

# УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ГЕЛИЯ

*В. Т. Швец\**

*Одесская государственная академия холода  
65082, Одесса, Украина*

Поступила в редакцию 22 июня 2012 г.

Рассчитано парное эффективное межоионное взаимодействие, свободная энергия, давление и электрическое сопротивление в жидком металлическом гелии в широком диапазоне плотностей и температур. Для всех указанных характеристик металла использовалась теория возмущений по потенциалу электрон-ионного взаимодействия. В случае электронов проводимости применялось приближение случайных фаз при учете обменного взаимодействия и корреляций в приближении локального поля. Для ядерной подсистемы использовалась модель твердых сфер. Диаметр этих сфер является единственным параметром теории. Оценка диаметра и плотности системы, при которой происходит переход гелия из однократно в двукратно ионизированное состояние, проведена на основе анализа парного эффективного взаимодействия между ядрами гелия. Рассмотрен случай двукратно ионизированных атомов гелия. При численных расчетах учтены члены теории возмущений до третьего порядка включительно. Роль поправки третьего порядка во всех случаях значительна. Электрическое сопротивление и его температурная зависимость для металлического гелия имеют вид, характерный для двухвалентных простых жидких металлов. Значения термодинамических параметров — плотностей температуры и давления — укладываются в диапазон значений, характерных для центральных областей планет-гигантов. Это позволяет предположить существование гелия в металлическом состоянии в пределах солнечной системы.

DOI: 10.7868/S0044451013010182

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема металлизации веществ, находящихся при нормальных условиях в газообразном состоянии, давно привлекала внимание физиков. Развитие экспериментов по ударному сжатию вещества наконец сделало возможной металлизацию некоторых из них [1, 2]. Так, в 1996–1999 гг. были получены и достаточно основательно изучены в металлическом состоянии водород и дейтерий [3–5], в 2001 г. — кислород [6], в 2003 г. — азот [7]. Экспериментально получить гелий в металлическом состоянии до настоящего времени не удалось. Теоретическое изучение процесса возможной металлизации гелия идет более результативно, хотя общее количество работ по этой тематике сравнительно невелико. Согласно одной из первых работ [8], для металлизации гелия при низких температурах необходимо давление 100 Мбар, что делает его существование в металлическом состоянии даже в центральных областях планет-гигантов солнечной сис-

темы нереальным. Используя квантовый метод молекулярной динамики, авторы работы [9] получили достаточно неожиданный результат: переход металл–диэлектрик в жидком гелии может происходить уже при плотности  $1 \text{ г/см}^3$ . В работе [10] для получения уравнения состояния твердого гелия использовался квантовый метод Монте-Карло. Результаты авторов состоят в том, что переход металл–диэлектрик должен происходить при плотности  $21.3 \text{ г/см}^3$  и давлении 25.7 Мбар. В работе [11] уравнение состояния и коэффициент электропроводности гелия были вычислены в рамках метода молекулярной динамики с использованием для электронной подсистемы метода функционала плотности. Авторы утверждают, что температура критическим образом влияет на электронную структуру гелия. Если при нулевой температуре запрещенная зона исчезает при плотности  $13 \text{ г/см}^3$ , то при температуре 20000 К она исчезает при плотности  $6.6 \text{ г/см}^3$ . Последние значения плотности и температуры уже вполне могут быть достигнуты в центральной области Юпитера. Из изложенного следует, что все расчеты разнообразных свойств металлического гелия выполнены методами математического моделирова-

\*E-mail: tarval@breezein.net

ния и не вполне согласуются между собой. Данная работа посвящена применению к изучению различных свойств металлического гелия аналитических методов. В первую очередь предметом исследования данной работы является уравнение состояния металлического гелия. Для нахождения единственного параметра теории — диаметра твердых сфер — исследуется парное эффективное межионное взаимодействие по аналогии со случаями металлического водорода и других простых металлов [12–15].

