

ЭЛЕКТРОННЫЕ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

PACS numbers: 61.20.Gy, 67.63.Gh, 71.10.Ca, 71.15.Dx, 71.15.Nc, 71.22.+i, 71.30.+h

Багаточастинкова взаємодія протонів у металічному водні

В. Т. Швець

*Одеська національна академія харчових технологій,
вул. Дворянська, 1/3,
65026 Одеса, Україна*

Вперше детально досліджено тричастинкову взаємодію протонів у металічному водні. За неї відповідає член третього порядку теорії збурень за потенціалом електрон-протонної взаємодії для енергії електронів провідності в полі протонів. Показано, що тричастинкова взаємодія протонів для більшості конфігурацій протонів є малою порівняно з ефективною парною взаємодією, але для деяких конфігурацій вона значно перевищує останню. Показано, що тричастинкова взаємодія прагне стиснути водень до більших густин, ніж це спроможна зробити парна ефективна двочастинкова взаємодія. Найбільша глибина потенціальної ями для тричастинкової взаємодії протонів відповідає розташуванню протонів на одній прямій, що можна інтерпретувати як тенденцію до створення кубічної ґратниці для водню в металічному стані. Кристалічний стан металічного водню має бути стійким при температурах, що значно перевищують кімнатну. Тричастинкова взаємодія сприяє переходу водню в атомарний стан як проміжний при переході водню з молекулярної фази в металічну.

Впервые детально исследовано трёхчастичное взаимодействие между протонами в металлическом водороде. За него отвечает член третьего порядка теории возмущений по потенциалу электрон-протонного взаимодействия для энергии электронов проводимости в поле протонов. Показано, что трёхчастичное взаимодействие для большинства конфигураций протонов является малым по сравнению с эффективным парным взаимодействием, но для некоторых конфигураций оно значительно превышает последнее. Показано, что трёхчастичное взаимодействие стремится сжать водород до больших плотностей, чем это в состоянии сделать парное эффективное взаимодействие. Наибольшая глубина потенциальной ямы для трёхчастичного взаимодействия протонов соответствует размещению протонов на одной прямой, что можно интерпретировать как тенденцию к образованию кубической решётки для водорода в металлическом состоянии. Кристаллическое состояние водорода может быть устойчивым при температурах, которые значительно превышают комнатную. Трёхча-

стичное взаимодействие способствует переходу водорода в атомарное состояние как промежуточное при переходе водорода из молекулярной фазы в металлическую.

For the first time, three-particle interaction of protons in metallic hydrogen is studied in detail. This interaction is conditioned by the third-order member of perturbation theory for the potential of the electron-proton interaction for the energy of conduction electrons in the field of protons. As shown, the three-particle interaction of protons for the majority of protons' configurations is small as compared with the effective pair interaction, but, for some configurations, it is much stronger than the last one. As shown, the three-particle interaction tends to compress hydrogen to higher densities than effective two-particle interaction is able to do. The maximal depth of the potential well for the three-particle interactions of protons corresponds to the location of protons in a straight line that can be interpreted as a tendency to form a cubic lattice of hydrogen in the metallic state. The crystalline state of metallic hydrogen should be stable at temperatures much higher than room one. Three-particle interaction promotes the transition of hydrogen in monoatomic state as intermediate state during the transition from molecular phase to metallic one.

Ключові слова: металічний водень, тричастинкова взаємодія.

(Отримано 14 березня 2014 р.)

1. ВСТУП

Дослідження екстремального стану речовини поступово вийшло на передній край природничих наук. При цьому речовина в екстремальному стані зустрічається не тільки в таких об'єктах як зірки або планети. Вражаючі успіхи застосування сучасних систем кумуляції енергії в земних умовах, як то: ядерні вибухи, легкогазові і електродинамічні гармати, установки лазерного випромінювання, прискорювачі елементарних заряджених частинок і йонів дозволяють впевнено відтворювати в земних умовах ті термодинамічні параметри речовини, що раніше були наявні лише в космічних об'єктах. Експерименти з ударного стискання речовини успішно освоюють тиски мегабарно-гігабарного діапазону [1–4]. Частиною проблеми дослідження екстремального стану речовини є спроби металізації всіх тих речовин, що за нормальних умов є газами. У цій царині досліджень за останні десятиліття досягнуто вражаючих успіхів. Так, у 1996–1999 роки одержані в металічному стані водень і дейтерій [5–7], у 2001 році — кисень [8], у 2003 році — азот [9]. Гелій експериментально в земних умовах одержати в металічному стані поки що не вдалось, хоча гелійову плазму вдалось довести до густини $3,6 \text{ г/см}^3$ і ступеня йонізації 90% [10]. Активно виконуються експерименти і з іншими шляхетними газами.

Серед речовин, одержаних у металічному стані за останні роки водень є найбільш вивченим і теоретично і експериментально. Крім робіт, зазначених в ґрунтовних оглядах [1–4], можна було б навести ще роботи [11–16], присвячені теоретичним розрахункам кінетичних і термодинамічних властивостей металічного водню.

Як для теоретичних, так і для експериментальних результатів, що стосуються металічного водню, спостерігається великий різнобій даних. Це і зрозуміло, оскільки для експериментів використовують різні експериментальні методики і установки, різні за принципом дії. Кожна така установка, а їх в світі небагато, є унікальним науковим інструментом. Насправді, повідомлення про відкриття водню в металічному стані почали надходити з різних наукових центрів ще за багато років до виходу в світ роботи [5]. Проте саме зазначена робота справила на наукову громадськість враження своєю ґрунтовністю, комплексністю дослідження, широкими температурним і густинним інтервалами дослідження водню у металічному стані. Тому з виходом у світ саме цієї роботи зникла більшість сумнівів щодо вірогідності самого факту одержання водню в металічному стані. Проте навіть у цій роботі з трьох основних термодинамічних параметрів речовини: тиску, густини і температури безпосередньо вимірювався лише тиск, а густина і температура одержувались внаслідок комп'ютерного моделювання. Така ситуація залишається типовою і досі. Тому теоретичні розрахунки різних властивостей металічного водню залишаються актуальними.

