

Письма в ЖЭТФ, том 18, вып. 4, стр. 269 – 273

20 августа 1973 г.

**РОЛЬ ЭЛЕКТРОН-ЭЛЕКТРОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
В ФОРМИРОВАНИИ МЕТАСТАБИЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ
МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ВОДОРОДА**

Е. Г. Бровман, Ю. Каган, А. Холас, В. В. Пушкарев

Анализируется вопрос об устойчивости получаемых для металлической фазы водорода результатов по отношению к изменениям характера приближений при учете электрон-электронного взаимодействия.

1. В работах [1] был рассмотрен вопрос о принципиальной возможности существования и структуре метастабильной фазы металлического

го водорода. Для этого был проведен анализ энергии, статической и динамической стабильности для всех решеток Бравэ, а также ряда двухатомных решеток. Наиболее существенные из полученных результатов могут быть сведены к следующим: 1) металлическая фаза водорода является при давлении равно нулю метастабильным, локально устойчивым состоянием; 2) все симметричные (к кубические) структуры неустойчивы; 3) минимум энергии реализуется на резко анизотропной структуре; 4) метастабильное состояние является стабильным в отношении распада на атомы (перехода в атомную фазу).

2. Рассмотрение в [1] основывалось на использовании теории возмущения по электрон-ионному взаимодействию (см. [2], а также обзор [3]) с удержанием членов до третьего порядка и приближенном учете электрон-электронного взаимодействия во всех членах ряда. Естественно, возникает вопрос об устойчивости сформулированных выше результатов по отношению к улучшению (изменению) характера приближений.

В настоящей статье мы приведем результаты анализа роли изменения характера приближения при учете электрон-электронного взаимодействия, демонстрирующего качественную устойчивость полученных результатов. Вопрос о влиянии более высоких членов разложения по электрон-ионному взаимодействию будет рассмотрен в отдельной работе.

3. В последнее время был достигнут определенный прогресс в нахождении статического поляризационного оператора $\pi(q)$ при промежуточных значениях электронной плотности (см., например, [4, 5]). Его величина полностью определяет $E^{(2)}$ и экранировку внешних линий электрон-ионного взаимодействия в $E^{(3)}$, и поэтому интересно проделать расчет в рамках улучшенных приближений для $\pi(q)$. (В [1] использовалось приближение Хаббарда с учетом теоремы сжимаемости).

Кроме того, можно улучшить приближение для неприводимого трехполюсника в $E^{(3)}$, учитывая в каждой вершине возможность обмена электрона, рассеивающегося на ионах, с экранирующим его фоном [3, 6]. Для этого заметим, что работы, анализирующие поведение $\pi(q)$, приводят к выражению вида

$$\pi(q) = \pi_0(q) / [1 - (4\pi e^2 / q^2) G(q) \pi_0(q)]. \quad (1)$$

($\pi_0(q)$ — простая петля, $G(q)$ — функция, определяющая поправку на локальное поле в данной теории). Рассматривая характере приближений для $\pi(q)$, нетрудно понять, что фактически они эквивалентны замене точной вершины (рис. 1,а) на приближенную, зависящую лишь от переданного импульса

$$T(p, q) \approx T(q) = [1 - (4\pi e^2 / q^2) G(q) \pi_0(q)]^{-1}. \quad (2)$$

Действуя аналогичным образом для трехполюсника, получим (рис. 1,б)

$$\Gamma^{(3)}(q_1, q_2, q_3) = \Lambda_0^{(3)}(q_1, q_2, q_3) / \tilde{\epsilon}(q_1) \tilde{\epsilon}(q_2) \tilde{\epsilon}(q_3), \quad (3)$$

$$\tilde{\epsilon}(q) = \epsilon(q) / T(q) = 1 + (4\pi e^2 / q^2) [1 - G(q)] \pi_0(q).$$

Здесь $\Lambda_0^{(3)}$ – кольцевая диаграмма с тремя импульсами внешнего статического поля (см. [1, 3]).

Подчеркнем, что в (1) и (3) входит одна и та же функция $G(q)$. Только при этом условии, в частности, выполняется найденное в [7] точное соотношение между двухполюсником и трехполюсником, когда в последнем один из импульсов стремится к нулю.

