

Научно-координационная Сессия
"Исследования неидеальной плазмы"
Президиум РАН, Москва, 23.11 - 24.11, 2011

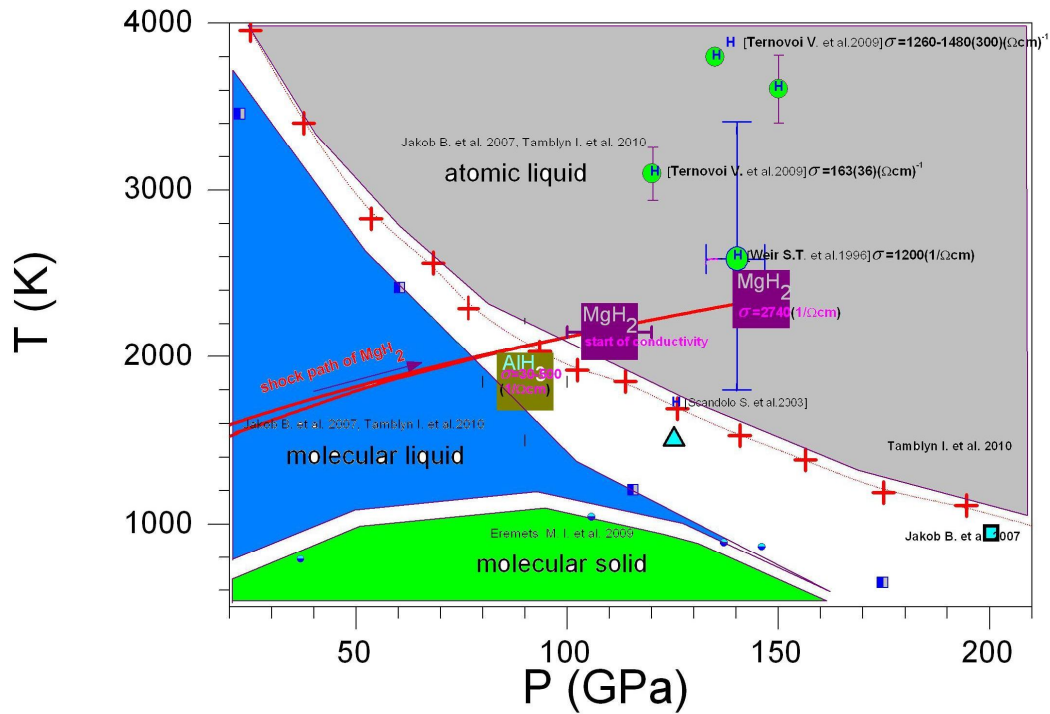
**Электрические и термодинамические свойства
гидрида лития (LiH) и оксида марганца (MnO)
при высоких давлениях и температурах.**

*А.М. Молодец, Д.В. Шахрай, В.В. Авдонин, А.А. Гольшев
Институт проблем химической физики РАН*

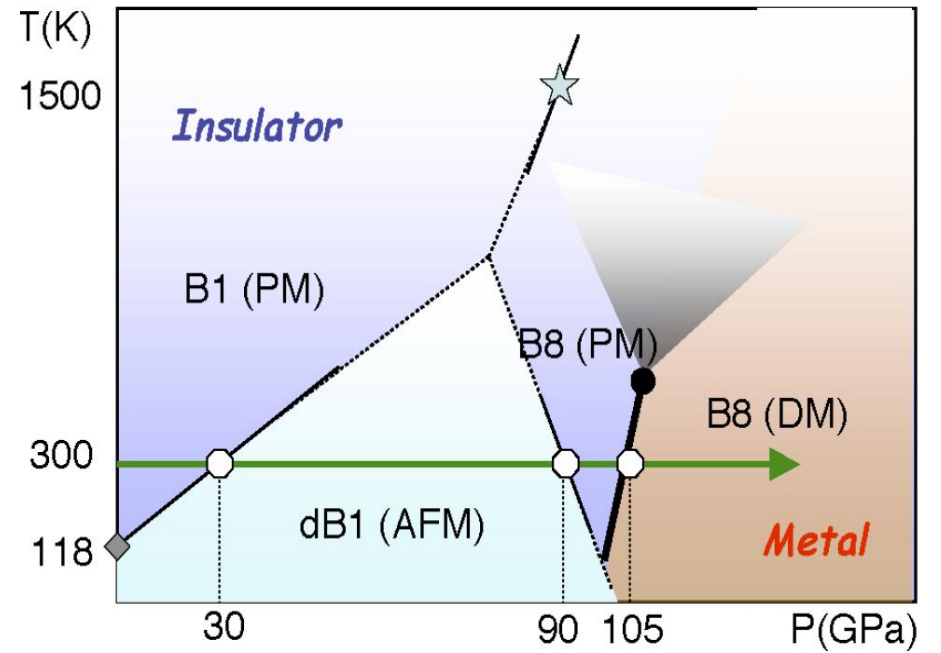
Черноголовка-2011

ВВЕДЕНИЕ

УДАРНОСЖАТЫЕ ГИДРИДЫ НА ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЕ ВОДОРОДА



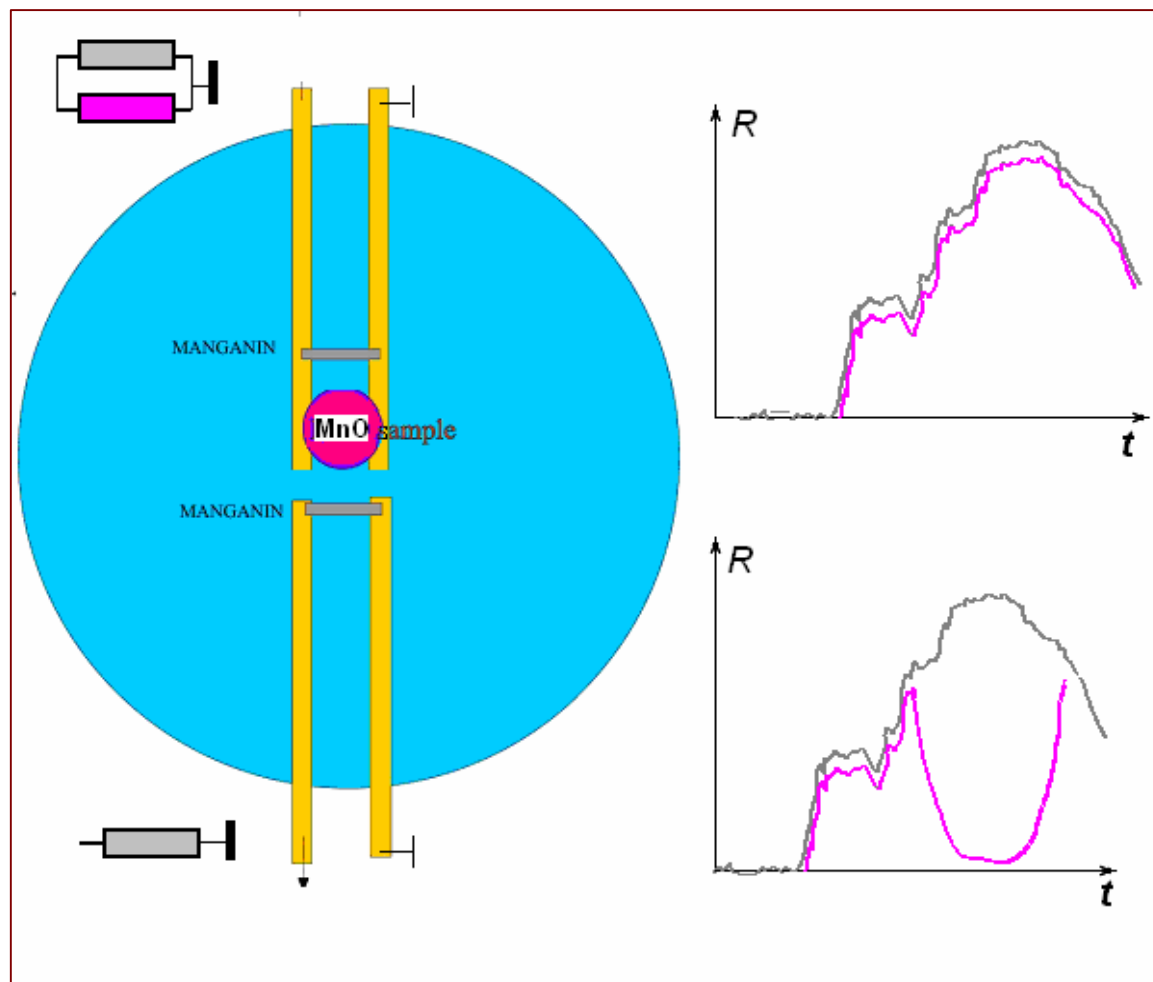
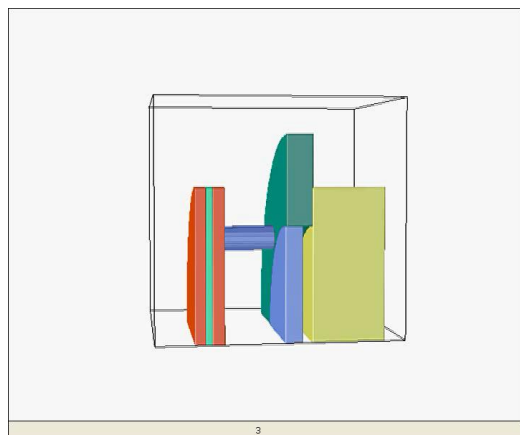
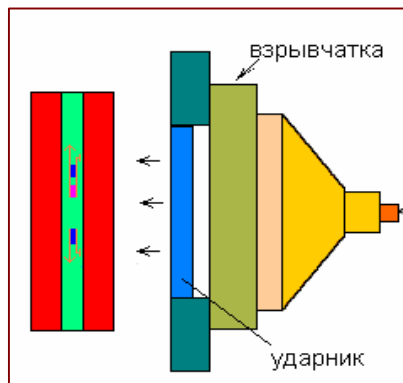
КОНЦЕПТУАЛЬНАЯ ДИАГРАММА MnO [C.S.Yoo // PRL2005]





