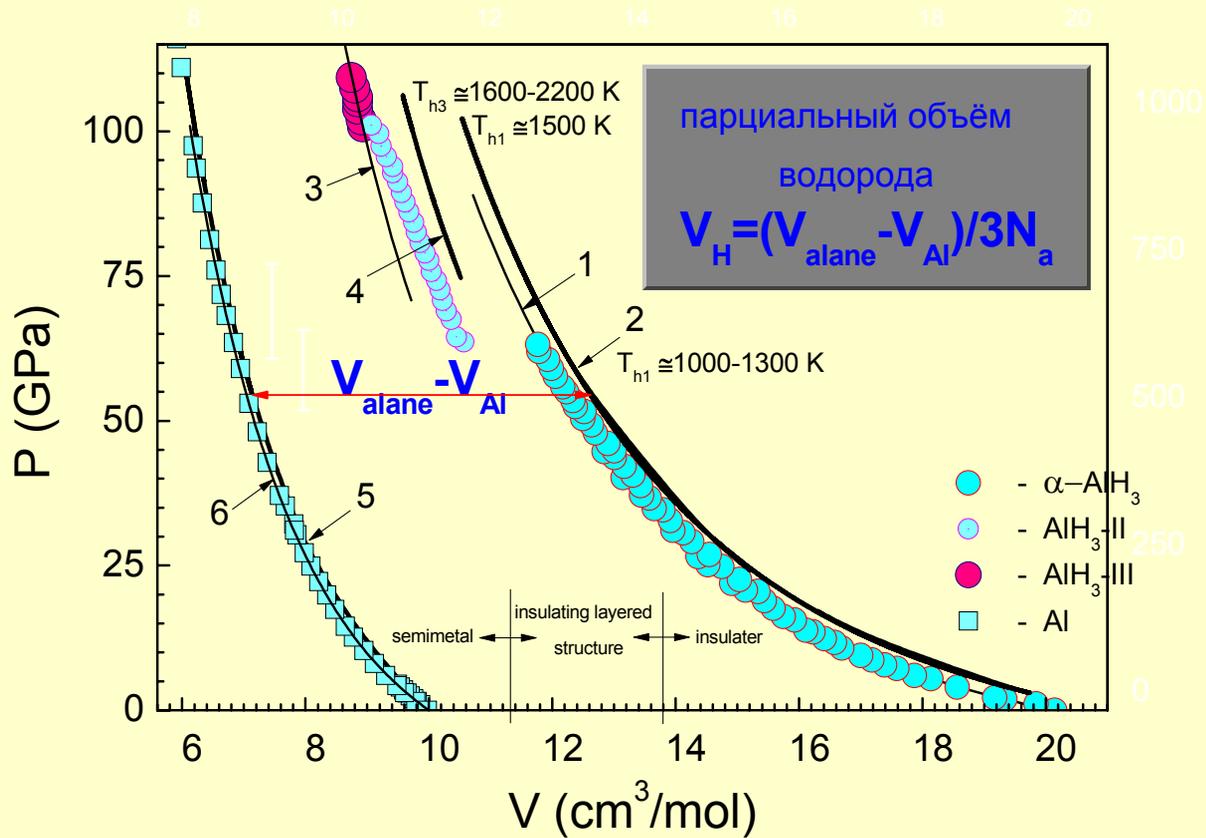
$$E_g(V) = E_{g0} V/V_0$$

$$E_{g0} = 0.6 \text{ eV}$$

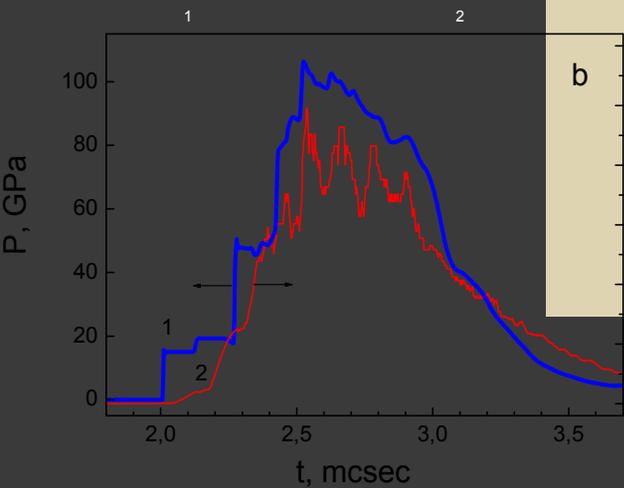
