04,07

Поведение конденсированных инертных газов на фазовой линии плавления вблизи перехода от притяжения к отталкиванию атомов

© В.П. Крайнов [1], Б.М. Смирнов [2]

[1] Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Московская обл., Россия
[2] Объединенный Институт Высоких Температур РАН, Москва, Россия

E-mail: vpkrainov@mail.ru

Поступила в Редакцию 31 октября 2025 г.
В окончательной редакции 13 ноября 2025 г.
Принята к публикации 15 ноября 2025 г.

Рассмотрено поведение конденсированного инертного газа как системы атомов с парным взаимодействием атомов, где взаимодействие между атомами — ближайшими соседями доминирует, на фазовой линии плавления в области переключения взаимодействия атомов от притяжения к отталкиванию. Точка переключения отвечает давлениям порядка 10 GPa, тогда как экспериментальный метод алмазной наковальни позволяет продвинуться до давлений порядка 100 GPa. Согласно экспериментальным данным точка переключения взаимодействия не является особой точкой, так что давление на фазовой линии плавления монотонно возрастает с температурой. Сконструирован потенциал взаимодействия двух одинаковых атомов инертного газа в области, одной из границ которой отвечает отталкиванию с потенциалом взаимодействия 0.3 eV, а другая соответствует дну потенциальной ямы. Наряду со стандартными параметрами потенциала взаимодействия вблизи дна потенциальной ямы в этом потенциале взаимодействия включена отталкивательная часть, параметры которой следуют из экспериментальных данных для коэффициента теплопроводности инертных газов при высоких температурах. На основе этого потенциала взаимодействия атомов и экспериментальных данных для фазовой линии плавления определены параметры точки переключения взаимодействия. В области переключения взаимодействия скачки плотности атомов и внутренней энергии относительно малы, так что скачок внутренней энергии за счет изменения кристаллической структуры системы атомов становится существенным. Представлены критерии наблюдаемого поведения конденсированных инертных газов при фазовом переходе в рассматриваемой области, соответствующим положительным скачкам плотности атомов и внутренней энергии как в области притяжения, так и отталкивания атомов.

Ключевые слова: фазовая линия плавления, обменное взаимодействие атомов инертного газа, метод алмазной наковальни.

DOI: 10.61011/FTT.2025.11.62132.309-25

1. Введение

Анализ конденсированных инертных газов как простейшей плотной системы взаимодействующих атомов позволяет понять принципиальные проблемы жидкостей и твердых тел. Этот анализ упрощается в силу парного характера взаимодействия между атомами и доминирования взаимодействия между ближайшими соседями [1]. Принципиальную роль в таком анализе играют экспериментальные данные. Именно эксперимент надежно доказывает существование жидкого и твердого агрегатных состояний. Важное значение для анализа конденсированных инертных газов при экстремальных условиях имеет метод алмазной наковальни [2,3], в рамках которого инертный газ, находящийся внутри алмазной ячейки, сжимается до давлений порядка миллиона атмосфер [4–8]. Эти давления включают переход от притяжения к отталкиванию атомов — ближайших соседей. Предметом исследования данной работы является анализ поведения инертных газов на фазовой линии плавления в области перехода от притяжения к отталкиванию атомов. Этот переход происходит при давлениях порядка сотни тысяч атмосфер, т. е. входит в область возможностей эксперимента.

Таким образом, предмет последующего анализа — конденсированный инертный газ, является системой слабо взаимодействующих атомов, т. е. волновая функция атомных валентных электронов слабо искажается за счет взаимодействия атомов и поэтому взаимодействие пробного атома с окружающими атомами слабо зависит от конфигурации других атомов. Учитывая это и соединяя механическое и термодинамическое описание данной системы взаимодействующих атомов с результатами эксперимента, получаем более полное описание рассматриваемой системы атомов. В настоящей статье мы выражаем давление и температуру, т. е. термодинамические параметры, через параметры парного потенциала взаимодействия атомов. В частности, отсюда следует уменьшение скачков энтропии и плотности при фазовом переходе по мере переключения среднего

взаимодействия атомов от притяжения к отталкиванию. Кроме того, в самой точке переключения, опираясь на экспериментальные данные, мы связываем давление и температуру со средним расстоянием между атомами в конденсированном инертном газе.