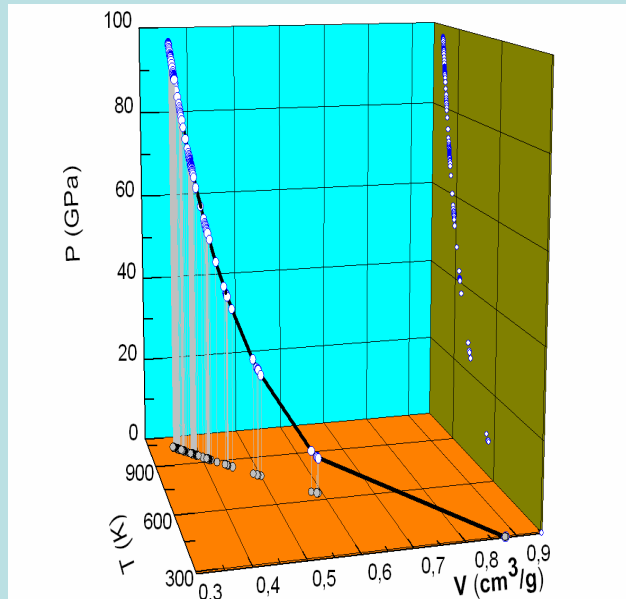
ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Электросопротивление $R(t)$ ударно сжатого образца определяется экспериментально



“ТЕРМОБАРОМЕТР”

ТЕРМОБАРОМЕТРИЧЕСКИЙ КАЛЬКУЛЯТОР

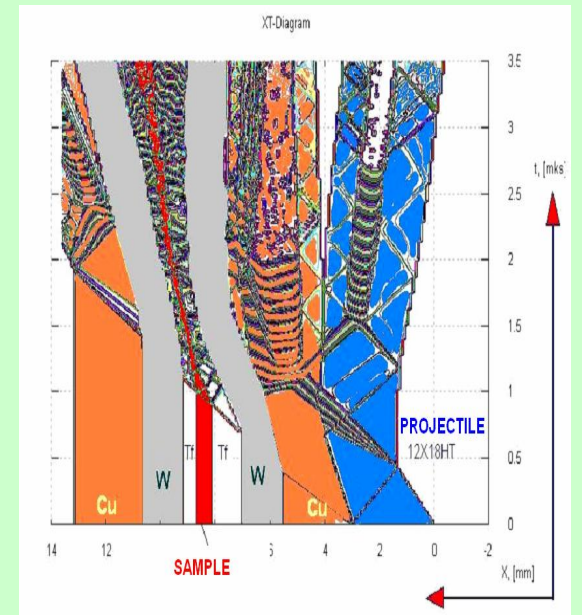


=

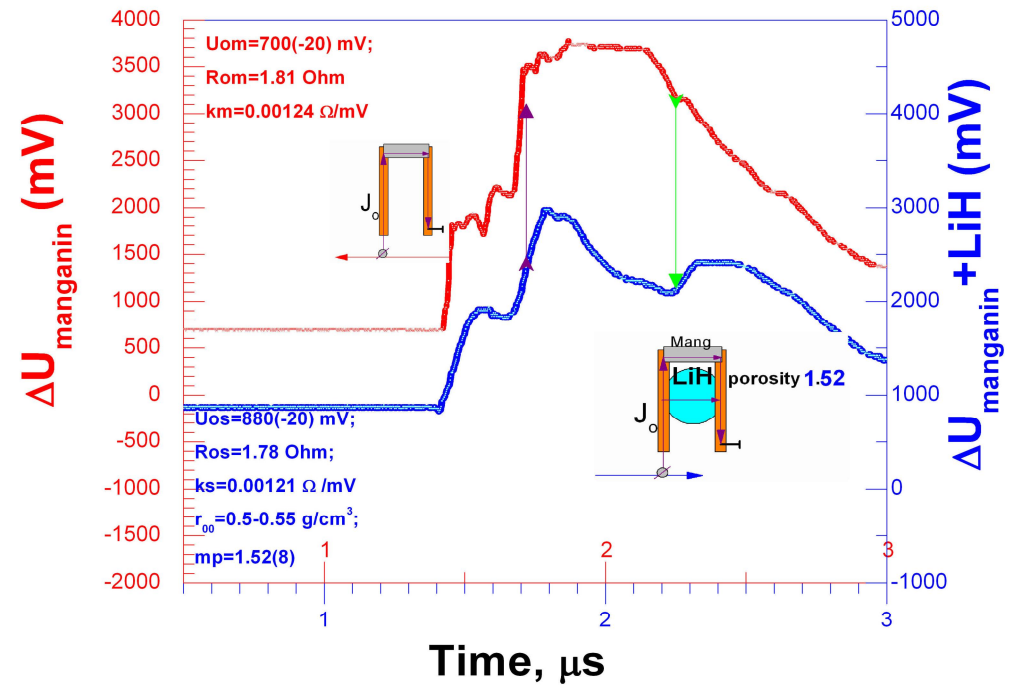
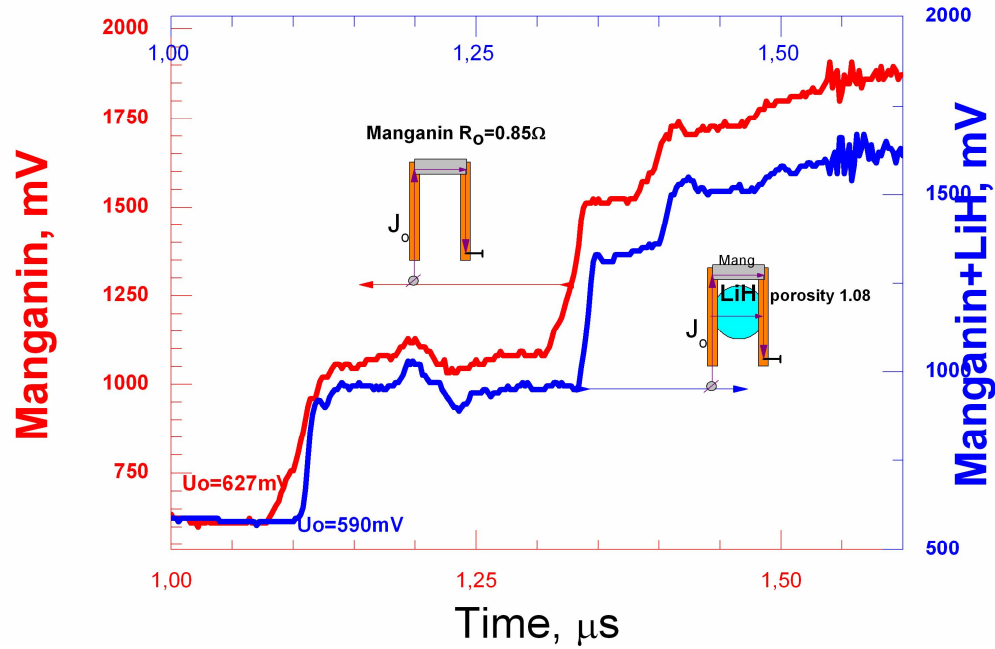
УРАВНЕНИЯ
СОСТОЯНИЯ
[HPR Vol. 30 No. 2, June
2010]

