

# ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ВОДОРОДА

*В. Т. Швецу\**

*Одесская государственная академия холода  
65026, Одесса, Украина*

Поступила в редакцию 5 мая 2006 г.

Рассчитано уравнение состояния жидкого металлического водорода. Исследованы интервалы температур 3000–20000 К и плотностей 0.2–3 моль/см<sup>3</sup>, соответствующие как условиям эксперимента по получению металлического водорода в земных условиях, так и условиям в ядрах планет-гигантов Солнечной системы, таких как Юпитер и Сатурн. Считается, что водород находится в атомарном состоянии и все его электроны коллективизированы. Для нахождения термодинамических потенциалов металлического водорода используется теория возмущений по электрон-протонному взаимодействию. Электронная подсистема рассматривается в приближении случайных фаз с учетом обменного взаимодействия и корреляций электронов в приближении локального поля. Протон-протонное взаимодействие учитывается в приближении твердых сфер. При численных расчетах термодинамических характеристик металлического водорода учтены члены нулевого, второго и третьего порядков теории возмущений. Член третьего порядка оказался достаточно существенным при не слишком высоких температурах и плотностях, хотя и значительно меньшим члена второго порядка. Термодинамические потенциалы металлического водорода являются монотонно возрастающими функциями плотности и температуры. Значения давления для температур и плотностей, характерных для условий получения металлического водорода в земных условиях, с высокой точностью совпадают с соответствующими значениями, приведенными авторами открытия металлического водорода. Найдены диапазоны температур и плотностей, в которых существует жидкая фаза металлического водорода.

PACS: 64.30.+t, 71.15.Nc, 71.10.-w

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Возможность существования металлического водорода была впервые предсказана в 1935 г. [1], но его реальное открытие с детальным исследованием зависимости электрического сопротивления от давления и температуры произошло в 1996 г. [2]. При этом молекулярный водород в жидком состоянии подвергался ударному сжатию до высоких 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. Фактически это был переход металл–полупроводник, поскольку запрещенная зона в молекулярном водороде не исчезала, а уменьшалась с 15 до 0.3 эВ, практически сравниваясь с температурой образца. Следует отметить, что экспериментальные и теоретические исследования предсказанного металлического состояния

водорода проводились и раньше. Так, в работе [3] электрическое сопротивление молекулярного водорода измерялось при значительно меньших давлениях, 0.1–0.2 Мбар, при этом наблюдалась экспоненциальная зависимость сопротивления от температуры, характерная для полупроводников с шириной запрещенной зоны 12 эВ. Первое детальное исследование уравнения состояния металлического водорода в кристаллическом состоянии при низких температурах относится еще к 1971 г. [4]. В 1978 г. появилось первое сообщение об открытии металлического водорода [5] при давлении 2 Мбар.

В настоящее время исследования равновесных свойств металлического водорода ведутся широким фронтом [6–9]. В значительной мере важность таких исследований заключается в том, что с учетом экстремальных условий существования металлического водорода в земных условиях измеряются некоторые

\*E-mail: valtar@paco.net

его равновесные характеристики, например, плотность и температура. С другой стороны, такая важная характеристика, как давление является уже вычисляемой. Существенной чертой исследований равновесных свойств металлического водорода является использование модели почти свободных электронов. Эту модель мы использовали и для расчетов электропроводности металлического водорода [10]. В данной работе мы считаем, что водород находится в металлическом состоянии с нулевой запрещенной зоной. Такое состояние реализуется или при больших давлениях, или при больших температурах. Заметим, что ядро Юпитера с радиусом, равным половине радиуса самой планеты, состоит из водорода, который находится при давлении 3–40 Мбар и температуре 10000–20000 К.

## 2. ГАМИЛЬТониан

В приближении почти свободных электронов гамильтониан электронной подсистемы металлического водорода можно взять в виде, подобном виду гамильтониана для простых жидких металлов [11]:

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

Гамильтониан протонной подсистемы имеет вид

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

Первый член в правой части описывает кинетическую энергию протонов, второй — кулоновскую энергию их взаимодействия. Здесь  $V$  — объем системы,  $N$  — количество протонов в системе,  $T_n$  — кинетическая энергия  $n$ -го протона,  $V(q)$  — фурье-образ кулоновского протон-протонного, электрон-электронного и электрон-протонного взаимодействий,  $\rho^i(\mathbf{q})$  — фурье-образ плотности протонов. Для достаточно высоких температур, рассматриваемых в дальнейшем, протонную подсистему можно считать классической. Поскольку при всех рассмотренных нами температурах электронный газ является сильно вырожденным, для его описания целесообразно использовать представление вторичного квантования по плоским волнам. В этом случае

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_k a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} V(q) [\rho^e(\mathbf{q})\rho^e(-\mathbf{q}) - N]. \quad (3)$$

Первый член в правой части описывает кинетическую энергию электронного газа, второй — кулоновскую энергию их взаимодействия. Здесь  $a_{\mathbf{k}}^+$ ,  $a_{\mathbf{k}}$  — операторы рождения и уничтожения электронов в состоянии с волновым вектором  $\mathbf{k}$ ,  $\varepsilon_k$  — энергия свободного электрона,  $\rho^e(\mathbf{q})$  — фурье-образ оператора электронной плотности,  $N$  — оператор количества электронов.

