

В.Т. ШВЕЦЬ,¹ С.В. КОЗИЦЬКИЙ²

¹ Одеська національна академія харчових технологій
(Вул. Канатна 112, Одеса 65039; e-mail: tasir.onaft@gmail.com)

² Одеська національна морська академія
(Вул. Дідріхсона, 8, Одеса 65029; e-mail: info@onma.edu.ua)

УДК 539

ТЕРМОДИНАМІКА МЕТАЛІЧНОГО ГЕЛІЮ

В роботі розраховано внутрішню і вільну енергію, та рівняння стану в рідкому металічному гелії в широкому діапазоні густин і температур. Для всіх зазначених характеристик металю використана теорія збурень за потенціалом електрон-іонної взаємодії із врахуванням членів до третього порядку включно. Для електронів провідності використано наближення випадкових фаз при врахуванні обмінної взаємодії і кореляцій в наближенні локального поля. Для ядерної підсистеми використана модель твердих сфер. Діаметр цих сфер є єдиним параметром теорії. Оцінку діаметра і густини системи, за яких відбувається перехід гелію з одноразово у дворазово іонізований стан, виконано на основі аналізу парної ефективної взаємодії між ядрами гелію. Для останньої також враховується член третього порядку теорії збурень. В роботі розглянуто випадок дворазово іонізованих атомів гелію. Роль поправки третього порядку у всіх випадках виявилась суттєвою. Значення термодинамічних параметрів: густини, температури і тиску укладаються в діапазон значень, характерних для центральних областей планет-гігантів. Це дозволяє припустити існування гелію в металічному стані в межах сонячної системи.

Ключові слова: рідкий металічний гелій, термодинамічні параметри, планети-гіганти.

1. Вступ

Прогрес експериментів по ударному стисканню речовин зробив можливим металізацію тих з них, що у нормальному стані є газами [1, 2]. Так, у 1996–1999 роках були отримані і досить ґрунтовно вивчені в металічному стані водень і дейтерій [3–5], у 2001 році – кисень [6], у 2003 році – азот [7]. Гелій експериментально отримати в металічному стані не вдалось і по теперішній час. Однак, теоретичне вивчення процесу можливої металізації гелію йде більш результативно, хоча загальна кількість робіт з цього приводу порівняно невелика. Відповідно до однієї з перших робіт [8], для металізації гелію при низьких температурах необхідний тиск у 100 Мбар, що робить його існування в

металічному стані навіть в центральних областях планет-гігантів сонячної системи нереальним. Використовуючи квантовий метод молекулярної динаміки, автори роботи [9] отримали досить неочікуваний результат, що перехід метал–діелектрик у рідкому гелії може відбуватись вже при густині 1 г/см³. В роботі [10] для отримання рівняння стану твердого гелію використовувався квантовий метод Монте-Карло. Результати авторів полягають в тому, що перехід метал–діелектрик має відбуватись при 21,3 г/см³ і тиску 25,7 Мбар. В роботі [11] рівняння стану і коефіцієнт електропровідності гелію були обчислені в рамках методу молекулярної динаміки з використанням для електронної підсистеми методу функціонала густини. Автори стверджують, що температура критичним чином впливає на електронну структуру гелію. Якщо при ну-

© В.Т. ШВЕЦЬ, С.В. КОЗИЦЬКИЙ, 2013

льовій температурі заборонена зона зникає при густині в 13 г/см^3 , то при температурі в 20000 К вона зникає при густині в $6,6 \text{ г/см}^3$. Останні значення густини і температури вже цілком досяжні в центральній області Юпітера. Як впливає з наведеного, досі розрахунки різних властивостей металічного гелію виконані методами математичного моделювання і не цілком узгоджуються між собою. Дана робота є однією з перших, присвячених застосуванню до вивчення різних властивостей металічного гелію аналітичних методів. У першу чергу, предметом дослідження даної роботи є рівняння стану металічного гелію. Для знаходження єдиного параметра теорії – діаметра твердих сфер буде досліджена парна ефективна міжйонна взаємодія, за аналогією з металічним воднем і іншими простими металами [12–16].

