

PACS numbers: 61.25.Bi, 61.25.Mv, 64.10.+h, 65.20.De, 71.15.Dx, 71.15.Nc, 96.30.Kf

## **Термодинамічні та кінетичні властивості одновалентного металічного гелію**

**В. Т. Швець**

*Одеська національна академія харчових технологій,  
вул. Дворянська, 1/3,  
65082 Одеса, Україна*

Ефективна парна міжйонна взаємодія, вільна енергія, тиск та електричний опір рідкого металічного гелію обчислено в широкому діапазоні густин і температур. Для цього використано теорію збурень за псевдопотенціалом електрон-йонної взаємодії. В усіх випадках розрахунки велись із врахуванням членів третього порядку теорії збурень, що на сьогодні є максимально можливою точністю обчислень. Як псевдопотенціал взято модельний однопараметричний псевдопотенціал. Для електронів провідності використано наближення випадкових фаз. Їх обмінна взаємодія і кореляції враховано в наближенні локального поля. Для йонної підсистеми використано модель твердих сфер. Їхній діаметер вважається одним з підгінних параметрів теорії. Цей діаметер та густина, за якої відбувається перехід металічного гелію з одновалентного в двовалентний стан, одержуються з аналізу парної ефективної міжйонної взаємодії. Детально аналізується випадок одновалентного металічного гелію. В усіх розглянутих випадках роль членів третього порядку виявилася істотною. Значення електроопору металічного гелію відповідає величинам, характерним для простих одновалентних металів. Такою ж виявилася і поведінка тиску як функції густини і температури. Досліджений діапазон густин і температур відповідає умовам, спостережуваним у центральній частині планет газових гігантів. Аналіз одержаних результатів свідчить про можливість існування гелію в металічному стані в надрах планет Юпітерової групи.

---

Corresponding author: Valerii Tymofiyovych Shvets  
E-mail: tarval@breezein.net

*Odessa National Academy for Food Technologies, 1/3 Dvoryanska Str.,  
65082 Odessa, Ukraine*

V. T. Shvets,  
The Thermodynamic and Kinetic Properties of One-Valent Metallic Helium,  
*Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 37, No. 10: 1425–1442 (2015) (in Ukrainian).

**Ключові слова:** рівняння стану, термодинаміка, електричний опір, металічний гелій.

Эффективное парное межоионное взаимодействие, свободная энергия, давление и электрическое сопротивление жидкого металлического гелия вычислены в широком диапазоне плотностей и температур. Для этого использована теория возмущений по псевдопотенциалу электрон-ионного взаимодействия. Во всех случаях расчёты велись с учётом членов третьего порядка теории возмущений, что на сегодня является максимально возможной точностью вычислений. В качестве псевдопотенциала взят модельный однопараметрический псевдопотенциал. Для электронов проводимости использовано приближение случайных фаз. Их обменное взаимодействие и корреляции учтены в приближении локального поля. Для ионной подсистемы использована модель твёрдых сфер. Их диаметр считается одним из подгоночных параметров теории. Этот диаметр и плотность, при которой происходит переход металлического гелия из одновалентного в двухвалентное состояние, получены из анализа эффективного парного межоионного взаимодействия. Подробно рассмотрен случай одновалентного металлического гелия. Во всех рассмотренных случаях роль членов третьего порядка оказалась существенной. Значение электросопротивления металлического гелия соответствует величинам, характерным для простых одновалентных металлов. Таким же оказалось и поведение давления как функции плотности и температуры. Исследованный диапазон плотностей и температур соответствует условиям, наблюдаемым в центральной части планет газовых гигантов. Анализ полученных результатов свидетельствует о возможности существования гелия в металлическом состоянии в недрах планет группы Юпитера.

**Ключевые слова:** уравнение состояния, термодинамика, электрическое сопротивление, металлический гелий.

Pair effective ion-ion interactions, free energy, pressure, and electrical resistance of liquid metallic helium are calculated in a wide range of densities and temperatures. For this problem, a perturbation theory by the pseudopotential of the electron-ion interaction is used. In all cases, calculations are carried out with regard to terms of the third-order perturbation theory, which is the maximum possible accuracy of calculations today. As pseudopotential, the one-parameter model pseudopotential is taken into account. For conduction electrons, the random phase approximation is used. Their exchange interaction and correlation are taken into account in local field approximation. For ionic subsystem, the model of hard spheres is used. Their diameter is one of the fitting parameters of a theory. This diameter and density, at which the transition from one-valent metallic helium to the divalent state takes place, are obtained from the analysis of the effective pair ion-ion interaction. The case of the one-valent metal helium is considered in detail. In all the above cases, the role of the third-order terms is significant. The value of electrical resistivity of metallic helium corresponds to the characteristic value of elementary one-valent metals. The behaviour of pressure as a function of density and temperature has the same peculiarity. The investigated ranges of densities and temperatures correspond to conditions ob-

served in the central part of the gas-giants. Analysis of the results indicates the possible existence of the helium in a metallic state in the central parts of the Jovian-group planets.

