

PACS: 72.10.-d, 72.15.-v, 72.15.Cz, 72.15.Lh

В.Т. Швец, А.Д. Буханенко, Т.В. Швец

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ВОДОРОДА

Одесская государственная академия холода
ул. Дворянская 1/3, г. Одесса, 65082, Украина
E-mail: valtar@paco.net

Статья поступила в редакцию 26 марта 2007 года

Рассчитана электрическая проводимость жидкого металлического водорода при температуре 3000–27000 К и плотности 0.35 mol/cm^3 , при которых он был получен в земных условиях. Водород рассматривается как трехкомпонентная система, состоящая из электронов, протонов и нейтральных атомов водорода. В случае обратного времени релаксации для электропроводности использован второй порядок теории возмущений по электрон-протонному и электрон-атомному взаимодействиям. Кулоновское электрон-электронное взаимодействие учтено в приближении случайных фаз, а обменное взаимодействие и корреляции электронов проводимости – в приближении локального поля. Для протонной и атомной подсистем использована модель твердых сфер. Концентрация электрически нейтральной атомной компоненты оказалась значительно выше, чем предполагалось авторами открытия металлического водорода, а ее роль в формировании электрического сопротивления с ростом температуры уменьшалась.

1. Введение

Считается общепринятым связывать открытие металлического водорода и детальное исследование зависимости электрического сопротивления от давления и температуры с работой [1], опубликованной в 1996 г. Согласно этой работе молекулярный водород в жидком состоянии подвергался ударному сжатию до давлений в диапазоне 0.93–1.80 Мбар при температурах 2200–4400 К. При давлении 1.4 Мбар и температуре 3000 К наблюдался переход металл–диэлектрик с коэффициентом электрического сопротивления металлической фазы $500 \mu\Omega\cdot\text{cm}$.

В настоящее время все более актуальным является теоретическое исследование различных свойств металлического водорода. В особенности это касается условий, характерных для ядер планет-гигантов Солнечной системы: Юпитера, Сатурна, Урана и Нептуна, которые едва ли когда-либо будут смоделированы на Земле. Кроме того, именно теоретическое исследование,

например, электрической проводимости может дать ответ на практически важный вопрос о доле нейтральных атомов или молекул при образовании металлического водорода и ее зависимости от температуры и плотности.

Существующие в настоящее время расчеты различных свойств, в том числе электрического сопротивления, основаны на представлении о металлическом водороде как о двухкомпонентной системе, состоящей только из протонов и электронов. Это относится как к равновесным [2,3], так и неравновесным его свойствам. В последнем случае в работе [4] сопротивление металлического водорода вычислено в широком диапазоне температур и плотностей, но при фиксированном значении параметра плотности упаковки, характерном для жидких металлов вблизи температуры плавления, и при учете лишь первого члена разложения электрического сопротивления в ряд по электрон-протонному взаимодействию (формула Займана [5]). Величина сопротивления оказалась равной примерно $20 \mu\Omega\cdot\text{см}$. Большой интерес представляет компьютерное моделирование различных свойств металлического водорода, включая и сопротивление [6]. К сожалению, и при компьютерном моделировании исходные посылки и конечный результат практически совпадают с результатами работы.

К эффектам, существенным при рассмотрении электронных явлений переноса в неупорядоченных металлах, относится учет членов старшего порядка теории возмущений по электрон-ионному взаимодействию. Последний эффект является весьма значительным во всем диапазоне существования металлической фазы и достаточно хорошо изучен для простых жидких металлов [7–16]. Начато его изучение и для металлического водорода в широком диапазоне температур и плотностей [17]. С учетом членов старших порядков теории возмущений сопротивление металлического водорода при плотности 0.35 mol/cm^3 и температуре 3000 К, отвечающим условиям эксперимента по получению металлического водорода, сопротивление уже оказывается равным примерно $50 \mu\Omega\cdot\text{см}$. Однако такое значение сопротивления все еще на порядок меньше экспериментального его значения. На такое несоответствие экспериментального и теоретического значений электрического сопротивления обратили внимание еще авторы открытия металлического водорода [1]. Согласно их предположению основным фактором, объясняющим такое несоответствие, является наличие в металлической фазе нейтральных атомов или молекул водорода. Доля же протонов, т.е. ионизированных атомов водорода, должна составлять около 5 mass% системы. Однако до настоящего времени теоретического расчета электрического сопротивления металлического водорода как сложной многокомпонентной системы проведено не было. Цель данной работы – восполнить указанный пробел в широком диапазоне температур.