2. Внутрішня енергія

Для металічного гелію використаємо, подібно простим рідким металам, гамільтоніан [13–17], де електрон-електронна взаємодія враховується точно. Внутрішню енергію металу можна отримати усередненням гамільтоніана за канонічним ансамблем Гіббса:

$$E = E_i + E_{ie}. \quad (1)$$

Тут

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

– внесок у внутрішню енергію ядерної підсистеми. Перший доданок у правій частині рівності є кінетичною енергією ядер, другий – кулонівською енергією їх взаємодії, V – об'єм системи, N_i – кількість ядер, $V_{ii}(q) = 4\pi z^2 e^2 / q^2$ – фур'є-образ енергії кулонівської взаємодії між ядрами гелію, $z = 2$, T – абсолютна температура, штрих у знаку суми означає відсутність доданка з $\mathbf{q} = 0$, $S_i(q)$ – статичний структурний фактор ядерної підсистеми. В ролі останнього у подальшому використовуватимемо структурний фактор для моделі твердих сфер. Для заданої густини він параметрично залежить, наприклад, лише від діаметра твердих сфер. Для температур, що розглядаються далі, ядерну підсистему можна вважати класичною.

Енергію електронної підсистеми і енергію взаємодії електронної і ядерної підсистем зручно розглядати разом. Їх суму – енергію основного стану

електронного газу в полі ядер – можна розвинути в ряд за степенями електрон-ядерної взаємодії [13]:

$$E_{ie} = \sum_{n=0}^{\infty} E_n. \quad (3)$$

В свою чергу, в кожному порядку за електрон-ядерною взаємодією відповідний доданок слід розвинути в ряд за електрон-електронною взаємодією. Член нульового порядку за електрон-ядерною взаємодією при використанні інтерполяційної формули Ноз'єра–Пайнса [18, 19] має вигляд

$$E_0 = N_e \left(\frac{1,105}{r_s} - \frac{0,458}{r_s} - 0,058 + 0,016 \ln r_s \right). \quad (4)$$

Тут введений параметр неідеальності Бракнера r_s , який дорівнює радіусу сфери, об'єм якої збігається з об'ємом, що припадає на один електрон, N_e – кількість електронів металу.

Внаслідок електронейтральності системи внесок першого порядку за електрон-електронною взаємодією в енергію основного стану електронного газу в металічному гелії відсутній. Члени другого і більш високих порядків мають вигляд

$$E_n = \frac{N_i}{V^n} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \Gamma^{(n)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) V_{ie}(q_1) \dots V_{ie}(q_n) \times \\ \times S_i(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \Delta(\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n). \quad (5)$$

Тут $V_{ie}(q) = 4\pi z e^2 / q^2$ – фур'є-образ енергії кулонівської електрон-ядерної взаємодії, $S_i(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$ – n – частинковий структурний фактор ядерної підсистеми; $\Delta(\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n)$ – символ Кронекера; $\Gamma^{(n)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$ – електронний n -полюсник [13]. Останній вираз є формально точним, а тому непридатним для конкретних обчислень. Існує декілька варіантів наближених обчислень електронного триполюсника [20–23] та багаточастинкових структурних факторів ядерної підсистеми [24]. Для електронного диполосника загальний результат різних авторів такий:

$$\Gamma^{(2)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) = -\frac{1}{2} \frac{\pi(q)}{\varepsilon(q)}. \quad (6)$$

Тут $\pi(q)$ – поляризаційна функція електронного газу, $\varepsilon(q)$ – його діелектрична проникність. В наближенні випадкових фаз і при врахуванні обмінної взаємодії і кореляцій електронів у наближенні

