

О НЕУСТОЙЧИВОСТИ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ВОДОРОДА ПО ОТНОШЕНИЮ К МАЛЫМ ИЗМЕНЕНИЯМ В УЧЕТЕ ЭЛЕКТРОН-ЭЛЕКТРОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

*С. В. Иорданский, О. В. Локуцкий, Е. Б. Вул,
Л. А. Сидорович, А. М. Финкельштейн*

Путем численных расчетов находилась энергия связи металлического водорода при нулевом давлении во втором и третьем порядке теории возмущений. Показано, что малые изменения в учете электрон-электронного взаимодействия могут привести к исчезновению метастабильного "металлического" минимума полной энергии.

Вопрос о существовании метастабильного металлического водорода вызывает значительный интерес и обсуждался в ряде работ [1 – 3].

Наиболее фундаментальные расчеты возможной метастабильной структуры при нулевом давлении были произведены в работе [2] и привели к неожиданному выводу о существовании метастабильной нитевидной структуры, в которой протоны близко расположены вдоль параллельных нитей, пересечение которых перпендикулярной плоскостью происходит на решетке из правильных треугольников.

В работе [2] энергия связи вычислялась с учетом членов второго и третьего порядка теории возмущений по электрон-протонному взаимодействию. При этом производился ряд приближений, связанных с неточностью учета взаимодействия электронов между собой. В члене второго порядка это сводится к неточности используемой формулы для диэлектрической проницаемости однородного электронного газа. В члене третьего порядка также имеются корреляционные поправки, которые в работе [2] не учитывались вовсе.

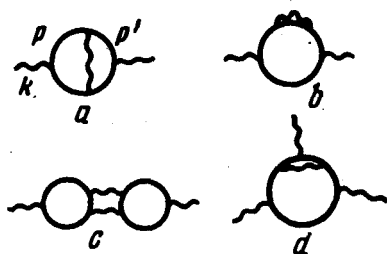


Рис. 1

Второй источник ошибок связан с отбрасыванием высших порядков теории возмущений. Однако, расчет на современных вычислительных машинах члена четвертого порядка фактически невозможен.

Целью настоящей работы было выяснение влияния небольших поправок, связанных с учетом электрон-электронных корреляций во втором и третьем порядке теории возмущений на качественные утверждения о характере метастабильной структуры металлического водорода.

Простейшие графики, учитывающие корреляционные поправки в энергии основного состояния электронного газа во внешнем поле протонов решетки, изображены на рис. 1, a – для члена второго порядка и для членов третьего порядка – на рис. 1, d . Соответствующие интегралы могут быть найдены только численно. Наиболее распространенный способ учета таких графиков состоит в замене в первом графике кулоновского потенциала, соответствующего внутренней волнистой линии, на некоторое эффективное среднее значение $V_{eff} = V_c \sqrt{k^2 + \lambda p_F^2}$, где p_F – импульс Ферми, λ – постоянная.

Соответствующее приближение носит название приближения Хаббарда [4]. В настоящей работе так же, как и в работе [2] при вычислении энергии во втором порядке теории возмущений E_2 , использовалось соответствующее выражение для поляризационного оператора с $\lambda = 2$:

$$\Pi(k) = \Pi_0(k) \left[1 - \frac{2\pi}{k^2 + \lambda k_F^2} \Pi_0(k) \right]^{-1} \quad (1)$$

($\Pi_0(k)$ – поляризационный оператор для свободных электронов),

Как показали расчеты на ЭВМ суммарный вклад графиков типа 1, a , 1, b , 1, c приводит к несколько большему значению $\Pi(k)$, чем дает формула (1) [5].

В настоящей работе в качестве оценки использовалось приближение Хаббарда также и для вычисления графиков типа 1, d . При этом суммировались лестницы, соответствующие каждой вершине, что приводит к члену третьего порядка E_3 в энергии связи:

$$E_3 = \sum_{k_1 + k_2 + k_3 = 0} \Pi_3^0(k_1, k_2, k_3) \Gamma(k_1) \Gamma(k_2) \Gamma(k_3) \quad (2)$$

(суммирование по векторам обратной решетки). Величина Π_3^0 соответствует приближению Хартри с учетом экранировки кулоновского поля решетки (выражение для Π_3^0 приведено в [2]). Множители Γ учитывают корреляционные поправки к вершинам:

$$\Gamma(k) = \left(1 - \frac{2\pi}{k^2 + \Lambda p_F^2} \Pi_0(k) \right)^{-1} \quad (3)$$

Величина Λ в расчетах варьировалась от значения $\Lambda = 2$ до ∞ ($\Lambda = \infty$ соответствует пренебрежению корреляционными поправками в E_3 , как это делалось в работе [2]).