2. Электрическое сопротивление

Для простых неупорядоченных металлов с относительно высокой проводимостью коэффициент электрического сопротивления R в приближении времени релаксации определяется следующим образом:

$$R = \frac{m}{e^2 n \tau}, \quad (1)$$

где n – плотность электронного газа, τ – время релаксации для процесса электропроводности, e – заряд электрона, m – его масса.

Во втором порядке теории возмущений по электрон-ионному взаимодействию для обратного времени релаксации для электропроводности жидких металлов в высокотемпературном пределе можно получить следующее выражение [5,7–17]:

$$\tau^{-1} = \frac{m}{12\pi^3 \hbar^3} \int_0^{2k_F} W^2(q) S(q) q^3 dq. \quad (2)$$

Здесь $S^i(q)$ – парный статичный структурный фактор ионной подсистемы, $W(q)$ – экранированный потенциал электрон-ионного взаимодействия. Для металлического водорода потенциал электрон-протонного взаимодействия $W_p(q) = -V(q)/\epsilon(q)$, где $V(q) = 4\pi e^2/q^2$ – фурье-образ потенциала кулоновского протон-протонного или электрон-протонного взаимодействий, $\epsilon(q) = 1 + [V(q) + \tilde{V}(q)]\pi_0(q)$ – эффективная диэлектрическая проницаемость электронного газа в приближении случайных фаз, $\tilde{V}(q) = -2\pi e^2/(q^2 + \lambda k_F^2)$ – потенциал обменного взаимодействия и корреляций электронного газа, $\lambda \approx 2$ [18], k_F – волновой вектор Ферми, $\pi_0(q)$ – поляризационная функция свободного электронного газа.

Приведенная формула для обратного времени релаксации соответствует дифракционной модели металла, в которой электрон-электронное взаимодействие учитывается через экранировку электрон-протонного и электрон-атомного взаимодействий.

Металлический водород является единственной системой, для которой неэкранированный потенциал электрон-протонного взаимодействия известен точно. Это обстоятельство принципиально упрощает расчеты различных свойств металлического водорода, поскольку отпадает проблема моделирования электрон-протонного взаимодействия, приводящая к появлению в теории дополнительных подгоночных параметров и влияющая на достоверность полученных результатов. Вместе с тем электрон-атомное взаимодействие носит чрезвычайно сложный характер и имеет три составляющие [19]: поляризационную, электростатическую и обменную. Они по-разному зависят от расстояния до атома. С увеличением расстояния наблюдается наиболее медленный спад поляризационной составляющей. На расстояниях, характерных для плазмы, она оказывается единственно существенной, несмотря на малую константу взаимодействия. Наиболее быстро уменьшается с увеличением расстояния обменная составляющая, которая становится основной на очень малых расстояниях, характерных для атомарных электронов. Вопрос о том, может ли металлический водород при сжатии до таких

экстремальных даже для него давлений содержать нейтральные атомы водорода, требует отдельного рассмотрения. С полной уверенностью можно сказать, что в пределах применимости модели твердых сфер для протонной подсистемы (а все наше рассмотрение проводится в рамках именно этой модели) обменное взаимодействие не играет существенной роли. Для расстояний, характерных для металлов, единственно важным является электростатическое взаимодействие.

Будем считать, что при образовании металлического водорода молекулярная фаза жидкого водорода переходит в атомарную с последующей ионизацией только части атомов.