Одной из основных теорий, на которых базируется современная физика металлов, является теория псевдопотенциалов [16]. В рамках этой теории для электронов проводимости потенциал электрон-ионного взаимодействия определенным образом заменяется псевдопотенциалом. Если ряд теорий возмущений для какого-либо свойства металла по степеням электрон-ионного взаимодействия сходится, то после замены потенциала псевдопотенциалом сходимость ряда усиливается настолько, что для большинства металлов достаточно учитывать первые несколько его членов [13]. Однако псевдопотенциал имеет настолько сложную структуру, что построить его *ab initio* для неупорядоченных металлов невозможно. Обычно используют различные модельные псевдопотенциалы, содержащие подгоночные параметры. Эти подгоночные параметры достаточно легко находятся при наличии для данного металла достаточно разносторонней и богатой экспериментальной информации. При отсутствии такой информации использование теории псевдопотенциалов резко усложняется. Исключением является тот случай, когда электрон-ионное взаимодействие оказывается кулоновским, т. е. когда атом теряет вследствие ионизации все свои электроны. Для такой системы псевдопотенциал и потенциал тождественно совпадают и число подгоночных параметров теории резко сокращается. К счастью, именно такой системой является металлический водород. Теоретическое описание его различных электронных свойств содержит лишь один внешний параметр — диаметр твердых сфер, который также может быть рассчитан, хотя и с ограниченной точностью. Такой системой является и металлический гелий с двукратно ионизованными атомами. Для экспериментаторов в данный момент больший интерес представляет металлический гелий с однократно ионизованными атомами, поскольку реализация металлического состояния в этом случае требует меньших давлений, плотностей и температур. Объектом нашего изучения будет как раз металлический гелий, состоящий из электронов проводимости и ядер. Нам кажется целесообразным

на данном этапе теоретических исследований металлического гелия выполнить «то, что можно, так как нужно», предварив этими расчетами неизбежный следующий этап исследований — «то, что нужно, так как можно».

## 2. ГАМИЛЬТониАН

В приближении почти свободных электронов гамильтониан электронной подсистемы металлического гелия можно взять в виде, подобном виду для простых жидких металлов [16, 17]:

$$H = H_i + H_e + H_{ie}.$$

Гамильтониан ядерной подсистемы имеет следующий вид:

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

Первый член в правой части описывает кинетическую энергию ядер, второй — кулоновскую энергию их взаимодействия. Здесь  $V$  — объем системы,  $N_i$  — количество ядер в системе,  $T_n$  — кинетическая энергия  $n$ -го ядра,  $V_{ii}(\mathbf{q}) = 4\pi z^2 e^2 / q^2$  — фурье-образ потенциальной энергии кулоновского взаимодействия между ядрами гелия,  $z = 2$ ;  $\rho^i(\mathbf{q})$  — фурье-образ плотности ядер. Для достаточно высоких температур, рассматриваемых в дальнейшем, ядерную подсистему можно считать классической. Для описания вырожденного электронного газа воспользуемся представлением вторичного квантования по плоским волнам. В этом случае

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

Первый член в правой части описывает кинетическую энергию электронного газа, второй — кулоновскую энергию взаимодействия электронов. Здесь  $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ ,  $a_{\mathbf{k}}$  — операторы рождения и уничтожения электронов в состоянии с волновым вектором  $\mathbf{k}$ ,  $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$  — энергия свободного электрона,  $V_{ee}(\mathbf{q}) = 4\pi e^2 / q^2$  — фурье-образ потенциальной энергии кулоновского взаимодействия между электронами,  $\rho^e(\mathbf{q})$  — фурье-образ оператора электронной плотности,  $N_e$  — оператор количества электронов.

Гамильтониан кулоновского взаимодействия электронов с ядрами имеет следующий вид:

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

где  $V_{ie}(q) = -4\pi ze^2/q^2$  — фурье-образ потенциальной энергии кулоновского взаимодействия между электронами и ядрами гелия. Условие электрической нейтральности системы можно учесть в исходном гамильтониане, опустив в каждой сумме слагаемое с  $\mathbf{q} = 0$ .

### 3. ВНУТРЕННЯЯ ЭНЕРГИЯ

Внутреннюю энергию системы можно получить усреднением гамильтониана по каноническому ансамблю Гиббса:

$$E = \langle H_i \rangle + \langle H_e \rangle + \langle H_{ie} \rangle.$$

Для вклада в энергию ядерной подсистемы это выглядит как

$$E_i = N_i \frac{3}{2} k_B T + N_i \frac{1}{2V} \sum'_{\mathbf{q}} V_{ii}(q) [S_i(q) - 1].$$

Штрих у знака суммы означает отсутствие слагаемого с  $\mathbf{q} = 0$ ,  $T$  — абсолютная температура системы. Второе слагаемое в правой части называется энергией Маделунга, точность ее вычисления зависит от характера приближения, использованного для статического структурного фактора ядерной подсистемы  $S_i(q)$ . В качестве последнего мы в дальнейшем будем использовать структурный фактор системы твердых сфер. Он параметрически зависит от плотности ядер, диаметра твердых сфер и плотности их упаковки. При заданной плотности независимым параметром является, например, лишь диаметр твердых сфер.