2. Парный потенциал взаимодействия атомов инертного газа

В силу отталкивательного характера потенциала обменного взаимодействия атомов инертного газа в конденсированном инертном газе атомы сохраняют свою индивидуальность, т. е. параметры атомов в нем мало отличаются от их значений для уединенного атома, а расстояние между ближайшими соседями велико по сравнению с размером атома. Поэтому свойства конденсированного инертного газа определяются потенциалом парного взаимодействия атомов.

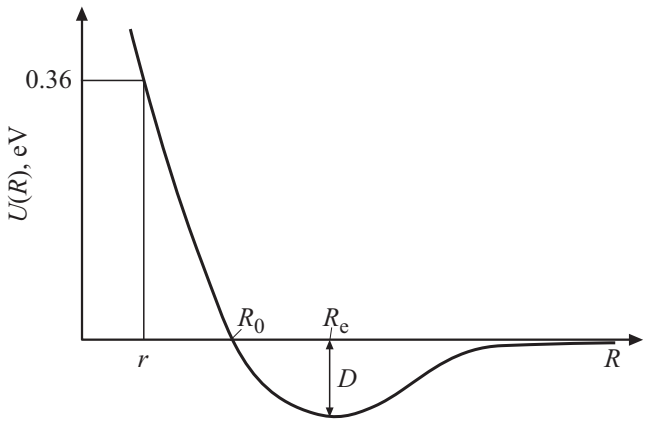
Удобно представить потенциал взаимодействия между двумя одинаковыми атомами инертного газа как функцию расстояния R между атомами в обобщенной форме Саттона–Чена [9]

$$U(R) = D\left[\left(\frac{R_e}{R}\right)^{2n} - 2\left(\frac{R_e}{R}\right)^{n}\right]. \qquad (1)$$

Представление потенциала взаимодействия в аналитическом виде удобно для его практического использования. Как видно, потенциал взаимодействия (1) двух атомов инертного газа, представленный на рисунке, включает в себя как область потенциальной ямы, так и область отталкивания атомов. Параметры потенциала взаимодействия двух атомов инертного газа в области минимума (R_e, D), содержащиеся в табл. 1, были восстановлены в работах [10–14] из обработки данных, относящихся к спектрам двухатомных молекул инертных газов, дифференциальному и полному сечениям рассеяния при столкновении атомов, к второму вириальному коэффициенту инертных газов, а также к параметрам кристаллических инертных газов. Эти параметры приведены в табл. 1 и далее будут использованы.

Данные в области отталкивания атомов, где потенциал взаимодействия атомов существенно превышает энергию диссоциации двухатомной молекулы D, получены из обработки экспериментальных результатов по теплопроводности инертных газов [15,16]. Возможностями эксперимента определяется и верхняя граница гдля потенциала отталкивания, которая отвечает максимальной температуре инертных газов, равной 5000 K. Эта температура отвечает энергии взаимодействия на границе рассматриваемого интервала примерно 0.36 eV. Теплопроводность инертных газов при этой температуре, используемая для нахождения энергии отталкивания атомов, приведена в табл. 1.

Представим характер восстановления потенциала парного потенциала взаимодействия атомов инертного газа на основе измеренных коэффициентов теплопроводности в инертном газе. Коэффициент теплопроводности одноатомного газа κ, который определяется упругими столкновения атомов, в первом приближении Чепмена–Энскога дается выражением [17,18]



Потенциал парного взаимодействия атомов $U(R)$ как функция расстояния R между ними [10]. Здесь R_e, D — параметры минимума потенциала взаимодействия атомов, R_0, r_o — расстояния между атомами, при которых потенциал парного взаимодействия атомов равен нулю и 0.3 eV соответственно.

$$\kappa = \frac{25\sqrt{\pi T}}{32\sqrt{m}\cdot\Omega^{(2,2)}}, \quad \Omega^{(2,2)} = \int_0^\infty t^2 e^{-t}\sigma^2(g)dt,$$

$$t = \frac{mg^2}{4T}, \quad \sigma_2(g) = \int (1-\cos^2\theta)d\sigma, \qquad (2)$$