Серед різноманітних характеристик водню в металічному стані особливе місце займають багаточастинкові взаємодії між протонами. Саме вони відповідають за існування конденсованої фази металічного водню і структуру його кристалічної ґратниці. Існування металічного водню в стійкому стані за нормальних умов є принциповим моментом досліджень. Широке практичне використання металічного водню можливе лише в разі можливості його реалізації саме у стійкому стані при досить високих температурах. Перевага міжчастинкових взаємодій перед іншими характеристиками металів полягає в тому, що при обчисленні цих взаємодій потрібно використовувати найменшу кількість різноманітних модельних міркувань, що різко підвищує ступінь вірогідності одержаних результатів. Дослідженню парної ефективної взаємодії йонів у металі, а також їх потрійної взаємодії, присвячено невелику кількість робіт [17–20]. Якщо стосовно парної ефективної взаємодії можна сказати, що ці статті містять вичерпне її дослідження, то стосовно тричастинкової взаємодії в них зроблений лише перший корок такого дослідження, що, не в останню чергу, пов'язане із складністю відповідного числового алгоритму.

Дана робота присвячена дослідженню, в першу чергу, тричастинкової взаємодії протонів у металічному водні та її зіставленню з

парною ефективною взаємодією протонів.

2. БАГАТОЧАСТИНКОВА МІЖЙОННА ВЗАЄМОДІЯ

Оскільки енергія електронної підсистеми в полі йонів залежить від координат йонів, то її можна розглядати як непрямую взаємодію між йонами. Внесок в цю енергію від різних порядків теорії збурень за псевдопотенціалом електрон-йонної взаємодії, як було показано в класичних роботах [21, 22], можна представити у наступному вигляді:

$$E_e = E_0 + E_1 + E_2 + E_3 + \dots \quad (1)$$

Зауважимо, що лише для металічного водню псевдопотенціал електрон-протонної взаємодії збігається з потенціалом цієї взаємодії, а останній є звичайним Кулоновим потенціалом. Тут внесок n -го порядку за псевдопотенціалом електрон-йонної взаємодії має вигляд:

$$E_n = \frac{V}{N^{n-1}} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \Gamma^{(n)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \omega(\mathbf{q}_1) \dots \omega(\mathbf{q}_n) S_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \Delta(\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n); \quad (2)$$

структурна функція —

$$S_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) = N^{-1} \langle \rho(\mathbf{q}_1) \dots \rho(\mathbf{q}_n) \rangle,$$

Фур'є-зображення густини йонної підсистеми —

$$\rho(\mathbf{q}) = \sum_{n=1}^N \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n).$$

Кожний член цього розвинення, починаючи з другого порядку за псевдопотенціалом, описує непрямую взаємодію між йонами через електрони провідності. Мовою потенціалів міжйонної взаємодії це саме розвинення можна представити у вигляді [22]:

$$E_e = E_0 + E_1 + \frac{1}{2!} \sum_{n,m=1}^N \langle \varphi_2(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m) \rangle + \frac{1}{3!} \sum_{n,m,l=1}^N \langle \varphi_3(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m, \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_l) \rangle + \dots \quad (3)$$

де ми представили:

$$E_2 = \frac{1}{2!} \sum_{n,m=1}^N \langle \varphi_2(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m) \rangle, \quad E_3 = \frac{1}{3!} \sum_{n,m,l=1}^N \langle \varphi_3(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m, \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_l) \rangle.$$

Кутові дужки означають усереднення за конфігураціями йонної підсистеми. Член другого порядку за псевдопотенціалом для $n \neq m$ є

сумою непрямих взаємодій всіх пар йонів. Внесок, що відповідає $n = m$, від координат йонів не залежить. Член третього порядку за псевдопотенціалом для $n \neq m \neq l$ відповідає сумі непрямих взаємодій всіх трійок йонів. Доданки з $n = m$ або $n = l$ відповідають знову непрямій парній взаємодії йонів. Але цей внесок у парну взаємодію є третього порядку за псевдопотенціалом. Доданок у члені третього порядку з $n = m = l$ від координат йонів не залежить. Порівнюючи між собою два різні вирази для тої самої електронної енергії, одержуємо наступні вирази для потенціалів непрямой міжйонної взаємодії:

$$V_2^{(2)}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = \frac{2!}{V} \sum_{\mathbf{q}} \Gamma^{(2)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) w^2(q) \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)]$$

для внеску другого порядку в парну непряму взаємодію,

$$V_3^{(2)}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = \frac{3!}{V^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \Gamma^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \times \\ \times w(q_1) w(q_2) w(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \exp[i\mathbf{q}_1 \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)]$$

для внеску третього порядку у парну непряму взаємодію,

$$V_3^{(3)}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j, \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k) = \frac{3!}{V^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \Gamma^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \times \\ \times w(q_1) w(q_2) w(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \exp[i\mathbf{q}_1 \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) + i\mathbf{q}_2 \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k)]$$

для внеску третього порядку в потрійну непряму взаємодію. Інші внески в непряму взаємодію обчислити числом не видається можливим, через відсутність відповідних аналітичних виразів для електронних багатополіусників. Вираз для електронного триполіусника було одержано в роботах [21, 22]. Детальні математичні викладки з цього приводу можна знайти в монографіях [23, 24].