Гамильтониан кулоновского взаимодействия электронов с протонами имеет вид

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

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:

$$E = \langle H \rangle = \langle H_i \rangle + \langle H_e \rangle + \langle H_{ie} \rangle. \quad (5)$$

Для вклада в энергию протонной подсистемы это выглядит следующим образом:

$$E_i = \langle H_i \rangle = N \frac{3}{2} k_B T + N \frac{1}{2V} \sum'_{\mathbf{q}} V(q) [S^i(q) - 1]. \quad (6)$$

Здесь штрих у знака суммы означает отсутствие слагаемого с  $\mathbf{q} = 0$ ,  $T$  — абсолютная температура системы. Последний вклад называется энергией Маделунга, и точность ее вычисления зависит от точности приближения, использованного для статического структурного фактора протонной подсистемы  $S^i(q)$ . В качестве последнего мы в дальнейшем будем использовать структурный фактор системы твердых сфер:

$$S^i(q) = [1 - nC(q)]^{-1}, \quad (7)$$

где  $C(q)$  — фурье-образ прямой корреляционной функции:

$$C(q) = -4\pi\sigma^3 \int_0^1 (\alpha + \beta x + \gamma x^3) \frac{\sin(q\sigma x)}{q\sigma x} x^2 dx, \quad (8)$$

$$\alpha = \frac{(2\eta + 1)^2}{(1 - \eta)^4}, \quad \beta = -6\eta \frac{(1 + 0.5\eta)^2}{(1 - \eta)^4}, \quad \gamma = \frac{1}{2}\eta\alpha.$$

Здесь  $n$  — плотность протонов,  $\sigma$  — диаметр твердых сфер,  $\eta$  — плотность упаковки.

Энергию электронной подсистемы и энергию взаимодействия электронной и протонной подсистем удобно рассматривать вместе. Их сумму — энергию основного состояния электронного газа в поле протонов можно разложить в ряд по степеням электрон-протонного взаимодействия [12]:

$$E_e = \langle H_e \rangle + \langle H_{ie} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n. \quad (9)$$

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

$$E_{0e} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) = N \frac{3}{5} \varepsilon_F = N \frac{1.105}{r_s}. \quad (10)$$

Здесь введен параметр неидеальности Бракнера  $r_s$ , равный радиусу сферы, объем которой совпадает с объемом системы, приходящимся на один электрон;  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми. 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 [13]. В результате получим

$$E_{HF} = N \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}}' V(\mathbf{q}) [S_0^e(q) - 1] = -N \frac{0.458}{r_s}. \quad (11)$$

Члены старших порядков по электрон-электронному взаимодействию называются корреляционной энергией. Их учет представляет собой до сих пор нерешенную задачу. Общепринятым подходом является использование интерполяционной формулы Нозьера–Пайнса [13, 14]

$$E_{cor} = N(-0.058 + 0.016 \ln r_s). \quad (12)$$

Вследствие электронейтральности системы член первого порядка по электрон-протонному взаимодействию в выражении для энергии основного состояния электронного газа в металлическом водороде отсутствует. Члены второго и более высоких порядков по электрон-протонному взаимодействию,

так называемая энергия зонной структуры, имеют вид

$$E_n = \frac{N}{V^n} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \Gamma^{(n)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) V(\mathbf{q}_1) \dots V(\mathbf{q}_n) \times \\ \times S^i(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \Delta(\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n). \quad (13)$$

Здесь  $S^i(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  —  $n$ -частичный структурный фактор протонной подсистемы, зависящий лишь от координат протонов и формально точно учитывающий протон-протонное взаимодействие;  $\Delta(\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n)$  — символ Кронекера;  $\Gamma^{(n)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  — электронный  $n$ -полюсник [12], зависящий только от координат электронной подсистемы и формально точно учитывающий электрон-электронное взаимодействие. Последнее выражение является формально точным, а потому непригодным для конкретных вычислений. Существует несколько вариантов приближенных вычислений как электронных многополюсников [15–18], так и многочастичных структурных факторов протонной подсистемы [19]. Для электронного двухполюсника общий для всех авторов результат таков:

$$\Gamma^{(2)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) = -\frac{1}{2} \frac{\pi(q)}{\varepsilon(q)}. \quad (14)$$