где T — температура, выраженная в энергетических единицах, m — масса атомов, g — относительная скорость сталкивающихся атомов, θ — угол рассеяния. В данном случае отталкивательный потенциал взаимодействия резко убывает с увеличением расстояния между атомами. При этом в соответствии с использованным методом Чепмена–Энскога [17,18], который является разложением по моментам, т. е. численному параметру, следующие члены разложения дают вклад примерно 4% в коэффициент теплопроводности. Рассеяние атомов в этом случае соответствует модели твердых сфер, где потенциал взаимодействия атомов характеризуется бесконечной потенциальной стенкой. Учитывая реальный потенциал взаимодействия, который резко зависит от расстояния между атомами в области, определяющей теплопроводность, представим рассматриваемый момент в рассеянии атомов в виде [19,20]:

$$\Omega^{(2,2)} = \frac{2}{3}\pi R_t^2, \quad U(R_t) = 0.83T. \qquad (3)$$

В конечном итоге формула (3) представляет собой разложение по малому параметру, характеризующему резкость изменения потенциала взаимодействия атомов. Эта резкость описывается малым параметром $1/k$, если

Таблица 1. Параметры парного потенциала взаимодействия атомов инертного газа

Атомы	Ne	Ar	Kr	Xe
D, meV	3.6	12	17	24
R_e, A	3.09	3.78	4.01	4.36
α	0.16	0.19	0.10	0.25
$\kappa(5000\,\mathrm{K})$, 0.01 W/(m K)	30.5	12.7	7.53	4.79
r, Å	2.07	2.72	2.92	3.27
n	6.0	5.8	5.5	5.6
R_0, Å	2.75	3.33	3.53	3.85

потенциал взаимодействия атомов при рассматриваемом расстоянии между атомами аппроксимировать зависимостью $U(R) \sim R^{-k}$, причем формула (3) учитывает первые два члена разложения по этому малому параметру. Тем самым точность данной аппроксимации составляет несколько процентов.

Для построения потенциала взаимодействия атомов инертного газа в форме (1) используем экспериментальные значения теплопроводности инертных газов при температуре 5000 K [15,16], точность которых оценивается в 4 %. Значения соответствующих коэффициентов теплопроводности κ при температуре 5000 K приведены в табл. 1, как и значения используемого малого параметра разложения α при этой температуре, который вводится как

$$\alpha = \left(\frac{d \ln \kappa(T)}{d \ln T} - \frac{1}{2} \right)^{1/2}. \qquad (4)$$

Табл. 1 содержит также параметры парного потенциала взаимодействия атомов инертного газа, представленного в форме (1). Как видно, этот потенциал взаимодействия близок к потенциалу Леннарда–Джонса [21]. В табл. 1 приведены значения расстояния между атомами r, при котором потенциал взаимодействия равен $U(r) = 0.36\,\mathrm{eV}$, а также расстояния между атомами R_0, при котором потенциал взаимодействия проходит через нуль $U(R_0) = 0$.

3. Поведение плотного инертного газа на фазовой линии плавления

Казалось бы, поведение рассматриваемого физического объекта, представляющего собой систему атомов с парным взаимодействием атомов — ближайших соседей, может быть проанализировано на основе современной компьютерной техники методом молекулярной динамики. Это позволило бы установить связь между механическими и термодинамическими свойствами системы. Однако, такой подход оказывается тупиковым в силу специфического поведения данной системы. Действительно, изменение конфигурации атомов происходит в результате перехода барьерных переходов между локальными минимумами системы [22,23], так что заметное изменение конфигурации атомов требует слишком большого времени.

Поэтому связь между механическими и термодинамическими свойствами рассматриваемой системы атомов устанавливается в результате усреднения движения отдельного атома на основе метода, описанного в [24]. Это ведет к уравнению состояния [25], связывающего давление и температуру с потенциалом взаимодействия атомов. В частности, для кристалла инертного газа при учете взаимодействия между ближайшими соседями уравнение состояния имеет вид [26]:

$$p = \frac{T}{V(a)} + P(a),\ V(a) = \frac{a^3}{\sqrt{2}},\ P(a) = \frac{4a}{V(a)} \left| \frac{dU(a)}{da} \right|. \qquad (5)$$

где p — давление, T — температура, V — объем, приходящийся на один атом, a — расстояние между ближайшими соседями кристалла, $U(a)$ — потенциал парного взаимодействия атомов при расстоянии a между ними.