+

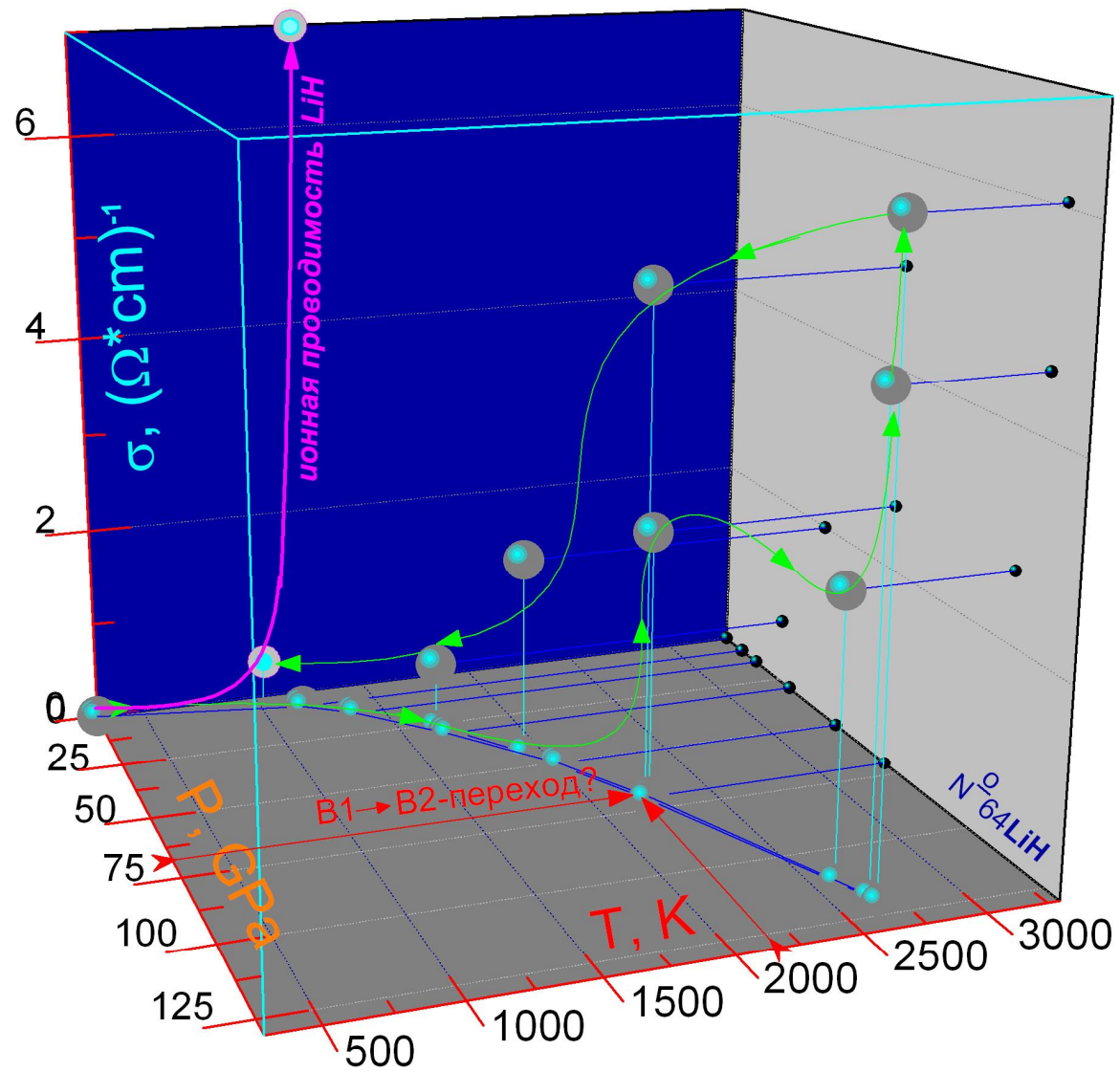
1D-ГАЗОДИНАМИЧЕСКИЙ КОД



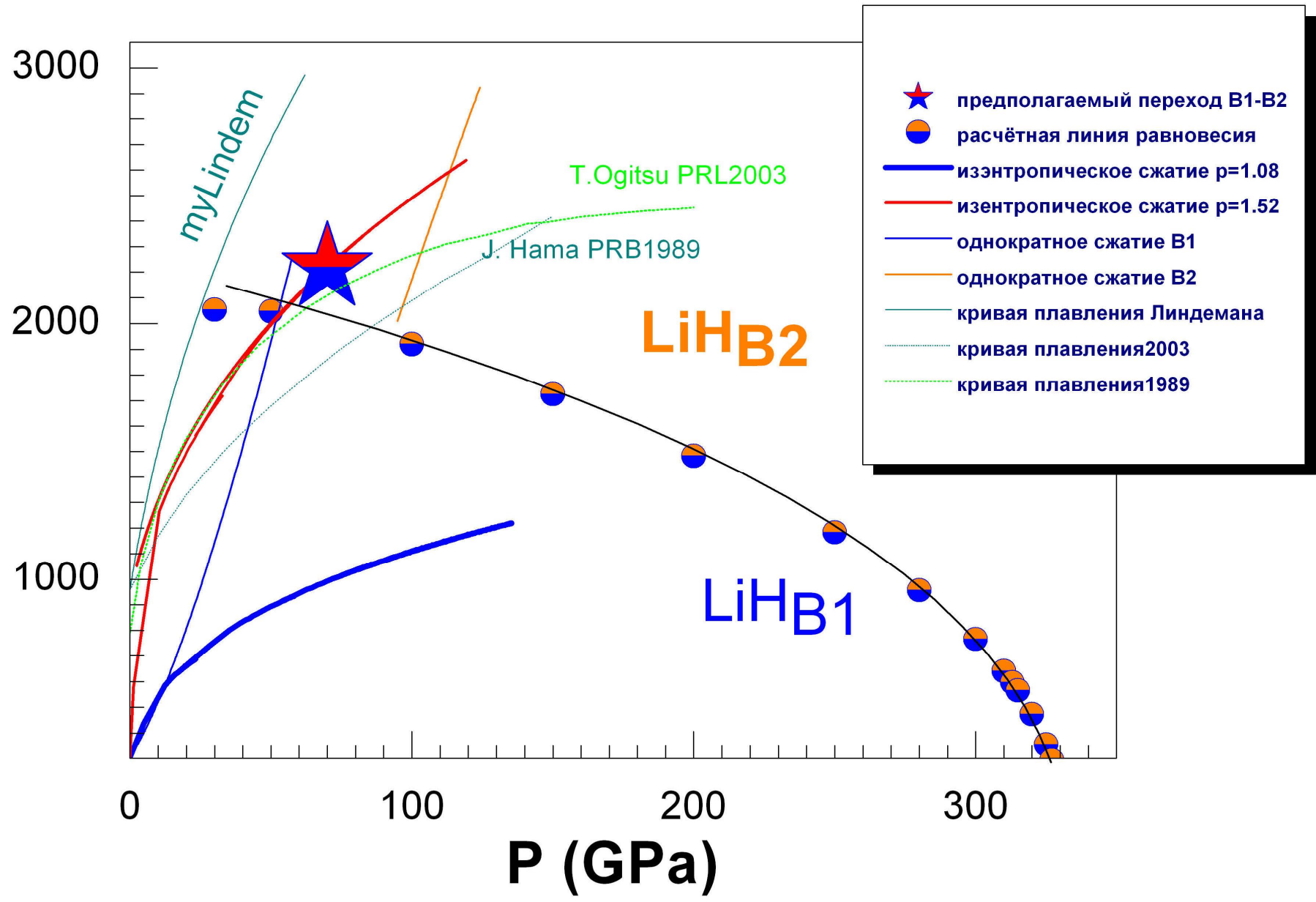
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОСЦИЛЛОГРАММЫ ПРОВОДИМОСТИ LiH



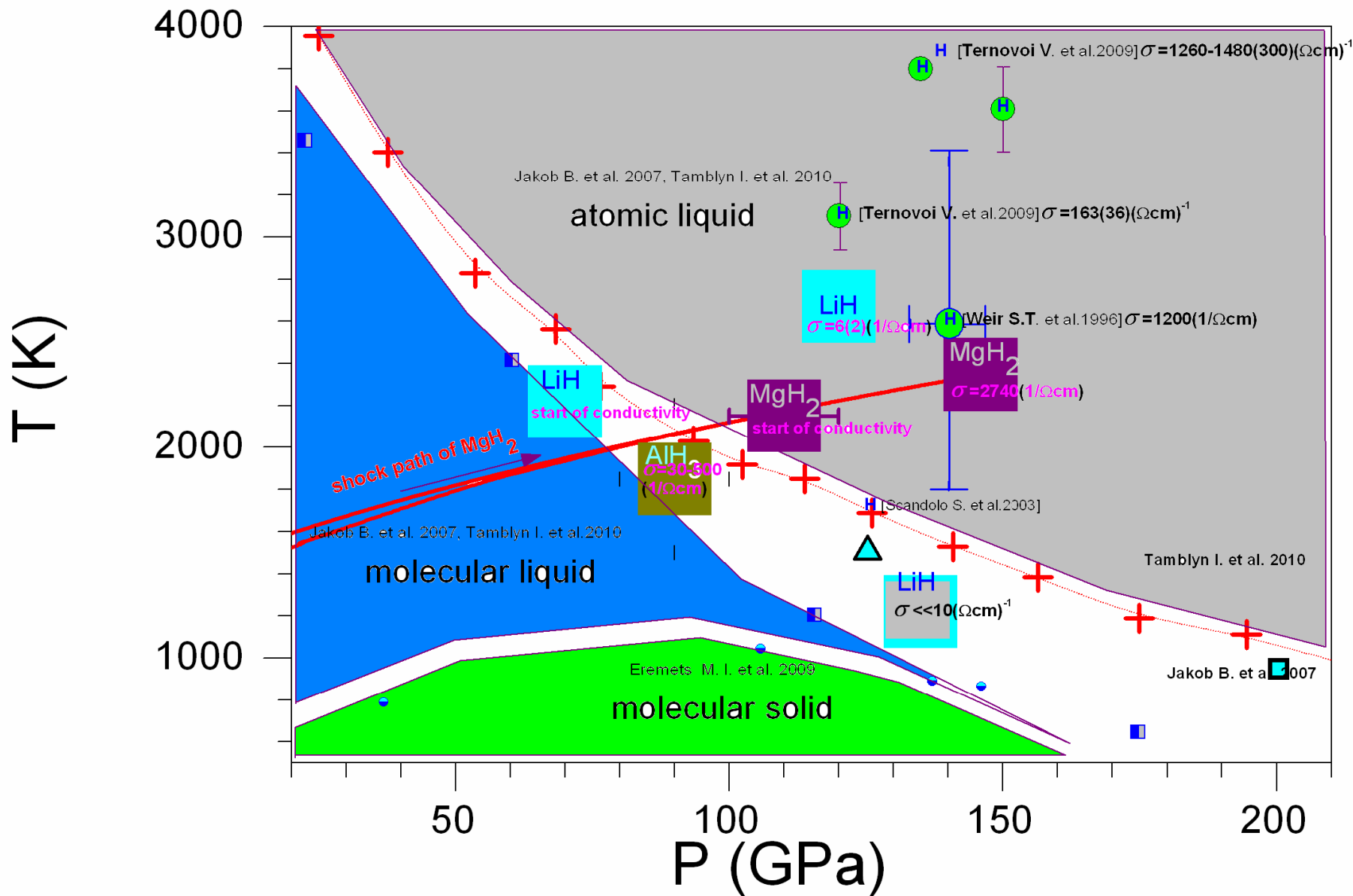
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ГИДРИДА ЛИТИЯ LiH
В МЕГАБАРНОЙ ОБЛАСТИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ



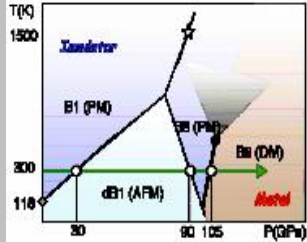
Фазовая диаграмма LiH в области мегабарных давлений



УДАРНОСЖАТЫЕ ГИДРИДЫ НА ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЕ ВОДОРОДА



