

К ВОПРОСУ О МЕЖИОННОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ В МЕТАЛЛИЧЕСКОМ ВОДОРОДЕ

Н.П.Коваленко, Л.М.Кузьмина, Г.Майер

Рассчитывается потенциал эффективного межоионного взаимодействия в металлическом водороде. Показано, что члены третьего порядка по электрон-ионному взаимодействию играют принципиальную роль в формировании ион-ионного взаимодействия.

Проблема металлического водорода (МВ) в последнее время привлекает большое внимание [1 – 5]. Анализ возможных типов структур МВ [3, 4] привел к выводу о своеобразных жидкостных тенденциях в МВ под давлением. Вопрос о возможном переходе водорода из молекулярной фазы в жидкометаллическую может быть решен только прямым расчетом термодинамического потенциала жидкой фазы, что, в свою очередь, требует знания потенциала межчастичного взаимодействия. В настоящей работе приведены результаты расчета потенциала эффективного межоионного взаимодействия $\Phi(R)$ в МВ.

Как показано в [6], потенциал эффективного межоионного взаимодействия в металле формируется из прямого и косвенного взаимодействий

ионов: Применение теории возмущений по псевдопотенциалу электронного взаимодействия (ПП) приводит к представлению $\Phi(R)$ в виде ряда

$$\Phi(R) = \Phi_2(R) + \Phi_3(R) + \dots, \quad (1)$$

где индекс у $\Phi(R)$ показывает порядок по ПП. Термодинамические свойства жидких щелочных металлов удовлетворительно описываются при учете в (1) только $\Phi_2(R)$ [7], которое имеет характерную форму типа потенциала Леннарда - Джонса с незначительными осцилляциями на больших расстояниях. Для МВ глубина минимума $\Phi_2(R)$ очень мала [8, 9], поэтому необходимо учесть следующие члены ряда теории возмущений. Вклад членов третьего порядка по ПП в парное ион-ионное взаимодействие получается с помощью общей теории [6] и может быть представлены в виде

$$\Phi_3(R) = \frac{1}{4\pi^4} \int_0^\infty dq_1 \frac{w(q_1)}{\epsilon(q_1)} q_1 \int_0^\infty dq_2 \frac{w(q_2)}{\epsilon(q_2)} q_2 \int_{-1}^1 dz \frac{w(\kappa)}{\epsilon(\kappa)} \times \\ \times \Lambda_0^{(3)}(q_1, q_2, \kappa) \left\{ \frac{\sin[(q_1 + q_2 z)R]}{(q_1 + q_2 z)R} + \frac{2\sin(q_1 R)}{q_1 R} \right\}. \quad (2)$$

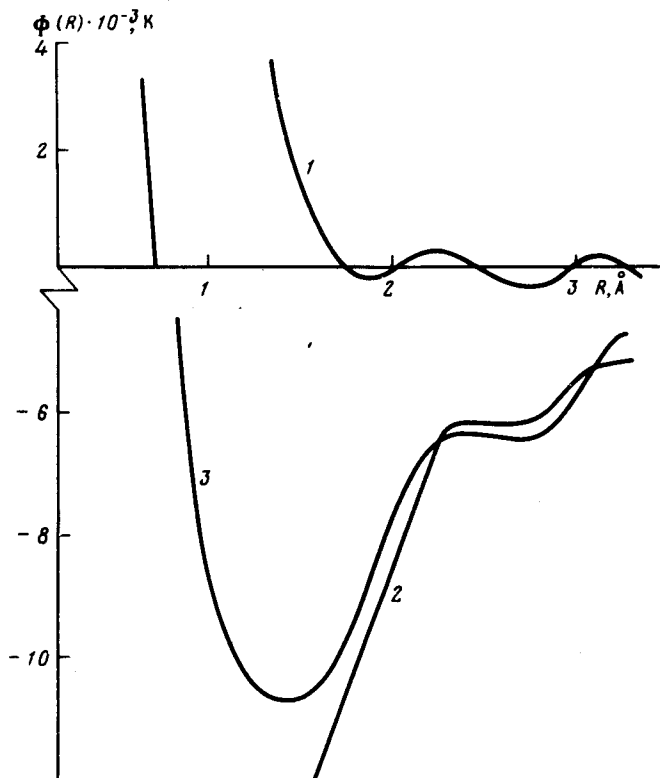


Рис. 1

где $u(q)$ – формфактор ПП (для водорода $4\pi e^2/q^2$), $\kappa = (q_1^2 + q_2^2 + 2q_1q_2z)^{1/2}$, $\Lambda_0^{(3)}(q_1, q_2, \kappa)$ – неприводимый 3-полусник, $\epsilon(q)$ – эффективная диэлектрическая проницаемость (см. [6]).

