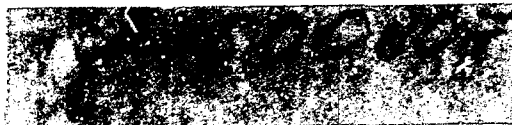


ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ԻՆՏԻՏՈՒՏ
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ԳՐԱԿԱՆ ՀԱՂՈՐԴՈՒՄ ՆԱՍԿՈՒՄ ՍՈՑԻԱԼԻՍՏԻԿԱՆ
НАУЧНОЕ СООБЩЕНИЕ



ЕФИ—61(74)

И.И.Гольдман, П.С.Овнанян

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

ԱՐՄՍ



ԵՐԵՎԱՆ

1974

ԵՐԵՎԱՆ

We regret that some of the pages in the microfiche copy of this report may not be up to the proper legibility standards, even though the best possible copy was used for preparing the master fiche.

ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

Научное сообщение ФИИ-1974

И.И.ГОЛЬДМАН, П.С.СВЯТАЧ

ОСНОВНЫЕ ПЕРЕМЕННЫЕ ПРИ ЧИСЛОВЫХ ДАВЛЕНИЯХ

1974

И.И.ГОЛЬДМАН, П.С. ОВНАНЯН

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Предсказывается существование фазового перехода в сильно сжатом веществе из оцк в гцк.

Ереванский физический институт

Ереван 1974 .

I.I. GOLDMAN, P.S. OVNANIAN

THE PHASE TRANSITION AT HIGH PREASURE

The phase transition in strongly compressed substance from BCC VCC into FCC is predicted.

Yerevan Physics Institute

Yerevan, 1974

© Ереванский физический институт, 1974

При больших плотностях вещества, когда $\rho = \frac{z_0}{a} \ll 1$, где z_0 - расстояние между атомами, a - борковский радиус, полную энергию кристалла можно разложить в ряд по этому малому параметру

$$\frac{E}{N} = \frac{2,87}{\rho^2} z^{5/3} - z^2 \frac{\Gamma}{2\rho} - z^2 \Delta(z) + \Delta_1 \ln \frac{\rho}{\rho_0} \quad (1)$$

Первый член представляет кинетическую энергию электронов, второй - кулоновскую энергию взаимодействия ядер в решетке [1], третий - энергию взаимодействия электронов с решеткой [2]. Последний член в разложении есть электрон - электронная энергия [3]. Ввиду независимости от типа решетки, этот член в окончательный результат не входит.

При очень больших плотностях существенен член $\Gamma/2\rho$ и устойчивой будет объемноцентрированная структура [1]. Однако, при меньших плотностях, благодаря члену Δ может оказаться устойчивой другая структура.

Пусть кривые энергий $E_1(\rho)$ и $E_2(\rho)$, относящиеся к двум разным структурам, пересекаются в некоторой точке ρ_0 .

Тогда

$$\frac{\Gamma_1}{2\rho_0} + \Delta_1 = \frac{\Gamma_2}{2\rho_0} + \Delta_2 \quad (2)$$

Откуда находим

$$\rho_0 = -\frac{1}{2} \frac{\Gamma_1 - \Gamma_2}{\Delta_1 - \Delta_2} \quad (3)$$

Отсюда видно, что знаки $\Gamma_1 - \Gamma_2$ и $\Delta_1 - \Delta_2$ должны быть разные.

В этом случае возможен фазовый переход.

Величины Γ и Δ для разных атомов, представленные в таблице I взяты из работ [1] и [2].

ТАБЛИЦА I

	Γ	Δ			
		H	He	C	Fe
ОЦК	2,88846I	0,090386	0,224488	0,47215I	1,03433
ГЦК	2,888282	0,091307	0,219672	0,46487I	1,0366II
Гексаг. плотная	2,888I7	0,066I69	0,189904	0,435366	0,98905

Переход возможен из объемноцентрированной структуры в граничноцентрированную для водорода, углерода и железа. Применимость формул оправдана малостью ρ_0 : 0,097 (для водорода) 0,064 (для углерода) и 0,039 (для железа).

Условие фазового перехода определяется условием равенства давлений:

$$P = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_1 = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_2 = - \frac{E_2 - E_1}{V_2 - V_1} \quad (4)$$

Разрешив эти уравнения относительно $V_1 = \rho_1^{-3}$ и $V_2 = \rho_2^{-3}$ получим:

$$\rho_1 = \frac{1}{2} \frac{\Gamma_1 - \Gamma_2}{\Delta_2 - \Delta_1} - \frac{1}{160a} \frac{(\Gamma_1 - \Gamma_2)^3}{(\Delta_2 - \Delta_1)^2} \quad (5)$$

и

$$\rho_2 = \frac{1}{2} \frac{\Gamma_1 - \Gamma_2}{\Delta_2 - \Delta_1} + \frac{1}{160a} \frac{(\Gamma_1 - \Gamma_2)^3}{(\Delta_2 - \Delta_1)^2} \quad (6)$$

Из формул (5) и (6) получим выражение для изменения объема при фазовом переходе:

$$\Delta V = V_2 - V_1 = \frac{3}{320a} \frac{(\rho_1 - \rho_2)^5}{(\Delta_2 - \Delta_1)^4} \quad (7)$$

где $a = 2,87 \cdot z^{-\frac{1}{3}}$

Относительное изменение объема при фазовом переходе равно:

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{3}{40a} \frac{(\rho_1 - \rho_2)^2}{(\Delta_2 - \Delta_1)} \quad (8)$$

Давление, при котором происходит фазовый переход, дается формулой:

$$P = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_1 = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_2 = z^2 \frac{64a}{3} \frac{(\Delta_2 - \Delta_1)^5}{(\rho_1 - \rho_2)^5} \quad (9)$$

В таблице 2 приведены давления, относительные изменения объемов и плотности, при переходе из оцк в гцк для водорода, углерода и железа.

ТАБЛИЦА 2

	H	C	Fe
$\frac{\Delta V}{V}$	$0,9 \cdot 10^{-6}$	$1,1 \cdot 10^{-6}$	$1,07 \cdot 10^{-6}$
P (атм.)	$6 \cdot 10^{13}$	$9 \cdot 10^{15}$	$1,5 \cdot 10^{18}$
$D(\text{г/см}^3)$	$1,22 \cdot 10^4$	$5 \cdot 10^5$	$1,05 \cdot 10^7$

ЛИТЕРАТУРА

1. I.I.GOLDMAN. *Phys.Lett.*, 34A, 339(1971)
И.И.ГОЛЬДМАН, Научное сообщение ЕФИ-14 (73)
2. I.I.GOLDMAN, C.YANG. *Phys.Lett.* 41A, 5(1972)
И.И.ГОЛЬДМАН, ЯН ШИ. Препринт ЕФИ-ТФ-6 (72)
3. M.GELL-MANN , K.BRUECKNER. *Phys.Rev.* 106, 364 (1957).

Рукопись поступила 17-го июля 1973 г.



Редактор Л.П. Мукаян

Заказ 0212

ВФ-03297

Тираж 300

Подписано к печати 18/IV-74г. Формат издания 30 x 40
0,5 уч.изд.л. Ц.4 к.

Отпечатано на ротапринтере
Ереванского физического института, Ереван 36, пер.Маркаряна 2