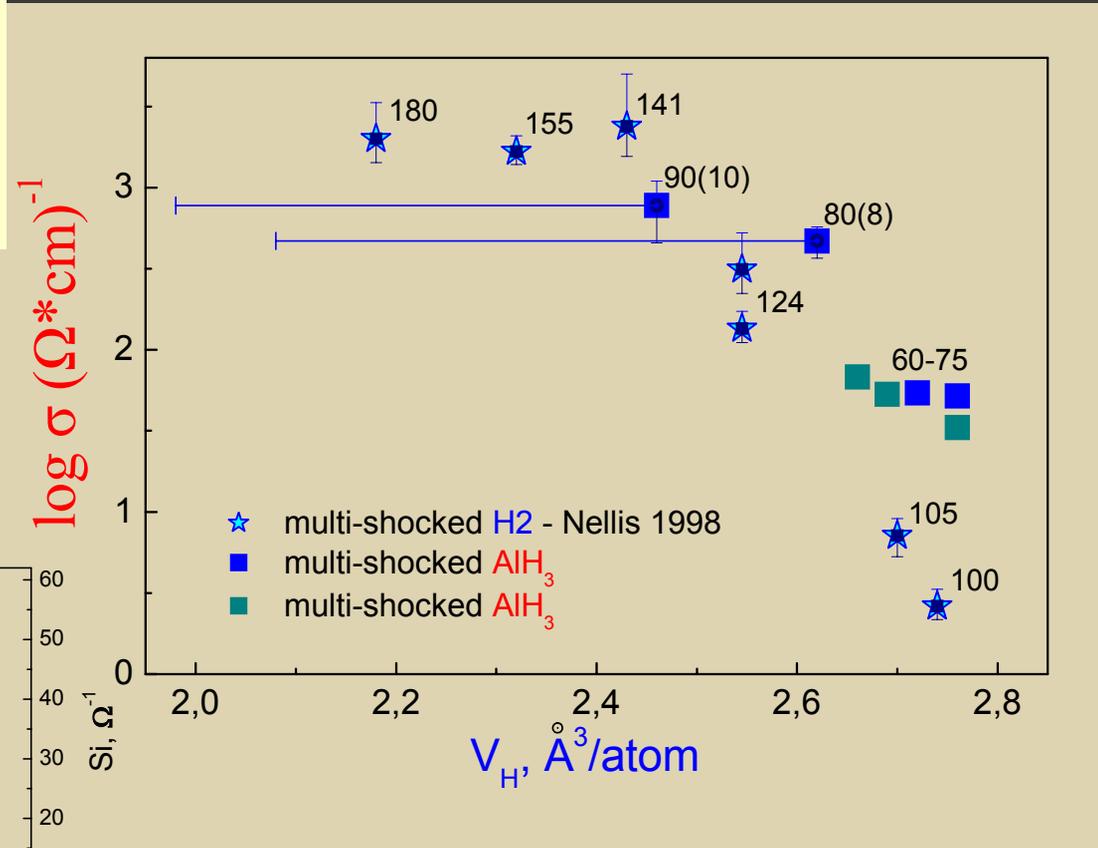
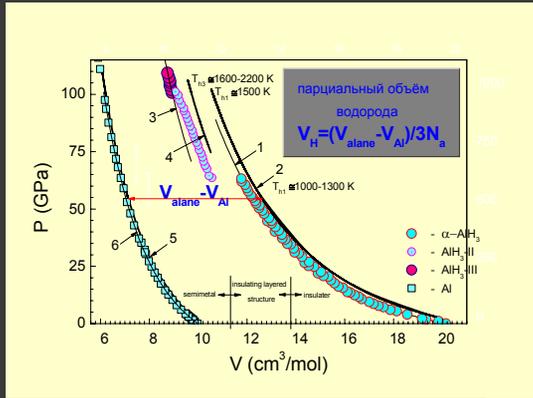
$$\sigma_0 = 148 (\Omega\text{cm})^{-1}$$



