Письма в ЖЭТФ, том 95, вып. 1, с. 33 – 36 © 2012 г. 10 января

Парное эффективное межпротонное взаимодействие и металлизация водорода

В. Т. Швец[1)]

Одесская государственная академия холода, 65082 Одесса, Украина

Поступила в редакцию 17 ноября 2011 г.

После переработки 28 ноября 2011 г.

В работе рассчитано парное эффективное межпротонное взаимодействие в металлическом водороде при различных плотностях. В потенциале парного взаимодействия, который может быть представлен в виде ряда теории возмущений по электрон-протонному взаимодействию, учтены члены второго и третьего порядков теории возмущений. Учет только члена второго порядка дает сравнительно неглубокую потенциальную яму с одним минимумом. Положение минимума соответствует взаимному равновесному положению протонов в металлическом водороде. При учете члена третьего порядка потенциал имеет уже два характерных минимума, положение одного из которых соответствует расстоянию между протонами в молекуле водорода. Глубины этих потенциальных ям зависят от плотности системы. При достаточно высоких плотностях в парном потенциале остается только потенциальная яма, соответствующая равновесному расположению протонов в металлической фазе. Наличие парного эффективного потенциала двух минимумов позволяет оценить плотность водорода в точке перехода в металлическое состояние. Анализ парного эффективного взаимодействия позволяет также оценить и возможность существования металлического водорода в стабильном состоянии при сравнительно невысоких температурах.

Проблема металлизации водорода давно привлекала внимание физиков [1]. Задолго до получения металлического водорода в лабораторных условиях он уже интенсивно исследовался теоретически (см., например, [3, 4]). Развитие экспериментов по ударному сжатию вещества привело к экспериментальному открытию сначала водорода и дейтерия [5, 6], а затем и кислорода [7]. Это послужило стимулом к интенсивному исследованию различных аспектов металлизации водорода (см., например, [8–16]. Однако многие аспекты металлического состояния водорода до сих пор исследованы мало. К ним относится проблема стабильности металлического водорода в нормальных условиях. Поскольку плотность водорода в металлическом состоянии, полученном в работе [4], являлась не измеряемой, а вычисляемой величиной, интерес представляет и независимое вычисление плотности в точке перехода в металлическое состояние. Важной характеристикой металлического водорода, которая может помочь в исследовании перечисленных проблем, является парное эффективное межпротонное взаимодействие.

Известно, что все свойства металлического водорода, связанные с наличием у него электронной подсистемы, можно рассматривать в рамках теории возмущений по электрон-протонному взаимодействию [17]. При этом члены старшего порядка вблизи точки перехода в металлическое состояние весьма существенны [2, 18] при исследовании и равновесных, и кинетических свойств металлического водорода.

Парное эффективное межпротонное взаимодействие также может быть представлено рядом теории возмущений по электрон-протонному взаимодействию [17]. При этом особый интерес представляет член третьего порядка. К сожалению, по этой теме имеется лишь одна работа [19]. Авторам этой работы ничего не было известно о реальном открытии металлического водорода. Проведенные в ней расчеты не привязаны к конкретным известным параметрам точки перехода в металлическое состояние.

Данная работа посвящена исследованию парного эффективного межпротонного взаимодействия в металлическом водороде в широком диапазоне плотностей, включая плотности в окрестности перехода полупроводник–металл. Ее целью является оценка плотности в точке перехода в металлическое состояние и его стабильности.

Парное эффективное межпротонное взаимодействие можно представить в виде следующего ряда [17]:

$$U(R) = \sum_{n=0}^{\infty} U_2^{(n)}(R).$$

Здесь R – расстояние между протонами, $U_2^{(0)}(R) = e^2/R$ – прямое кулоновское взаимодействие между протонами, член первого порядка по потенциалу

[1)]e-mail: tarval@breezein.net

электрон- протонного взаимодействия $U_2^{(1)}(R) = 0$, член второго порядка

$$U_2^{(2)}(R) = -\frac{e^2}{2\pi^2 R}\int_0^\infty w^2(q)\frac{\pi_0(q)}{\varepsilon(q)}\sin(qR)qdq,$$