Энергию электронной подсистемы и энергию взаимодействия электронной и ядерной подсистем удобно рассматривать вместе. Их сумму — энергию основного состояния электронного газа в поле ядер — можно разложить в ряд по степеням электрон-ядерного взаимодействия [13]:

$$E_e = \sum_{n=0}^{\infty} E_n.$$

В свою очередь, в каждом порядке по электрон-ядерному взаимодействию соответствующий вклад следует разложить в ряд по электрон-электронному взаимодействию. Член нулевого порядка по электрон-ядерному и электрон-электронному взаимодействиям — это кинетическая энергия идеального электронного газа. При низких температурах ( $k_B T/\varepsilon_F \ll 1$ ,  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми)

$$E_{0e} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) = N_e \frac{1.105}{r_s}.$$

Здесь введен параметр неидеальности Бракнера  $r_s$ , равный радиусу сферы, объем которой совпадает с объемом системы, приходящимся на один электрон. В первом порядке по электрон-электронному взаимодействию вклад в энергию называется энергией Хартри–Фока. Для его получения следует учесть вклад в гамильтониан системы от электрон-электронного взаимодействия, где в качестве структурного фактора  $S_e(q)$  достаточно взять структурный фактор идеального электронного газа [18]. В результате имеем

$$E_{HF} = N_e \frac{1}{2V} \sum'_{\mathbf{q}} V_{ee}(q) [S_e^{(0)}(q) - 1] = -N_e \frac{0.458}{r_s}.$$

Члены старших порядков по электрон-электронному взаимодействию называются корреляционной энергией. Задача их учета до сих пор не решена. Общепринятым подходом является использование интерполяционной формулы Нозьера–Пайнса [18, 19]:

$$E_{cor} = N_e (-0.058 + 0.016 \ln r_s).$$

Вследствие электронейтральности системы член первого порядка по электрон-ядерному взаимодействию в выражении для энергии основного состояния электронного газа в металлическом гелии отсутствует. Члены второго и более высоких порядков по электрон-ядерному взаимодействию, так называемая энергия зонной структуры, имеют вид

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

Здесь  $S_i(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  —  $n$ -частичный структурный фактор ядерной подсистемы, зависящий лишь от координат ядер и формально точно учитывающий ядерно-ядерное взаимодействие,  $\Delta(\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n)$  — символ Кронекера,  $\Gamma^{(n)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  — электронный  $n$ -полюсник [13], зависящий только от координат электронной подсистемы и формально точно учитывающий электрон-электронное взаимодействие. Последнее выражение является формально точным, а потому не пригодным для конкретных вычислений. Существует несколько вариантов приближенных вычислений электронных многополюсников [20–23] и многочастичных структурных факторов ядерной подсистемы [24]. Для электронного двухполюсника общий результат разных авторов имеет вид

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

где  $\pi(q)$  — поляризационная функция электронного газа,  $\varepsilon(q)$  — его диэлектрическая проницаемость. В приближении случайных фаз и при учете обменного взаимодействия и корреляций электронов в приближении локального поля имеем

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

где

$$U(q) = -\frac{2\pi e^2}{q^2 + \lambda k_F^2}$$

— потенциальная энергия обменного взаимодействия и корреляций электронного газа,  $\lambda \approx 2$  [25],  $\pi_0(q)$  — поляризационная функция идеального электронного газа. Для электронного трехполосника результаты разных авторов существенно отличаются. Результат независимого вычисления автором данной статьи электронного трехполосника [17] совпадает для модели идеального электронного газа с результатом, полученным в работе [22]. Именно он и использован в данной работе:

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

где  $\Lambda_0^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)$  — электронный трехполосник вырожденного идеального электронного газа. Указанное приближение для трехполосника соответствует учету электрон-электронного взаимодействия в приближении самосогласованного поля, где электрон-электронное взаимодействие учитывается лишь через экранирование внешнего поля — поля ядер. Члены же второго и третьего порядков по электрон-протонному взаимодействию после перехода от суммирования к интегрированию в сферической системе координат имеют вид