локального поля:

$$\varepsilon(q) = 1 + [V_{ee}(q) + U(q)]\pi_0(q), \quad (7)$$

де $V_{ee}(q) = 4\pi e^2/q^2$ – фур'є-образ кулонівської енергії електрон-електронної взаємодії, $U(q) = -2\pi e^2/(q^2 + \lambda k_F^2)$ – потенціальна енергія обмінної взаємодії і кореляцій електронного газу, $\lambda \approx 2$ [25], $\pi_0(q)$ – поляризаційна функція ідеального електронного газу. Для електронного триполюсника результати різних авторів суттєво відрізняються. Результат незалежного обчислення авторів даної статті електронного триполюсника [17] збігається для моделі ідеального електронного газу з результатом, отриманим у роботі [22]. Саме він і використовуватиметься в даній роботі:

$$\Gamma^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) = \frac{\Lambda_0^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)}{\varepsilon(\mathbf{q}_1)\varepsilon(\mathbf{q}_2)\varepsilon(\mathbf{q}_3)}, \quad (8)$$

де $\Lambda_0^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)$ – електронний триполюсник виродженого ідеального електронного газу. Члени ж другого і третього порядків за електрон-протонною взаємодією після переходу від підсумовування до інтегрування у сферичній системі координат є такими:

$$E_2 = -N_i \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{\pi(q)}{\varepsilon(q)} V_{ie}^2(q) S_i(q) q^2 dq, \quad (9)$$

$$E_3 = N_i \frac{1}{4\pi^4} \int_0^\infty dq_1 q_1^2 \int_0^\infty dq_2 q_2^2 F(q_1, q_2), \quad (10)$$

$$F(q_1, q_2) = \frac{2n+1}{2} \int_0^\pi \frac{\Lambda_0^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2)}{\varepsilon(q_1)\varepsilon(q_2)\varepsilon(|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|)} \times \\ \times V_{ie}(q_1)V_{ie}(q_2)V_{ie}(|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|)S_i(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \times \\ \times \sin(\theta_{12})d\theta_{12}. \quad (11)$$

Для тричастинкового структурного фактора нами використане наближення [24, 26, 27]:

$$S_i(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) = S_i(\mathbf{q}_1)S_i(\mathbf{q}_2)S_i(\mathbf{q}_3). \quad (12)$$

За визначенням вільної енергії Гельмгольца:

$$F = E - TS, \quad (13)$$

де S – ентропія системи. Її можна представити сумою електронної і ядерної складових. Для виродженого електронного газу електронною складовою можна знехтувати порівняно з ядерною. Останній внесок можна взяти у наближенні твердих сфер [19, 28]:

$$S = S_{0i} + S_{ii}(\eta), \quad (14)$$

$$S_{0i} = N_i k_B \ln \left[\frac{e}{n_i} \left(\frac{eMk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right] \quad (15)$$

– ентропія ідеального ядерного газу, M – маса ядра, n_i – густина ядер; внесок, зумовлений взаємодією між ядрами,

$$S_{ii}(\eta) = N_i k_B \frac{3\eta^2 - 4\eta}{(1 - \eta)^2}. \quad (16)$$

Тут η – параметр густини пакування ядер.

3. Парна ефективна міжйонна взаємодія

Запропонована теорія містить, на перший погляд, єдиний невизначений параметр – діаметр твердих сфер. Знаючи його залежність від густини і температури можна знайти відповідну залежність термодинамічних потенціалів. Для знаходження шуканої залежності діаметра в даній роботі використовується парна ефективна взаємодія між ядрами. Вираз для цієї взаємодії містить їх пряму кулонівську взаємодію і їх посередню взаємодію через електрони провідності. Перша є відштовхувальною, друга – притягальною. Конкуренція цих взаємодій і може утворювати потенціальну яму з характерним мінімумом. За залежністю цієї взаємодії від відстані між ядрами можна визначити діаметр твердих сфер для довільної температури і густини [29].