Рассмотрим поведение конденсированного инертного газа вблизи фазовой линии плавления. Ограничившись взаимодействием между ближайшими соседями, будем описывать каждое агрегатное состояние, твердое и жидкое, двумя параметрами, именно, средними расстояниями между ближайшими соседями a_s и a_l для твердого и жидкого состояния, а также средними числами заполнения γ_s и γ_l для этих состояний. Согласно определению числа заполнения, среднее число ближайших соседей γ для пробного атома равно $q = 12\gamma$. В этих параметрах уравнения состояния (5) для твердого и жидкого состояний принимают вид

$$p = \frac{\gamma_s T}{V(a_s)} + \gamma_s^2 P(a_s), \quad p = \frac{\gamma_l T}{V(a_l)} + \gamma_l^2 P(a_l). \qquad (6)$$

При этом входящие в формулу (6) параметры определены в формуле (5).

В дополнение к уравнениям состояния на фазовой линии давления справедливо уравнение Клайперона–Клазиуса [27,28], которое в рамках используемого приближения имеет вид

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta Q}{T \Delta V}, \quad \Delta Q = 6\gamma_l U(a_l) - 6\gamma_s U(a_s),$$

$$\Delta V = \frac{V(a_l)}{\gamma_l} - \frac{V(a_s)}{\gamma_s}. \qquad (7)$$

Здесь ΔQ — удельная теплота, затрачиваемая на плавление, а ΔQ — изменение удельного объема (объема, приходящегося на один атом) при плавлении. Полученные уравнения позволяют проанализировать условия, при которых выполняется реальный характер плавления.

Рассматривая фазовый переход в конденсированных инертных газах, мы придерживаемся общими принципами физики агрегатных состояний [29]. Именно, жидкое и твердое агрегатные состояния характеризуются ближним порядком, так что средние расстояния между пробным атомом и его ближайшими соседями близки. Дальний порядок, который действует в результате взаимодействия между не ближайшими соседями, устанавливает кристаллическую структуру атомов в твердом состоянии. В случае конденсированного инертного газа при низких температурах внутренняя энергия определяется взаимодействием ближайших соседей, как это следует из сравнения внутренней энергии кристаллов [30] с энергией взаимодействия ближайших соседей. Полученный вывод о малом вкладе взаимодействия не ближайших соседей во внутреннюю энергию данной системы взаимодействующих атомов распространяется на более широкую область температур и давлений. Тогда твердое и жидкое агрегатные состояния описываются одинаковым образом.

Перепишем уравнения состояния (6) как уравнения для давления и температуры

$$p = \frac{\gamma_s V(a_s)P(a_s) - \gamma_l V(a_l)P(a_l)}{V(a_l)/\gamma_l - V(a_s)/\gamma_s},$$

$$T = \frac{\gamma_s^2 P(a_s) - \gamma_l^2 P(a_l)}{\gamma_s/V(a_s) - \gamma_l/V(a_l)}. \tag{8}$$

При анализе поведения конденсированного инертного газа на фазовой линии плавления в рамках рассматриваемой модели наряду с уравнениями (7) и (8) используем экспериментальные данные для положения фазовой линии плавления. При плавлении в области притяжения атомов объем, приходящийся на один атом, увеличивается, поскольку фазовый переход из твердого состояния с кристаллической структурой атомов, т.е. упорядоченным распределением атомов в пространстве происходит в жидкое состояние с хаотическим распределением атомов. Вместе с тем плавление характеризуется поглощением тепла, т.е. при плавлении в области притяжения атомов выполняются условия

$$\Delta V > 0, \quad \Delta Q > 0. \tag{9}$$

В соответствии с уравнением Клайперона–Клаузиуса (7) это соответствует росту давления с температурой на фазовой линии плавления в области притяжения атомов.