При одержанні вище наведених виразів ми врахували, що

$$S(q) = S_2(q) = \frac{1}{N} \sum_{n,m} \langle \exp[-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)] \rangle,$$

$$S_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) = \frac{1}{N} \sum_{n,m,k} \langle \exp[i\mathbf{q}_1 \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m) + i\mathbf{q}_2 \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_k)] \rangle.$$

Для внеску другого порядку в парну непряму взаємодію маємо:

$$V(\mathbf{R}) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\pi(q)}{\varepsilon(q)} w^2(q) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}),$$

де ми врахували, що [22]

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

У сферичних координатах

$$V_2^2(R) = -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dq q^2 \frac{\pi(q)}{\varepsilon(q)} w^2(q) \int_{-1}^1 \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) d(\cos \theta).$$

Виконавши інтегрування за полярним кутом, одержуємо:

$$V_2^2(R) = -\frac{1}{2\pi^2 R} \int_0^\infty \frac{\pi(q)}{\varepsilon(q)} w^2(q) \sin(qR) q dq.$$

Видно, що непряма парна енергія взаємодії йонів через електронну провідність залежить лише від відстані між йонами. Враховуючи також пряму Кулонову взаємодію між йонами, для ефективної парної взаємодії між йонами матимемо:

$$V_{ef}(R) = \frac{z^2 e^2}{R} - \frac{1}{2\pi^2 R} \int_0^\infty \frac{\pi(q)}{\varepsilon(q)} w^2(q) \sin(qR) q dq. \quad (4)$$

Розглянемо тепер внесок третього порядку в парну непряму взаємодію. У сферичній системі координат:

$$V_3^{(2)}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = \frac{3!}{(2\pi)^6} \int_0^\infty dq_1 q_1^2 \int_0^\infty dq_2 q_2^2 \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \Gamma^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \times \\ \times w(q_1) w(q_2) w(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \exp[i\mathbf{q}_1 \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)].$$

Обравши як полярну вісь вектор \mathbf{q}_1 , можна зінтегрувати за азимутальними кутами φ_1 і φ_2 та полярними кутами θ_1 і θ_2 . Результат інтегрування буде таким:

$$V_3^{(2)}(R) = \frac{3e^2}{4\pi^4 R} \int_0^\infty dq_1 q_1 \sin(q_1 R) \int_0^\infty dq_2 q_2^2 \int_0^\pi d\theta_{12} \sin(\theta_{12}) \times \\ \times \frac{w(q_1) w(q_2) w(|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|)}{\varepsilon(q_1) \varepsilon(q_2) \varepsilon(|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|)} \Lambda_0^{(3)}(q_1, q_2, |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|).$$

Перейшовши до нової змінної інтегрування у внутрішньому інтегралі $q_3^2 = q_1^2 + q_2^2 - 2q_1 q_2 \cos(\theta)$, можна одержати і наступний вираз для внеску третього порядку в парну непряму міжйонну взаємодію:

$$U_3^{(2)}(R) =$$

$$= \frac{3e^2}{4\pi^4 R} \int_0^\infty dq_1 q_1 \sin(q_1 R) \int_0^\infty dq_2 q_2^2 \int_{|q_1 - q_2|}^{q_1 + q_2} dq_3 \frac{w(q_1)w(q_2)w(q_3)}{\varepsilon(q_1)\varepsilon(q_2)\varepsilon(q_3)} \Lambda_0^{(3)}(q_1, q_2, q_3). \quad (5)$$

Розглянемо тепер внесок третього порядку в тричастинкову непряму міжйонну взаємодію. У сферичній системі координат:

$$U_3^{(3)}(\mathbf{R}_{13}, \mathbf{R}_{23}) = \frac{1}{(2\pi)^6} \int d\mathbf{q}_1 \int d\mathbf{q}_2 f[q_1, q_2, \cos(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{q}_2)] \exp(i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{R}_{13} + i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{R}_{23}),$$

де

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{13} &= \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_3, \quad \mathbf{R}_{23} = \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_3, \\ f[q_1, q_2, \cos(\theta)] &= 6 \frac{V^3}{N^3} \Gamma^{(3)}(q_1, q_2, q_3) V(q_1) V(q_2) V(q_3), \\ q_3^2 &= q_1^2 + q_2^2 - 2q_1 q_2 \cos(\theta). \end{aligned}$$

При інтегруванні за вектором \mathbf{q}_2 за напрямком полярної осі зручно прийняти вектор \mathbf{q}_1 і полярний кут відраховувати від нього. Азимутальний кут зручно відраховувати від проекції вектора \mathbf{R}_{23} на площину, перпендикулярну вектору \mathbf{q}_1 . Тоді

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{R}_{23} &= q_1 R_{23} \cos(\mathbf{q}_2 \wedge \mathbf{R}_{23}), \\ \cos(\mathbf{q}_2 \wedge \mathbf{R}_{23}) &= \cos(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{q}_2) \cos(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{23}) + \sin(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{q}_2) \sin(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{23}) \cos(\varphi_{\mathbf{q}_2}). \end{aligned}$$

Надалі скористаємося таким інтегралом:

$$\int_0^{2\pi} \exp[-i\alpha \cos(\varphi)] d\varphi = 2\pi J_0(\alpha).$$

Поклавши

$$\alpha = q_2 R_{23} \sin(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{q}_2) \sin(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{23}),$$

одержуємо:

$$\begin{aligned} &\int_0^{2\pi} \exp[-iq_2 R_{23} \sin(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{q}_2) \sin(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{23}) \cos(\varphi)] d\varphi = \\ &= 2\pi J_0(q_2 R_{23} \sin(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{q}_2) \sin(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{23})). \end{aligned}$$