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

$$E_3 = N_i \frac{1}{4\pi^4} \int_0^\infty dq_1 q_1^2 \int_0^\infty dq_2 q_2^2 F(q_1, q_2),$$

$$F(q_1, q_2) = \frac{2n+1}{2} \int_0^\pi \frac{\Lambda_0^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2)}{\varepsilon(q_1)\varepsilon(q_2)\varepsilon(|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|)} \times \\ \times V_{ie}(q_1)V_{ie}(q_2)V_{ie}(|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|) S_i(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \times \\ \times \sin \theta_{12} d\theta_{12}.$$

Здесь  $\theta_{12}$  — угол между векторами  $\mathbf{q}_1$  и  $\mathbf{q}_2$ . Поскольку электрон-ядерное взаимодействие известно точно, основное, использованное нами приближение в

расчетах члена третьего порядка по электрон-протонному взаимодействию — это геометрическое приближение для трехчастичного структурного фактора [24, 26, 27]:

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

Таким образом, энергию основного состояния электронного газа металлического гелия можно представить как

$$E = E_0 + \sum_{n=2}^\infty E_n, \\ E_0 = E_{0e} + E_{HF} + E_{cor}.$$

#### 4. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ И ДАВЛЕНИЕ

По определению свободной энергии

$$F = E - TS,$$

где  $S$  — энтропия системы. Последнюю можно представить в виде суммы электронной и ядерной составляющих. Однако для вырожденного электронного газа электронной составляющей можно пренебречь по сравнению с ядерным вкладом в энтропию. Последний вклад можно взять в приближении твердых сфер [19, 28]:

$$S = S_{0i} + S_{ii}(\eta).$$

Здесь

$$S_{0i} = N_i k_B \ln \left[ \frac{e}{n_i} \left( \frac{eMk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right]$$

— энтропия идеального ядерного газа,  $M$  — масса ядра,  $n_i$  — плотность ядер,

$$S_{ii}(\eta) = N_i k_B \frac{3\eta^2 - 4\eta}{(1 - \eta)^2}$$

— вклад, обусловленный взаимодействием между ядрами,  $\eta$  — параметр (плотность упаковки ядер), связанный с плотностью системы и диаметром твердых сфер универсальным соотношением.

Предложенная теория содержит, на первый взгляд, единственный неопределенный параметр — диаметр твердых сфер. Только зная зависимость этого параметра от плотности и температуры, можно найти соответствующие зависимости термодинамических потенциалов. Для нахождения искомых зависимостей диаметра твердых сфер в данной работе используется парное эффективное взаимодействие между ядрами. По зависимости этого взаимодействия от расстояния между ядрами

можно определить диаметр твердых сфер для произвольной температуры и плотности [29].

Диаметр твердых сфер  $\sigma$ , т. е. минимальное расстояние, на которое при данной температуре могут сблизиться ядра, находится из условия равенства кинетической и потенциальной энергий протонов при их взаимном сближении:

$$V_{ef}(\sigma) = 3k_B T/2.$$

## 5. ПАРНОЕ ЭФФЕКТИВНОЕ МЕЖИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Так же, как и в случае металлического водорода [12, 30, 31], парное эффективное межиионное взаимодействие в жидком металлическом гелии будем рассматривать в рамках теории возмущений по электрон-ионному взаимодействию. Его можно представить в виде следующего ряда [13]:

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

где  $R$  — расстояние между ионами. В случае металлического гелия, образованного двукратно ионизованными атомами гелия,  $U_2^{(0)}(R) = V_{ii}(R)$  является потенциальной энергией кулоновского взаимодействия между ядрами. Член первого порядка по потенциалу электрон-ядерного взаимодействия  $U_2^{(1)}(R) = 0$ , член второго порядка

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

член третьего порядка

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

Рассмотрение парного эффективного межиионного взаимодействия для гелия начнем с достаточно высоких плотностей электронного газа.

На рис. 1–3 приведены графики зависимости парного эффективного потенциала от расстояния между ионами. Потенциал на рис. 1 имеет вид, характерный для типичного простого металла. Глубина первого минимума потенциальной ямы составляет примерно 3000 К, что вполне достаточно, чтобы жидкий металлический гелий был устойчив при меньших температурах и данной плотности. Положение

первого минимума соответствует равновесному взаимному положению ионов гелия в металлической фазе для ближайших соседей. Член третьего порядка в формировании этого минимума имеет гораздо большее значение, чем член второго порядка. Такая ситуация характерна и для металлического водорода [15]. Заметим, что при этом вклад членов третьего порядка во внутреннюю энергию металлов составляет всего несколько процентов и гораздо меньше вклада члена второго порядка.