член третьего порядка

$$U_2^{(3)}(R) = \frac{3e^2}{4\pi^4 R}\int_0^\infty dq_1 q_1 \sin(q_1 R)\int_0^\infty dq_2 q_2^2 \times$$

$$\times \int_{|q_1-q_2|}^{q_1+q_2} dq_3 \frac{w(q_1)w(q_2)w(q_3)}{\varepsilon(q_1)\varepsilon(q_2)\varepsilon(q_3)}\Lambda_0^{(3)}(q_1,q_2,q_3),$$

где $\pi_0(q)$ – поляризационная функция невзаимодействующего электронного газа. Эффективная диэлектрическая проницаемость электронного газа в приближении случайных фаз при учете обменного взаимодействия и корреляций в приближении локального поля имеет вид

$$\varepsilon(q) = 1 + [v(q) + \tilde{v}(q)]\pi_0(q),$$

где $\tilde{v}(q)$ – фурье-образ локального потенциала обменного взаимодействия и корреляций электронов проводимости, $\nu(q) = 4\pi e^2/q^2$, $w(q) = -v(q)$ – фурье-образы кулоновских потенциалов электрон-электронного и электрон-протонного взаимодействий соответственно, $\Lambda_0^{(3)}(q_1,q_2,q_3)$ – электронный трехполюсник невзаимодействующего электронного газа [17].

Отметим, что электронный газ является сильно вырожденным. Если ориентироваться на значение плотности водорода в точке перехода в металлическую фазу, приведенное в работе [4], то энергия Ферми, выраженная в градусах Кельвина, составит 224000 K. Для металла это чрезвычайно высокая энергия, даже с учетом того обстоятельства, что ионизованной может являться только часть молекул водорода (в точке перехода – примерно 40% [5, 15]). Водород нами рассматривается при температурах в несколько тысяч градусов (в точке перехода в металлическое состояние 3000 K). Поэтому температурные поправки к полученным результатам будут порядка нескольких процентов. Во-первых, это примерно соответствует величине таких поправок при расчете парного эффективного межионного взаимодействия для большинства металлов при температурах их плавления (обычно этими поправками пренебрегают). Во-вторых, погрешность расчетов, связанная с пренебрежением этими поправками, значительно меньше погрешностей, связанных с рядом других факторов, речь о которых будет идти ниже. Поэтому далее мы будем рассматривать электронный газ при нулевой температуре, пренебрегая соответствующими температурными поправками.

Ниже приводятся зависимости парного эффективного потенциала от расстояния между протонами.

Как видно из рис. 1, член третьего порядка существенно влияет на поведение парного эффективного взаимодействия между протонами. При его учете меняется как глубина потенциальной ямы, так и ее положение. Ближайшая к началу координат потенциальная яма, возникающая во втором порядке теории возмущений, становится в несколько раз глубже, а положение ее минимума смещается в сторону меньших расстояний между протонами. Минимум этой потенциальной ямы соответствует равновесному расстоянию между протонами в металлическом водороде. При плотности системы 0.448 г/см^3 равновесное расстояние составляет $R_1 = 4.1$ а.е. Глубина этой потенциальной ямы равна 997 K.

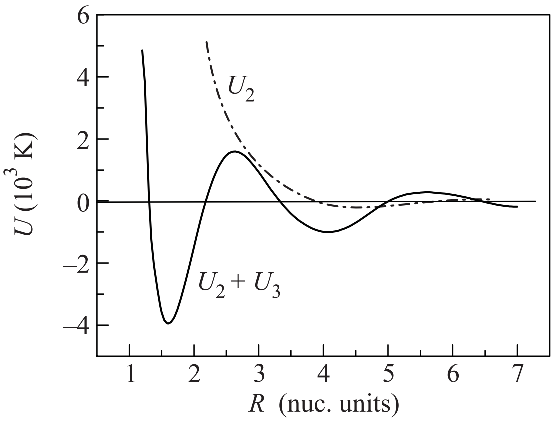

Рис. 1. Парное эффективное взаимодействие между протонами при плотности 0.448 г/см^3

Наиболее интересной особенностью, возникающей при учете члена третьего порядка теории возмущений, является появление еще одной потенциальной ямы, расположенной гораздо ближе к началу координат. Минимум этой потенциальной ямы находится на расстоянии $R_2 = 1.6$ а.е. от начала координат. Это расстояние чуть больше расстояния между протонами в молекуле водорода (1.4 а.е.) и несколько меньше расстояния между протонами в положительном ионе водорода (2 а.е.). Наличие такой потенциальной ямы указывает на конкуренцию между возможностями существования водорода в молекулярном и металлическом состояниях. Такой вывод хорошо согласуется с результатами работы [20], где показано, что в ударно-волновом эксперименте ионизация водорода должна происходить в молекулярной фазе с образованием молекулярного иона. Глубина этой потенциальной ямы в несколько раз больше глубины потенциальной ямы, соответствующей металлической связи между протонами. Она составляет 3.947 К. При таком соотношении глубин двух указанных потенциальных ям логично предположить, что энергетически более выгодным является существование водорода в молекулярном состоянии.