**Key words:** equation of state, thermodynamics, electrical resistance, metal helium.

*(Отримано 23 червня 2015 р.; остаточний варіант — 8 вересня 2015 р.)*

## 1. ВСТУП

Останнім часом проблема металізації речовин, що за нормальних умов є газами, привертає все більшу увагу науковців. Експерименти з ударного стискання речовини зробили можливою металізацію деяких з них [1, 2]. Зокрема, в 1996–1999 рр. у металічному стані були одержані водень і дейтерій [3–5], у 2001 р. — кисень [6], у 2003 р. — азот [7]. Однак, незважаючи на численні намагання, гелій в металічному стані так і не одержали. На тепер існує лише декілька теоретичних робіт, присвячених металізації гелію. Відповідно до однієї з перших робіт [8], для металізації гелію при низьких температурах потрібен тиск у 100 Мбар. Такого тиску не існує навіть у центральних частинах планет гігантів сонячної системи. Використовуючи метод молекулярної динаміки, автори роботи [9] одержали досить дивний результат: перехід метал–діелектрик для рідкого гелію має спостерігатись вже при густині  $1 \text{ г/см}^3$ . Автори роботи [10] одержали рівняння стану твердого гелію, використовуючи квантовий метод Монте-Карло і дійшли висновку, що перехід метал–діелектрик у гелію має спостерігатись для густини  $21,3 \text{ г/см}^3$  і тиску  $25,7 \text{ Мбар}$ . Автори роботи [11] одержали рівняння стану і коефіцієнт електричної провідності гелію, використовуючи методи молекулярної динаміки для йонної підсистеми і функціоналу густини для електронної підсистеми. До того ж з'ясувалось, що зонна структура гелію надзвичайно сильно залежить від температури. При нульовій температурі заборонена зона зникає при густині  $13 \text{ г/см}^3$ , у той час як при температурі  $20000 \text{ К}$  вона зникає при густині  $6,6 \text{ г/см}^3$ . Отже, комп'ютерні експерименти, виконані різними авторами, погано узгоджуються між собою.

Вперше термодинамічні властивості двічі йонізованого металічного гелію вивчались у роботі [12]. Метою даної роботи є розгляд у межах такого ж мікроскопічного підходу різних властивостей одноразово йонізованого металічного гелію. Зокрема, вперше буде одержано і проаналізовано рівняння стану металічного одновалентного гелію. Для знаходження діаметра твердих сфер — одного з двох підгінних параметрів даної теорії — буде використано аналіз парної ефективної міжйонної, аналогічно тому як це робилось для металічного водню та двовалентного металічного гелію [12–15].

Однією з найуспішніших теорій сучасної фізики металів є теорія псевдопотенціалів. Її засадничим принципом є заміна потенціалу електрон-йонної взаємодії псевдопотенціалом [16]. Якщо ряд теорії збурень за електрон-йонною взаємодією для певної характеристики металу збігається, то його збіжність суттєво зростає при заміні потенціалу електрон-йонної взаємодії псевдопотенціалом. Однак структура псевдопотенціалу є настільки складною, що для неупорядкованих металів його не можна розраховувати з високою точністю. Неминучим тут є використання модельних псевдопотенціалів з одним або більшою кількістю підгінних параметрів. Звичайно, для їх знаходження використовуються експериментальні дані, відмінні від тих, що розраховуються. Складність ситуації з одноразово йонізованим металічним гелієм полягає в тому, що будь-які експериментальні дані, що стосуються металічного стану, відсутні. У разі дворазово йонізованого металічного гелію псевдопотенціал збігається з потенціалом, створюваним ядром, і є Кулонівським, тобто не містить жодних підгінних параметрів. Неможливість застосування традиційної для фізики металів процедури знаходження підгінних параметрів, що входять у псевдопотенціал, і є однією з головних складнощів нашого підходу.

## 2. ГАМІЛЬТОНІАН

Гамільтоніан металічного гелію візьмемо у вигляді, характерному для простих рідких металів, вважаючи гелій неупорядкованим, а йонну підсистему — статичною [16, 17]:

$$H = H_i + H_e + H_{ie}; \quad (1)$$

тут

$$H_i = \sum_{n=1}^N T_n + (2V)^{-1} \sum_{\mathbf{q}} V_{ii}(q) [\rho^i(\mathbf{q}) \rho^i(-\mathbf{q}) - N_i] \quad (2)$$

є Гамільтоніаном йонної підсистеми, яка вважається класичною. Перший доданок з правого боку останнього рівняння відповідає кінетичній енергії йонів, другий — енергії їх взаємодії,  $V$  є об'ємом системи,  $N_i$  — кількістю йонів системи,  $T_n$  — кінетичною енергією  $n$ -го йона,  $V_{ii}(q) = 4\pi z^2 e^2 / q^2$  є Фур'є-зображенням потенціальної енергії Кулонової взаємодії пари йонів,  $\rho^i(\mathbf{q})$  — Фур'є-зображенням густини йонів. Підсистема електронів провідності вважається виродженою і в представленні вторинного квантування за плоскими хвилями її Гамільтоніан має вигляд

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + (2V)^{-1} \sum_{\mathbf{q}} V_{ee}(q) [\rho^e(\mathbf{q}) \rho^e(-\mathbf{q}) - N_e]. \quad (3)$$

Перший член з правого боку останнього рівняння відповідає кінетичній енергії електронів провідності, другий — їхній Кулоновій взаємодії;  $a_k^+$ ,  $a_k$  є операторами народження і знищення електронів у стані з хвильовим вектором  $\mathbf{k}$ ,  $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$  — кінетичною енергією вільного електрона,  $V_{ee}(q) = 4\pi e^2 / q^2$  — Фур'є-зображенням потенціальної енергії їхньої Кулонової взаємодії,  $\rho^e(\mathbf{q})$  — Фур'є-зображенням оператора густини електронів,  $N_e$  — оператором кількості електронів. Гамільтоніан взаємодії між електронами і йонами має вигляд

$$H_{ie} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} w_{ie}(q) \rho^i(\mathbf{q}) \rho^e(-\mathbf{q}), \quad (4)$$

де  $w_{ie}(q)$  — формфактор псевдопотенціалу електрон-йонної взаємодії. Умова електронейтральності системи вимагає не враховувати в кожній з вище наведених сум доданка з  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ .

### 3. ПСЕВДОПOTЕНЦІАЛ ЕЛЕКТРОН-ЙОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ

Як псевдопотенціал електрон-йонної взаємодії ми використали модельний псевдопотенціал. Його характерною рисою є наявність підгінних параметрів. У разі Ашкрофтового псевдопотенціалу такий псевдопотенціал має лише один підгінний параметр  $r$ :

$$w_{ie}(q) = -\frac{4\pi e^2 z}{q^2} \cos(rq). \quad (5)$$

Цей формфактор має правильну асимптотику для  $q \rightarrow 0$ , якісно правильну поведінку для проміжних значень  $q$  і незадовільну асимптотичну поведінку для  $q \rightarrow \infty$ , оскільки формфактор досить повільно спадає із зростанням хвильового вектора. Остання обставина обумовлена тим фактом, що Ашкрофтів псевдопотенціал повністю ігнорує детальну поведінку взаємодії електронів провідності з електронами йонного кістяка. Асимптотична поведінка формфактора для  $q \rightarrow \infty$  є вкрай важливою для більшості характеристик металів, оскільки містить інтеграли з нескінченною верхньою межею за  $q$  [18].