Тепер потенціал можна представити так:

$$U_3^{(3)}(\mathbf{R}_{13}, \mathbf{R}_{23}) = \frac{1}{(2\pi)^5} \int d\mathbf{q}_1 \exp(i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{R}_{13}) \int_0^\infty dq_2 q_2^2 F[q_1, q_2, \cos(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{23})].$$

Тут

$$F[q_1, q_2, \cos(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{23})] = \int_0^\pi d\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \sin(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) f[q_1, q_2, \cos(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{q}_2)] \times \\ \times J_0[q_2 R_{23} \sin(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{q}_2) \sin(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{23})] \exp[iq_2 R_{23} \cos(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{q}_2) \cos(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{23})].$$

При інтегруванні за вектором \mathbf{q}_1 за напрямком полярної осі зручно прийняти вектор \mathbf{R}_{23} , і полярний кут відрахувати від нього. Азимутальний кут зручно відрахувати від проекції вектора \mathbf{R}_{13} на площину, перпендикулярну вектору \mathbf{R}_{23} . Тоді

$$\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{R}_{13} = q_1 R_{13} \cos(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{13}), \\ \cos(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{13}) = \cos(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{23}) \cos(\mathbf{R}_{13} \wedge \mathbf{R}_{23}) + \sin(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{23}) \sin(\mathbf{R}_{13} \wedge \mathbf{R}_{23}) \cos(\varphi_{\mathbf{q}_1}).$$

Тоді для інтегралу за азимутальним кутом матимемо:

$$\int_0^{2\pi} \exp[-iq_1 R_{13} \sin(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{23}) \sin(\mathbf{R}_{13} \wedge \mathbf{R}_{23}) \cos(\varphi)] d\varphi = \\ = 2\pi J_0(q_1 R_{13} \sin(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{R}_{23}) \sin(\mathbf{R}_{13} \wedge \mathbf{R}_{23})).$$

Остаточний вираз для тричастинкового незвідного потенціалу міжйонної взаємодії має вигляд:

$$U_3^{(3)}(\mathbf{R}_{13}, \mathbf{R}_{23}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_0^\infty dq_1 q_1^2 \int_0^\infty dq_2 q_2^2 \int_0^\pi d\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{R}_{23}} \sin(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{R}_{23}}) \times \\ \times J_0[q_1 R_{13} \sin(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{R}_{23}}) \sin(\theta_{\mathbf{R}_{13}, \mathbf{R}_{23}})] \exp[iq_1 R_{13} \cos(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{R}_{23}}) \cos(\theta_{\mathbf{R}_{13}, \mathbf{R}_{23}})] \times \\ \times \int_0^\pi d\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \sin(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) J_0[q_2 R_{23} \sin(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) \sin(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{R}_{23}})] \times \\ \times \exp[iq_2 R_{23} \cos(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) \cos(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{R}_{23}})] f[q_1, q_2, \cos(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{q}_2)]. \quad (6)$$

Відповідно до наведених вище викладок, потенціал тричастинкової міжйонної взаємодії в металі визначається наступною формулою:

$$U_3^{(3)}(\mathbf{R}_{13}, \mathbf{R}_{23}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_0^\infty dq_1 q_1^2 \int_0^\infty dq_2 q_2^2 \int_0^\pi d\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{R}_{23}} \sin(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{R}_{23}}) \times \\ \times J_0[q_1 R_{13} \sin(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{R}_{23}}) \sin(\theta_{\mathbf{R}_{13}, \mathbf{R}_{23}})] \exp[iq_1 R_{13} \cos(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{R}_{23}}) \cos(\theta_{\mathbf{R}_{13}, \mathbf{R}_{23}})] \times$$

$$\begin{aligned} & \times \int_0^\pi d\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \sin(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) J_0[q_2 R_{23} \sin(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) \sin(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{R}_{23}})] \times \\ & \times \exp[iq_2 R_{23} \cos(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) \cos(\theta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{R}_{23}})] f[q_1, q_2, \cos(\mathbf{q}_1 \wedge \mathbf{q}_2)], \\ & f[q_1, q_2, \cos(\theta)] = 6 \frac{V^3}{N^3} \Gamma^{(3)}(q_1, q_2, q_3) V(q_1) V(q_2) V(q_3). \end{aligned}$$

3. ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Результати числових розрахунків тричастинкової міжпротонної взаємодії наведені на наступних шести рисунках. На рисунку 1 наведено залежність тричастинкової взаємодії протонів від відстані між ними в разі, коли вони розташовані у вершинах правильного трикутника. Саме така конфігурація протонів є типовою при аналізі тричастинкової взаємодії в металах [17, 18]. Графік тричастинкової взаємодії нагадує графік парної ефективною взаємодії між йонами в металах. Проте глибина потенціальної ями в точці переходу досягає лише сотні градусів і далі швидко спадає при зростанні густини металічного водню. При перевищенні густиною водню значень його густини в точці переходу в металічний стан всього на 30% по-