ИЗОТЕРМЫ, ФАЗОВЫЕ ТРАЕКТОРИИ УДАРНОГО СЖАТИЯ АЛАНА и парциальный объём водорода V_H



ПРОВОДИМОСТЬ AlH_3 в области металлизации H_2 ПРИ УДАРНОМ СЖАТИИ



«ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ КАТАСТРОФА» И ПЕРЕХОД ДИЭЛЕКТРИК МЕТАЛЛ В AlH_3 ПРИ УДАРНОМ СЖАТИИ

I. Формула Клаузиуса-Моссотти для диэлектрической проницаемости диэлектрика $\varepsilon(n)$ (b -индекс рефракции, α -поляризуемость):

$$\varepsilon = \frac{1 + 2b}{1 - b}, \quad b = \frac{4\pi}{3} \alpha n$$

Диэлектрики $b < 1$, Металлы $b > 1$.

II. Критерий Херцфельда:

металлизация происходит при $b \rightarrow 1$ или $\varepsilon \rightarrow \infty$ («диэлектрическая катастрофа»).

III. В конденсированной фазе $\text{AlH}_3 \rightarrow \text{Al}^{3+} + 3\text{H}^-$:

$$\alpha_{\text{AlH}_3} \cong \alpha_{\text{Al}^{3+}} + 3\alpha_{\text{H}^-} \cong 3\alpha_{\text{H}^-}$$

По известным значениям ε с помощью формулы Клаузиуса-Моссотти определяем α_{H^-} .

IV. Согласно критерию Херцфельда и нашей оценке α

$$\alpha_{\text{AlH}_3} \cong 3\alpha_{\text{H}^-} \cong 28.8 \text{ а.е.}$$

металлизация должна наступать при $\rho = 2.8 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$, что хорошо согласуется с экспериментом.