Переход к электрическому сопротивлению бинарного сплава или раствора металла в непроводящей жидкости можно формально осуществить с помощью следующей замены [20]:

$$W^2(q)S(q) \rightarrow c_1c_2[W_1(q) - W_2(q)]^2 + \sum_{i,j=1}^2 c_i c_j W_i(q)W_j(q)S_{ij}(q), \quad (3)$$

где $c_1 = c_a$, $c_2 = c_p$ – концентрации атомов водорода и протонов соответственно, $S_{11}(q) = S_a(q)$ – структурный фактор атомной подсистемы, $S_{22}(q) = S_p(q)$ – структурный фактор протонной подсистемы, $S_{12}(q) = S_{21}(q) = S_{ap}(q)$ – смешанные структурные факторы атомов и протонов, $W_1(q) = W_a(q)$, $W_2(q) = W_p(q)$, $W_a(q) = -U(q)/\epsilon(q)$ – экранированный потенциал электрон-атомного взаимодействия, $U(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \left(1 - \frac{16}{(4+q^2)^2} \right)$ – фурье-образ электростатического взаимодействия электрона с атомом водорода [21].

Принципиально важной характеристикой для модельных численных расчетов электрического сопротивления металлического водорода является эффективное парное протон-протонное взаимодействие. Выражение для эффективного парного потенциала во втором порядке теории возмущений по электрон-ионному взаимодействию хорошо известно. Это выражение не содержит каких-либо подгоночных параметров, характеризующих ионную подсистему, и зависит только от волнового вектора Ферми, т.е. плотности системы. Единственным универсальным приближением, сделанным при его получении, является приближение случайных фаз для электронной подсистемы с учетом обменного взаимодействия и корреляций электронов в приближении локального поля.

Диаметр твердых сфер, или минимальное расстояние, на которое при данной температуре могут сближаться протоны, будем находить из условия равенства кинетической и потенциальной энергий протонов при их максимальном сближении [17,22]. Найденный таким образом диаметр твердых сфер является функцией плотности и температуры. Благодаря этому все величины, зависящие от диаметра твердых сфер, также будут функциями плотности и температуры.

Без заметной потери точности последующих вычислений задача существенно упрощается, если в качестве радиуса твердой сферы соответствующей атому водорода, взять радиус Бора. Действительно, плотностная и температурная зависимости диаметра твердых сфер, соответствующего атомам, обусловлены исключительно экранирующим действием электронной подсистемы. Для короткодействующего атомного потенциала оно достаточно мало.

4. Численные расчеты и обсуждение результатов

Естественными внешними параметрами являются плотность и температура системы. Наличие ее внутренних параметров связано с модельным характером расчетов. Поскольку форм-фактор электрон-протонного взаимодействия известен точно, принятое приближение для форм-фактора электрон-атомного взаимодействия не содержит подгоночных параметров, а для электронной подсистемы использовано приближение случайных фаз, источником внутренних параметров системы могут служить только протонная и атомная подсистемы. Если для парциальных парных структурных факторов протон-атомной подсистемы использовать точное решение уравнения Перкуса–Йевики для модели твердых сфер, то в теории действительно появляются параметры, связанные с данной подсистемой, – это диаметры твердых сфер σ_a , σ_p и параметры плотности упаковки η_a , η_p , связанные между собой простыми соотношениями. Легко видеть, что фактически независимым является лишь один из них. В качестве такого параметра удобно взять диаметр твердых сфер, соответствующий протонам. Если температура системы также известна, то и оставшийся параметр системы может быть определен, как это показано в предыдущем разделе.

На рис. 1,а приведена зависимость электрического сопротивления металлического водорода во втором порядке теории возмущений по потенциалам электрон-протонного и электрон-атомного взаимодействий как функция концентрации протонов (электронов) или атомов водорода. Плотность и