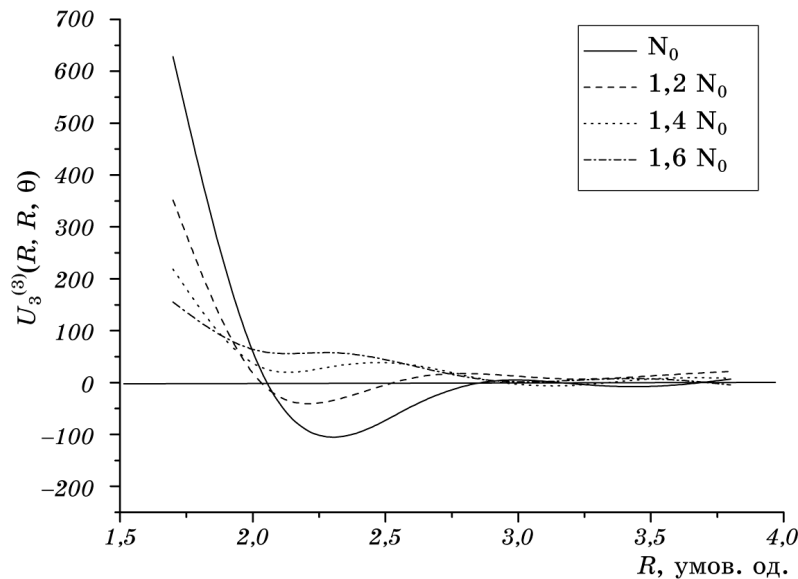


Рис. 1. Тричастинкова взаємодія для протонів з урахуванням члена третього порядку теорії збурень, розташованих у вершинах правильного трикутника, як функція відстані між вершинами для різних значень густини металічного водню.

тенціяльна яма взагалі зникає. Крім того, рівноважна відстань між протонами, що відповідає тричастинковій взаємодії, набагато менша відстані, що відповідає парній взаємодії. Саме парна взаємодія і формує в основному характерні відстані між протонами в металічній фазі водню. Отже, тричастинкова взаємодія прагне додатково стиснути систему.

На рисунку 2 наведено залежність парної ефективної взаємодії між протонами від відстані між ними. Видно, що глибина потенціальної ями в декілька разів перевищує глибину потенціальної ями для тричастинкової взаємодії для розглянутої вище конфігурації протонів. Якщо врахувати, що металічний водень був одержаний при температурі 3000 К, то розглянуту конфігурацію трьох протонів, розташованих у вершинах правильного трикутника, можна не брати до уваги. Цей результат не є універсальним, і для деяких конфігурацій протонів результат щодо глибини потенціальної ями може бути зовсім іншим. Проте закономірності поведінки тричастинкової і двочастинкової взаємодій залежно від густини залишаться тими самими.

Порівнюючи рисунки 1 і 2, можна помітити, що глибина потенціальної ями для тричастинкової взаємодії значно швидше спадає із збільшенням густини для тричастинкової взаємодії, ніж для двочастинкової.

Зазначимо, що на одній з кривих на рис. 2 при малих відстанях

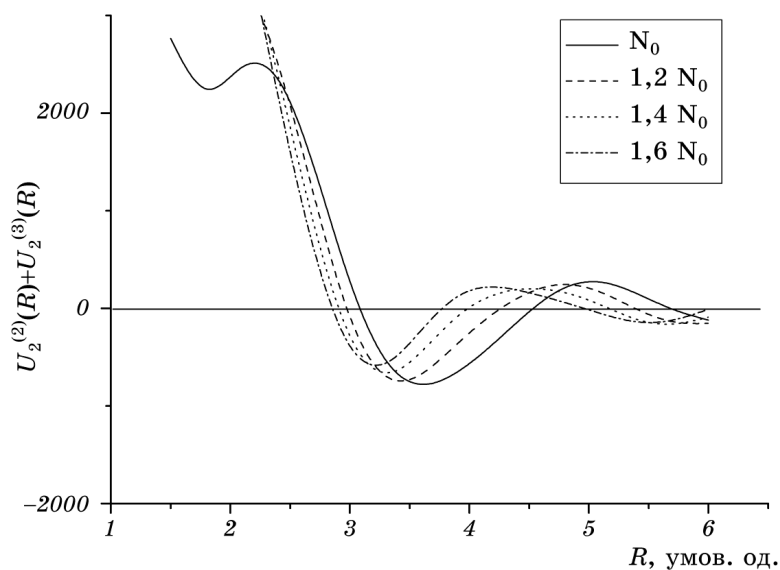


Рис. 2. Парна ефективна взаємодія для протонів з урахуванням членів другого і третього порядків теорії збурень як функція відстані між ними для різних значень густини металічного водню.

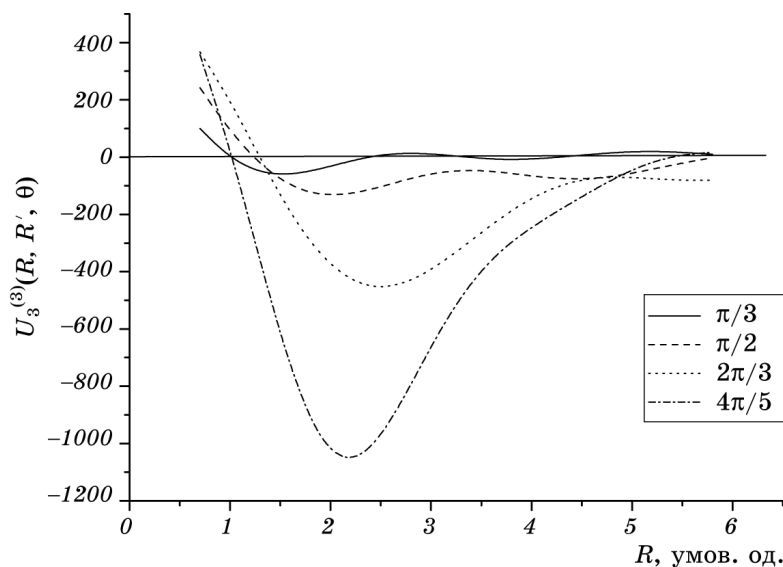


Рис. 3. Тричастинкова взаємодія для протонів як функція довжини бічної сторони рівнобедреного трикутника за різних значень кута при вершині.