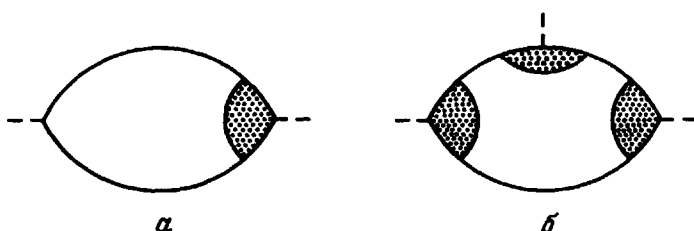


Рис. 1

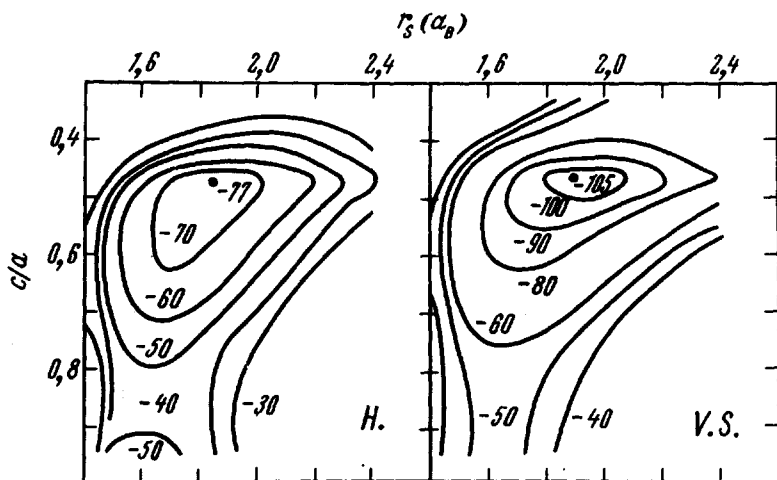


Рис. 2

4. Мы провели вычисление энергии металлической фазы водорода, используя приближения (1), (3) для трех функций $G(q)$: G_{V5} [4], G_{TW} [5], G_H [1]. Оказалось, что результаты качественно подобны, хотя, разумеется, численно различаются.

В таблице приведены значения энергии и равновесная величина $r_s (P = 0)$ для трех кубических решеток и простой гексагональной решетки, которая снова оказалась оптимальной. Все кубические структуры неустойчивы – в последней графе таблицы указаны те модули упругости, которые отрицательны, и тем самым ясен характер длинноволновой неустойчивости. У всех одноосных структур минимум энергии соответствует резко анизотропным структурам, причем соответствующие c/a еще меньше, чем в [1]. (Сохраняется "нитяной" характер структур). Для простой гексагональной структуры значения $(c/a)_{min}$ близки для разных форм $G(q)$ и составляют $\approx 0,47$.

Существенно, что значение энергии в минимумах всех структур уменьшилось, т.е. энергия связи возросла по сравнению с результата-

Тип решетки	$G(q)$	r_s, aB	$E, \text{ридберги}$	Неустойчивые модули
ОЦК	H	1,626	-1,047	$B_{2,2}, B_{4,4}$
	VS	1,629	-1,050	$B_{2,2}, B_{4,4}$
	TW	1,639	-1,056	$B_{2,2}, B_{4,4}$
ГЦК	H	1,625	-1,048	$B_{4,4}$
	VS	1,629	-1,051	$B_{4,4}$
	TW	1,639	-1,057	$B_{4,4}$
ПК	H	1,645	-1,054	$B_{2,2}$
	VS	1,651	-1,059	$B_{2,2}$
	TW	1,665	-1,067	$B_{2,2}$
ПГ	H	1,856	-1,077	-
	VS	1,903	-1,105	-
	TW	2,009	-1,141	-

ми [1]. Следует отметить, что минимум в ПГ структуре лежит вблизи неаналитичности "трехполюсника". В этой области, строго говоря, необходимо учитывать щели в электронном спектре, что может слегка изменить $(c/a)_{min}$ и соответствующее значение E_{min} . На рис. 2 изображены для ПГ структуры изоэнергетические уровни, позволяющие проанализировать характер формирования "металлического" минимума и барьеры, окружающие его. Для сравнения приведены данные для G_H и G_{V5} . Видно, что в обоих случаях поведение линий уровней подобно. Сам минимум вследствие усиления $E^{(3)}$ сместился в сторону больших r_s по сравнению с [1]. (Как отмечено в [1], $E^{(3)} \sim r_s$, а $E^{(2)} \approx \text{const}$). Реальное уточнение равновесного r_s , по-видимому, может быть достигнуто лишь при учете членов более высокого порядка по электрон-ионному взаимодействию. Особенно существенен выход за рамки принятого приближения при переходе к еще более искаженным структурам, где резко возрастает вклад от ближайших узлов обратной решетки.

Таким образом, все полученные в [1] качественные результаты сохраняются при переходе к более последовательному учету электрон-электронного взаимодействия и при одновременном варьировании формы приближенной функции $G(q)$.

Отметим в заключение, что в опубликованной недавно работе [6] было фактически использовано ошибочное представление для $\Lambda_0^{(3)}$, (точное выражение приведено, например, в [3, 8]), в связи с чем все утверждения о положении энергетического минимума и роли электрон-электронного взаимодействия неверны.

Институт атомной энергии
им. И.В.Курчатова

Поступила в редакцию
3 июля 1973 г.

Литература

- [1] Е.Г.Бровман, Ю.Каган, А.Холас. ЖЭТФ, 61, 2429, 1971; 62, 1498, 1972.
- [2] Е.Г.Бровман, Ю.Каган, А.Холас. ЖЭТФ, 52, 557, 1967.
- [3] E.G.Brovman, Y.Kagan. Phonons in nontransition metals in "Lattice dynamics" ed. by A.A.Maradudin. Northolland Press, 1973.
- [4] P.Vashista, K.S.Singwi. Phys. Rev., B6, 875, 1972.
- [5] F.Toigo, T.O.Woodruff. Phys. Rev., B2, 3958, 1970; 4, 4312, 1971.
- [6] С.В.Иорданский, О.В.Локуциевский, Е.Б.Вул, Л.А.Сидорович, А.М.Финкельштейн. Письма в ЖЭТФ, 17, 530, 1973.
- [7] Е.Г.Бровман, Ю.Каган. ЖЭТФ, 57, 1329, 1969.
- [8] Е.Г.Бровман, Ю.Каган, А.Холас. ЖЭТФ, 61, 737, 1971.