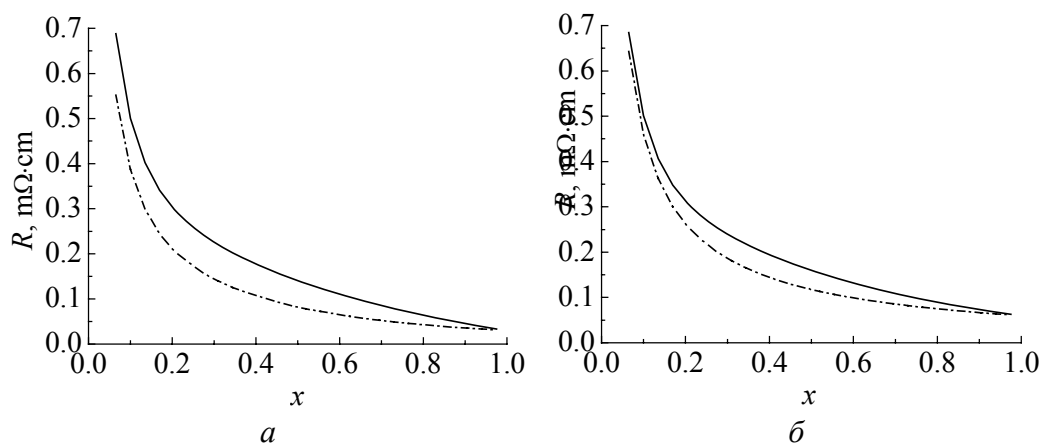


Рис. 1. Зависимость электрического сопротивления от плотности протонной подсистемы при различных температурах, K : a – 3000, b – 18000; — – mixture, ---- – чистый металл

температура такой трехкомпонентной системы соответствуют условиям эксперимента по получению металлического водорода [1]. Концентрация протонов изменяется от близкой к максимально возможной, когда электрическое сопротивление составляет примерно $20 \mu\Omega\cdot\text{cm}$, до минимального значения, когда электрическое сопротивление достигает экспериментально измеренной величины $500 \mu\Omega\cdot\text{cm}$. Для нас представляет интерес именно это минимальное значение концентрации протонов. Согласно нашим расчетам оно составляет 10%. Для сравнения на графике приведена также зависимость электрического сопротивления металлического водорода от плотности в предположении, что все его электроны коллективизированы. Естественным является использование формулы Займана для сопротивления чистых металлов, игнорирующей наличие нейтральных атомов водорода. В этом случае экспериментальное значение сопротивления достигается при плотности протонов, составляющей 7% от экспериментального значения плотности в лабораторных условиях. Последний результат практически совпадает с оценкой, приведенной в работе [1], относительно доли ионизованных атомов водорода при значениях давления и температуры, соответствующих условиям эксперимента. Видимо, эта оценка также основывалась на анализе формулы Займана. Еще один вывод заключается в том, что роль рассеяния электронов на нейтральных атомах весьма значительна по сравнению с их рассеянием на протонах.

На рис 1,б приведена зависимость электрического сопротивления как функция плотности атомной подсистемы при гораздо более высокой температуре, а именно 18000 К. Видно, что обе кривые, соответствующие зависимости электрического сопротивления металлического водорода от плотности, расположены заметно выше, чем в случае более низких температур, как и должно быть для металлов. Вместе с тем относительная роль рассеяния электронов проводимости на атомах водорода значительно меньше. Особенно хорошо это видно на рис. 2, где

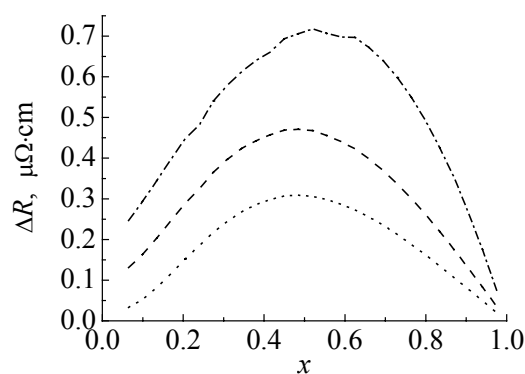


Рис. 2. Зависимость относительной величины вклада атомной подсистемы в электрическое сопротивление металлического водорода от плотности температуры, K: -·-·-· - 3000, ---- - 9000, ···· - 27000

представлена относительная величина вклада в электрическое сопротивление, обусловленного рассеянием электронов на атомах водорода при различных температурах. Такое поведение вклада рассеяния электронов на атомах водорода в общее сопротивление металлического водорода связано с тем, что эффективный диаметр атома водорода гораздо меньше зависит от температуры (в использованном нами приближении такая зависимость вообще отсутствует), чем эффективный диаметр протона.