Діаметр твердих сфер σ , яка є мінімальною відстанню, на яку при даній температурі можуть наблизитись ядра, знаходиться з умови рівності кінетичної і потенціальної енергії ядер при їх взаємному наближенні:

$$V_{ef}(\sigma) = 3k_B T/2. \quad (17)$$

Як і у випадку металічного водню [12, 30, 31], парну ефективну міжйонну взаємодію в рідкому металічному гелії розглядатимемо в рамках теорії

збурень за електрон-ядерною взаємодією. Її можна представити так [13]:

$$U_{\text{ef}}(R) = \sum_{n=0}^{\infty} U_2^{(n)}(R). \quad (18)$$

Тут R – відстань між ядрами. У разі металічного гелію, утвореного дворазово іонізованими атомами гелію, $U_2^{(0)}(R) = V_{ii}(R)$ є енергією кулонівської взаємодії між ядрами. Член першого порядку за потенціалом електрон-ядерної взаємодії $U_2^{(1)}(R) = 0$, член другого порядку

$$U_2^{(2)}(R) = -\frac{e^2}{2\pi^2 R} \int_0^{\infty} V_{ei}^2(q) \frac{\pi_0(q)}{\varepsilon(q)} \sin(qR) q dq, \quad (19)$$

член третього порядку

$$U_2^{(3)}(R) = \frac{3e^2}{4\pi^4 R} \int_0^{\infty} dq_1 q_1 \sin(q_1 R) \int_0^{\infty} dq_2 q_2^2 \int_{|q_1 - q_2|}^{q_1 + q_2} dq_3 \times \\ \times \frac{V_{ie}(q_1) V_{ie}(q_2) V_{ie}(q_3)}{\varepsilon(q_1) \varepsilon(q_2) \varepsilon(q_3)} \Lambda_0^{(3)}(q_1, q_2, q_3). \quad (20)$$

На рис. 1 наведено графік залежності парної ефективної взаємодії залежно від відстані між ядрами. На графіку потенціал приведений у градусах Кельвіна, а відстань – в атомних одиницях. Потенціал має вигляд, характерний для типового простого металу. Глибина першого мінімуму потенціальної ями становить приблизно 3000 К, що цілком досить, для стійкості рідкого металічного гелію при менших температурах і даній густині. Локалізація першого мінімуму відповідає рівноважному взаємному розміщенню ядер гелію в металічній фазі для найближчих сусідів. Член третього порядку у формуванні цього мінімуму має значно більше значення, ніж член другого порядку. Така ситуація характерна і для металічного водню [15]. Зауважимо, що при цьому внесок членів третього порядку у внутрішню енергію металу становить лише декілька відсотків і значно менший внеску члена другого порядку. При більших густинах глибина першого мінімуму зменшується, при менших густинах – збільшується. Але, крім того, починає формуватись ще одна потенціальна яма при значно менших відстанях між ядрами. В металічному водні теж спостерігається така поведінка між-протонного потенціалу. Її звичайно інтерпретують

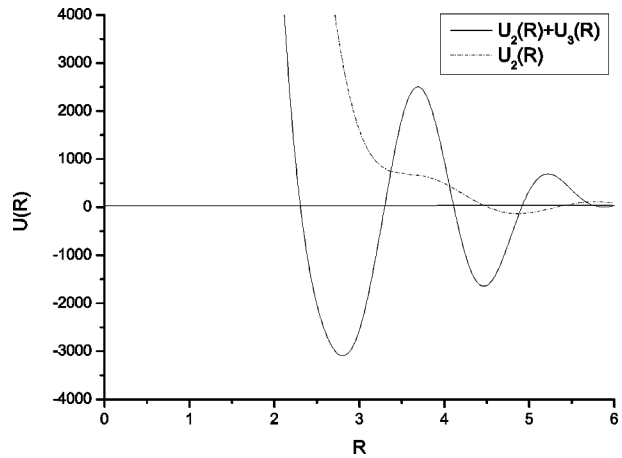


Рис. 1. Парна ефективна взаємодія між ядрами гелію при густині 6,7 г/см³

як початок формування молекулярної фази водню [30, 31]. В даному разі, мабуть, мова також йде про перебудову електронної підсистеми металу, що відповідає виникненню одноразово іонізованих атомів гелію. Характерна густина металу, що розмежовує ці дві металічні фази рідкого гелію, з нашої точки зору, є густина 5,3 г/см³, при якій глибини двох зазначених потенціальних ям збігаються. Ситуація з металічним гелієм є унікальною. Ми вміємо обчислювати тільки вільну енергію двічі іонізованого гелію. Тому ми поклали в основу аналізу парну ефективну взаємодію, а не, наприклад, вільну енергію в околі точки переходу. Формули для парної взаємодії не містять жодного вільного параметра і не вимагають жодних серйозних модельних припущень. Всі інші характеристики гелію – містять і одне, і друге.

