

Холодное плавление водорода при мегабарных давлениях

В. С. Воробьев, В.Г Новиков

Вопрос о состоянии водорода при мегабарных давлениях является одной из главных проблем в физике высоких давлений, физике планет и астрофизике. Существенный прогресс в этом направлении был достигнут благодаря измерениям температуры плавления при рекордно высоких давлениях (~ 300 - 400 ГПа), полученных в алмазных наковальнях [1-2]. Оказалось, что кривая плавления водорода при давлениях < 100 ГПа обнаруживает нормальный ход—температура плавления растет с ростом давления и происходит фазовый переход молекулярный кристалл (МК)—молекулярная жидкость. Однако при больших давлениях температура плавления, достигнув максимума (~ 900 К), начинает падать, снижаясь практически до нуля при давлении ~ 600 ГПа. Такая зависимость температуры плавления от давления характерна для аномального плавления, когда плотность жидкой фазы на линии плавления больше плотности твердой, была ранее обнаружена для некоторых металлов, инертных газов. Для воды, например, она начинается сразу за тройной точкой. Сведения о состоянии жидкой фазы, в которую переходит твердый МК, противоречивы [3]. В настоящем сообщении показано, что с состоянием МК при нулевых температурах и давлениях ~ 500 - 600 ГПа может конкурировать другое менее упорядоченное состояние. Для описания последнего используется модель электронейтральных ячеек Вигнера—Зейтца. В такой ячейке каждый водородный ион находится в центре и окружен связанными и свободными электронами. Рассчитывается полная энергия электрона в ячейке с учетом кинетической энергии связанных и свободных состояний, взаимодействия электронов с центральным ионом, электрон—электронного и обменного взаимодействий. Показано, что при малых плотностях термодинамически более выгодным является состояние МК. Однако с ростом плотности внутренняя энергия состояния, описываемая на основе данной модели, становится ниже внутренней энергии МК. Обсуждаются методы распространения модели на отличные от нуля температуры.

1. C. Narayana, H. Luo, J. Orloff, and Ruoff, *Nature* 393,46, (1998).
2. P. Loubeyre, F. Occelli, and R. LeToullec, *Nature*, 416, 613, (2002).
3. В. В. Кечин, *Письма в ЖЭТФ*, 79, 46, (2004).