MnO

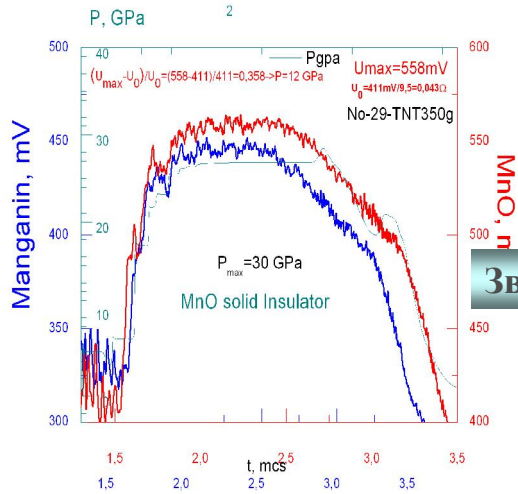
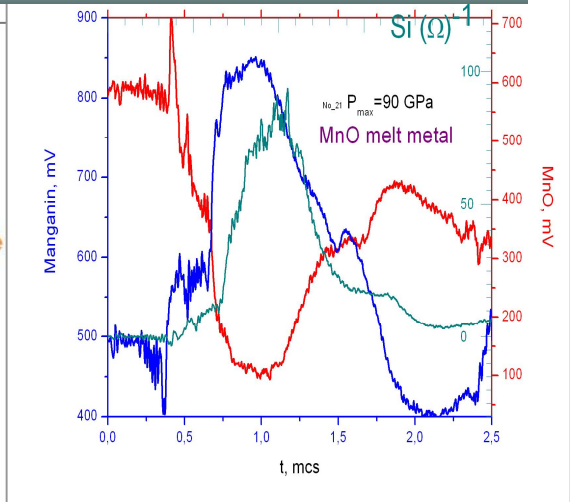
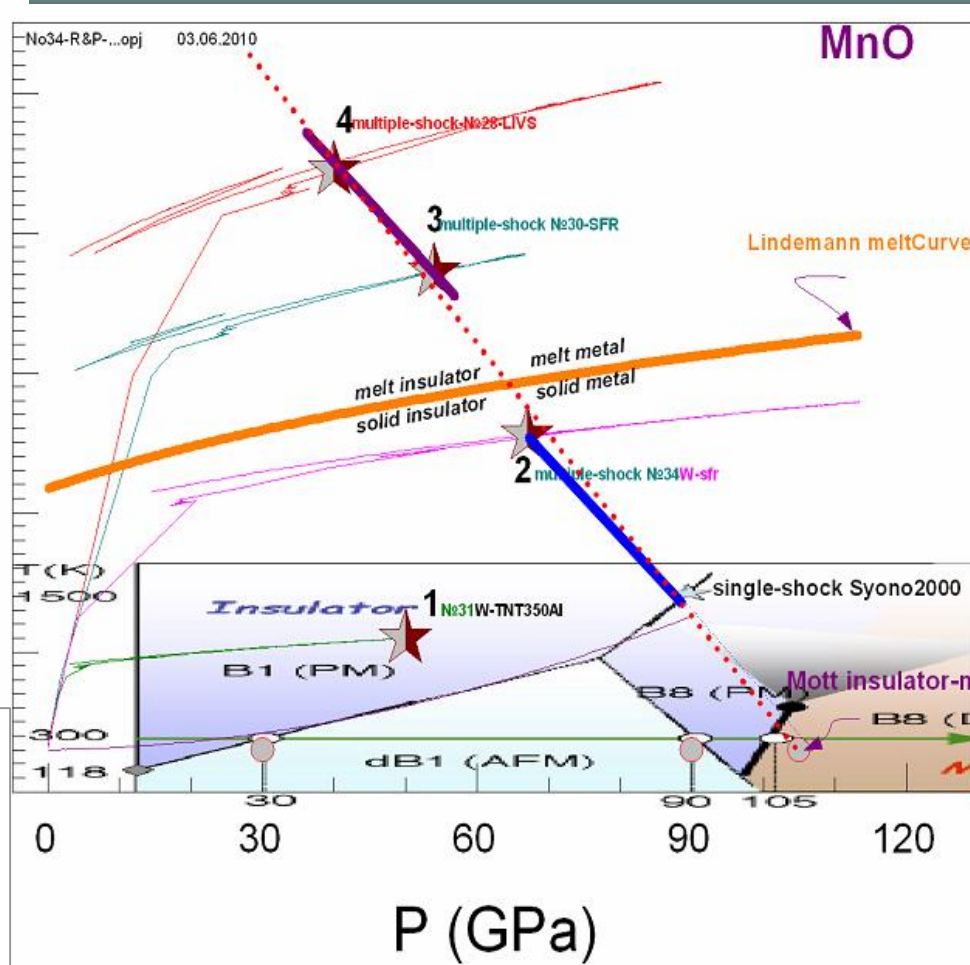


Концептуальная диаграмма MnO
C.S.Yoo-2005

T (K)

5000
4000
3000
2000
1000

Звезды 2, 3 и 4 состояния ударносжатого MnO с высокой проводимостью.



Звезда 1 – состояние ударносжатого MnO с низкой проводимостью.

Увеличение проводимости ударносжатого оксида марганца можно истолковать как моттовский переход изолятор-металл.

ВЫВОДЫ

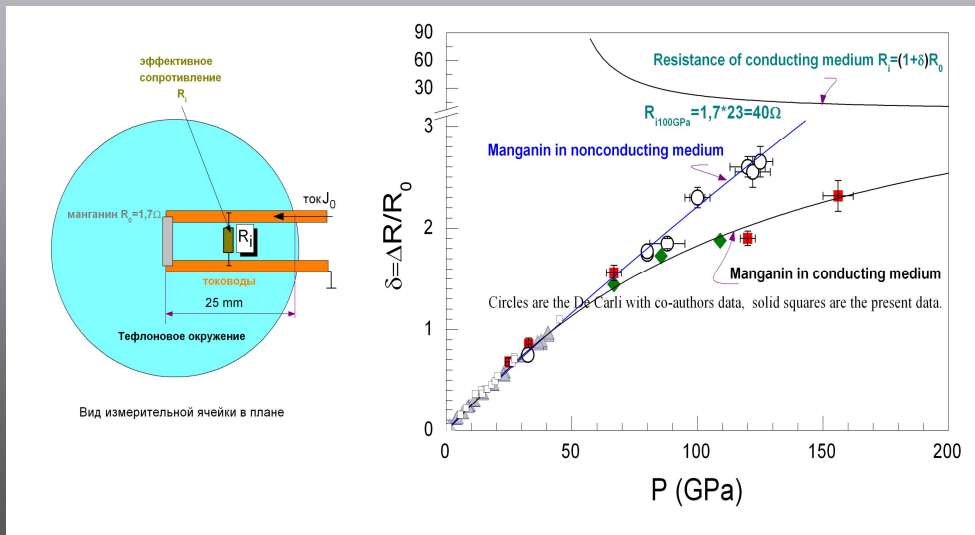
- Проводимость ударносжатого гидрида лития (LiH) остаётся гораздо меньше $10 \text{ (Ом} \cdot \text{см)}^{-1}$ вплоть до 140 ГПа и 1200 К. Существенное увеличение проводимости происходит при 70 ГПа и 2200 К.

Построены полуэмпирические уравнения состояния двух модификаций гидрида лития и их линия равновесия в диапазоне давлений 30-300 ГПа и температур 2000-300 К.

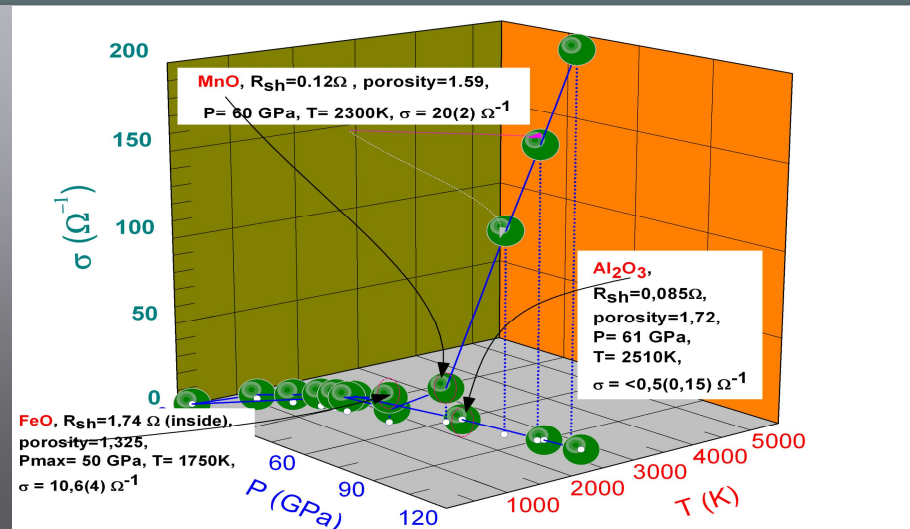
- Электропроводность оксида марганца (MnO) увеличивается на порядки, достигая значений, характерных для металлов. Изменение электропроводности ударносжатого оксида марганца интерпретируется как Моттовский переход диэлектрик-металл в области давлений 30-60 ГПа и температур 2000-4000 К.