Вычислялась энергия связи простой гексагональной решетки как функция переменных c/a (отношение периода вдоль оси шестого порядка к периоду в базовой плоскости) и величины r_s , связанной с плотностью $\frac{4}{3} \pi r_s^3 = n^{-1}$. Полная энергия связи складывается из суммы

$$E_{полн} = E_0 + E_{PR} + E_2 + E_3,$$

где E_{PR} – электростатическая энергия решетки, а E_0 – энергия однородного электронного газа. E_0 учитывалось в приближении Нозье-ра – Пайнса, так же как это делалось в работе [2].

энергии в ридб/атом, $r_s = 0,903 \text{ \AA}$

c / σ	E2	E3		EPR	E _{ПОЛН}	
		$\Lambda = \infty$	$\Lambda = 2$		$\Lambda = \infty$	$\Lambda = 2$
		0,393	-0,2920		-0,1224	0,1534
0,493	-0,2115	-0,0779	0,0930	-0,8902	-1,0562	-1,0713
0,593	-0,1616	-0,0555	0,0636	-0,9682	-1,0619	-1,0700
0,693	-0,1275	-0,0424	0,0468	-1,0102	-1,0566	-1,0611

На рис. 2 приведена картина линий уровня энергии связи при $\Lambda = \infty$. Цифрами указаны значения $(1 + E_{\text{полн}}) \cdot 10^3 \text{ ридб}$. Отметим существование перевальной точки, отделяющей минимум, найденный в работе [2], от области, где энергия начинает заметно убывать с падением плотности, что можно отождествить с переходом в область "молекулярного" водорода, который имеет малую плотность при нулевом давлении.

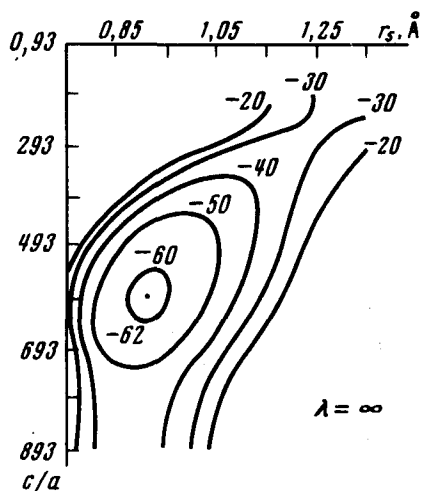


Рис. 2

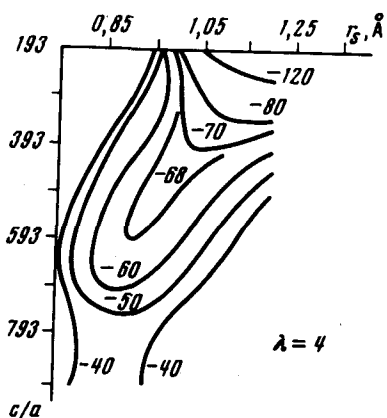


Рис. 3

При $\Lambda = 2$ седловая точка и "металлический минимум" с высокой плотностью отсутствует. Устойчивое состояние имеется только где-то в области малой плотности и малых c/σ . В этой области значений параметров, расчеты по теории возмущений совершенно ненадежны ($E_3/E_2 \sim 1$). Важно отметить, что абсолютное изменение $E_2 + E_3$, из-за отличия Λ от ∞ , согласно таблице, составляет около 4% от самой величины $E_2 + E_3$, что означает чрезвычайную чувствительность самого факта существования "металлического" минимума полной энергии к небольшим изменениям в счете. Расчеты показывают, что критическое значение Λ , при котором исчезает минимум с высокой плотностью, $6 > \Lambda_{\text{кр}} > 4$. На рис. 3 показаны линии уровня при $\Lambda = 4$.

Таким образом, результаты расчетов по теории возмущений с учетом второго и третьего порядков не указывают однозначно на существование метастабильного металлического водорода, так как нам неиз-

вестны поляризационный оператор и неприводимый трехлюэстик для однородного электронного газа с достаточной точностью. Учет корреляций только в члене второго порядка по Хаббарду, по-видимому, занижает значение электронной энергии и весьма вероятно, что метастабильный нитевидный минимум для металлического водорода при нулевом давлении отсутствует.

Представляет интерес проверка этих утверждений вне рамок теории возмущений, путем непосредственного расчета зонной структуры.

Авторы выражают глубокую благодарность И.М.Халатникову за интересные и ценные обсуждения.

Поступила в редакцию
4 апреля 1973 г.

Литература

- [1] T. Schneider. *Helvetica Physica Acta*, **42**, 957
 - [2] Е.Т.Бровман, Ю.Каган, А.Холас. *ЖЭТФ*, **61**, 2429, 1971.
 - [3] Е.Т.Бровман, Ю.Каган, А.Холас. *ЖЭТФ*, **62**, 1492, 1972.
 - [4] J. Hubbard. *Proc. Roy. Soc.*, **A243**, 336, 1958.
 - [5] D.I. Geldart. *R. Taylor. Can. J. Phys.*, **48**, 155, 1970.
-