між протонами видно початкову фазу формування мінімуму потенціальної енергії взаємодії, що відповідає утворенню молекулярної фази водню [18].

На рисунку 3 наведено залежність тричастинкової взаємодії від відстані між протонами в разі, коли протони розташовані у вершинах рівнобедреного трикутника. Видно, що глибина потенціальної ями суттєво збільшується при збільшенні кута при вершині. У разі наближення цього кута до розгорнутого, глибина потенціальної ями значно перевищує тисячу градусів і, відповідно, значно перевищує глибину потенціальної ями для ефективної парної взаємодії.

Ефективна парна взаємодія між протонами є сферично симетричною, а отже нечутливою до конкретної конфігурації протонів. При певних умовах вона здатна сформувати лише конденсовану неупорядковану фазу водню. Натомість тричастинкова взаємодія між протонами є суттєво не сферично симетричною. Саме вона відповідає за формування конкретних конфігурацій розташування протонів, зокрема, кристалічного стану металічного водню.

З рисунка 3 видно, що потенціальна яма є найглибшою, коли протони розташовані на одній прямій. При цьому потенціальна яма настільки глибока, що уможливорює не лише існування водню в стабільному металічному стані, але і його кристалічний стан при температурах, що істотно перевищують кімнатну. З цього випливає ще один висновок, а саме, що металічний водень при помірно високих температурах прагне сформувати кубічну кристалічну ґрат-

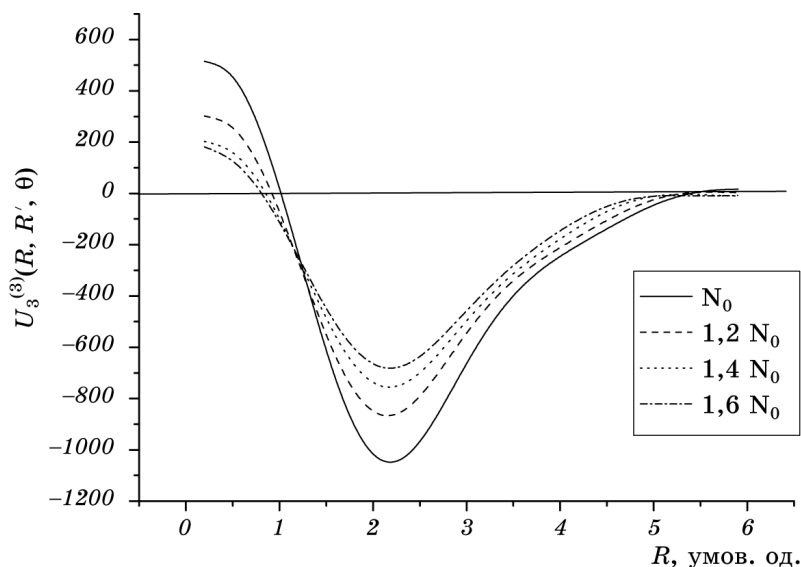


Рис. 4. Тричастинкова взаємодія протонів у третьому порядку теорії збурень при їх розташуванні вздовж прямої лінії залежно від відстані між ними для різних густин металічного водню.

ницю. Цей результат цілком узгоджується з універсалізацією поведінки речовини в екстремальних умовах [1]. Проте є вагомі застереження щодо можливості існування у водню кристалічної ґратниці в металічному стані [25]; причина застережень — надзвичайно висока амплітуда нульових коливань протонів через їх малу масу.

На рисунку 4 для аналізу обрано розташування трьох протонів на одній прямій. Видно, що, на відміну від ефективної парної взаємодії протонів, тричастинкова взаємодія надзвичайно сильно залежить від густини, і вже при не дуже великих густинах глибини потенціальних ям для обох взаємодій зрівнюються.

Якщо три протони розташувати на одній прямій, то тричастинкову взаємодію можна розглядати як внесок третього порядку за електрон-протонною взаємодією в ефективну двочастинкову взаємодію двох протонів у разі взаємодії двох крайніх протонів, коли третій протон розташований посередині між ними.

Така комбінована ефективна двочастинкова взаємодія наведена на рис. 5 при густині, заявленій як густина переходу водню в металічний стан. Видно, що на відстанях між крайніми протонами, характерних для металічної фази водню (мінімум потенціальної ями на відстані приблизно 3,5 умов. од.) внесок тричастинкової взаємодії лише дещо модифікує парну ефективну взаємодію між протонами, роблячи відповідну потенціальну яму не такою глибокою. Проте привертає увагу глибока потенціальна яма, цілком зумовлена

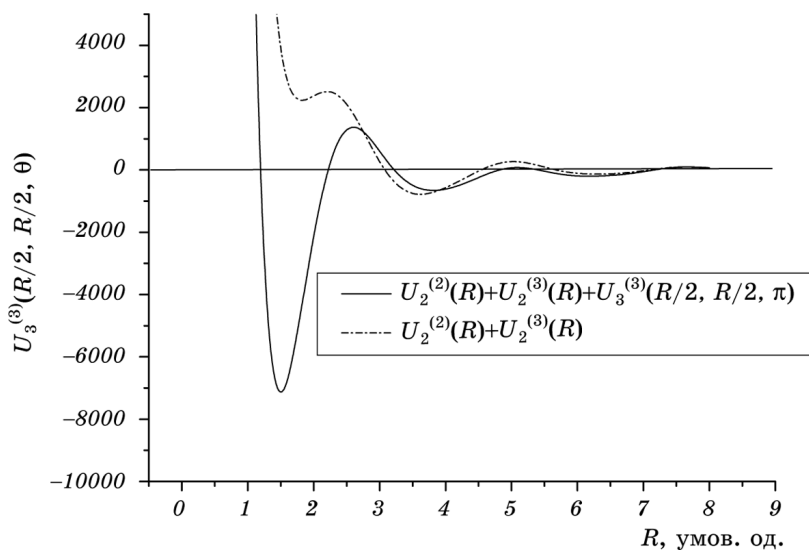


Рис. 5. Внесок тричастинкової взаємодії протонів у двочастинкову. Густина металічного водню $0,64 \text{ г/см}^3$.