Расчет $\Phi(R)$ для МВ по формуле (1) с учетом (2) был проведен на ЭВМ. Поляризационный оператор, входящий в $\epsilon(q)$, был выбран в форме, предложенной Гелдартом и Воско [10],

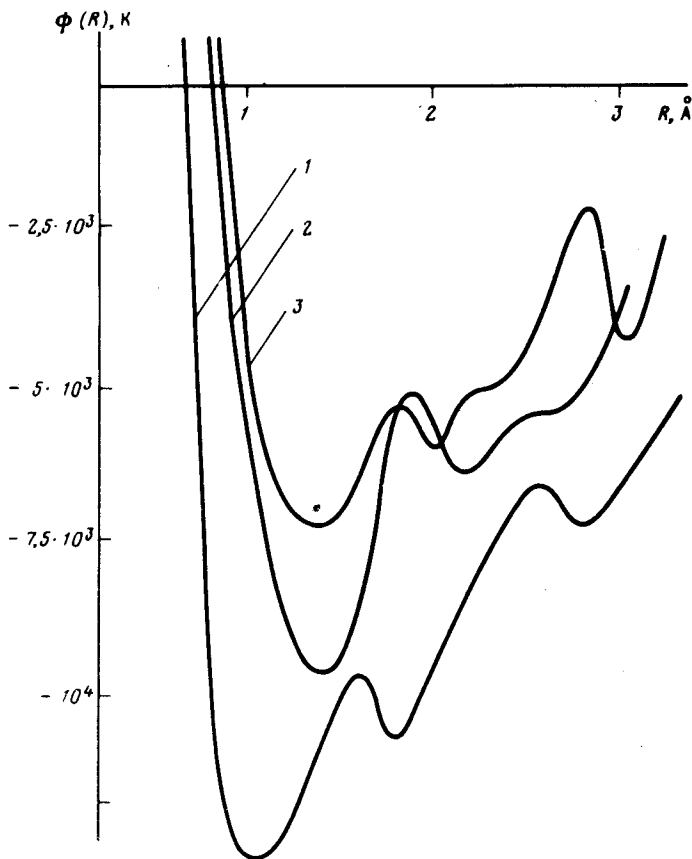


Рис. 2

На рис. 1 представлены результаты расчетов отдельных вкладов в $\Phi(R)$ при плотности, соответствующей $r_s = 1,45$ (r_s – стандартное обозначение для радиуса сферы, соответствующей атомному объему, выраженного в боровских радиусах). Учет лишь членов второго порядка (кривая 1) не приводит к формированию потенциальной ямы, что согласуется с расчетами [8, 9], а также с результатами [3, 4]. Вклад члена третьего порядка $\Phi_3(R)$ (кривая 2) играет решающую роль при определении $\Phi(R)$ и приводит к появлению глубокого минимума на результирующей кривой 3. Отметим, что аналогичные расчеты для щелочных металлов также приводят к значительному увеличению глубины потенциальной ямы за счет $\Phi_3(R)$ ($\sim 25\%$).

Было проведено также исследование формы $\Phi(R)$ в зависимости от давления, в интервале r_s от 1,05 до 1,6. (Если воспользоваться уравнением состояния МВ, полученным в [5], то приведенный интервал соответствует давлениям от нуля до 10 Мбар). Кривые 1, 2, 3 на рис. 2 относятся к $r_s = 1,6; 1,25$ и $1,05$ соответственно. Как следует из приведенных рисунков, изменение давления приводит к изменению глубины потенциальной ямы. Уменьшение глубины минимума с ростом давления соответствует возрастанию отталкивательного вклада в энергию от прямого ион-ионного взаимодействия, отмеченного в [3]. Далее, в отличие от простых жидких металлов, на кривой $\Phi(R)$ появляется несколько минимумов. Наличие таких минимумов свидетельствует об изменении структуры МВ, сопровождающемся перестройкой ближнего порядка и изменением координационных чисел, и в известной степени отражает наличие разных структур и возможность фазовых переходов в кристаллической фазе.

Сравнение рис. 1 и рис. 2 также показывает, что изменение давления приводит к чередованию более симметричных и менее симметричных структур, как это имеет место и для твердой фазы.

Располагая данными о $\Phi(R)$, можно рассчитать термодинамические свойства МВ в жидкой фазе. При этом возникает задача определения радиальной функции распределения и учета неприводимых 3-частичных вкладов в термодинамические характеристики.

Авторы выражают признательность В.М.Адамяну, Ю.П.Красному и И.З.Фишеру за полезные обсуждения.

Одесский
государственный университет
им. И.И.Мечникова

Поступила в редакцию
3 июля 1978 г.

Литература

- [1] В.П.Трубицын. ФТТ, 8, 862, 1966.
- [2] Л.Ф.Верещагин, Е.Н.Яковлев, Ю.А.Тимофеев. Письма в ЖЭТФ, 21, 190, 1975.
- [3] Е.Г.Бровман, Ю.Каган, А.Холас. ЖЭТФ, 61, 2429, 1971.
- [4] Е.Г.Бровман, Ю.Каган, А.Холас. ЖЭТФ, 62, 1492, 1972.
- [5] Ю.Каган, В.В.Пушкарев, А.Холас. ЖЭТФ, 73, 967, 1977.
- [6] Е.Г.Бровман, Ю.М.Каган. УФН, 112, 369, 1974.
- [7] Ю.П.Красный, В.П.Онищенко. УФЖ, 17, 1704, 1972.
- [8] T.Schneider, E.Stoll. Helv. Phys. Acta, 43, 453, 1970.
- [9] D.J.Stevenson, N.W.Ashcroft. Phys. Rev., 9A, 728, 1974.
- [10] D.Heldart, S.H.Vosko. Can. J. Phys., 44, 2137, 1966.