УЧЁТ СОПУТСТВУЮЩИХ ЭФФЕКТОВ ПРОВОДИМОСТИ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ УДАРНОГО СЖАТИЯ

ПРОВОДИМОСТЬ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ



ПРОВОДИМОСТЬ ГАЗОВ В ПОРИСТЫХ ОБРАЗЦАХ

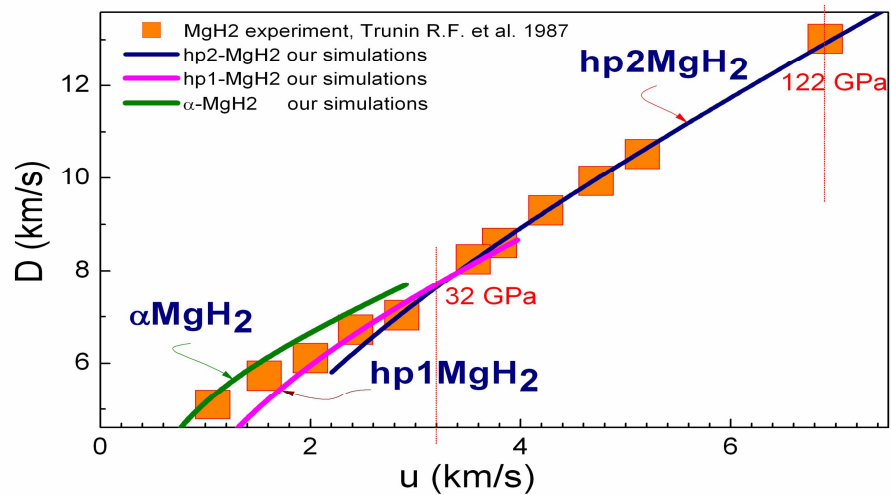


Электросопротивление изоляционного окружения уменьшается до десятков Ω , но остаётся значительно больше электросопротивления исследуемых образцов.

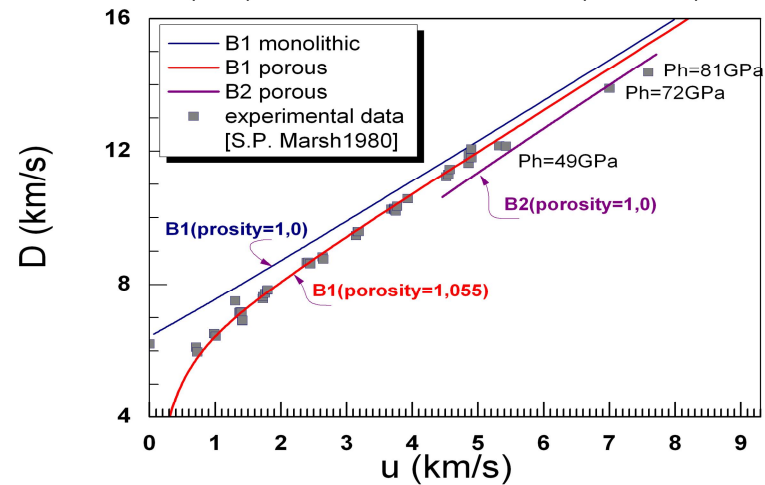
Проводимость газов в порах образцов не более $0.05-0.5 \Omega^{-1}$

ОБЛАСТЬ СТАБИЛЬНОСТИ УДАРНОСЖАТЫХ ГИДРИДОВ

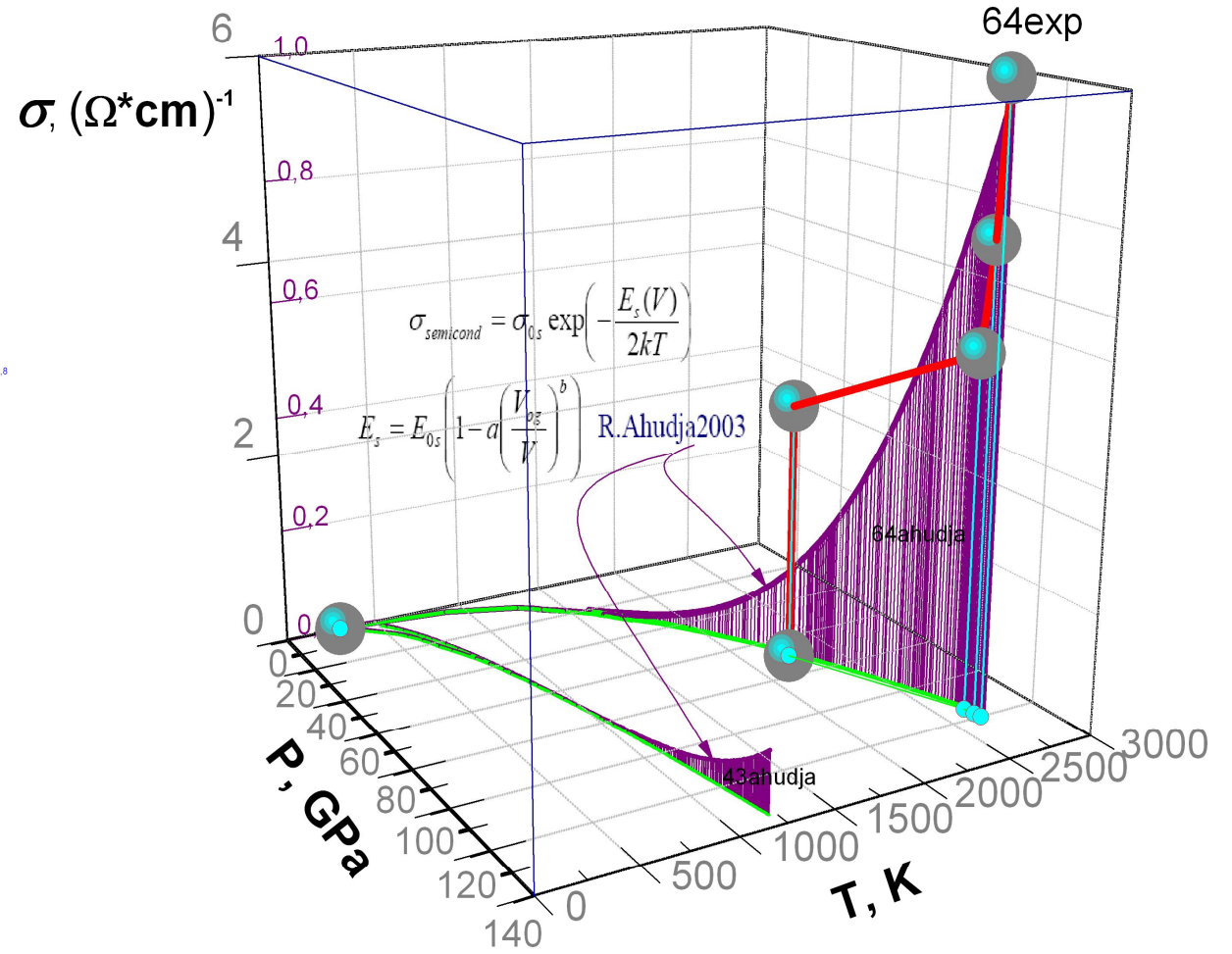
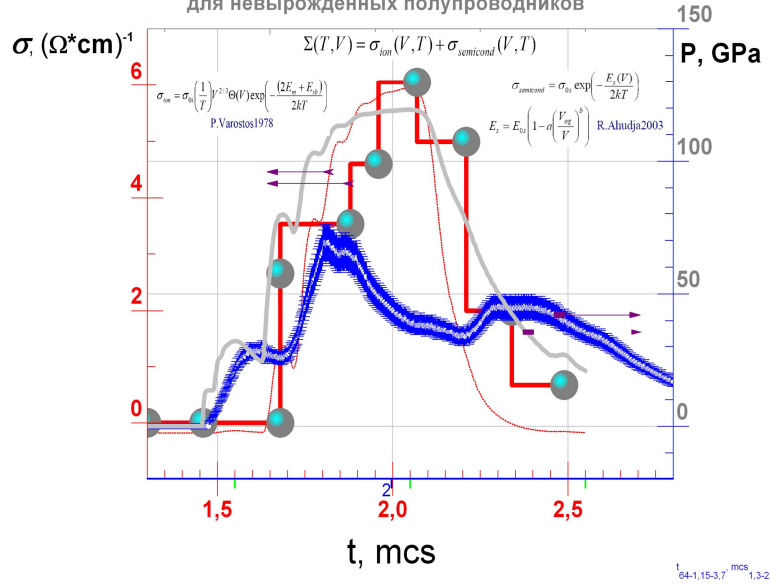
HUGONIOT OF SINGLE and MULTI-SHOCK COMPRESSION of MgH_2 POLYMORPHS