На рис. 2 видим начальный процесс формирования потенциальной ямы при гораздо меньших межиионных расстояниях. В металлическом водороде тоже наблюдается такое поведение межиионного потенциала и обычно оно интерпретируется как начало формирования молекулярной фазы водорода [30, 31]. В данном случае, видимо, речь также идет о перестройке электронной подсистемы металла, отвечающей возникновению однократно ионизованных атомов гелия.

Характерной плотностью металла, разграничивающей эти две металлические фазы жидкого гелия, с нашей точки зрения, является плотность  $5.3 \text{ г/см}^3$ , при которой глубины двух указанных потенциальных ям сравниваются. Этот момент эволюции системы представлен на рис. 3.

Таким образом, учет старших порядков теории возмущений при нахождении парного эффективного потенциала межиионного взаимодействия позволяет проследить поведение этого взаимодействия в непосредственной окрестности точки перехода гелия между однократно и двукратно ионизованными атомами гелия. Он также является, с нашей точки зрения, важным при обсуждении вопроса об устойчивости гелия в металлическом состоянии. Согласно данным расчетам, в широком интервале плотностей глубина потенциальной ямы, соответствующей металлической связи ионов гелия, составляет несколько тысяч градусов Кельвина. При более высоких температурах гелий не может находиться в стабильном жидком состоянии, а представляет собой полностью ионизованную плазму. А, например, при комнатной температуре гелий вполне мог бы находиться в стабильном жидком металлическом состоянии. Во всяком случае, это не противоречит результатам наших расчетов. Вопрос о возможности существования гелия в металлическом твердом состоянии остается открытым. Так, существуют убедительные доказательства того, что существование металлического водорода в твердом состоянии невозможно [32]. Согласно этой работе, единственной твердой фазой водорода является его молекулярная фаза, а пере-

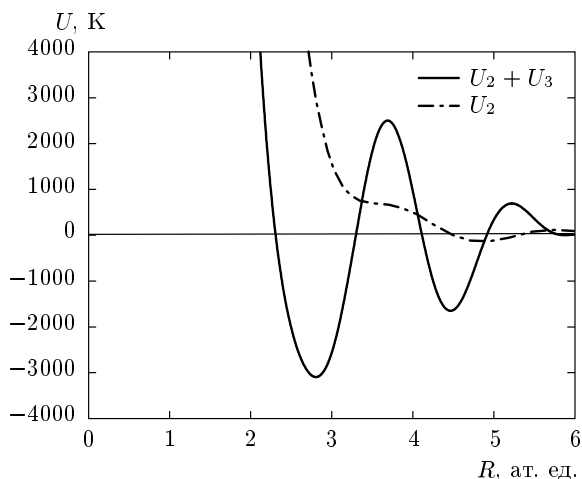


Рис. 1. Парное эффективное взаимодействие между ядрами гелия при плотности  $6.7 \text{ г/см}^3$

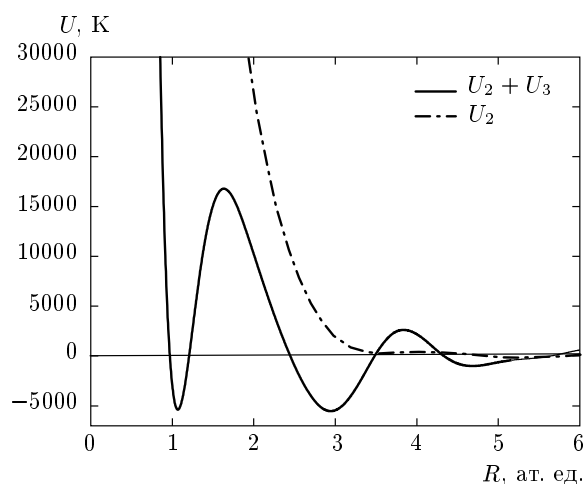


Рис. 3. Парное эффективное взаимодействие между ядрами гелия при плотности  $5.3 \text{ г/см}^3$