З іншого боку, якщо використати воднеподібні хвильові функції для опису основного стану одновалентного стану йона гелію, ми одержуємо наступний електростатичний потенціал такого йона:

$$v_{ie}(q) = -\frac{4\pi e^2}{q^2} \left[ z - \frac{16z^4}{(4z^2 + q^2)^2} \right]. \quad (6)$$

Такий формфактор має коректну асимптотичну поведінку для  $q \rightarrow 0$ , якісно коректну поведінку для проміжних значень  $q$  і коре-

ктну асимптотичну поведінку для  $q \rightarrow \infty$ .

Ми пропонуємо наступний комбінований формфактор, що зберігає однопараметричний характер Ашкрофтового псевдопотенціалу, але має кращу ніж у нього короткохвильову поведінку, зберігаючи правильну довгохвильову поведінку, і задовільну поведінку для проміжних значень хвильового вектора

$$w_{ie}(q) = -\frac{4\pi e^2}{q^2} \left[ z - \frac{16z^4}{(4z^2 + q^2)^2} \right] \cos(rq). \quad (7)$$

Для Гелію заряд ядра —  $ez = 2e$ .

Рисунок 1 показує поведінку формфакторів H, He та Li для густини, характерної для переходу водню в металічний стан. З рисунка видно подібну поведінку формфакторів гелію і літію та їх відмінність від поведінки формфактора водню.

Зазвичай, для знаходження підгінного параметра використовується експериментальна інформація, але в разі металічного гелію така інформація відсутня. Можливим є використання лише якісних міркувань. Зрозуміло, що значення ефективного радіуса йона Гелію  $r_{\text{He}}$  має бути меншим за радіус атома Гідрогену  $r_{\text{H}} = 1$ . В наших розрахунках ми використали  $r_{\text{He}} = 0,8$ . Тільки в цьому разі результати розрахунків широкого набору властивостей металічного гелію є фізично несуперечливими. Наш висновок такий: чим ширшим є коло розрахованих властивостей, тим меншим є інтервал можливих значень ефективного радіуса.

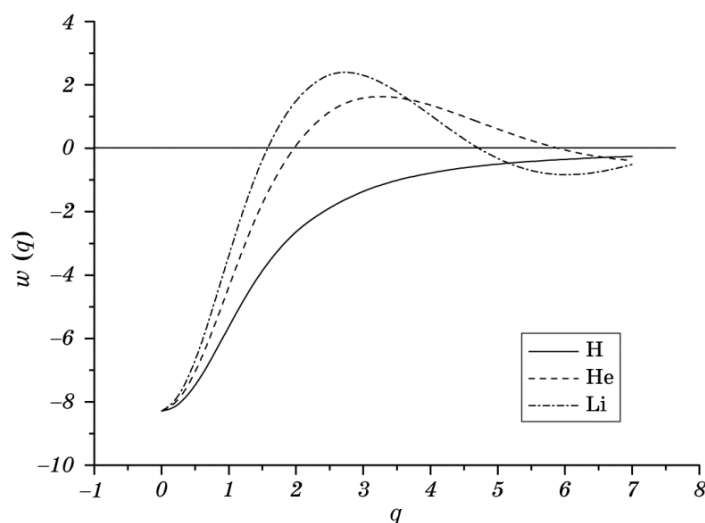


Рис. 1. Формфактори для H, He, Li ( $r_e = 0,8$  для He,  $r_e = 1$  для Li).

Fig. 1. Form-factors for H, He, Li ( $r_e = 0.8$  for He,  $r_e = 1$  for Li).

#### 4. ВНУТРІШНЯ ЕНЕРГІЯ

Внутрішню енергію системи одержуємо усередненням за Гіббсовим канонічним ансамблем із наведеним вище Гамільтоніаном системи

$$E = \langle H_i \rangle + \langle H_e \rangle + \langle H_{ie} \rangle. \quad (8)$$

Внесок йонної підсистеми в енергію металу має вигляд:

$$E_i = N_i \frac{3}{2} k_B T + N_i \frac{1}{2V} \sum_q V_{ii}(q) [S_i(q) - 1]. \quad (9)$$

Штрих біля знаку суми вказує на відсутність доданка з  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ . Тут  $T$  є абсолютною температурою системи. Перший доданок з правого боку рівняння є кінетичною енергією класичної йонної підсистеми. Другий доданок — енергією взаємодії йонів; це — так звана Маделунґова енергія; точність її обчислення залежить від точності виразу для статичного структурного фактора йонної підсистеми  $S_i(q)$ . В цій роботі використовується структурний фактор для моделю твердих сфер. Він залежить від густини йонів, діаметра твердих сфер і параметра густини пакування. Незалежними серед них є лише два. Для фіксованої густини в якості незалежного параметра доцільно обрати діаметр твердих сфер.