При пересечении точки переключения R_0, так что $U(R_0) = 0$, первое условие (9) выполняется, поскольку хаотическое распределение атомов требует большей плотности атомов, чем упорядоченное при тех же условиях. Второе условие (9) может нарушаться, и в зависимости от сохранения или нарушения этих условий возможен различный характер поведения после прохождения точки переключения [31]. Однако, экспериментальные данные показывают, что давление на фазовой линии плавления растет с ростом температуры, т.е. условия плавления (7) сохраняются в области отталкивания атомов.

Представим критерии, которые обеспечивают выполнение условий (7). Введем параметры

$$\Delta = \frac{a_s - a_l}{a_s}, \quad \delta = \gamma_s - \gamma_l. \tag{10}$$

В соответствии с общими принципами физики агрегатных состояний [30] параметр Δ мал. Далее в тройной точке $\gamma_s = 0.94$ и $\gamma_l = 0.80$. Введем параметр

$$\xi = \frac{\gamma_s \Delta}{\delta}. \tag{11}$$

Далее в рамках используемого приближения выразим через этот параметр рассматриваемые физические величины, считая параметры (10) малыми и разлагая по ним. Тогда уравнения (8) принимают вид:

$$p = \frac{\xi\gamma_s^2\, w(a_s) - \gamma_s^2 P(a_s)}{1 - 3\xi}, \quad w(a_s) = -\frac{d[a_s^3 P(a_s)]}{a_s^2 da_s}.$$

$$T = \frac{k_1 V(a_s)[\xi\gamma_s v(a_s) - 2P(a_s)]}{1 - 3\xi},\ v(a_s) = -a_s \frac{dP(a_s)}{da_s}. \tag{12}$$

Здесь удельный объем V дается в Å^3, величины p, P, w, v выражены в GPa, а температура T дается в K. Коэффициент перевода между этими величинами составляет $k_1 = 72.5\,\text{K}/(\text{Å}^3 \cdot \text{GPa})$. При этом величины u и U выражены в meV. Кроме того, уравнение Клайперона–Клазиуса (7) в новых переменных принимает вид

$$\frac{dp}{dT} = \frac{6k_2[\xi\gamma_s^2 u(a_s) - \gamma_s^2 U(a_s)]}{TV(a_s)(1 - 3\xi)},\ u(a_s) = -a_s \frac{dU(a_s)}{da_s}. \tag{13}$$

причем коэффициент перевода единиц измерения равен $k_2 = 0.16\,\text{GPa} \cdot \text{Å}^3/\text{meV}$. К этим уравнениям добавляется экспериментальная зависимость давления от температуры на фазовой линии плавления.

Таким образом, уравнения (12) и (13) вместе с экспериментальной зависимостью $p(T)$ на фазовой линии плавления связывают термодинамические параметры p и T с механическими параметрами a_s и γ_s, выражая их через величину ξ, которая в соответствии с формулой (11) является параметром точки переключения $a_s \approx R_0$, где $U(R_0) = 0$. Как видно, представленные уравнения дают полное описание конденсированного инертного газа на фазовой линии плавления вблизи точки переключения в рамках использованной модели при заданном потенциале взаимодействия двух атомов инертного газа. В табл. 2 приведены значения величин, которые определяют свойства конденсированных инертных газов на фазовой линии плавления вблизи точки переключения взаимодействия атомов от притяжения к отталкиванию.

Таблица 2. Величины, описывающие поведение конденсированных инертных газов на фазовой линии плавления, вблизи точки переключения от притяжения к отталкиванию атомов

Атомы	Ne	Ar	Kr	Xe
R_0, Å	2.75	3.33	3.53	3.85
$P(R_0)$, GPa	3.8	6.8	7.8	8.6
$w(R_0)$, GPa	520	1300	1600	2200
$v(R_0)$, GPa	80	140	150	170
$u(R_0)$, meV	87	280	350	550
ξ, %	15	10	9.5	7.9
$p(R_0)$, GPa	3.2	5.5	6.2	6.8
$T(R_0)$, 1000 K	0.5	0.7	0.9	1.3

В табл. 2 приведены значения величин, входящих в формулы (12) и (13) в точке переключения знака взаимодействия атомов. Отсюда получим условия, налагаемые на величину параметра ξ, которые имеют вид

$$\frac{1}{3} > \xi > 0.1.$$

Левая часть этого условия ($\xi < 1/3$) отвечает требованию, что при плавлении плотность атомов возрастает. Другая часть этого условия вытекает из требования, чтобы значения давления и температуры оставались положительными величинами.