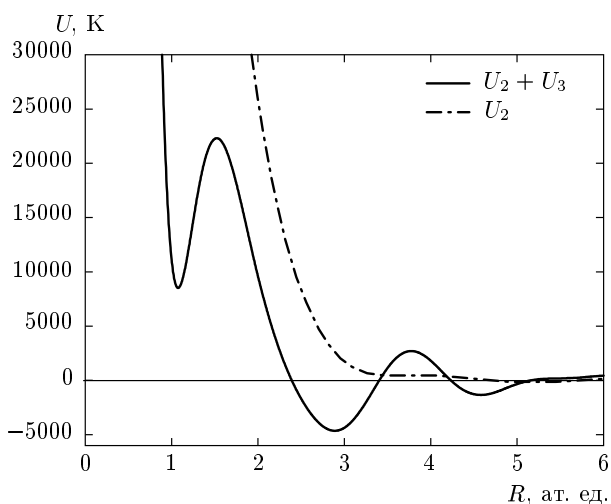


Рис. 2. Парное эффективное взаимодействие между ядрами гелия при плотности  $5.8 \text{ г/см}^3$

ход водорода в металлическое состояние означает переход в состояние квантовой жидкости благодаря квантовым нулевым колебаниям атомов. Результаты наших расчетов также свидетельствуют о том, что в центральных областях всех планет-гигантов солнечной системы гелий может находиться в металлическом состоянии.

Отметим, что к использованию полученных результатов для нахождения диаметра твердых сфер следует относиться как к полезным оценкам. Остается открытым вопрос о роли членов более высокого, чем третий, порядков теории возмущений при расчете парного эффективного межпротонного вза-

имодействия. Так, расчет диаметра при использовании парного эффективного межъядерного взаимодействия во втором порядке теории возмущений при температуре  $10000 \text{ К}$  и плотности  $5.3 \text{ г/см}^3$  дает величину  $2.101 \text{ ат. ед.}$  При учете члена третьего порядка это значение будет уже  $1.778 \text{ ат. ед.}$  Член четвертого порядка учесть уже не представляется возможным. В результате вопрос о достаточно точном значении диаметра твердых сфер решить не удастся. Можно лишь предполагать, что учет членов старшего порядка приводит к дальнейшему уменьшению диаметра. Если далее предположить, что темп этих изменений образует геометрическую прогрессию, то значение диаметра твердых сфер, полученное во втором порядке теории возмущений, следует умножить на  $\alpha = 0.5$ . В этом случае диаметр окажется близким к диаметру первой боровской орбиты однократно ионизованного атома гелия. К счастью, найденный таким образом коэффициент  $\alpha$  достаточно слабо зависит и от плотности, и от температуры. По этой причине мы в дальнейшем будем считать этот коэффициент постоянной величиной, а зависимость диаметра твердых сфер от плотности и температуры такой же, как и в случае его нахождения во втором порядке теории возмущений по электрон-ядерному взаимодействию.

## 6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Прежде всего выясним, насколько правомерно использовать теорию возмущений по электрон-ядерному взаимодействию для нахождения свободной

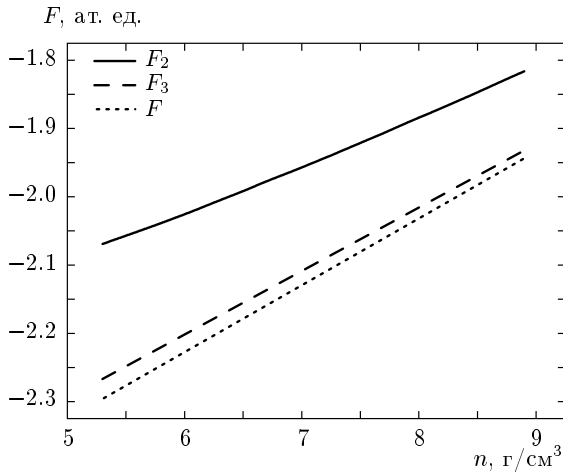


Рис. 4. Зависимости от плотности свободной энергии при  $T = 10000$  К, найденной во втором  $F_2(n, T)$  и третьем  $F_3(n, T)$  порядках теории возмущений, а также ее оценки  $F(n, T)$  в произвольном порядке

энергии. На рис. 4 приведен график зависимости свободной энергии от плотности. Оценки свободной энергии  $F(n, T)$  выполнены в предположении, что ряд теории возмущений структурно зависящей части внутренней энергии представляет собой ряд геометрической прогрессии со знаменателем  $E_3(n, T)/E_2(n, T)$ . Видно, что вклад старших порядков теории возмущений быстро убывает. Члены ряда теории возмущений для свободной энергии выше третьего порядка достаточно малы.