	ε	α_{H^-}
LiH	4.28	12.4
NaH	3.03	18.4
MgH ₂	3.90	11.9
AlH ₃	4.43	9.6

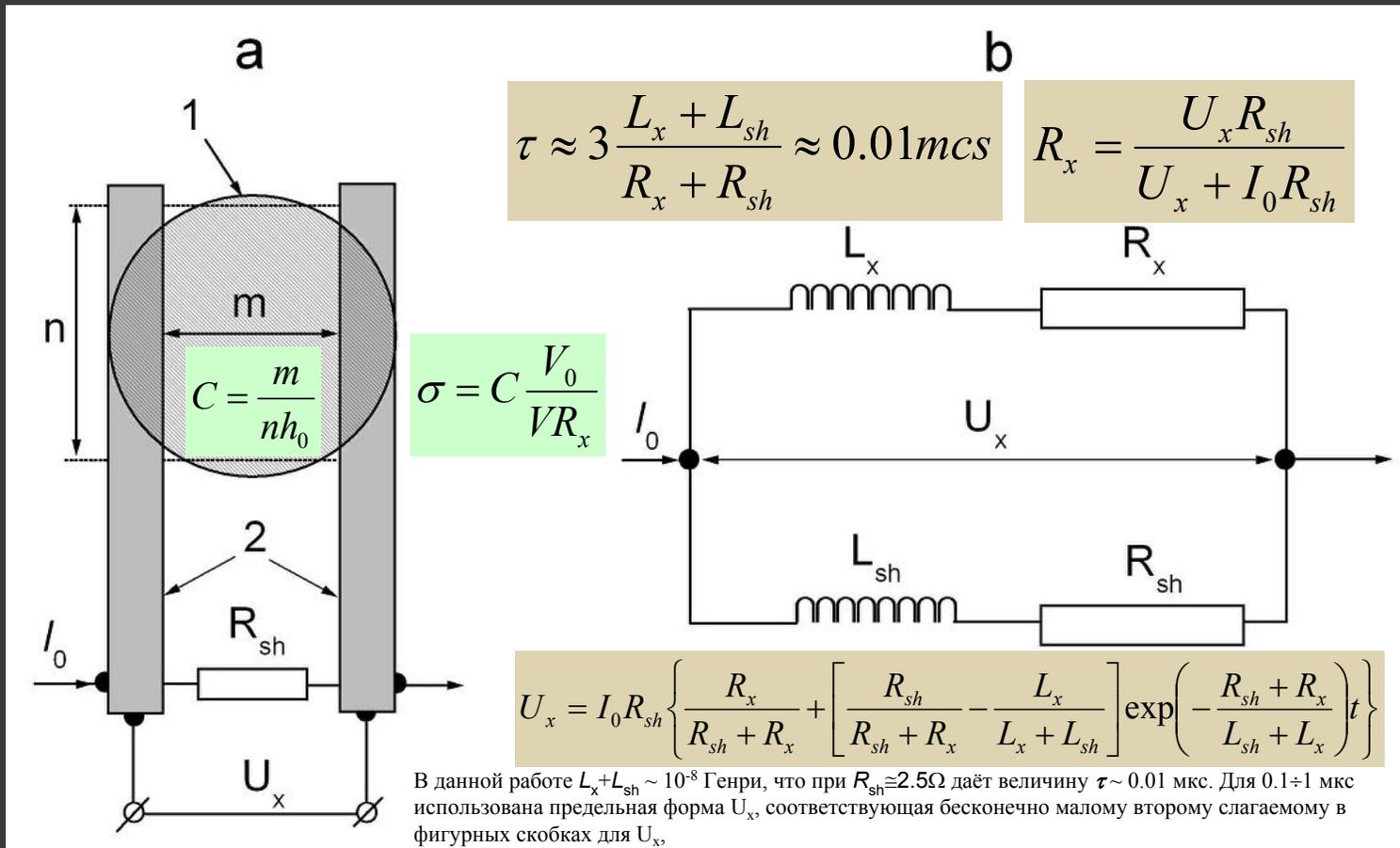
ВЫВОДЫ

- В области давлений ≈ 60 ГПа и температур ≈ 1000 К гидрид алюминия AlH_3 (алан) обладает полупроводниковым механизмом электропроводности .
- В области высоких давлений (до 90 ГПа) и температур (до 2000 К) объёмно-температурная зависимость проводимости алана AlH_3 сопоставима с металлической электропроводностью водорода H_2 .
- Металлизация ударно сжатого AlH_3 может быть истолкована в рамках представлений о так называемой «диэлектрической катастрофе» с учетом существенного различия состояний алана в молекулярной и конденсированной фазах.

Работа выполнена при поддержке программы Президиума РАН «Исследование вещества в экстремальных условиях»

Авторы благодарны В.Ф. Дегтярёвой и Е.М. Анфельбауму за плодотворные обсуждения

ИЗМЕРИТЕЛЬНАЯ ЯЧЕЙКА ДЛЯ ОБРАЗЦОВ AlN_3 ПРИ УДАРНОМ СЖАТИИ



Измерительная ячейка (а) и эквивалентная электрическая схема датчика проводимости образца (б). а: 1 – дискообразный образец толщиной $h_0 \approx 0.5$ мм и эффективными размерами $m = 3 \div 5$ мм и $n = 6 \div 8$ мм, 2 – медные токовводы, R_{sh} – шунтирующее сопротивление, б: R_x – сопротивление образца, L_x – inductance of the sample, R_{sh} – сопротивление шунтирующего сопротивления, L_{sh} – inductance of the shunt resistor, U_x – напряжение на медных токовводах. C – константа ячейки.