Результати наших розрахунків свідчать, що в центральних областях всіх планет-гігантів сонячної системи гелій може знаходитись в металічному стані.

Зауважимо, що до використання отриманих результатів при знаходженні діаметра твердих сфер слід відноситись як до корисних оцінок. Залишається відкритим питання про роль членів вищих, ніж третій порядок теорії збурень при розрахунках парної ефективної між'ядерної взаємодії. Так, у другому порядку теорії збурень при температурі 10000 К і густині 5,3 г/см³ для діаметра твердих сфер ми отримуємо 2,101 а.о. При врахуванні члену третього порядку це значення бу-

де вже 1,778 а.о. Члени четвертого і старших порядків точно врахувати неможливо. Можна тільки припустити, що члени старшого порядку приводять до подальшого зменшення діаметра. Якщо також припустити, що темп цих змін відповідає геометричній прогресії, то значення діаметра твердих сфер, отримане у другому порядку теорії збурень, потрібно помножити на $\alpha = 0,5$. У цьому разі він виявиться близьким до діаметра першої борівської орбіти одноразово іонізованого атома гелію.

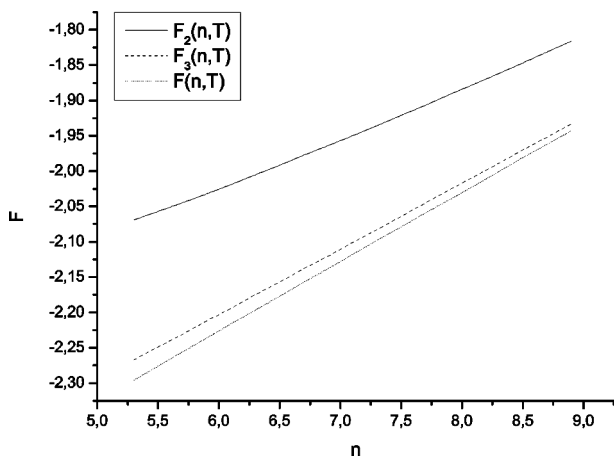


Рис. 2. Залежність вільної енергії Гельмгольца від густини при $T = 10000$ К, знайдена у другому $F_2(n, T)$, третьому $F_3(n, T)$ порядках теорії збурень і оцінка повної суми для $F(n, T)$

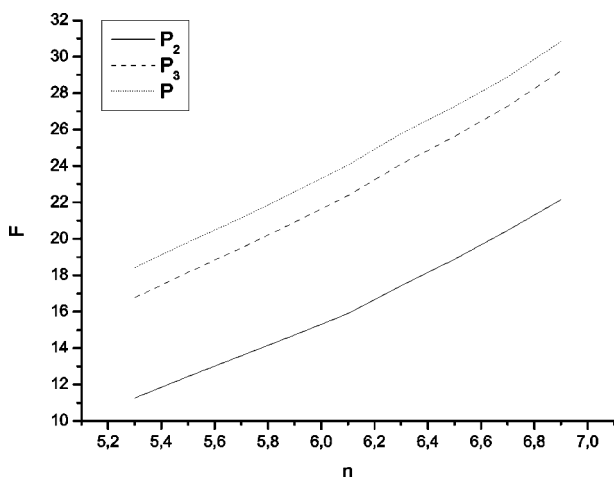


Рис. 3. Залежність тиску від густини при $T = 10000$ К, знайдена у другому $P_2(n, T)$, третьому $P_3(n, T)$ порядках теорії збурень і оцінка повної суми для $P(n, T)$