На основе данных табл. 2 можно упростить соотношения между термодинамическими параметрами конденсированного инертного газа в окрестности точки переключения. В частности, отсюда получаем отношение давления к температуре в этой области, которое не зависит от параметра ξ:

$$\frac{p}{T} = \frac{\gamma_s\, w(R_0)}{v(R_0)V(R_0)}. \tag{14}$$

Отсюда можно найти вклад теплового движения атомов в давление p на основании уравнения состояния (6), который равен

$$\xi(R_0) = \frac{\gamma_s\, T(R_0)}{V(R_0)p(R_0)} = \frac{w(R_0)}{v(R_0)}. \tag{15}$$

Значения этой величины для конденсированных инертных газов вблизи точки переключения приведены в табл. 2. На основе этих значений и уравнения состояния (6) находим давление в точке переключения взаимодействия атомов на фазовой линии плавления согласно формуле

$$p(R_0) = \frac{\gamma_s^2\, P(R_0)}{1 - \xi(R_0)}. \tag{16}$$

Эти значения приведены в табл. 2. Объединяя их с экспериментальными данными для зависимости $p(T)$, определим температуру в точке переключения взаимодействия атомов. Отметим низкую точность этой операции, поскольку используемые данные имеются в графическом виде и получены путем аппроксимации данных из области более низких температур, где температура объекта фиксируется, а также из области более высоких температур, где температура объекта определяется на основе излучения объекта в инфракрасной области спектра. При этом были использованы экспериментальные зависимости давления от температуры $p(T)$ на фазовой линии плавления, представленные в работе [32] для неона, в работе [33] для аргона и криптона, а также в работах [33,34] для ксенона.

Особого внимания заслуживает параметр γ_s, представляющий собой отношение среднего числа ближайших соседей для внутреннего атома к 12, т.е. к соответствующему числу ближайших соседей в кристалле. Значения этого параметра для твердого и жидкого состояний инертного газа при приближении к точке переключения взаимодействия на фазовой линии плавления стремятся сравниться. Очевидно, область значений этого параметра при каждой температуре узкая в силу требования, что при рассматриваемой температуре этот параметр, с одной стороны, относился к состоянию с хаотическим распределением атомов в пространстве и, с другой стороны, отвечал их упорядоченному распределению в кристалле. Отметим, что в тройной точке значение этого параметра для твердого состояния составляет 0.94, а для жидкого равно примерно 0.80 [1,35]. Очевидно, мы сильно не ошибемся, если примем значение этого параметра в точке переключения взаимодействия на фазовой линии плавления равным $\gamma_s = 0.85$. Точность представленных в табл. 2 значений давления и температуры давление в точке переключения взаимодействия атомов на фазовой линии плавления оценивается в $(30-40)\%$.

4. Заключение

При анализе конденсированных инертных газов мы объединяем механические свойства этих систем, используя потенциал взаимодействия атомов как классических частиц, их термодинамические свойства, описывая твердое и жидкое агрегатные состояния температурой и давлением, а также экспериментальные данные. При этом потенциал взаимодействия между атомами носит парный характер, причем согласно измерениям основной вклад во внутреннюю энергию кристалла вносит взаимодействие между ближайшими соседями. На этом основана используемая в работе модель, в рамках которой учитывается взаимодействие между ближайшими соседями. На основании этой модели рассмотрено поведение конденсированных инертных газов на фазовой линии плавления в окрестности точки переключения взаимодействия атомов от притяжения к отталкиванию.

Модель ближнего порядка позволяет выразить термодинамические параметры конденсированных инертных газов на линии плавления через параметры потенциала взаимодействия атомов. Хотя это не дает полного описания рассматриваемой системы атомов даже при использовании экспериментальной линии плавления, однако позволяет связать термодинамические параметры, давление и температуру, со средним расстоянием между ближайшими соседями. Кроме того, отсюда следует, что при движении от тройной точки к области перехода от притяжения к отталкиванию вдоль фазовой линии плавления, скачки энтропии и плотности уменьшаются и становятся в несколько раз меньшими при вхождении в область переключения, чем в тройной точке.