Еще одной особенностью вклада рассеяния на атомах водорода является то, что он стремится к нулю не только при стремлении к нулю концентрации атомов водорода, но и тогда, когда эта концентрация становится максимально большой. Последнее обстоятельство связано с одновременным уменьшением плотности электронов проводимости, и при вычислении интеграла в выражении (2) становится существенным поведение электрон-атомного и электрон-протонного форм-факторов только при малых значениях волнового вектора. При этом экранированный форм-фактор электрон-протонного взаимодействия стремится к своему максимально возможному значению, а форм-фактор электрон-атомного взаимодействия – к нулю.

С нашей точки зрения, обе оценки доли атомов водорода нуждаются в уточнении, поскольку согласно критерию Иоффе–Регеля [23] модель почти свободных электронов перестает работать, если длина свободного пробега электронов проводимости приближается к межпротонному расстоянию, а сопротивление системы – к $200 \mu\Omega\cdot\text{cm}$. Что именно происходит в каждой конкретной металлической системе при выполнении критерия Иоффе–Регеля, можно выяснить только при учете членов старших порядков теории возмущений по электрон-протонному взаимодействию [7–17]. При этом, поскольку речь идет только об оценке порядка величины эффекта, пренебрегаем рассеянием электронов на нейтральных атомах водорода. На рис. 3 представлена зависимость вкладов второго R_2 и третьего R_3 порядков по электрон-протонному взаимодействию в сопротивление металлического водорода в зависимости от плотности протонной подсистемы, вычисленная согласно работе [17]. Видно, что вклад третьего порядка сопоставим по величине с вкладом второго порядка при всех исследованных плотностях. Особенно большим он является при относительно низких плотностях. На рис. 3 приведен также результат приближенного суммирования ряда теории возмущений $R = R_2/(1 - R_3/R_2)$. Видно, что ряд сходится даже при достижении сопротивления $500 \mu\Omega\cdot\text{cm}$. При дальнейшем понижении плотности системы теоретическое значение сопротивления стремится к бесконечности.

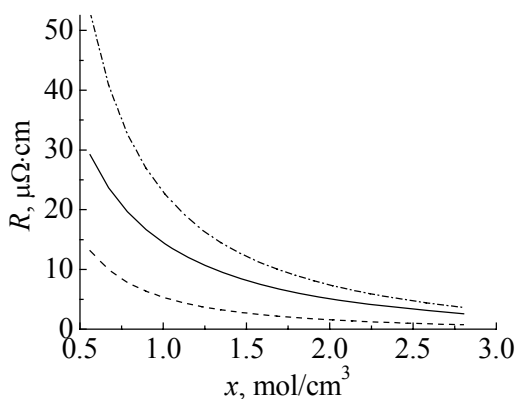


Рис. 3. Зависимость сопротивления от плотности протонной подсистемы при $T = 3000 \text{ K}$: — — R_2 , --- — R_3 , -·-·- — $R = R_2/(1 - R_3/R_2)$

ское значение сопротивления стремится к бесконечности.

По графику рис. 3 можно определить доли протонов и нейтральных атомов в условиях эксперимента по получению водорода в металлическом состоянии. Видно, что учет членов старших порядков теории возмущений сдвигает нижнюю оценку для плотности протонов с 5–10% до 30–35%. При учете же дополнительного рассеяния электронов проводимости на атомах водорода в старших порядках теории возмущений электрическое сопротивление достигнет экс-

периментального значения при еще гораздо больших плотностях протонной подсистемы.

Таким образом, можно сделать следующие выводы: 1) модель почти свободных электронов позволяет не только качественно, но и количественно описать сопротивление металлического водорода; 2) металлический водород при температуре 3000 К и плотности 0.35 mol/cm^3 скорее всего представляет, как минимум, трехкомпонентную систему. Доля протонной подсистемы в общей плотности металла составляет не менее 30–35%, а не 5%, как считалось ранее. Более точная оценка возможна только при использовании теории возмущений для сплавов неупорядоченных металлов, которую еще предстоит построить.