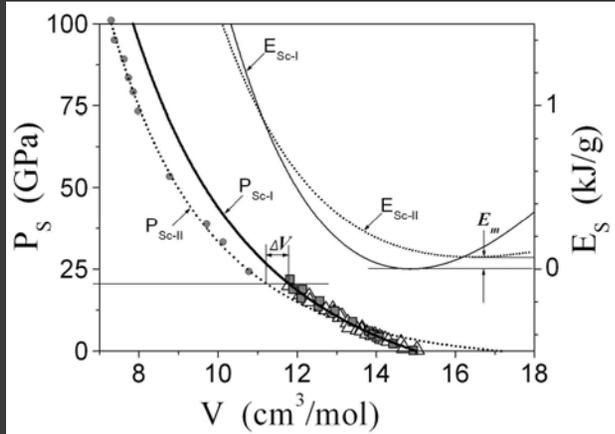
РЕКОНСТРУКЦИЯ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ Sc-I и Sc-II

$$P - P_S = \frac{\gamma}{V} (E - E_S)$$

$$\gamma = \frac{2}{3} + \frac{2x}{1-x}$$

$$x = \frac{V}{v_S}$$

$$P_S = S_1 F_x + S_2$$

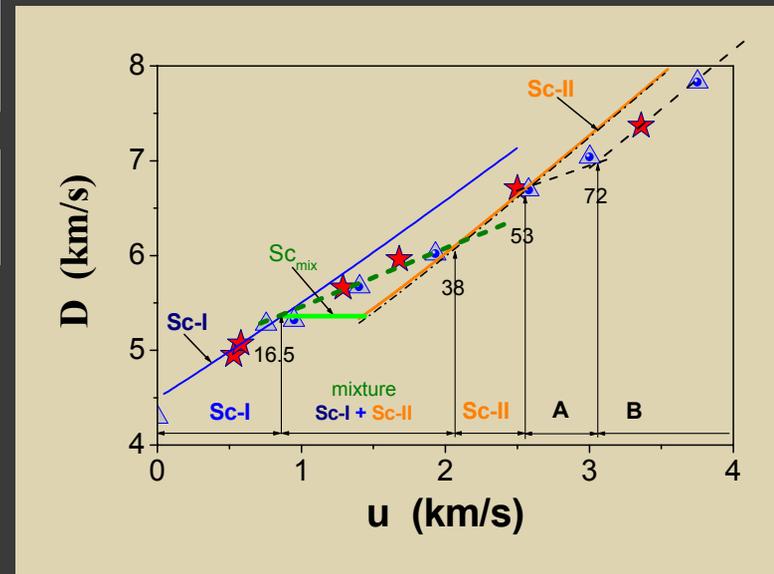


- $P_S = P_S(V)$, $E_S = E_S(V)$ – pressure and energy on isotherm;
- S_1 , S_2 , v_S – fitting parameters of isotherm
- E_m - shift $E_S(V)$ Sc-II regard to $E_S(V)$ Sc-I;
- $x_0 = V_0/v_S$, $V_0 = V(P_0, T_0)$;
- $P_0 = 1 \text{ atm}$, $T_0 = 298 \text{ K}$.