4. Обговорення результатів

Перш за все, з'ясуємо наскільки правомірно використовувати теорію збурень за електрон-ядерною взаємодією для знаходження вільної енергії. На рис. 2 наведено графік залежності вільної енергії від густини. Оцінка вільної енергії $F(n, T)$, виконана у припущенні, що ряд теорії збурень структурно залежної частини внутрішньої енергії є геометричною прогресією із знаменником $E_3(n, T)/E_2(n, T)$. Значення енергії наведені в атомній системі одиниць, густина – в г/см^3 . Видно,

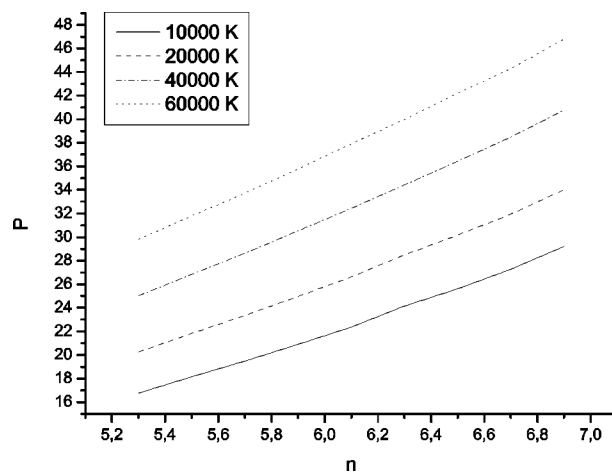


Рис. 4. Залежність тиску, обчисленого в третьому порядку теорії збурень, від густини при різних значеннях температури

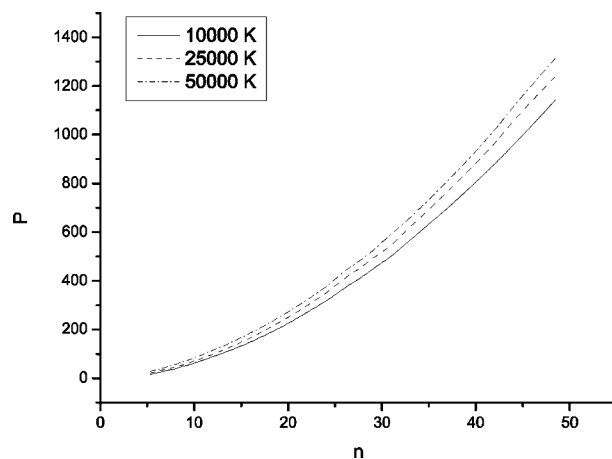


Рис. 5. Залежність тиску, обчисленого в третьому порядку теорії збурень, від густини при різних значеннях температури

що така оцінка близька до значень енергії, обчислених з точністю до членів третього порядку теорії збурень.

Схожий вигляд має і залежність тиску від густини, що видно на рис. 3. Тиск подано в Мбар, густину – в г/см^3 . Із збільшенням густини швидкість збіжності ряду для вільної енергії і тиску зростає. Тиск при густині $5,3 \text{ г/см}^3$ становить близько 18 Мбар. Якщо вважати, що нижче цієї густини гелій знаходиться в одноразово іонізованому стані, то зазначене значення тиску імовірно є верхньою межею тиску для гелію в цьому стані. Наведені на рис. 3 значення тиску і густини цілком потрапляють в діапазон тисків і густин для внутрішньої області такої планети, як Юпітер [32]. Ця обставина вказує на можливість існування металічного гелію в центральних областях не лише Юпітера, а і екзопланет його групи.

На рис. 4 наведено тиск як функція густини для різних температур. Ця залежність є монотонно зростаючою і в розглянутому діапазоні густин і температур майже лінійна. Тиск виражений в Мбар, густина – в г/см^3 .

На рис. 5 наведена залежність тиску від густини для настільки великих значень густини, що тиск перестає залежати від структури ядерної підсистеми.