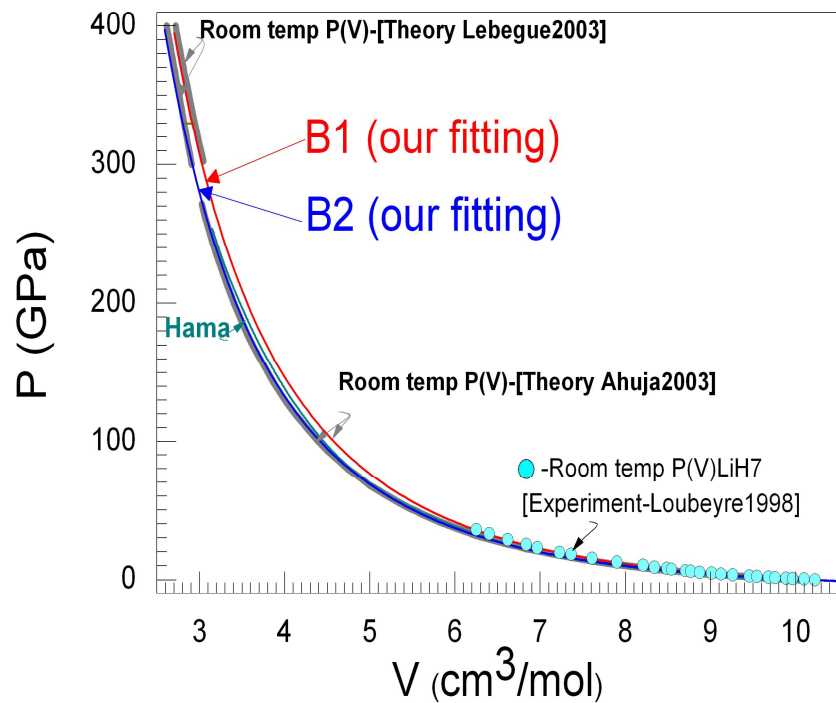
CALCULATED (lines) SINGLE HUGONIOTS OF TWO (B1 and B2) PHASES OF LiH



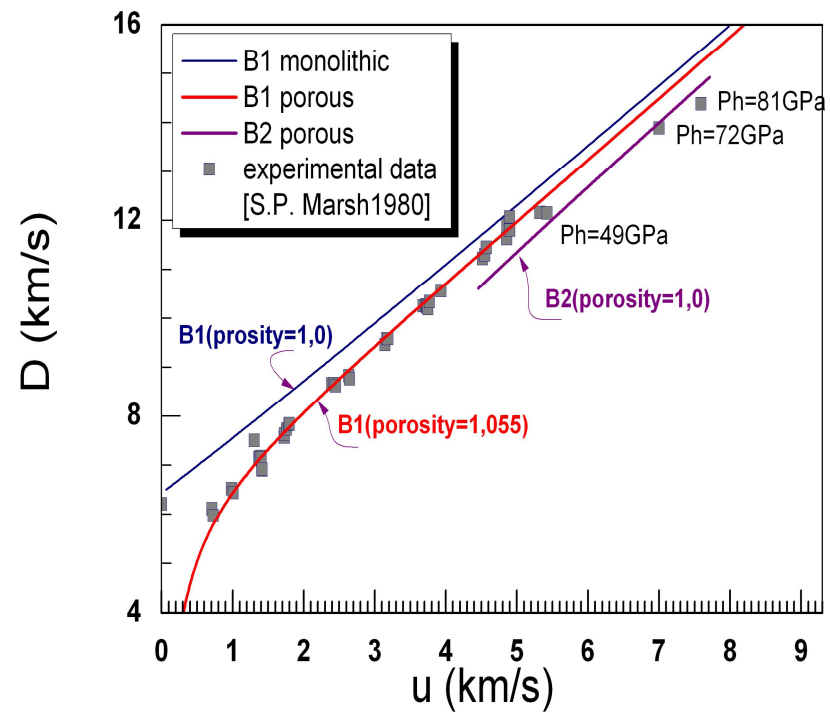
Моделирование электропроводности LiH экспонентой [Ahudja2003]
 для невырожденных полупроводников



LiH₂

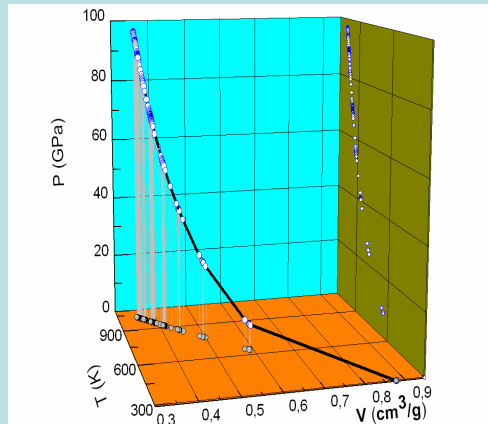


CALCULATED (lines) SINGLE HUGONIOTS OF TWO (B1 and B2) PHASES OF LiH



SHOCK THERMOBAROMETER CALCULATOR

Shock THERMO-BAROMETER calculator



EQUATIONS OF STATE

[HPR Vol. 30, No. 2, June 2010]

$$F = E_x + 3R \left[\frac{\Theta}{2} + T \ln \left(1 - \exp \left(-\frac{\Theta}{T} \right) \right) \right] - a_s RT. \quad (1)$$

In Eq. (1) all designations are traditional, but the kind of key functions - characteristic Einstein temperature Θ and potential energy E_x are defined by new formulas.