В области притяжения атомов плавление твердого инертного газа сопровождается ростом плотности атомов и поглощением тепла. Плотность атомов увеличивается также при плавлении в области отталкивания атомов, поскольку плавление является переходом от упорядоченного распределения атомов в пространстве к хаотическому. Изменение внутренней энергии при плавлении в области отталкивания атомов могло бы иметь любой знак, однако согласно эксперименту давление на фазовой линии плавления растет с температурой. Поэтому согласно экспериментальным данным и уравнению Клайперона–Клазиуса плавление твердого инертного газа в области отталкивания атомов сопровождается поглощением тепла.

Особенностью движения к точке переключения взаимодействия атомов на фазовой линии плавления является уменьшение скачка плотности атомов и внутренней энергии по мере приближения к точке переключения. В рамках используемой модели с учетом взаимодействие между ближайшими соседями получены критерии, при которых изменение внутренней энергии при плавлении сохраняет свой знак при прохождении точки переключения. При этом отметим, что учет только ближнего порядка взаимодействия для твердого состояния инертного газа, справедливый согласно экспериментальным данным вдали от точки переключения, нарушается при приближении к этой точке. Тем не менее, другие выводы сохраняются.

Существенно, что давление, приводящее к переходу от притяжения к отталкиванию, составляет для твердых инертных газов несколько GPa, тогда как метод алмазной наковальни позволяет проводить измерения вплоть до давления примерно 100 GPa. Поэтому переход инертного газа от притяжения к отталкиванию атомов доступен для экспериментального анализа методом алмазной наковальни. Что касается фазового перехода между твердым и жидким агрегатными состояниями инертного газа, т. е. плавления, то он стремится к фазовому переходу второго рода при приближении к точке переключения взаимодействия атомов, хотя остается фазовым переходом первого рода [36].

Обратим внимание еще на один аспект данного исследования. Одной из его целей было построить потенциал взаимодействия двух одинаковых атомов инертного газа, начиная от дна потенциальной ямы и до меньших расстояний между атомами вплоть до сильного отталкивания. Хотя зависимость потенциала взаимодействия атомов от расстояния R между ними аппроксимируется комбинацией степенных функций $1/R$, это не имеет принципиального значения и он может быть аппроксимирован экспоненциальными зависимостями. Точность полученного потенциала взаимодействия атомов оценивается в 20%. Традиционный метод определения потенциала взаимодействия атомов инертного газа в области отталкивания основан на анализе дифференциального сечения рассеяния быстрых атомов на малые углы, но точность этого метода оценивается коэффициентом порядка 2. Казалось бы, наиболее точный метод может быть основан на измерениях зависимости от давления для удельного объема, найденного из анализа брэгговского рассеяния рентгеновского излучения на сильно сжатом инертном газе, где точность измерения каждой величины оценивается в несколько процентов. Однако, в случае неона потенциалы взаимодействия в области сильного отталкивания, полученные из данных по теплопроводности и параметров сильного сжатия атомов, отличаются почти в два раза [37]. Это расхождение между потенциалами взаимодействия может быть объяснено отсутствием термодинамического равновесия в сильно сжатом неоне. Тем не менее, исследования инертного газа на фазовой линии плавления при высоких давлениях представляет интерес как для понимания поведения инертных газов при экстремальных условиях, так и для анализа потенциала парного взаимодействия атомов.

Финансирование работы

Работа выполнена по гос. заданию министерства науки и высшего образования РФ № FSMG-2023-0011 (ВПК) и № 075-00270-24-00) (БМС).