внеском тричастинкової взаємодії в двочастинкову, на відстані $1,5$ умов. од. між протонами. Такого типу мінімуми на кривих парної ефективної взаємодії між протонами звичайно інтерпретують як потенціальну яму, що відповідає утворенню молекулярної фази водню. Оскільки відстань в $1,5$ умов. од. між крайніми протонами для трійки протонів, розташованих на одній прямій, відповідає відстані в $0,75$ умов. од. для сусідніх протонів трійки, то таку потенціальну яму, зумовлену потрійною взаємодією, логічно інтерпретувати як потенціальну яму, що відповідає утворенню атомарної фази водню. В той час як потенціальна яма, що відповідає формуванню молекулярної фази водню, лише починає формуватись (пунктирна крива), яма, що відповідає формуванню атомарної фази водню, вже цілком сформована і досить глибока.

Отже, наявність двох зазначених потенціальних ям закриває дискусію про варіанти переходу водню в металічний стан: через проміжну атомарну фазу, чи безпосередньо в металічну фазу з молекулярної. Наші результати свідчать на користь варіанту з існуванням саме атомарної фази як проміжної при переході водню з молекулярного стану в металічний.

Як видно з рис. 6, при збільшенні густини металічного водню в півтора рази проти його густини в точці переходу в металічний стан, потенціальна яма, що відповідає переходу водню в атомарний стан, стає швидше віртуальною, оскільки її мінімуму відповідають вже додатні енергії.

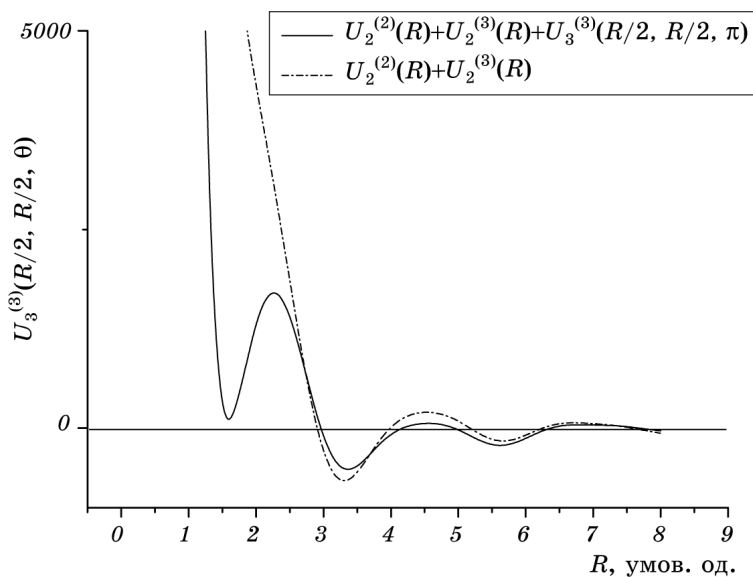


Рис. 6. Внесок тричастинкової взаємодії протонів у двочастинкову. Густина металічного водню $0,9 \text{ г/см}^3$.

4. ВИСНОВКИ

1. Тричастинкова взаємодія протонів є істотно не сферично симетричною. Для більшості конфігурацій протонів вона мала порівняно з ефективною парною взаємодією, але для деяких конфігурацій вона значно перевищує останню.
2. Тричастинкова взаємодія намагається стиснути водень до більших густин, ніж це спроможна зробити парна ефективна двочастинкова взаємодія.
3. Найбільша глибина потенціальної ями для тричастинкової взаємодії протонів відповідає розташуванню протонів на одній прямій, що можна інтерпретувати як тенденцію до створення кубічної ґратниці для водню в металічному стані.
4. Кристалічний стан металічного водню має бути стійким при температурах, що значно перевищують кімнатні.
5. Тричастинкова взаємодія формує можливість переходу водню в атомарний стан як проміжний при переході водню з молекулярної фази в металічну.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. В. Е. Фортов, *УФН*, **179**, № 6: 653 (2009).
2. В. Е. Фортов, *УФН*, **177**, № 4: 347 (2007).

