

ПЛАЗМЕННЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В ВОДОРОДЕ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

*Норман Г.Э., Саитов И.М.**

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**saitovilnur@gmail.com*

Предположение о существовании металлического водорода выдвинуто Вигнером и Хантингтоном в 1935 г. Резкое увеличение коэффициента отражения водорода было обнаружено при давлении 495 ГПа и температуре 5.5 К, что интерпретировалось как переход твердого водорода в проводящую фазу. В работе сделан обзор теоретических и экспериментальных работ, а также предложений о практических приложениях металлического водорода. Упор сделан на последние теоретические и экспериментальные исследования и оригинальные результаты авторов доклада. В рамках теории функционала плотности и квантовой молекулярной динамики рассчитаны зависимости давления, электропроводности и протон-протонные парных корреляционных функций (ПКФ) от плотности в диапазоне 1.14 – 2.0 г/см³ при температурах 50 и 100 К. Рассчитанный диапазон давлений 300 – 1200 ГПа, т.е. твердая фаза. Расчеты проводятся с использованием пакета VASP. В качестве начальной конфигурация используется моноклинная решетка группы C2/c, так как данная структура является наиболее устойчивой в области давлений выше 260 ГПа, что при рассматриваемых температурах соответствует фазе III твердого водорода. Обнаружен структурный переход при давлении 607 ГПа, характеризующийся заметным скачком электропроводности и резким уменьшением числа молекул H₂. При значении плотности 1.563 г/см³ и давления 607 ГПа происходит исчезновение пика ПКФ на расстоянии 0.74 Å, соответствующем межатомному расстоянию в молекуле H₂, что является указанием на распад молекул H₂. При этом резко увеличивается значение электропроводности до 85300 (Ом·см)⁻¹ и возникает пик ПКФ на расстоянии 0.92 Å. Это расстояние равно межпротонному расстоянию в молекулярном ионе H₃⁺. Такое положение первого максимума ПКФ остается неизменным в диапазоне давлений 607 – 832 ГПа. Это говорит о неявном появлении ионов H₃⁺ в структуре твердого водорода при его переходе в проводящее состояние. Таким образом, природа перехода сочетает ионизацию со структурными изменениями. При дальнейшем сжатии первый максимум ПКФ начинает соответствовать среднему расстоянию между протонами при заданной плотности, что указывает на полную диссоциацию ионов водорода. Сильная ионизация при фазовом переходе в плотном твердом водороде/дейтерии сближает этот переход с плазменным фазовым переходом во флюиде водорода.