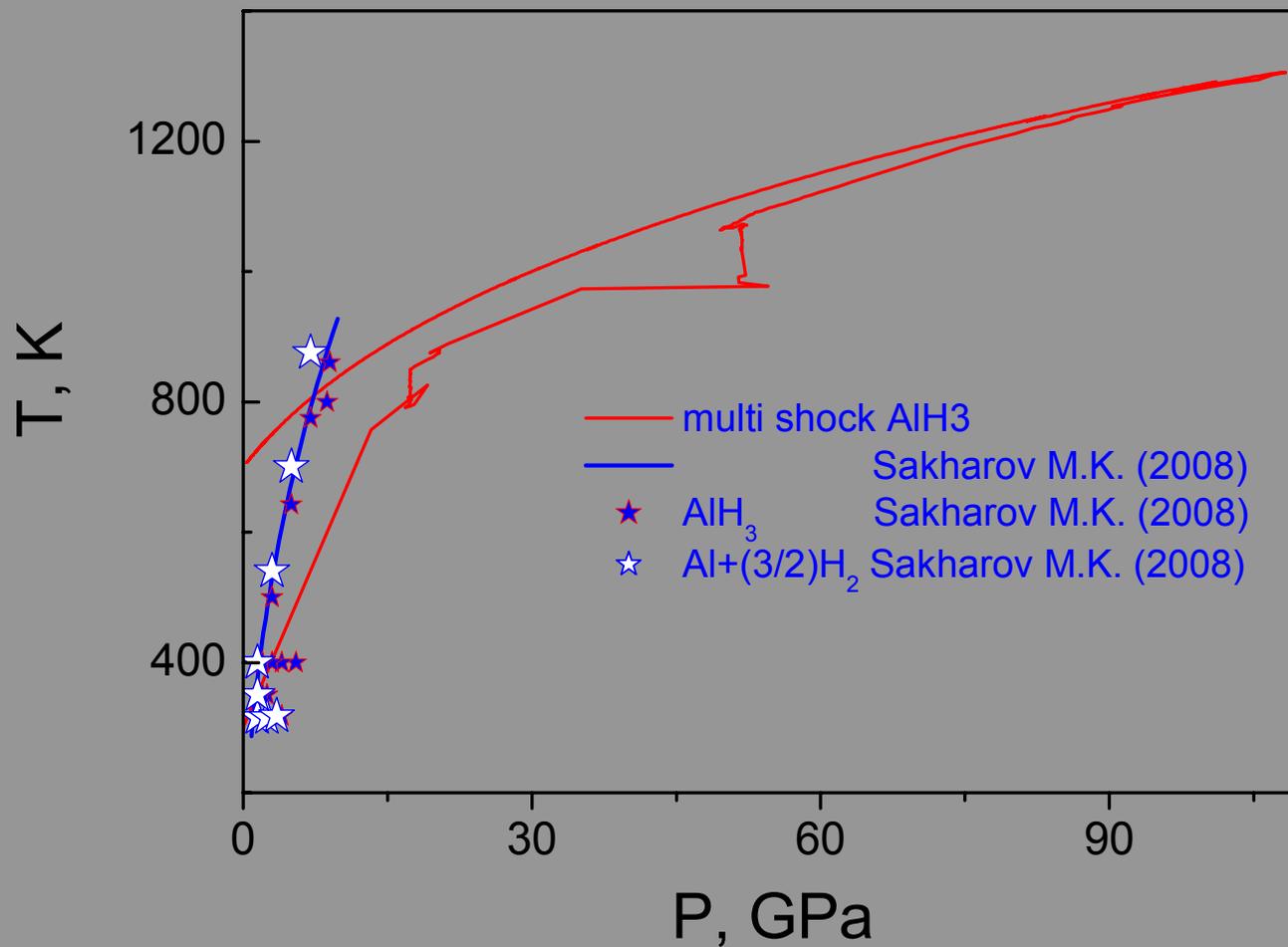
$$E_S = -v_S (S_1 H_x + S_2 x) + S_3 E - 3RT_0 \ln \left(\left(\frac{1-x}{1-x_0} \right)^2 \left(\frac{x_0}{x} \right)^{2/3} \right) + E_m$$

$$F_x = 3 \left(-\frac{1}{5} x^{-5/3} + 2x^{-2/3} + 6x^{1/3} - x^{4/3} + \frac{1}{7} x^{7/3} \right)$$