Зручно розглядати разом енергію електронної підсистеми та енергію взаємодії електронів з йонами. Цю суму, енергію основного стану електронного газу в полі йонів, зручно представити у вигляді ряду теорії збурень за електрон-йонною взаємодією [13]:

$$E_e + E_{ie} = \sum_{n=0}^{\infty} E_n. \quad (10)$$

Кожний доданок ряду теорії збурень за електрон-йонною взаємодією слід розвинути в ряд теорії збурень за електрон-електронною взаємодією. Для члена нульового порядку за електрон-йонною взаємодією маємо

$$E_0 = \sum_{n=0}^{\infty} E_{en}. \quad (11)$$

Для низьких температур  $k_B T / \varepsilon_F \ll 1$ , де  $\varepsilon_F$  — Фермійова енергія, а кінетична енергія електронної підсистеми —

$$E_{e0} = \sum_k \varepsilon_k n(k) = N_e \frac{1,105}{r_s}. \quad (12)$$

Тут  $r_s$  є Бракнеровим параметром — радіусом сфери, об'єм якої дорівнює об'єму системи, що припадає на один електрон. Внесок в енергію першого порядку за електрон-електронною взаємодією на-

зивається енергією обмінної взаємодії. Для його одержання достатньо використати у виразі для енергії взаємодії електронного газу статичний структурний фактор невзаємодійної електронної підсистеми  $S_e(q)$  [19]. Внаслідок цього маємо:

$$E_{e1} = E_{XF} = N_e (2V)^{-1} \sum_q V_{ee}(q) [S_e^{(0)}(q) - 1] = -N_e 0,458/r_s. \quad (13)$$

Члени теорії збурень за електрон-електронною взаємодією вищих порядків називаються кореляційною енергією. Їх врахування не може бути здійснено точно. Для них ми використали інтерполяційну формулу Ноз'єра-Пайнса [19, 20]:

$$\sum_{n=2}^{\infty} E_{en} = E_{cor} = N_e (-0,058 + 0,016 \ln r_s). \quad (14)$$

Через електронейтральність системи член першого порядку за електрон-йонною взаємодією буде наступним:

$$E_1 = n_e \Delta w_{ie}(0), \quad (15)$$

де

$$\Delta w_{ie}(0) = 2\pi r^2 z(1 - z^{-3}) \quad (16)$$

є некулонівською частиною псевдопотенціалу.

Члени другого і вищих порядків за електрон-йонною взаємодією мають вигляд:

$$E_n = \frac{N_i}{V^n} \times \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \Gamma^{(n)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) w_{ie}(q_1) \dots w_{ie}(q_n) S_i(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \Delta(\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n) \quad (17)$$

( $n \geq 2$ ), де  $S_i(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  є  $n$ -частинковим структурним фактором йонної підсистеми, що залежить лише від координат йонної підсистеми і формально точно враховує йон-йонну взаємодію,  $\Delta(\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n)$  — Кронекерів символ, а  $\Gamma^{(n)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  є електронним  $n$ -полюсником [13], що залежить лише від електронних ступенів вільності і формально точно враховує електрон-електронну взаємодію. Вираз (17) є формально точним і непридатним для практичних обчислень. Існує декілька наближених варіантів для електронних багатополіусників [21–24] і багаточастинкових структурних факторів йонної підсистеми [25]. Двополіусник має наступну блочну структуру:

$$\Gamma^{(2)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) = -\frac{1}{2} \frac{\pi(q)}{\varepsilon(q)}, \quad (18)$$



де  $\pi(q)$  і  $\varepsilon(q)$  є поляризаційною функцією і ефективною діелектричною проникністю електронного газу відповідно. В наближенні випадкових фаз із врахуванням обмінної взаємодії і кореляцій електронів провідності в наближенні локального поля діелектрична проникність має вигляд

$$\varepsilon(q) = 1 + [V_{ee}(q) + U(q)]\pi_0(q), \quad (19)$$

де  $U(q) = -2\pi e^2 / (q^2 + \lambda k_F^2)$  є енергією обмінної взаємодії і кореляцій електронного газу,  $\lambda \cong 2$  [26], а  $\pi_0(q)$  є поляризаційною функцією ідеального електронного газу. Для електронного триполюсника нами обрано вираз, одержаний в [17], що повністю збігається з раніше одержаним виразом у роботі [22]. Блочна структура триполюсника є наступною

$$\Gamma^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) = \frac{\Lambda_0^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)}{\varepsilon(\mathbf{q}_1)\varepsilon(\mathbf{q}_2)\varepsilon(\mathbf{q}_3)}, \quad (20)$$

де  $\Lambda_0^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)$  є електронним триполюсником невзаємодійного електронного газу. Для членів другого і третього порядків теорії збурень за електрон-йонною взаємодією після переходу до сферичної системи координат ми одержуємо наступні вирази:

$$E_2 = -N_i \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{\pi(q)}{\varepsilon(q)} w_{ie}^2(q) S_i(q) q^2 dq, \quad (21)$$

$$E_3 = N_i \frac{1}{4\pi^4} \int_0^\infty dq q^2 \int_0^\infty dp p^2 F(q, p), \quad (22)$$

де

$$F(q, p) = \frac{2n+1}{2} \times \int_0^\pi \frac{\Lambda_0^{(3)}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, -\mathbf{q}-\mathbf{p})}{\varepsilon(q)\varepsilon(p)\varepsilon(|\mathbf{q}-\mathbf{p}|)} w_{ie}(q) w_{ie}(p) w_{ie}(|\mathbf{q}+\mathbf{p}|) S_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, -\mathbf{q}-\mathbf{p}) \sin(\theta) d\theta. \quad (23)$$

Тут  $\theta$  є кутом між векторами  $\mathbf{q}$  і  $\mathbf{p}$ . Головним наближенням при обчисленні члена третього порядку є геометричне наближення для тричастинкового структурного фактора [25, 27]:

$$S_i(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) = S_i(\mathbf{q}_1) S_i(\mathbf{q}_2) S_i(\mathbf{q}_3). \quad (24)$$

## 5. ВІЛЬНА ЕНЕРГІЯ І ТИСК

Вільна енергія визначається як

$$F = E - TS, \quad (25)$$

де  $S$  — ентропія системи, яка є сумою електронної та йонної складових

$$S = S_e + S_{gas} + S_{conf}. \quad (26)$$

Тут

$$S_e = \pi^2 k_B^2 T / k_F^2 \quad (27)$$

є ентропією ідеального виродженого електронного газу,

$$S_{gas} = \frac{5}{2} k_B T + \frac{3}{2} k_B \ln \left( \frac{M k_B T}{2\pi n_i^{2/3}} \right) \quad (28)$$

є ентропією ідеального класичного газу йонів, а

$$S_{conf} = \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2} k_B \quad (29)$$

є конфігураційною енергією рідини твердих сфер з параметром пакування  $\eta$ .

