

ФАЗЫ АТОМАРНОГО ВОДОРОДА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Н. Е. Лозовик, О. А. Панкратов, А. В. Ключник

УДК 531.19.546.11.538.6

Найдены термодинамические характеристики системы из атомов водорода с поляризованными спинами ($H\uparrow$), метастабильной в магнитном поле (\mathcal{H}) при низких температурах. Рассматривается плавление этого кристалла. Обсуждается сверхтекучесть $H\uparrow$.

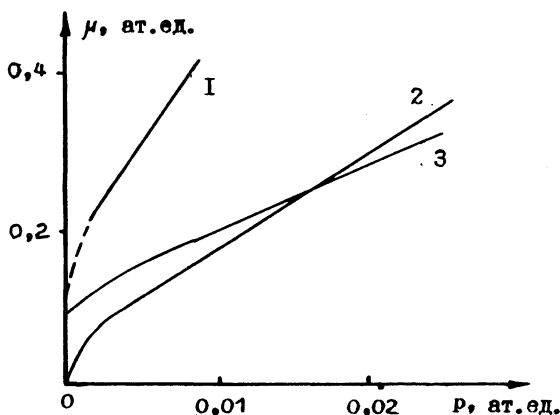
В сильных полях \mathcal{H} при низкой температуре T возможно затормозить рекомбинацию свободных радикалов /1/ (из-за вымораживания состояния с антипараллельными спинами при $\mathcal{H} \gg 10^4 T$ Гс). Поле $\mathcal{H} \gg 10^4 T$ Гс приводит лишь к метастабильности системы. Поля, при которых изменяется основное состояние /2/, существенно выше: $\mu_0 \mathcal{H} \sim D_0$, где D_0 — энергия диссоциации молекулы.

При очень низких T время установления теплового равновесия в спиновой подсистеме возрастает, и указанный механизм подавления реакций рекомбинации не реализуется. Тем не менее, система из свободных радикалов может быть сделана метастабильной (из-за слабости спин-решеточной релаксации), если предварительно отсепарированный по спину пучок свободных радикалов направить на находящуюся в магнитном поле сильно охлажденную подложку — см. эксперимент /3/. Так можно стабилизировать атомы в возбужденных состояниях (и экситоны Ванье-Мотта) с отличным от нуля спином.

Энергию взаимодействия двух атомов $H\uparrow$ аппроксимируем выражением /7/: $u(R) = \gamma R^{-4/3} \exp(-WR) - (CR^{-6} + DR^{-8}) \exp(-400R^{-6})$. Подгонка γ, W, C, D к данным /6/ дает: $\gamma = 1,031, W = 0,766, C = -2,437, D = 13,875$ (при $0 < R < 6$); $\gamma = 1,5, W = 1, C = 8,5, D = 131$ (при $6 \leq R < 12$).

Ван-дер-Ваальсов минимум, менее глубокий, чем для системы $He-He$, не дает связанного состояния двух атомов. Но, благодаря ему, возможно образование конденсированных фаз $H\uparrow$ /9/, хотя

лишь при давлении $P \neq 0$. Из-за малости глубины потенциальной ямы и массы атома H^+ (по сравнению с 4He), H^+ должен проявлять еще более выраженные квантовые свойства, чем 4He . Вычисление энергии кристалла H^+ при $T = 0$ аналогично проведенному в [7] для H_2 .



Р и с. 1. Зависимость термодинамического потенциала от давления при $T = 0$ для 1 - атомарного кристалла (H^+), 2 - H_2 -кристалла, 3 - H -металла

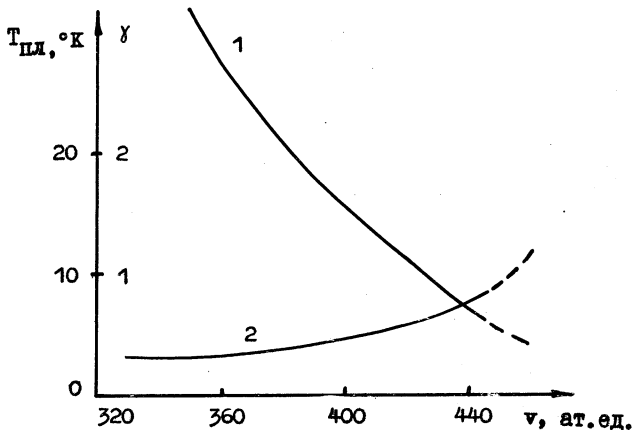
Потенциальная энергия на атом $\epsilon_n = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N u(R_i)$, где для решеточных сумм берутся значения, известные для ГЦК и ГПУ решеток. Энергия нулевых колебаний $\epsilon_{HK} = \frac{1}{2N} \sum_k \hbar \omega_k$ вычисляется в модели Дебая, где средняя скорость звука \bar{v} выражается через плотность, коэффициент Пуассона σ (принимаем $\sigma = 0,35$) и потенциальный модуль сжатия. Выражения для энергии имеют вид:

$$\epsilon_n = 6 \cdot 2^{-2/9} \gamma_V^{-4/9} \exp(-2^{1/6} \gamma_V^{1/3}) - (14,45 \cdot 2^{-2} \cdot \sigma v^{-2} + 6,4 \cdot 2^{-4/3} D_V^{-8/3}) \exp(-200 v^{-2}),$$

$$\epsilon_{HK} = \frac{9}{8} (6\pi^2)^{1/3} \bar{v}^{-1/3},$$

где v - атомный объем.

