

# Ячеечная модель для описания жидкого 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. 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 до малых значений при давлении ~ 400 ГПа. Сведения о состоянии жидкой фазы, в которую переходит твердый МК, противоречивы. Можно предположить, что с состоянием МК при нулевых температурах и давлениях ~ 300-400 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. На рис. представлена кривая плавления водорода. 1-9 экспериментальные и расчетные данные разных авторов. Кривая 1 – расчет по предлагаемой модели.