Здесь  $\pi(q)$  — поляризационная функция электронного газа, а  $\varepsilon(q)$  — его диэлектрическая проницаемость. В приближении случайных фаз и с учетом обменного взаимодействия и корреляций электронов в приближении локального поля

$$\varepsilon(q) = 1 + [V(q) + U(q)]\pi_0(q), \quad (15)$$

где

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

— потенциальная энергия обменного взаимодействия и корреляций электронного газа,  $\lambda \approx 2$  [20],  $\pi_0(q)$  — поляризационная функция идеального электронного газа. Для электронного трехполюсника результаты разных авторов существенно различаются. Результат выполненного автором данной статьи независимого вычисления электронного трехполюсника для модели идеального электронного газа совпадает с результатом, полученным в работе [17]. Именно этот результат и использован в настоящей работе:

$$\Gamma^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) = \frac{\Lambda_0^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)}{\varepsilon(\mathbf{q}_1)\varepsilon(\mathbf{q}_2)\varepsilon(\mathbf{q}_3)}, \quad (16)$$

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

$$E_2 = N \frac{-1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{\pi(q)}{\varepsilon(q)} w^2(q) S(q) q^2 dq, \quad (17)$$

$$E_3 = N \frac{1}{4\pi^4} \int_0^\infty dq_1 q_1^2 \int_0^\infty dq_2 q_2^2 F(q_1, q_2), \quad (18)$$

$$F(q_1, q_2) = \frac{1}{2} \int_0^\pi \frac{\Lambda_0^{(3)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2)}{\varepsilon(q_1)\varepsilon(q_2)\varepsilon(|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|)} \times$$

$$\times w(q_1)w(q_2)w(|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|)S(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \sin \theta_{12} d\theta_{12}.$$

Поскольку электрон-протонное взаимодействие известно точно, основное использованное нами приближение в расчетах члена третьего порядка по электрон-протонному взаимодействию — это геометрическое приближение для трехчастичного структурного фактора [19, 21, 22]:

$$S(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) = S(\mathbf{q}_1)S(\mathbf{q}_2)S(\mathbf{q}_3). \quad (19)$$

Таким образом, энергию основного состояния электронного газа металлического водорода можно записать в виде

$$E = E_0 + \sum_{n=2}^\infty E_n, \quad (20)$$

$$E_0 = E_{0e} + E_{HF} + E_{cor}. \quad (21)$$

На рис. 1 видно, что с ростом плотности роль энергии зонной структуры — члены второго и третьего порядков по электрон-протонному взаимодействию — уменьшается, соответственно, условия сходимости ряда теории возмущений по этому взаимодействию улучшаются. Кроме того, во всех исследованных диапазонах плотностей и температур член третьего порядка по электрон-протонному взаимодействию значительно меньше члена второго порядка. Еще одно обстоятельство заключается в том, что при плотностях, больших плотностей перехода в металлическое состояние (0.3 моль/см<sup>3</sup>), внутренняя

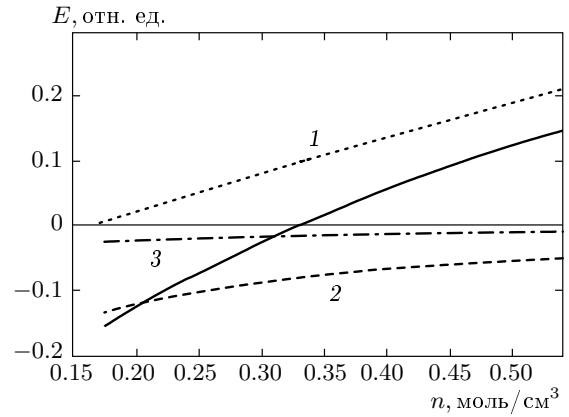


Рис. 1. Энергия основного состояния электронного газа при температуре 9000 К.  $E_0$  (1),  $E_2$  (2),  $E_3$  (3) — вклады в энергию нулевого, второго и третьего порядков по электрон-протонному взаимодействию. Сплошная кривая соответствует  $E_0 + E_2 + E_3$

энергия становится положительной, приближаясь с ростом плотности к внутренней энергии идеального газа.

#### 4. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ И ДАВЛЕНИЕ

По определению свободной энергии

$$F = E - TS, \quad (22)$$

где  $S$  — энтропия системы. Последнюю можно представить как сумму электронной и протонной составляющих. Однако для вырожденного электронного газа электронной составляющей можно пренебречь по сравнению с протонным вкладом в энтропию, который в приближении твердых сфер [14, 23] можно записать в виде

$$S = S_i = S_{hs} = S_{0i} + S_i(\eta), \quad (23)$$

где

$$S_{0i} = Nk_B \ln \left[ \frac{e}{n} \left( \frac{eMk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right] \quad (24)$$

— энтропия идеального протонного газа ( $M$  — масса протона), а

$$S_i(\eta) = Nk_B \frac{3\eta^2 - 4\eta}{(1 - \eta)^2} \quad (25)$$

— вклад, обусловленный взаимодействием между протонами.