Вільну енергію також можна представити рядом теорії збурень за електрон-йонною взаємодією

$$F = \sum_{n=0}^{\infty} F_n, \quad (30)$$

де

$$F_0 = E_0 - TS, \quad (31)$$

$$F_n = E_n, \quad n \geq 1. \quad (32)$$

Відповідно, тиск

$$P = \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T. \quad (33)$$

Тиск також можна представити рядом теорії збурень за електрон-йонною взаємодією

$$P = \sum_{n=0}^{\infty} P_n, \quad (34)$$

де

$$P_n = \left( \frac{\partial F_n}{\partial V} \right)_T. \quad (35)$$

Для знаходження діаметра твердих сфер нами використано парну ефективну міжйонну взаємодію [28]. Діаметр твердих сфер  $\sigma$  є мінімальною відстанню, на яку можуть зблизитися два йони при даній температурі. Якщо кінетичну енергію йонів відраховувати від мінімуму потенціальної ями парної йонної взаємодії, то діаметр знаходиться з умови

$$V_{ef}(\sigma) = \frac{3}{2} k_B T. \quad (36)$$

## 6. ЕФЕКТИВНА ЙОН-ЙОННА ВЗАЄМОДІЯ

Подібно випадку металічного водню [12, 29, 30], ефективна взаємодія йонів у рідкому металічному гелію розглядається в межах теорії збурень за електрон-йонною взаємодією. Її можна представити наступним рядом [13]

$$U(R) = \sum_{n=0}^{\infty} U_2^{(n)}(R), \quad (37)$$

де  $R$  — відстань між йонами. У разі одноразово йонізованого металічного гелію, член нульового порядку має вигляд

$$U_2^{(0)}(R) = V_{ii}(R) = e^2/R \quad (38)$$

і є енергією Кулонової взаємодії між йонами. Член першого порядку

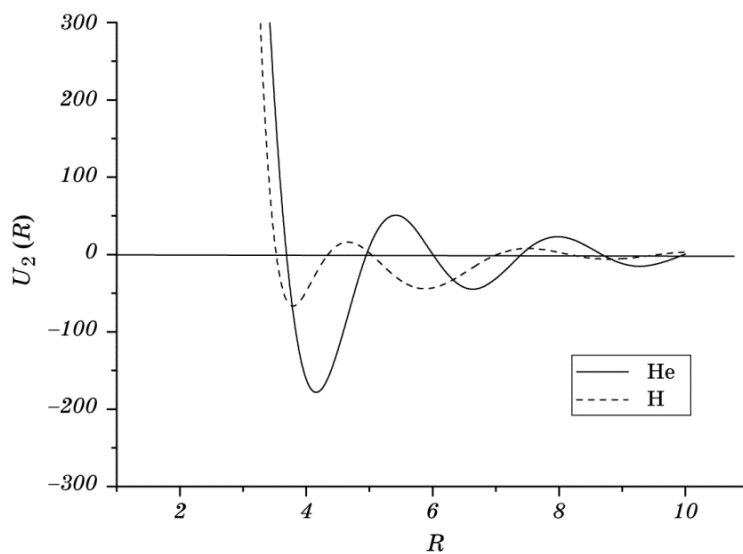
$$U_2^{(1)}(R) = 0, \quad (39)$$

член другого порядку має вигляд

$$U_2^{(2)}(R) = -\frac{e^2}{2\pi^2 R} \int_0^{\infty} w_{ei}^2(q) \frac{\pi_0(q)}{\varepsilon(q)} \sin(qR) q dq, \quad (40)$$

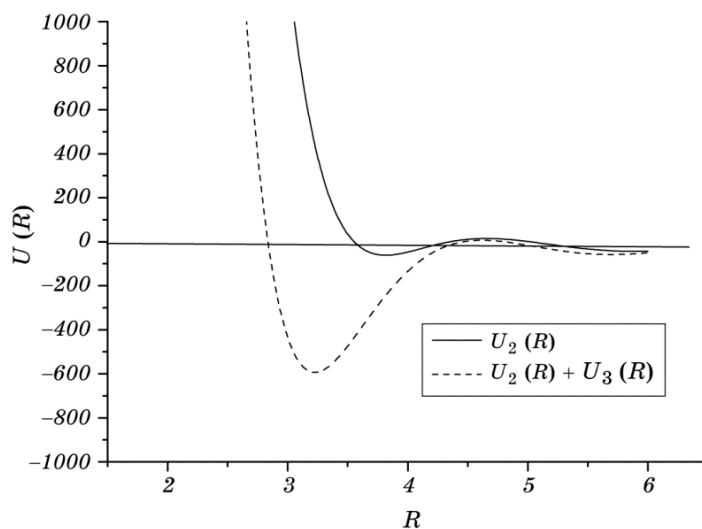
член третього порядку буде таким:

$$U_2^{(3)}(R) = \frac{3e^2}{4\pi^4 R} \times \int_0^{\infty} dq_1 q_1 \sin(q_1 R) \int_0^{\infty} dq_2 q_2^2 \int_{|q_1 - q_2|}^{q_1 + q_2} dq_3 \frac{w_{ie}(q_1) w_{ie}(q_2) w_{ie}(q_3)}{\varepsilon(q_1) \varepsilon(q_2) \varepsilon(q_3)} \Lambda_0^{(3)}(q_1, q_2, q_3). \quad (41)$$



**Рис. 2.** Ефективна парна взаємодія; для He густина  $2,56 \text{ г/см}^3$ ; для H густина  $0,64 \text{ г/см}^3$ .

**Fig. 2.** Effective pair interactions; for He, density is  $2.56 \text{ g/cm}^3$ ; for H, density is  $0.64 \text{ g/cm}^3$ .



**Рис. 3.** Ефективна парна взаємодія для гелію в другому і третьому порядках теорії збурень для густини  $2,56 \text{ г/см}^3$ .

**Fig. 3.** Effective pair interaction for helium in the second and third orders of perturbation theory for density of  $2.56 \text{ g/cm}^3$ .