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

[1] Б.М. Смирнов. УФН **171**, *5*, 1291 (2001).
[2] A. Van Valkenburg, C.E. Weir, E.R. Lippincott, E.N. Bunting. J. Res. Natl. Bur. Stand. Sect. **63A**, 55 (1959).
[3] W.A. Bassett. High Pressure Research **29**, 163 (2009).
[4] R.E. Hemley, C.S. Zha, A.P. Jepcoat. Phys. Rev. **39B**, 11820 (1989).
[5] L.W. Finger, R.M. Hazen, G. Zou. Appl. Phys. Lett. **39**, 892 (1981).
[6] R. Boehler, M. Ross, P. Soderlind, D. Boercker. Phys. Rev. Lett. **86**, 5731 (2001).
[7] M. Ross, R. Boehler, P. Soderlind. Phys. Rev. Lett. **95**, 257801 (2005).
[8] D. Santamarna-Purez, G.D. Mukherjee, B. Schwager, R. Boehler. Phys. Rev. **81B**, 214101 (2010).

[9] A.P. Sutton, J. Chen. Phil. Mag. Lett. **61**, 139 (1990).
[10] G. Mie. Ann. Phys. **11**, 657 (1903).
[11] R.A. Aziz, M.J. Slaman. Chem. Phys. **139**, 187 (1989).
[12] R.A. Aziz, M.J. Slaman. Chem. Phys. **142**, 1030 (1990).
[13] A.K. Dham, A.R. Allnatt, W.J. Meath, R.A. Aziz. Mol. Phys. **67**, 1291 (1989).
[14] A.K. Dham, W.J. Meath, A.R. Allnatt, R.A. Aziz, M.J. Slaman. Chem. Phys. **142**, 173 (1990).
[15] Н.Б. Варгафтик. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. Наука, М. (1972). 658 с.
[16] Н.Б. Варгафтик, Л.П. Филиппов, А.А. Тармазанов, Е.Е. Тоцкий. Справочник по теплопроводности жидкостей и газов. Энергоатомиздат, М. (1990), 725 с.
[17] S. Chapman, T.G. Cowling. The Mathematical Theory of Non-uniform Gases. Cambr. Univ. Press, Cambridge (1952), 326 p.
[18] J.H. Ferziger, H.G. Kaper. Mathematical Theory of Transport Processes in Gases., North Holland, Amsterdam (1972), 443 p.
[19] Л.А. Палкина, Б.М. Смирнов. ТВТ **12**, 37 (1974).
[20] Б.М. Смирнов. УФН **138**, 517 (1982).
[21] J.E. Lennard-Jones, A.E. Ingham. Proc. Roy. Soc. **107** A, 463 (1924).
[22] F.H. Stillinger, T.A. Weber. Phys. Rev. **25** A, 978 (1982).
[23] F.H. Stillinger, T.A. Weber. Phys. Rev. **28** A, 2408 (1983).
[24] E. Gruneisen E. Ann. Physik **344**, 257 (1912).
[25] J.O. Hirschfelder, F. Charles, Ch.F. Curtiss, R.B. Bird. Molecular Theory of Gases and Liquids. Wiley, New York (1964), 538 p.
[26] B.M. Smirnov. Principles of Statistical Physics. Wiley, Weinheim (2006), 325 p.
[27] M.C. Clapeyron. J. de l'Ecole polytech. **23**, 153 (1834).
[28] R. Clausius. Ann. Phys. **79**, 368 (1850).
[29] J.M. Ziman. Principles of the Theory of Solids. Cambr. Univ. Press, Cambridge (1979), 366 p.
[30] V.A. Rabinovich. Thermophysical Properties of Neon, Argon, Krypton, and Xenon. Hemisphere, Washington (1988), 354 p.
[31] С.М. Стишов. УФН **114**, *1*, 3 (1974).
[32] N.V. Nghia, H.K. Hieu, D.D. Phuong. Vacuum **196**, 110725 (2018).
[33] A.G.M. Ferreira, L.J.J. Lobo. Chem. Thermodynamics 40, 618 (2008).
[34] M. Ross, R. Boehler, P. Soderlind. Phys. Rev. Lett. **95**, 257801 (2005).
[35] B.M. Smirnov, R.S. Berry. Phase Transitions of Simple Systems. Springer, Berlin (2008), 247 p.
[36] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Часть 1. Наука, М. (1976), 584 с.
[37] B.M. Smirnov. Int. Rev. At. Mol. Phys. **17**, 13 (2025).

Редактор Ю.Э. Китаев