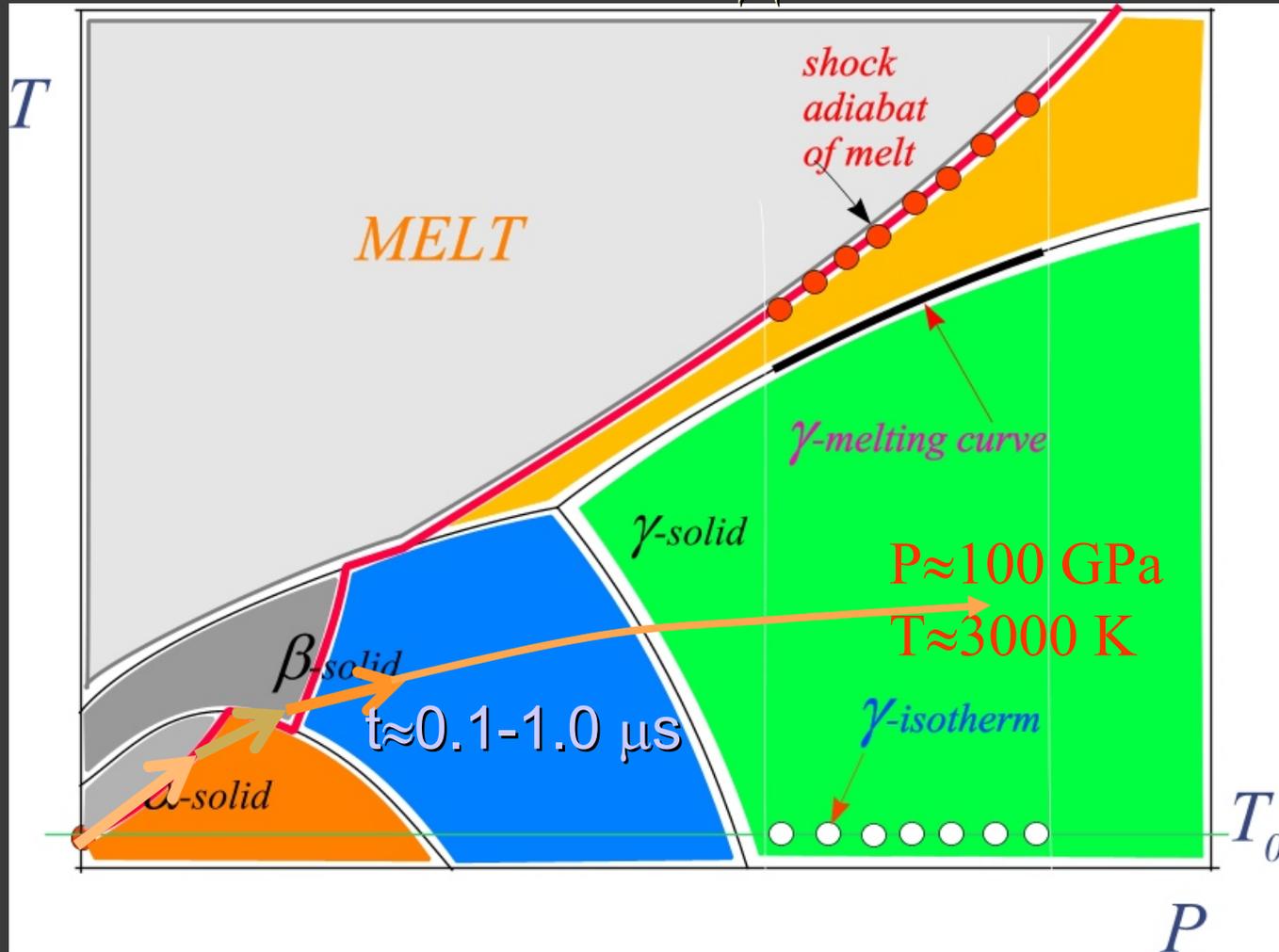
$$H_x = 9 \left(\frac{1}{10} x^{-2/3} + 2x^{1/3} + \frac{3}{2} x^{4/3} - \frac{1}{7} x^{7/3} + \frac{1}{70} x^{10/3} \right)$$



ФАЗОВАЯ ТРАЕКТОРИЯ AlH_3 в Т-Р координатах



РАБОЧАЯ ОБЛАСТЬ на ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЕ ТИПИЧНОГО ТВЁРДОГО ТЕЛА