На рис. 1 приведен рассчитанный термодинамический потенциал на атом $\mu = \epsilon + pv$ в зависимости от p вместе с кривыми для кристалла H_2 и металлического водорода из [8/; здесь $\epsilon = \epsilon_n + \epsilon_{нк} + D_0$. Отметим, что из-за ангармонизма, растущего с уменьше-

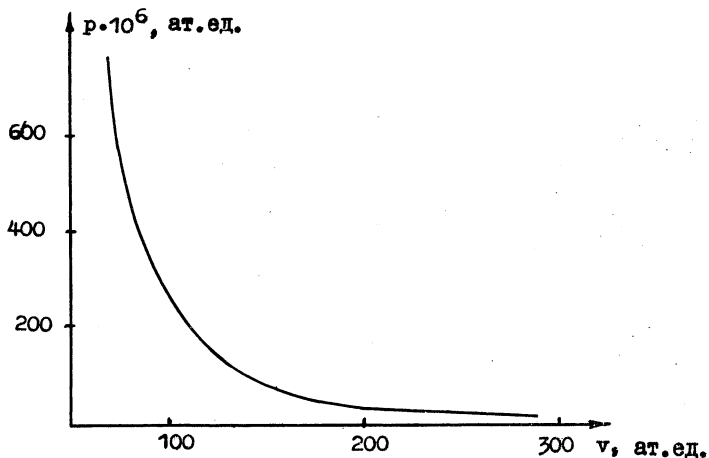


Р и с. 2. 1 - зависимость температуры плавления от объема;
2 - зависимость параметра Линдемана χ от объема

нием p , вычисления $\epsilon_{нк}$ для малых p могут рассматриваться лишь как оценки. Из рис. 1 видно, что кристалл H_2 в магнитном поле является новой метастабильной фазой водорода. Для оценки $T_{пл}$ (см. рис. 2) использовалась формула $T_{пл} = \left(\frac{M\chi_k}{1,6k_B} \right) \bar{v}^2$, где χ_k - параметр Линдемана (данные по плавлению H_2 дают $\chi_c \sim 0,9$). Зависимость $p = p(v)$ при $T = 0$ для кристалла H_2 показана на рис. 3. Из критерия Линдемана следует, что при $p \sim 3 \cdot 10^2$ атм H_2 претерпевает "холодное" плавление.

Оценки энергии связи жидкой фазы H_2 показывают, что при $p = 0, T = 0$ H_2 существует в виде газа (см. также [4/, [5/]). Для рассмотрения газа H_2 применима, в отличие от 4He , теория разреженного бозе-газа. Бозе-жидкости (или газы) H_2 и T_2 должны

быть сверхтекучими. Температуру λ -перехода можно оценить по температуре бозе-конденсации (для ${}^4\text{He}$ это дает неплохую оценку). При плотности порядка плотности жидкого ${}^4\text{He}$ имеем $T_B(\text{He}) \approx 12,6^\circ\text{K}$. Расчеты показывают, что при не очень больших ρ в по-



Р и с. 3. Диаграмма состояния $p = p(v)$ для кристалла He^+ при $T = 0$

лях $\mu_0 K \gg 1^\circ\text{K}$ эффект уширения электронных зон не препятствует стабилизации атомарной фазы. Выше предполагалось, что фазы He^+ устойчивы относительно цепной реакции образования He_2 , т.е., что соответствующий коэффициент размножения $\chi < 1$. В сверхтекучей фазе He^+ сверхтеплопроводность подавляет K .

Поступила в редакцию
20 октября 1976 г.

Л и т е р а т у р а

1. В. С. Детохов, Д. Е. Лозовик, Письма в ЖТФ, 1, 609 (1975).
2. Д. Е. Лозовик, Тезисы VIII совещания по атомн. молекул. спектр., Иркутск, 1972 г., Изд-во Ирк. ГУ, стр. 32.
3. R. Hess, Adv. Struc. Eng., 18, 427 (1973).
4. С. Е. Necht, Physica, 25, 1159 (1959).
5. W. C. Stwalley, L. H. Nosanov, Phys. Rev. Lett., 36, 910 (1976).
6. J. O. Hirschfelder, J. W. Linnet, J. Chem. Phys., 18, 130 (1950).
7. В. П. Трубицын, ФТТ, 7, 3443, 3363 (1965); 8, 864 (1966).
8. Е. Г. Бровман, Ю. Каган, А. Холас, ЖЭТФ, 61, 2129 (1971).
9. Д. Е. Лозовик, О. А. Панкратов, А. В. Ключник, Препринт ФИАН № 77, М., 1976 г.