Розглянемо спочатку міжйонну взаємодію для високих густин електронного газу. Рисунки 2 і 3 містять залежність парної ефективної взаємодії від віддалі між йонами. Потенціали на рисунку 2 для металічного гелію і водню мають таку ж форму, як і для типових простих металів. Глибина потенціальної ями для гелію є значно більшою, ніж для водню, але обидві є малими порівняно з характерними для їх існування температурами. Рівноважні ж віддалі між йонами є практично однаковими.

Парний потенціал для металічного гелію, розрахований в другому і третьому порядках теорії збурень і поданий на рис. 3, подібний до відповідного потенціалу для металічного водню. Член третього порядку для гелію є надзвичайно важливим для формування мінімуму потенціальної енергії. Ця ситуація також характерна і для металічного водню [15]. Глибини і положення мінімумів потенціальної енергії для гелію і водню надзвичайно близькі в разі врахування членів третього порядку. Мала глибина потенціальної ями, навіть при врахуванні члена третього порядку теорії збурень, робить малоїмовірною можливість існування одновалентного металічного гелію у вільному стані без зовнішнього тиску. Внесок члена третього порядку у вільну енергію металічного гелію становить лише декілька відсотків і набагато менший, ніж внесок члена другого порядку. Зауважимо, що для двовалентного металічного Гелію глибина потенціальної ями парного потенціалу поблизу точки переходу між двовалентним і одновалентним станами досягає декіль-

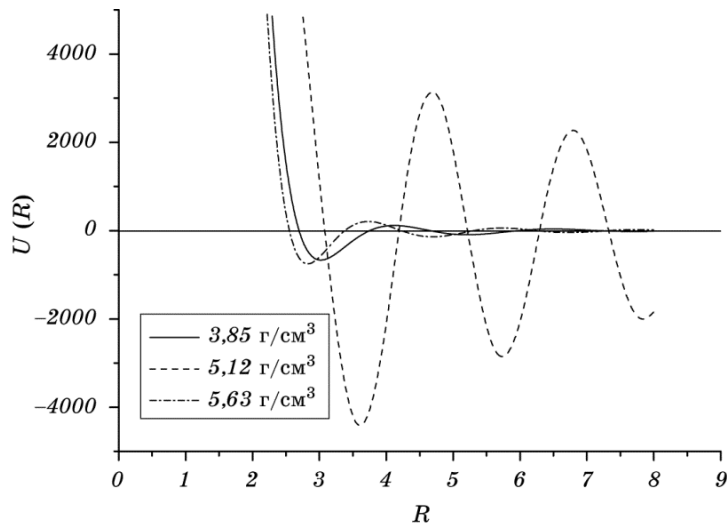


Рис. 4. Ефективна парна взаємодія для йонів Гелію за різних густин.

Fig. 4. The effective pair interaction of helium ions for different densities.

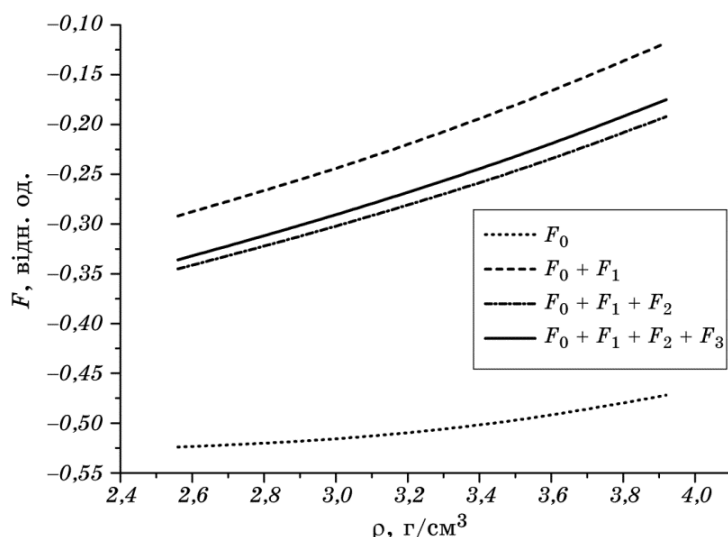
кох тисяч градусів [31]. У цьому разі існування металічного гелію у вільному стані стає цілком ймовірним.

З рисунка 4 видно, що для густин одновалентного металічного гелію, що дещо перевищують  $5 \text{ г/см}^3$ , у системі спостерігається нестабільність. Для цієї ж густини спостерігається нестабільність і для двовалентного гелію [31]. Ця обставина дозволяє припустити, що перехід між одновалентним і двовалентним станами металічного гелію відбувається саме при цій густині.

У нашій теорії є два параметри. Один з них — це параметр модельного псевдопотенціалу. Другий — це діаметр твердих сфер. Оскільки при температурі в декілька тисяч градусів значення діаметра, обчислені з аналізу парного потенціалу, знайденого в другому і третьому порядках теорії збурень, мало відрізняються чисельно, але істотно відрізняються з точки зору обсягів обчислювальної роботи, то ми тут використовуватимемо для подібних розрахунків лише члени другого порядку.

## 7. ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Нами вперше для металічного гелію проаналізовано теорію збурень

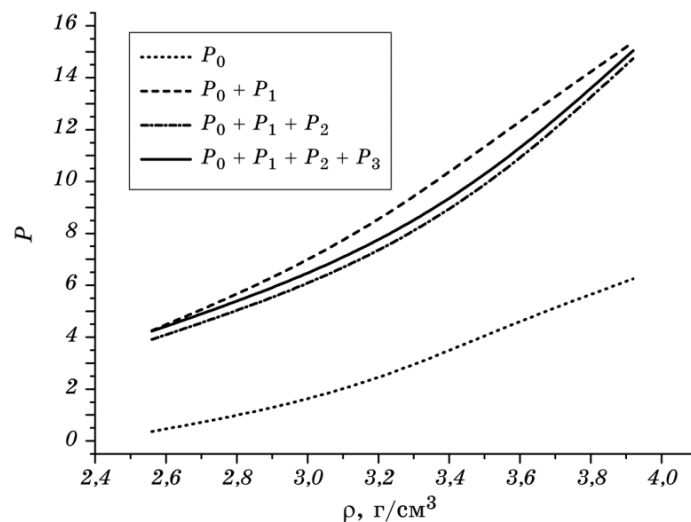


**Рис. 5.** Залежність вільної енергії від густини, обчислена в нульовому ( $F_0$ ), першому ( $F_1$ ), другому ( $F_2$ ), і третьому ( $F_3$ ) порядках теорії збурень для  $T = 5000 \text{ К}$ , густина наведена в  $\text{г/см}^3$ , вільна енергія — в атомних одиницях.

