

ИЗМЕНЕНИЕ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛ H_2 ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ В РАЗОГРЕТОМ ПЛОТНОМ ВОДОРОДЕ

Сартан Р. А.

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия
r.sartan@gmail.com

Разогретый плотный водород исследуется в области фазового перехода флюид-флюид в рамках теории функционала плотности. Предложено формальное определение “молекулы” для вычисления концентрации и времени жизни H_2 . Рассмотрены следующие зависимости.

1. Концентрация H_2 от плотности вдоль изотерм. Концентрация молекул составляет 100% в менее плотной фазе и плавно уменьшается при фазовом переходе с ростом плотности.
2. Время жизни молекул H_2 от плотности вдоль изотерм. Время жизни резко падает на несколько порядков при фазовом переходе. Это можно интерпретировать как ионизацию H_2 до H_2^+ , так как ионы менее стабильны.
3. Среднее межатомное расстояние в молекулах H_2 от плотности вдоль изотерм. Среднее межатомное расстояние имеет небольшой, но резкий скачок в 5-8% при фазовом переходе. Это также является косвенным указанием на появление ионов H_2^+ .
4. Концентрация H_2 от проводимости. Резкий скачок проводимости совпадает с началом появления ионов H_2^+ . При дальнейшей диссоциации до H^+ рост проводимости слабый.

Получены указания на ионизацию H_2 до H_2^+ при фазовом переходе в разогретом плотном водороде. При дальнейшем увеличении давлений (температур) происходит диссоциация до атомарного водорода.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 18-19-00734.