Похожий вид имеет и зависимость давления  $P$  от плотности (рис. 5). Однако есть и некоторое отличие. Ряд теории возмущений для давления хотя и сходится, но несколько медленнее, чем для свободной энергии. При этом скорость сходимости ряда возрастает с увеличением плотности. Значение давления при плотности  $5.3 \text{ г/см}^3$  составляет около 18 Мбар. Если считать, что при плотности, меньшей  $5.3 \text{ г/см}^3$ , гелий находится в однократно ионизованном состоянии, то указанное значение давления, видимо, является верхней границей для гелия в этом состоянии. Приведенные на рис. 5 значения давления и плотности вполне укладываются в диапазон давлений и плотностей во внутренней области такой планеты, как Юпитер [33]. Это обстоятельство указывает на возможность существования металлического гелия в центральных областях не только Юпитера, но и других экзопланет группы Юпитера.

На рис. 6 приведены значения давления  $P$  как функции плотности при различных значениях температуры. Эти зависимости имеют монотонно воз-

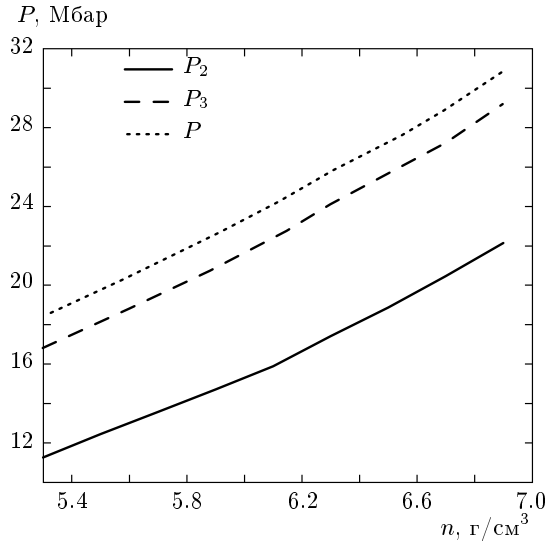


Рис. 5. Зависимости от плотности давления при  $T = 10000$  К, найденного во втором  $P_2(n, T)$  и третьем  $P_3(n, T)$  порядках теории возмущений, а также его оценки  $P(n, T)$  в произвольном порядке

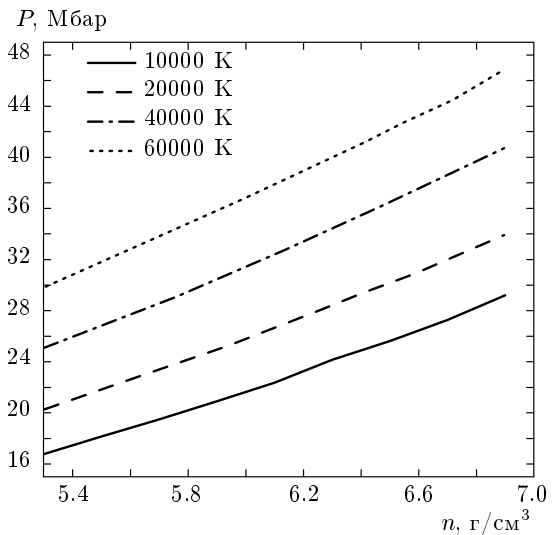
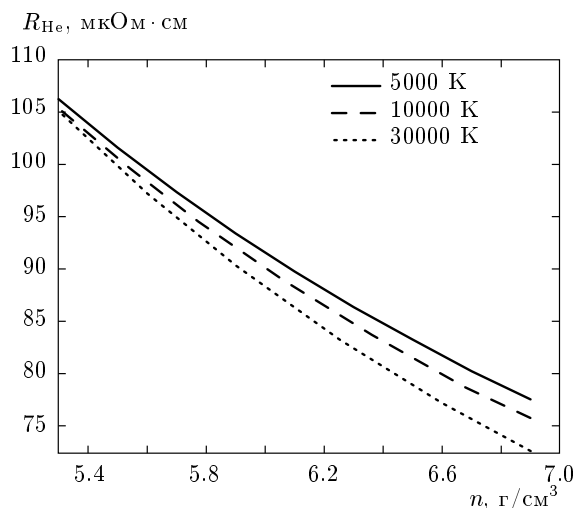


Рис. 6. Зависимости давления, вычисленного в третьем порядке теории возмущений, от плотности при различных значениях температуры