**Fig. 5.** The calculated dependence of free energy on density for zero ( $F_0$ ), first ( $F_1$ ), second ( $F_2$ ) and third ( $F_3$ ) orders of perturbation theory for  $T = 5000 \text{ K}$ ; density is given in  $\text{g/cm}^3$ ; free energy is given in atomic units.

за електрон-йонною взаємодією для вільної енергії. На рисунку 5 показано залежність цієї енергії від густини металу. З рисунка видно, що внесок в енергію членів ряду теорії збурень швидко спадає із зростанням порядку цих членів за електрон-йонною взаємодією. Членами ряду вище третього порядку цілком можна знехтувати. Ряд теорії збурень швидко збігається для всіх розглянутих густин. Із зростанням густини ця збіжність лише збільшується. Діапазон густини  $2,56\text{--}4,2\text{ г/см}^3$  відповідає рідкій фазі металічного гелію, оскільки ентропія металу, обчислена за формулами відповідними рідкій фазі, в цьому разі є додатною. Якщо густина металічного гелію перевищує значення  $4,2\text{ г/см}^3$ , то ентропія стає від'ємною. Цей факт ми інтерпретуємо як перехід рідкого гелію в кристалічний стан.

Залежність від густини тиску рідкого металічного гелію подібна до аналогічної залежності вільної енергії (рис. 6). Тиск для густини  $2,56\text{ г/см}^3$  приблизно дорівнює 4 Мбар. Найбільша розглянута нами густина металічного гелію є  $4,2\text{ г/см}^3$ . Це найбільше значення густини одноразово йонізованого металічного гелію добре узгоджується з найменшим значенням густини дворазово йонізованого металічного гелію, одержаним в [12]. Тиски і густини, наведені на рис. 6, відповідають тискам і густинам, що існують всередині Юпітера



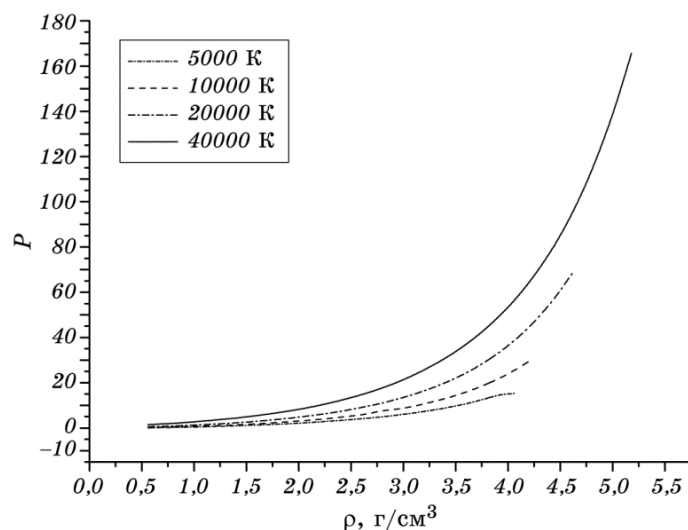
**Рис. 6.** Залежність тиску від густини в нульовому ( $P_0$ ), першому ( $P_1$ ), другому ( $P_2$ ) і третьому ( $P_3$ ) порядках теорії збурень для  $T = 5000\text{ К}$ , густина наведена в  $\text{г/см}^3$ , тиск — у Мбар.

**Fig. 6.** Dependence of pressure on the density for zero ( $P_0$ ), first ( $P_1$ ), second ( $P_2$ ) and third ( $P_3$ ) orders of perturbation theory for  $T = 5000\text{ К}$ ; density is given in  $\text{г/см}^3$ ; pressure is given in Мбар.

[32]. Ця обставина дозволяє припустити можливість існування металічного гелію в центральній частині Юпітера, а також інших екзопланет Юпітерової групи. Рисунок 7 показує залежність тиску від густини для різних значень температури. Ця залежність завжди монотонно зростаюча.

Залежність електричного опору рідкого металічного гелію  $R_{\text{He}}$  (рис. 8) від густини подібна до аналогічної залежності для рідкого металічного водню [15]. Аналіз показує, що ряд теорії збурень для електричного опору добре збігається для всіх розглянутих температур і густин. Електричний опір одновалентного металічного гелію знаходиться в діапазоні значень, характерних для простих одновалентних металів. Так само як і для інших одновалентних простих металів, він зростає із зростанням температури. В околі значення густини  $0,4 \text{ г/см}^3$  ряд теорії збурень розбігається. Цей факт можна інтерпретувати як існування в околі цього значення фазового переходу метал-діелектрик. Таким чином, областю існування рідкого металічного гелію в металічному стані для температури  $5000 \text{ К}$  є область густин  $0,4-4,2 \text{ г/см}^3$ .