При несколько большей плотности, 0.53 г/см^3 (см. рис. 2), глубины потенциальных ям, соответствую-

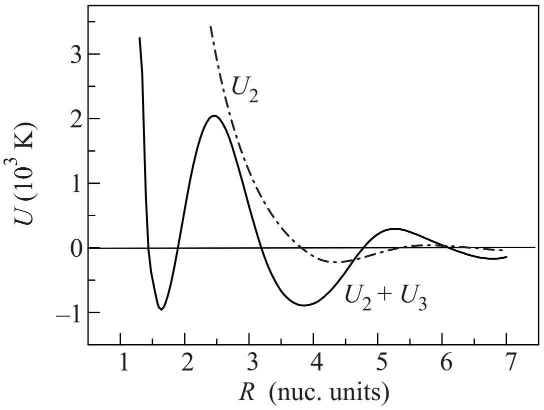

Рис. 2. Парное эффективное взаимодействие между протонами при плотности 0.53 г/см^3

щих молекулярному и металлическому состояниям водорода, выравниваются. Это говорит о близости по энергиям молекулярного и металлического состояний. Скорее всего, приведенная плотность, 0.53 г/см^3, находится в непосредственной близости от точки перехода водорода в металлическое состояние. Вполне реалистичным является предположением о том, что точка перехода водорода из молекулярного состояния в металлическое лежит в интервале плотностей [0.5 г/см^3, 0.6 г/см^3].

При еще большей плотности, 0.64 г/см^3, потенциальная яма, соответствующая молекулярному состоянию водорода, при отрицательных энергиях исчезает (см. рис. 3). Этот факт можно интерпретировать как полную металлизацию водорода. Это значение плотности интересно тем, что именно оно было заявлено авторами открытия металлического водорода [4] как плотность водорода в точке перехода металл–полупроводник. На самом деле к этому значению плотности, как уже говорилось выше, нужно относиться с некоторой осторожностью, поскольку оно являлось расчетным, а не измеренным.

Наконец, при еще большей плотности, 0.784 г/см^3, парное эффективное взаимодействие принимает традиционный для типичных металлов вид (см. рис. 4).

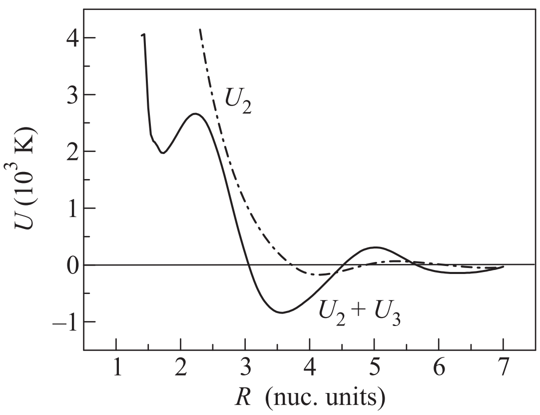

Рис. 3. Парное эффективное взаимодействие между протонами при плотности 0.64 г/см^3

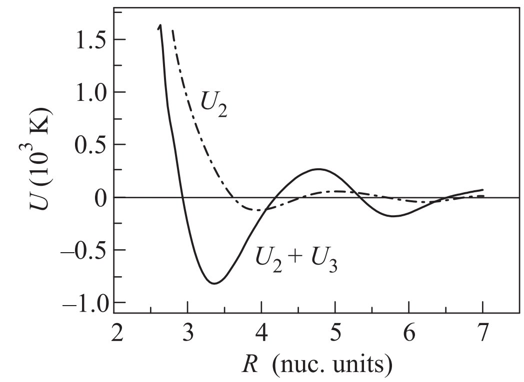

Рис. 4. Парное эффективное взаимодействие между протонами при плотности 0.784 г/см^3

При дальнейшем увеличении плотности глубина потенциальной ямы медленно убывает, а ее минимум несколько смещается к началу координат. При плотности 2 г/см^3 глубина составляет примерно 100 К.

