

Фазовый переход флюид-флюид в разогретом плотном водороде

Г.Э.Норман, И.М.Саитов

ВШЭ, ОИВТ РАН

Показано, что при фазовом переходе флюид-флюид в разогретом плотном водороде происходит ионизация молекул H_2 с образованием молекулярных ионов H_2^+ и H_3^+ . Ab initio молекулярной динамикой и квантовым моделированием рассчитаны уравнение состояния, протон-протонные парные корреляционные функции $g(r)$ (ПКФ) и проводимость. Использован пакет VASP. Получены следующие результаты.

(1) ПКФ на расстояниях, больших 2\AA , меняются с плотностью медленно вдоль изотерм. Однако величины первого максимума $g(r_{\max 1})$ и первого минимума $g(r_{\min 1})$ резко изменяются в узком интервале плотностей. Чтобы подчеркнуть характер изменений, построены графики изотерм $g(r_{\max 1})/g(r_{\min 1})$. Ярко выраженные скачки указывают на фазовый переход первого рода, поскольку они происходят там же, где и слабые скачки плотности. Оценка критической температуры даёт 4000 К.

(2) Значение $r_{\max 1}$ равно межатомному расстоянию $d(H_2)$ в молекуле H_2 , значение $r_{\min 1}$ близко к межатомным расстояниям $d(H_2^+)$ и $d(H_3^+)$ в молекулярных ионах H_2^+ and H_3^+ . Пусть $g_1(r)$ and $g_2(r)$ – ПКФ, ближайšie к фазовому переходу до и после него. Функция $g(r) = g_2(r) - g_1(r)$ близка к нулю при $r > 2\text{\AA}$ и имеет глубокий минимум при $r = d(H_2)$ и ярко выраженный максимум в области расстояний от $d(H_3^+)$ до $d(H_2^+)$. Это означает, что при фазовом переходе уменьшается число молекул H_2 и появляются ионы H_2^+ and H_3^+ .

(3) Отношение вторых максимума и минимума $g(r_{\max 2})/g(r_{\min 2})$ меняется с плотностью медленно. ПКФ, полученные для $r > 2\text{\AA}$, близки к ПКФ системы мягких сфер.

(4) Предложен двухступенчатый механизм фазового перехода: ионизация молекул H_2 с образованием ионов H_2^+ , а затем реакция молекул H_2 с ионами H_2^+ с образованием ионов H_3^+ . Первая стадия может быть соотнесена с предсказанием Нормана-Старостина о плазменном фазовом переходе. Обсуждается возможность такого фазового перехода в других веществах, помимо водорода.