растающий характер и в рассматриваемом диапазоне плотностей и температур являются почти линейными. Представляют интерес и зависимости от плотности и температуры электрического сопротивления  $R_{\text{He}}$  двукратно ионизованного металлического гелия. На рис. 7 приведены результаты вычислений аналогично случаю металлического водорода [15]. Анализ показывает, что в рассматриваемом



**Рис. 7.** Зависимости электрического сопротивления, рассчитанные в третьем порядке теории возмущений, от плотности при различных температурах

диапазоне плотностей и температур ряд теории возмущений также достаточно хорошо сходится. Электрическое сопротивление двухвалентного металлического гелия лежит в интервале значений, характерном для простых двухвалентных металлов. При этом с ростом температуры электрическое сопротивление металлического гелия убывает, что также характерно для этих металлов.

В целом рассмотренная картина различных свойств двукратно ионизированного металлического гелия представляется нам весьма реалистичной. Используемый при расчетах диапазон плотностей, давлений и температур может быть достигнут экспериментально уже в ближайшем будущем. Нам представляется, что результаты расчетов являются хорошим ориентиром при изучении различных свойств однократно ионизированного металлического гелия. В последнем случае теория, конечно, будет содержать большее число свободных параметров, а для их определения потребуется экспериментальная информация, связанная с металлическим состоянием гелия.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Е. Г. Максимов, Ю. Т. Шилов, УФН **169**, 1223 (1999).
2. В. Е. Фортов, УФН **177**, 347 (2007).
3. S. T. Weir, A. C. Mitchell, and W. J. Nellis, Phys. Rev. Lett. **76**, 1860 (1996).
4. В. Е. Фортов, В. Я. Терновой, С. В. Квитов, В. Б. Минцев, Д. Н. Николаев, А. А. Пяллинг, А. С. Филимонов, Письма в ЖЭТФ **69**, 874 (1999).
5. V. Ya. Ternovoi, A. S. Filimonov, V. E. Fortov, S. V. Kvitov, D. N. Nikolaev, and A. A. Pyaling, Physica B **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 **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. Nat. Acad. Sci. USA **105**, 11071 (2008).
12. Е. Г. Бровман, Ю. М. Каган, А. Холас, ЖЭТФ **61**, 2429 (1971).
13. Е. Г. Бровман, Ю. М. Каган, УФН **112**, 369 (1974).
14. D. J. Stevenson and N. W. Ashcroft, Phys. Rev. A **9**, 782 (1974).
15. В. Т. Швец, ЖЭТФ **131**, 743 (2007).
16. У. Харрисон, *Псевдопотенциалы в теории металлов*, Мир, Москва (1968).
17. В. Т. Швец, *Метод функций Грина в теории металлов*, Латстар, Одесса (2002).
18. И. А. Вакарчук, *Введение в проблему многих тел*, Изд-во Львовского унив., Львов (1999).
19. W. H. Shih and D. Stroud, Phys. Rev. B **31**, 3715 (1985).
20. P. Lloyd and C. A. Shall, J. Phys. C **1**, 1620 (1968).
21. Е. Г. Бровман, Ю. Каган, ЖЭТФ **63**, 1937 (1972).
22. Е. Г. Бровман, А. Холас, ЖЭТФ **66**, 1877 (1974).
23. J. Hammerberg and N. W. Ashcroft, Phys. Rev. B **9**, 3999 (1974).
24. L. Ballentine and V. Heine, Phil. Mag. **9**, 617 (1964).



25. D. J. M. Geldart and S. H. Vosko, *Canad. J. Phys.* **44**, 2137 (1966).
26. V. T. Shvets and E. V. Belov, *Acta Phys. Polon. A* **96**, 741 (1999).
27. V. T. Shvets, *Phys. Met. Metallogr.* **89**, 211 (2000).
28. И. Р. Юхновский, М. Ф. Головкин, *Статистическая теория классических равновесных систем*, Наукова думка, Киев (1987).
29. V. T. Shvets, S. V. Savenko, and Ye. K. Malinovskiy, *Condensed Matter Phys.* **9**, 1 (2006).
30. S. D. Kaim, N. P. Kovalenko, and E. V. Vasiliu, *J. Phys. Studies* **1**, 589 (1997).
31. В. Т. Швец, *Письма в ЖЭТФ* **95**, 34 (2012).
32. В. В. Кечин, *Письма в ЖЭТФ* **79**, 46 (2004).
33. V. T. Shvets, T. V. Shvets, and Ya. Ye. Rachynskiy, *Ukr. J. Phys.* **55**, 251 (2010).