Таким образом, только учет старших порядков теории возмущений при нахождении парного эффективного потенциала межпротонного взаимодействия позволяет проследить поведение этого взаимодействия в непосредственной окрестности точки перехода водорода в металлическое состояние. С нашей точки зрения, он также важен при обсуждении вопроса об устойчивости водорода в металлическом состоянии. Согласно данным расчетам в широком интервале плотностей глубина потенциальной ямы, соответствующей металлической связи протонов, составляет около 1000 К. Выше этой температуры водород, скорее всего, не может находиться в стабильном жидком состоянии, а представляет собой полностью ионизованную водородную плазму. Напомним, что экспериментально металлическое состояние водорода было получено при температуре 3000 К (это значение температуры – также расчетное, а не измеренное [4]). Ниже температуры 1000 К, в том числе при комнатной температуре, водород вполне мог бы находиться в стабильном жидком металлическом состоянии. Во всяком случае это не противоречит результатам наших расчетов. Имеются убедительные доказательства того, что существование металлического водорода в твердом состоянии невозможно [21]. Согласно этой работе, единственной твердой фазой водорода является его молекулярная фаза. Переход водорода в металлическое состояние означает переход в состояние квантовой жидкости благодаря квантовым нулевым колебаниям атомов.

В заключение отметим, что к полученным результатам следует относиться как к полезным оценкам. Остается открытым вопрос о роли при расчете парного эффективного межпротонного взаимодействия членов более высоких, чем третий порядков теории возмущений. Известную неопределенность в полученные результаты вносит и приближение локального поля, использованное нами при учете обменного взаимодействия и корреляций электронов проводимости. В данной работе для последнего взято приближение Гелдарта–Воско [22], уже использовавшееся ранее в классических работах [2, 17], посвященных в том числе и проблеме металлического водорода.

1. E. Wigner and H. B. Huntington, J. Chem. Phys. **3**, 764 (1935).
2. Е. Г. Бровман, Ю. Каган, А. Холас, ЖЭТФ **61**, 2429 (1971).
3. D. J. Stevenson and N. W. Ashcroft, Phys. Rev. A **9**, 782 (1974).
4. S. T. Weir, A. C. Mitchell, and W. J. Nellis, Phys. Rev. Lett. **76**, 1860 (1996).
5. В. Е. Фортов, В. Я. Терновой, С. В. Квитов и др., Письма в ЖЭТФ **69**, 874 (1999).
6. V. Ya. Ternovoi, A. S. Filimonov, V. E. Fortov et al., Physica B **265**, 6 (1999).
7. M. Bastea, A. C. Mitchell, and W. J. Nellis, Phys. Rev. Lett. **86**, 3108 (2001).
8. В. Е. Фортов, В. Я. Терновой, М. В. Жерноклетов и др., ЖЭТФ **124**, 288 (2003).
9. С. К. Гришечкин, С. К. Груздев, В. К. Грязнов и др., Письма ЖЭТФ **80**, 452 (2004).
10. W. J. Nellis, Rep. Prog. Phys. **69**, 1479 (2006).
11. V. S. Filinov, V. E. Fortov, M. Bonitz, and P. R. Levashov, Письма ЖЭТФ **74**, 422 (2001).
12. Е. Г. Максимов, Ю. Т. Шилов, УФН **169**, 1223 (1999).
13. В. Е. Фортов, УФН **177**, 347 (2007).
14. В. В. Кечин, Письма ЖЭТФ **79**, 46 (2004).
15. В. Т. Швец, А. С. Власенко, А. Д. Буханенко, Письма в ЖЭТФ **86**, 625 (2007).
16. В. Т. Швец, ЖЭТФ **131**, 743 (2007).
17. Е. Г. Бровман, Ю. М. Каган, УФН **112**, 369 (1974).
18. В. Т. Швец, ФММ **103**, 346 (2007).
19. S. D. Kaim, N. P. Kovalenko, and E. V. Vasiliu, J. of Physical Studies **4**, 589 (1997).
20. С. И. Анисимов, Ю. В. Петров, Письма в ЖЭТФ **65**, 397 (1997).
21. В. В. Кечин, Письма в ЖЭТФ **79**, 46 (2004).
22. D. J. M. Geldart and S. H. Vosko, Can. J. Phys. **44**, 2137 (1966).