1. *S.T. Weir, A.C. Mitchell, W.J. Nellis*, Phys. Rev. Lett. **76**, 1860 (1996).
2. *Е.Г. Бровман, Ю. Каган, А. Холас*, ЖЭТФ **61**, 2429 (1971).
3. *Е.Г. Бровман, Ю. Каган*, ЖЭТФ **63**, 1937 (1972).
4. *D.J. Stevenson, N.W. Ashcroft*, Phys. Rev. **A9**, 782 (1974).
5. *J.M. Ziman*, Phil. Mag. **6**, 1013 (1961).
6. *I. Kwon, L. Collins, J. Kress, N. Troullier*, Phys. Rev. **E54**, 2844 (1996).
7. *B. Springer*, Phys. Rev. **136**, 115 (1964).
8. *J. Rubio*, J. Phys. **C2**, 288 (1969).
9. *T. Neal*, Phys. Fluid. **13**, 249 (1970).
10. *N.W. Ashcroft, W. Schaich*, Phys. Rev. **B1**, 1370 (1970).
11. *A. Bringer, D. Wagner*, Z. Phys. **241**, 295 (1971).
12. *J. Popielawski*, Physica **78**, 97 (1974).
13. *J. Gorecki, J. Popielawski*, J. Phys. **F13**, 2107 (1983).
14. *V.T. Shvets, E.V. Belov*, Acta Physica Polonica **A96**, 741 (1999).
15. *В.Т. Швець*, Метод функцій Гріна в теорії металів, Латстар, Одеса (2002).
16. *В.Т. Швець*, Фізика неупорядкованих металів, Маяк, Одеса (2007).
17. *V.T. Shvets, S.V. Savenko, Ye.K. Malynovski*, Condensed Matter Physics **9**, 127 (2006).
18. *D.J.M. Geldart, S.H. Vosko*, Can. J. Phys. **44**, 2137 (1966).
19. *Л.М. Биберман, В.С. Воробьев, И.Т. Якубов*, Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы, Наука, Москва (1982).
20. *T.E. Faber, J.M. Ziman*, Phil. Mag. **11**, 153 (1965).
21. *В.Г. Левич, Ю.А. Вдовин, В.А. Мямлин*, Курс теоретической физики, Т. 2, Наука, Москва (1971).
22. *В.Т. Швець, С.В. Дацько, Є.Л. Малиновський*, УФЖ **52**, 72 (2007).
23. *A.F. Ioffe, A.R. Regel*, Prog. Semicond. **4**, 237 (1960).

V.T. Shvets, O.D. Bukhanenko, T.V. Shvets

TEMPERATURE DEPENDENCE OF ELECTRICAL RESISTANCE OF METALLIC HYDROGEN

Electrical conductivity of liquid metallic hydrogen has been calculated for 3000–27000 K and density of 0.35 mol/cm^3 , the conditions it was produced on earth. The hydrogen is

considered as a three-component system, consisting of electrons, protons and neutral atoms of hydrogen. For an inverse relaxation time the conductivity is treated within the second order perturbation theory on electron-proton and electron-atomic interactions. An electron-electron interaction is taken into account in the random-phase approximation. For proton and atomic subsystems the hard spheres model is used. The concentration of electrically neutral component turned out to be much higher than was expected earlier. Its role in formation of the electrical resistance diminished with temperature increase.

Fig. 1. Dependence of electrical resistance on proton-subsystem density at different temperatures, K : a – 3000, b – 18000; — – mixture, -·-·- – pure metal

Fig. 2. Dependence of the relative value of atomic-subsystem contribution to electrical resistance of metallic hydrogen on density and temperature, K : -·-·- – 3000, ---- – 9000, – 27000

Fig. 3. Dependence of electrical resistance on proton-subsystem density for $T = 3000$ K: — – R_2 , --- – R_3 , -·-·- – $R = R_2/(1 - R_3/R_2)$