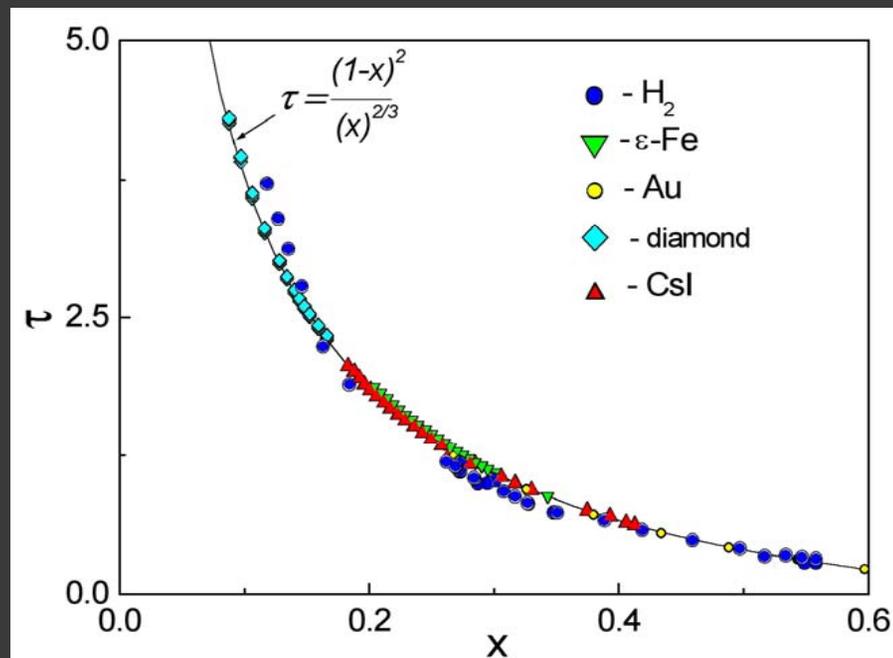
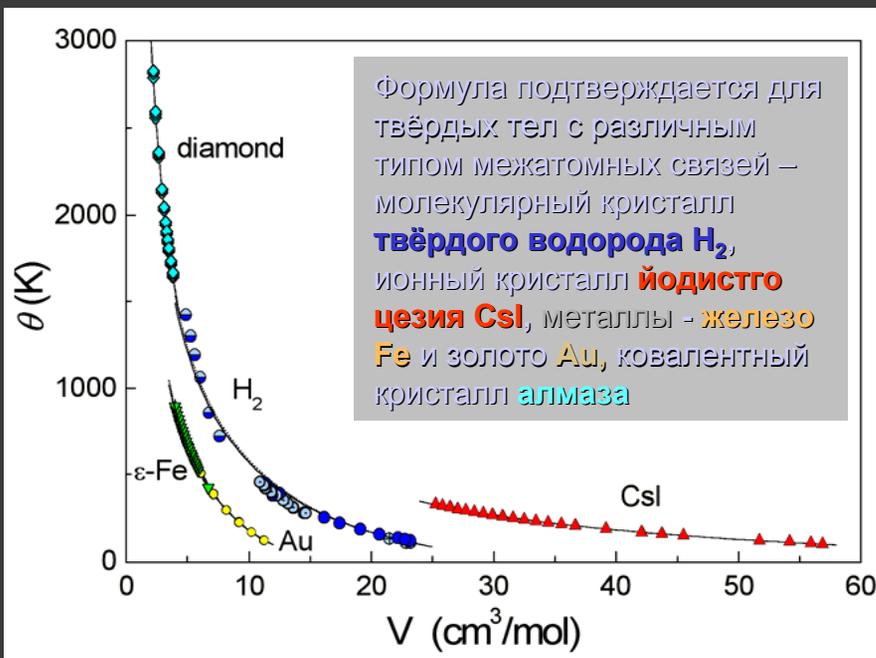
Наше рабочее пространство расположено между ударной адиабатой однократного сжатия и изотермой высокого давления. В эксперименте мы попадаем в неё серией последовательных ударных волн за времена 0,1-1 микросекунд. Это время достаточно велико, чтобы вещество в конечном состоянии считать находящимся в термодинамическом равновесии и использовать обычные уравнения состояния

$$P = P(V, T).$$

ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

Оказывается, что объёмные зависимости температуры Дебая $\theta(V)$ различных твёрдых тел подчиняются единой функциональной зависимости

$\tau(x) = \theta/\theta_a = (1-x)^2 x^{-2/3}$, где $\theta_a = \theta_0 a^{4/3}/(a-1)^2$; $x=V/v$; $a=1+2/(\gamma_0-2/3)$; γ_0 – параметр Грюнрайзена если использовать характеристический объём $v=aV_0$



Эта формула для $\theta(V)$ соответствует объёмной зависимости коэффициента Грюнрайзена $\gamma=2/3+2x/(1-x)$