В кінці розглянутого інтервалу з точністю до трьох значущих цифр результати підсумовування ряду теорії збурень для тиску при врахуванні членів другого та другого і третього порядків збігаються $P_2(50, 10000) = P_3(50, 10000)$. Зменшується і відносна величина температурних поправок. Поведінка тиску стає все більш універсальною, зумовленою, в основному, властивостями виродженого електронного газу.

Реалістичність отриманих результатів підтверджується і тим, що електричний опір металічного гелію, розрахований аналогічно випадку металічного водню [15], лежить в інтервалі значень, характерному для простих двовалентних рідких металів. Подібною є і його температурна залежність.

Результати наших розрахунків є цілком реалістичним орієнтиром при вивченні термодинамічних властивостей одноразово іонізованого гелію. В останньому разі, теорія неминує міститиме більше підгінних параметрів і для їх визначення буде необхідна експериментальна інформація, пов'язана з металічним станом гелію.

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, Одеса, 2002).
18. И.А. Вакарчук, *Введение в проблему многих тел* (Львовский национальный университет им. Ивана Франка, 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, Philos. Mag. **9**, 617 (1964).
25. D.J.M. Geldart and S.H. Vosko, Can. J. Phys. **44**, 2137 (1966).
26. V.T. Shvets and E.V. Belov, Acta Phys. Pol. A **96**, 741 (1999).
27. V.T. Shvets, Phys. Metal. Metallogr. **89**, 211 (2000).
28. И.П. Юхновский, М.Ф. Головки, *Статистическая теория классических равновесных систем* (Наукова думка, Киев, 1987).
29. V.T. Shvets, S.V. Savenko, and Ye.K. Malinovskiy, Cond. Matter Phys. **9**, 1 (2006).
30. S.D. Kaim, N.P. Kovalenko, and E.V. Vasiliu, J. Phys. Stud. **1**, 589 (1997).

31. В.Т. Швець, Письма в ЖЭТФ **95**, 34 (2012).
32. V.T. Shvets, T.V. Shvets, and Ya.Ye. Rachynskiy, Ukr. J. Phys. **55**, 251 (2010).

Одержано 17.07.12

В.Т. Швець, С.В. Козицький

ТЕРМОДИНАМИКА МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ГЕЛИЯ

Резюме

Рассчитана минимальная плотность, при которой гелий переходит в металлическое состояние. Она составляет 5 г/см^3 . Оценена также температура перехода металл–диэлектрик. Она составляет не менее 9000 К. С этой целью исследовались парное эффективное межюнное взаимодействие в гелии и его электрическое сопротивление в окрестности точки перехода в металлическое состояние. Рассмотрение основывалось на модели почти свободных электронов. В качестве малого параметра использовалось отношение потенциала взаимодействия электронов проводимости с однократно ионизованным атомом гелия к энергии Ферми. Взаимодействие между электронами учитывалось в соответствии с дифракционной моделью металла, т.е. посредством экранировки электрон-ионного взаимодействия. Обменное взаимодействие и корреляции электронов проводимости учитывались в приближении локального поля.

V. T. Shvets, S. V. Kozytzkiy

THERMODYNAMICS OF METALLIC HELIUM

Summary

The internal and free energies of liquid metallic helium were calculated in wide ranges of density and temperature, and the corresponding equation of state was obtained in the framework of the perturbation theory. The potential of electron-ion interaction was selected as a small parameter, and the calculations were carried out to the third order of smallness inclusive. Conduction electrons were considered in the random phase approximation and taking into account exchange interaction and correlations in the local field approximation. The hard-sphere model was used for the nuclear subsystem, with the sphere diameter being the only parameter of the theory. The sphere diameter and the system density at which helium transforms from the single- into the double-ionized state were evaluated by analyzing the effective pair interaction between the helium nuclei, also in the third order of perturbation theory. The case of double-ionized helium atoms was considered. The third-order correction turned out substantial in all examined cases. The values obtained for thermodynamic parameters—density, temperature, and pressure—fall within the ranges typical of the central regions in giant planets, which allows us to suppose the existence of metallic helium in the solar system.