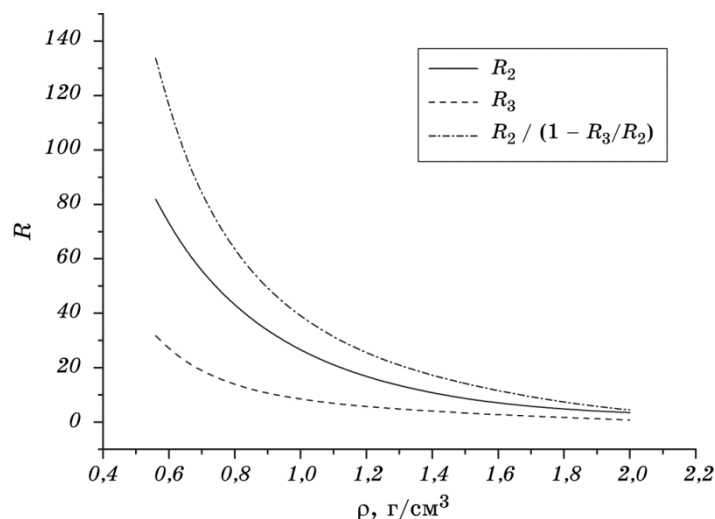
В цілому, загальна картина різних властивостей одноразово йонізованого металічного гелію видається цілком реалістичною. Тиски, густини і температури, використані нами при обчисленнях у



**Рис. 7.** Залежність тиску від густини для різних температур при врахуванні члена третього порядку, густина наведена в  $\text{г/см}^3$ , тиск — у Мбар.

**Fig. 7.** Dependence of pressure on density for different temperatures taking into account the third-order contribution; density is given in  $\text{g/cm}^3$ ; pressure is given in Mbar.





**Рис. 8.** Залежність електричного опору, одержаного в третьому порядку теорії збурень, від густини для різних температур, густина наведена в  $\text{г/см}^3$ , опір — у  $\text{мкОм}\cdot\text{см}$ .

**Fig. 8.** Dependence of electrical resistivity on density resulting in a third order of the perturbation theory for different temperatures; density is given in  $\text{g/cm}^3$ ; resistivity is given in  $\mu\Omega\cdot\text{cm}$ .

цій роботі, можуть бути одержані експериментально найближчим часом. В усякому разі, ми на це сподіваємось. Ми також сподіваємось, що майбутні експериментальні результати будуть близькими до тих, що ми одержали у даній роботі.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. E. G. Maksimov and Yu. T. Shilov, *Physics-Uspekhi*, **42**, No. 11: 1121 (1999).
2. V. E. Fortov, *Physics-Uspekhi*, **50**, No. 4: 333 (2007).
3. S. T. Weir, A. C. Mitchell, and W. J. Nellis, *Phys. Rev. Lett.*, **76**: 1860 (1996).
4. V. E. Fortov, V. Ya. Ternovoi, S. V. Kvitov, V. B. Mintsev, D. N. Nikolaev, A. A. Pyalling, and A. S. Filimonov, *JETP Lett.*, **69**, No. 12: 926 (1999).
5. V. Ya. Ternovoi, A. S. Filimonov, V. E. Fortov, S. V. Kvitov, D. N. Nikolaev, and A. A. Pyaling, *Physica B (Amsterdam)*, **265**: 6 (1999).
6. M. Bastea, A. C. Mitchell, and W. J. Nellis, *Phys. Rev. Lett.*, **86**: 3108 (2001).
7. R. Chau, A. C. Mitchell, R. W. Minich, and W. J. Nellis, *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 245501 (2003).
8. D. A. Young, A. K. McMahan, and M. Ross, *Phys. Rev. B: Condens. Matter*, **24**: 5119 (1981).
9. A. Kietzmann, B. Holst, R. Redmer, M. P. Desjarfais, and T. R. Mattsson, *Phys. Rev. Lett.*, **98**: 190602 (2007).
10. S. A. Kharallah and B. Militzer, *Phys. Rev. Lett.*, **101**: 106407 (2008).

11. L. Stixrude and R. Jeanloz, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **105**: 11071 (2008).
12. V. T. Shvets, *JETP*, **143**, No. 1: 159 (2013).
13. E. G. Brovman, Yu. M. Kagan, and A. Holas, *JETP*, **34**: 1300 (1971).
14. D. J. Stevenson and N. W. Ashcroft, *Phys. Rev. A: At., Mol., Opt. Phys.*, **9**: 782 (1974).
15. V. T. Shvets, *JETP*, **104**, No. 4: 655 (2007).
16. W. A. Harrison, *Pseudopotentials in the Theory of Metals* (New York: WA Benjamin: 1966).
17. V. T. Shvets, *Method of Green's Functions in the Theory of Metals* (Odesa: Latstar: 2002) (in Ukrainian).
18. V. T. Shvets and E. V. Belov, *Acta Physica Polonica A*, **96**, No. 6: 403 (1999).
19. I. A. Vakarchuk, *Introduction to the Many-Body Problem* (Lviv: Lviv University: 1999) (in Ukrainian).
20. W. H. Shih and D. Stroud, *Phys. Rev. B: Condens. Matter*, **31**: 3715 (1985).
21. P. Lloyd and C. A. Shall, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **1**: 1620 (1968).
22. E. G. Brovman and Yu. Kagan, *JETP*, **36**, No. 5: 1025 (1972).
23. E. G. Brovman and A. Holas, *JETP*, **39**: 924 (1974).
24. J. Hammerberg and N. W. Ashcroft, *Phys. Rev. B: Solid State*, **9**: 3999 (1974).
25. L. Ballentine and V. Heine, *Philos. Mag.*, **9**: 617 (1964).
26. D. J. M. Geldart and S. H. Vosko, *Can. J. Phys.*, **44**: 2137 (1966).
27. V. T. Shvets, *Phys. Met. Metallogr.*, **89**, No. 3: 211 (2000).
28. V. T. Shvets, S. V. Savenko, and Ye. K. Malinovskiy, *Condens. Matter Phys.*, **9**: 1 (2006).
29. S. D. Kaim, N. P. Kovalenko, and E. V. Vasiliu, *J. Phys. Studies*, **1**: 589 (1997).
30. V. T. Shvets, *JETP Lett.*, **95**, No. 1: 29 (2012).
31. V. T. Shvets, *Phys. Met. Metallogr.*, **113**, No. 10: 977 (2012).
32. V. T. Shvets, T. V. Shvets, and Ya. Ye. Rachynskiy, *Ukr. J. Phys.*, **55**: 251 (2010).