3. Е. Г. Максимов, Ю. Т. Шилов, *УФН*, **169**, № 11: 1223 (1999).
4. W. J. Nellis, *Rep. Prog. Phys.*, **69**: 479 (2006).
5. S. T. Weir, A. C. Mitchell, and W. J. Nellis, *Phys. Rev. Lett.*, **76**, Iss. 11: 1860 (1996).
6. 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**, № 12: 874 (1999).
7. V. Ya. Ternovoi, A. S. Filimonov, V. E. Fortov, S. V. Kvitov, D. N. Nikolaev, A. A. Pyalling, *Physica B*, **265**, Issues 1–4: 6 (1999).
8. M. Bastea, A. C. Mitchell, and W. J. Nellis, *Phys. Rev. Lett.*, **86**: 3108 (2001).
9. R. Chau, A. C. Mitchell, R. W. Minich, and W. J. Nellis, *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 245501 (2003).
10. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, Ю. М. Макаров, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. Ю. Баурин, В. А. Комраков, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, Е. А. Пронин, А. А. Юхимчук, *ЖЭТФ*, **142**, № 4 (10): 696 (2012).
11. В. Т. Швець, С. В. Дацько, Є. К. Малиновський, *Український фізичний журнал*, **58**, № 1: 72 (2007).
12. В. Т. Швець, *Физ. мет. металловед.*, **103**, № 4: 346 (2007).
13. В. Т. Швець, *ЖЭТФ*, **131**, № 4: 743 (2007).
14. В. Т. Швець, А. С. Власенко, А. Д. Буханенко, *Письма в ЖЭТФ*, **86**, № 8: 625 (2007).
15. В. Т. Швець, *Теплофизика высоких температур*, **46**, вып. 2: 219 (2008).
16. V. T. Shvets, *Acta Phys. Pol. A*, **114**, No. 4: 851 (2008).
17. M. Hasegawa, *J. Phys. F: Metal Physics*, **6**, No. 5: 649 (1976).
18. S. D. Kaim, N. P. Kovalenko, and E. V. Vasiliu, *J. Phys. Studies*, **1**, No. 4: 589 (1997).
19. В. Т. Швець, С. В. Козицький, *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, № 9: 1199 (2011).
20. В. Т. Швець, *Письма в ЖЭТФ*, **95**, № 1: 33 (2012).
21. Е. Г. Бровман, Ю. М. Каган, А. Холас, *ЖЭТФ*, **61**, № 6 (12): 2429 (1971).
22. Е. Г. Бровман, Ю. М. Каган, *УФН*, **112**, № 3: 369 (1974).
23. В. Т. Швець, *Фізика неупорядкованих металів* (Одеса: Маяк: 2007).
24. В. Т. Швець, С. В. Козицький, *Металізація водню і гелію* (Одеса: ОНМА: 2013).
25. В. В. Кечин, *Письма в ЖЭТФ*, **79**, № 1: 46 (2004).

REFERENCES

1. V. E. Fortov, *Physics-Uspekhi*, **52**: 615 (2009).
2. V. E. Fortov, *Physics-Uspekhi*, **50**: 333 (2007).
3. E. G. Maksimov and Yu. I. Shilov, *Physics-Uspekhi*, **42**: 1121 (1999).
4. W. J. Nellis, *Rep. Prog. Phys.*, **69**: 479 (2006).
5. S. T. Weir, A. C. Mitchell, and W. J. Nellis, *Phys. Rev. Lett.*, **76**, Iss. 11: 1860 (1996).
6. V. E. Fortov, V. Ya. Ternovoi, S. V. Kvitov, V. B. Mintsev, D. N. Nikolaev, A. A. Pyalling, A. S. Filimonov, *JETP Letters*, **69**, Iss. 12: 926 (1999).
7. V. Ya. Ternovoi, A. S. Filimonov, V. E. Fortov, S. V. Kvitov, D. N. Nikolaev, A. A. Pyalling, *Physica B*, **265**, Issues 1–4: 6 (1999).

8. M. Bastea, A. C. Mitchell, and W. J. Nellis, *Phys. Rev. Lett.*, **86**: 3108 (2001).
9. R. Chau, A. C. Mitchell, R. W. Minich, and W. J. Nellis, *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 245501 (2003).
10. M. A. Mochalov, R. I. Il'kaev, V. E. Fortov, A. L. Mikhailov, Yu. M. Makarov, V. A. Arinin, A. O. Blikov, A. Yu. Baurin, V. A. Komrakov, V. A. Ogorodnikov, A. V. Ryzhkov, E. A. Pronin, A. A. Yukhimchuk, *JETP*, **115**, Iss. 4: 614 (2012).
11. V. T. Shvets, S. V. Datsko, Ye. K. Malynovskij, *Ukr. J. Phys.*, **52**, No. 1: 70 (2007).
12. V. T. Shvets, *The Phys. Met. Metallogr.*, **103**, Iss. 4: 330 (2007).
13. V. T. Shvets, *JETP*, **104**, Iss. 4: 655 (2007).
14. V. T. Shvets, A. S. Vlasenko, A. D. Bukhanenko, *JETP Letters*, **86**, Iss. 8: 552 (2007).
15. V. T. Shvets, *High Temperature*, **46**, Iss. 2: 194 (2008).
16. V. T. Shvets, *Acta Phys. Pol. A*, **114**, No. 4: 851 (2008).
17. M. Hasegawa, *J. Phys. F: Metal Physics*, **6**, No. 5: 649 (1976).
18. S. D. Kaim, N. P. Kovalenko, and E. V. Vasiliu, *J. Phys. Studies*, **1**, No. 4: 589 (1997).
19. V. T. Shvets and S. V. Kozytskyy, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **33**, No. 9: 1199 (2011) (in Ukrainian).
20. V. T. Shvets, *JETP Letters*, **95**, Iss. 1: 29 (2012).
21. E. G. Brovman, Yu. Kagan, and A. Kholas, *Soviet Physics JETP*, **34**, No. 6: 1300 (1972).
22. Ye. G. Brovman and Yu. M. Kagan, *Physics-Uspeski*, **17**: 125 (1974).
23. V. T. Shvets, *Fizyka Nevporjadkovanykh Metaliv (Physics of Disordered Metals)* (Odesa: Mayak: 2007) (in Ukrainian).
24. V. T. Shvets and S. V. Kozytskyy, *Metalizatsiya Vodnyu i Geliyu (Hydrogen and Helium Metallization)* (Odesa: ONMA: 2013) (in Ukrainian).
25. V. V. Kechin, *JETP Letters*, **79**, Iss. 1: 40 (2004).