The expression for characteristic temperature $\Theta = \Theta(V)$ depending only from volume V is defined as

$$\Theta = \Theta_0 \left(\frac{v_0 - V}{v_0 - V_0} \right)^2 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (2)$$

where $\Theta_0 = \Theta(V_0)$. The parameter v_0 makes sense a characteristic volume. It is equal

$$v_0 = V_0 \left(1 + \frac{2}{\gamma_0 - 2/3} \right), \quad (3)$$

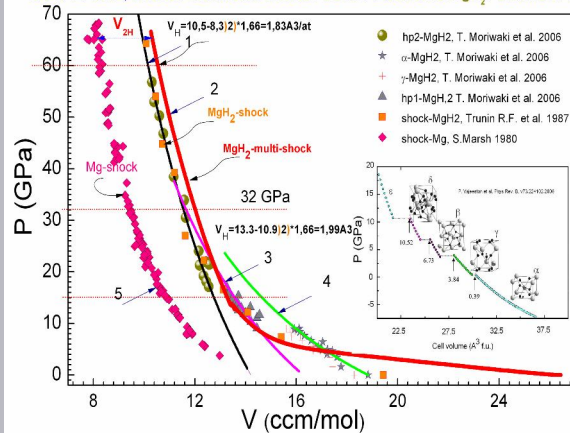
where $\gamma_0 = \gamma(V_0, T_0)$ is the Gruneisen parameter at initial volume V_0 and initial temperature T_0 . The expression for $E_x = E_x(V)$ is defined as

$$E_x = -v_x (C_1 H_x + C_2 x) + C_3 + \bar{E}_m, \quad (4)$$

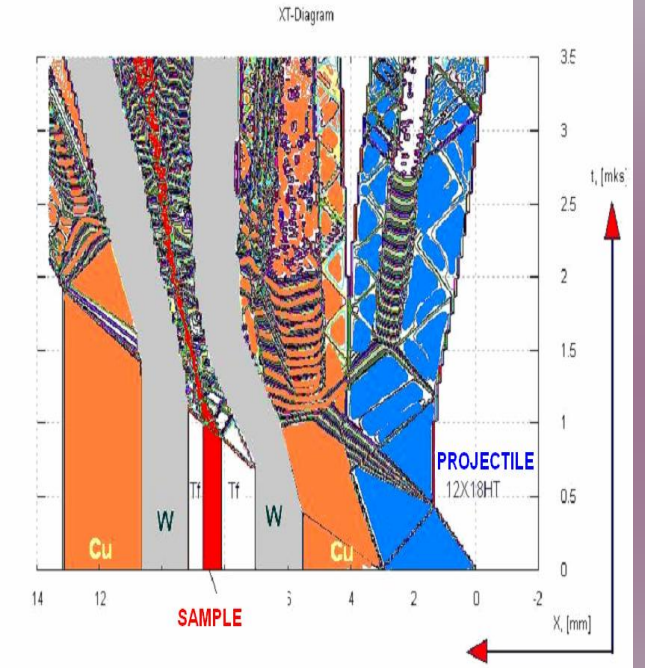
$$H_x = 9 \left(\frac{1}{10} x^{-\frac{2}{3}} + 2x^{\frac{1}{3}} + \frac{3}{2} x^{\frac{4}{3}} - \frac{1}{7} x^{\frac{7}{3}} + \frac{1}{70} x^{\frac{10}{3}} \right), \quad (5)$$

The constants C_1, C_2, C_3 are expressed analytically through the isothermal bulk modulus K_0 at ambient pressure, Θ_0, V_0, v_0 and v_x . It is supposed that K_0, Θ_0, V_0 and γ_0 are known from the handbook. The optimum value of v_x is found from the best coincidence between the calculated volume dependencies of pressure at isothermal compression and experimental ones.

ISOTHERMAL, SHOCK and MULTI-SHOCK COMPRESSION of MgH₂ POLYMORPHS

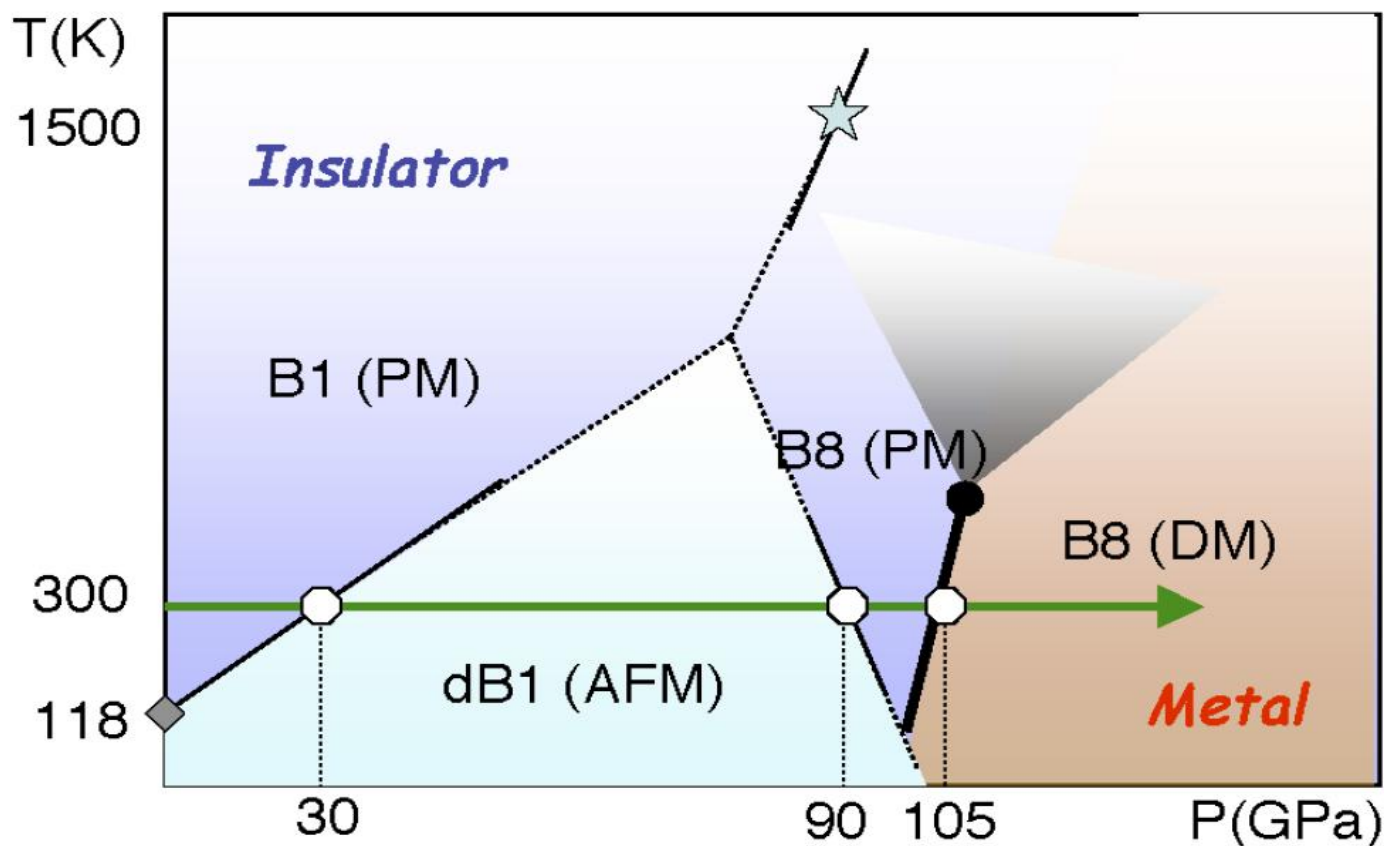


1D-GAS DYNAMIC CODE with THE EQUATIONS OF STATE



КОНЦЕПТУАЛЬНАЯ ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА MnO

First-Order Isostructural Mott Transition in Highly Compressed MnO C. S. Yoo, B. Maddox, J.-H. P. Klepeis, V. Iota, W. Evans, and A. McMahanys Rev Let 2005



Белые точки –изотермические статические данные высокого давления в алмазных наковальнях
Звезда - однократное ударное сжатие,
Ромб - температура Нееля при атмосферном давлении.

Толстая чёрная линия представляет **ИЗОСТРУКТУРНЫЙ МОТТОВСКИЙ ПЕРЕХОД** первого порядка который одновременно сопровождается потерей магнитного момента большим декрементом объёма и металлизацией и который должен оканчиваться критической точкой. Серый веер выше критической точки – **СГЛАЖЕННЫЙ ПЕРЕХОД К МЕТАЛЛИЧЕСКОМУ ПОВЕДЕНИЮ** В ОБЛАСТИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР И ДАВЛЕНИЙ