

ДИССОЦИАЦИЯ И ПЛАВЛЕНИЕ ВОДОРОДА ПРИ МЕГАБАРНЫХ ДАВЛЕНИЯХ

В.С. Воробьев, * В.Г. Новиков, А.Л. Хомкин, А.С. Шумихин

Объединенный институт высоких температур РАН,
* Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Предложены модели, объясняющие аномальный характер диссоциации и плавления плотного жидкого или твердого молекулярного водорода при мегабарных давлениях. Для описания диссоциации предположено, что свободные, диссоциированные атомы взаимодействуют путем квантового межэлектронного обмена. Вычислена плотностная зависимость энергии связи атома водорода в такой квазижидкости. Показано, что переход из молекулярного флюида в атомарную жидкость имеет характер фазового перехода первого рода с критическими параметрами $P_c = 72 \text{ GPa}$, $T_c = 10500 \text{ K}$, $\rho_c = 0.5 \text{ g/cc}$. Обнаружена возможность метастабильного существования атомарной жидкости водорода в диссоциированном молекулярном флюиде при разгрузке давления.

Для описания плавления твердого молекулярного водорода развита модель, основанная на ячеечном приближении, в которой учтена локализация электронов и вырождение протонов. При низких температурах и давлениях молекулярный водород находится в твердом или жидком состоянии. Внешнее давление дестабилизирует молекулярные связи, и система переходит в более разупорядоченное состояние со свободными электронами. Это новое разупорядоченное состояние энергетически более выгодно и имеет более низкую свободную энергию. Недавно обнаруженные аномалии кривой плавления водорода указывают на возможность перехода из молекулярного состояния в более разупорядоченное состояние. Ниже давления $\sim 100 \text{ ГПа}$ кривая плавления имеет нормальное поведение – температура плавления монотонно растет с ростом давления. Выше линии плавления находится молекулярная жидкость (МЖ), ниже – молекулярное твердое тело. Для давлений выше 100 ГПа температура плавления сначала достигает максимума, а затем начинает уменьшаться. Отрицательный наклон dT/dP был обнаружен в первопринципных теоретических расчетах [1, 2] и эксперименте Лубейра с алмазными наковальнями [3]. Экстраполяция кривой плавления в область более высоких давлений и более низких температур показывает, что при давлениях выше 400 ГПа и нулевых температурах водород может быть в жидком состоянии. Это интересное физическое явление (холодное плавление) было предсказано в [4, 5] для квантовой системы точечных зарядов на однородном компенсирующем фоне зарядов противоположного знака. Предложенная выше модель подтверждает аномальный характер плавления твердого молекулярного водорода при мегабарных давлениях.

1. S. Scandolo, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., **100**, 3051, 2003.
2. D. Hohl, V. Natali, D. M. Ceperley, and R. M. Martin, Phys. Rev. Lett. **71**, 541 (1993).
3. R. Loubeyre, F. Occelli, and R. LeToullec, Nature (London) **416**, 613, (2002).
4. D.A. Kirzhnits, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **38**, 503 (1960) [Sov. Phys. JETP **11**, 344 (1960)].
5. A.A. Abrikosov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **39**, 1797 (1960) [Sov. Phys. JETP, **12**, 1259 (1961)].