Предложенная теория содержит, на первый взгляд, единственный неопределенный параметр —

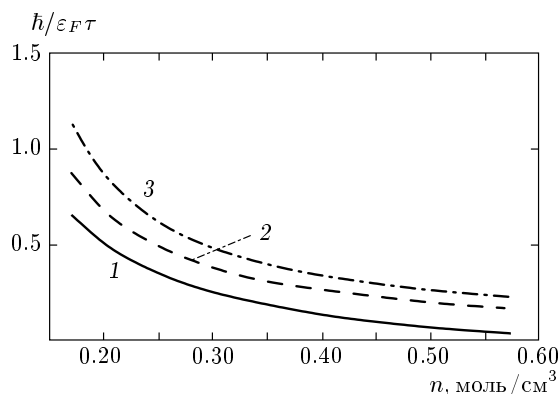


Рис. 2. Зависимости безразмерного параметра  $\hbar/\varepsilon_{FT}$  от плотности при различных значениях температуры  $T = 3000$  (1),  $9000$  (2) и  $18000$  (3) К

диаметр твердых сфер. Только зная зависимость этого параметра от плотности и температуры, можно найти соответствующие зависимости термодинамических потенциалов. Для их нахождения мы использовали парное эффективное протон-протонное взаимодействие. По зависимости этого взаимодействия от межпротонного расстояния можно определить диаметр твердых сфер для произвольной температуры и плотности [10]. Единственным приближением, сделанным при его получении, является уже обсуждавшееся выше приближение случайных фаз для электронной подсистемы с учетом обменного взаимодействия и корреляций электронов в приближении локального поля.

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

$$V_{eff}(\sigma) = \frac{3}{2}k_B T. \quad (26)$$

Расчеты показывают, что для плотности, которая отвечает плотности перехода водорода в металлическое состояние ( $0.3$  моль/см<sup>3</sup>), глубина потенциальной ямы составляет всего несколько сот градусов. При больших плотностях потенциальная яма практически исчезает. Таким образом, в металлическом водороде при высоких температурах существенным является лишь отталкивание между протонами. Это делает невозможным существование металлического водорода при высоких температурах при снятии внешнего давления.

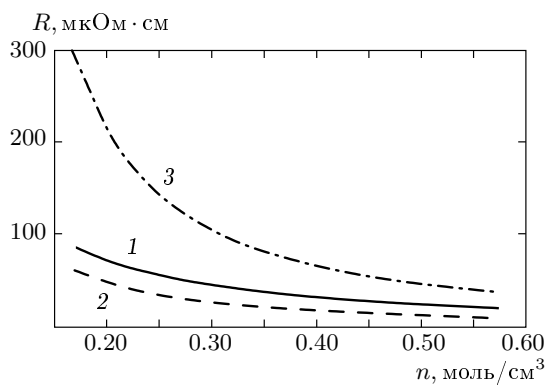


Рис. 3. Зависимости электрического сопротивления от плотности при температуре  $9000$  К.  $R_2$  (1),  $R_3$  (2) — члены второго и третьего порядков;  $R$  (3) — результат приближенного суммирования ряда теории возмущений

## 5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

По данным авторов открытия металлического водорода [2] при температуре  $3000$  К и плотности  $0.3$  моль/см<sup>3</sup> давление составляет  $1.4$  Мбар. По результатам наших расчетов при тех же условиях давление составляет  $1.38$  Мбар. С нашей точки зрения, такая близость значений свидетельствует не столько об адекватности теории условиям эксперимента, сколько о подобности методик расчета давления и сделанных при этом упрощающих предположений. Ответ на вопрос о применимости, например, модели почти свободных электронов следует искать в рамках самой теории. Безразмерным параметром, характеризующим применимость модели почти свободных электронов, является величина  $\hbar/\varepsilon_F\tau$ , где  $\tau$  — время жизни электрона в состоянии с заданным значением волнового вектора. Это время жизни близко ко времени релаксации для электропроводности и теплопроводности металлов. Модель почти свободных электронов применима в случае, когда этот параметр меньше единицы. На рис. 2 приведена зависимость указанного параметра от плотности и температуры. На рис. 2 видно, что при малых плотностях и высоких температурах безразмерный параметр близок к единице, т.е. в этом случае модель почти свободных электронов неприменима. Для высоких плотностей и малых температур параметр  $\hbar/\varepsilon_F\tau$  значительно меньше единицы и модель почти свободных электронов является хорошей. В частности, модель почти свободных электронов является достаточно хорошей для плотности  $n = 0.3$  моль/см<sup>3</sup>, при которой впервые был получен

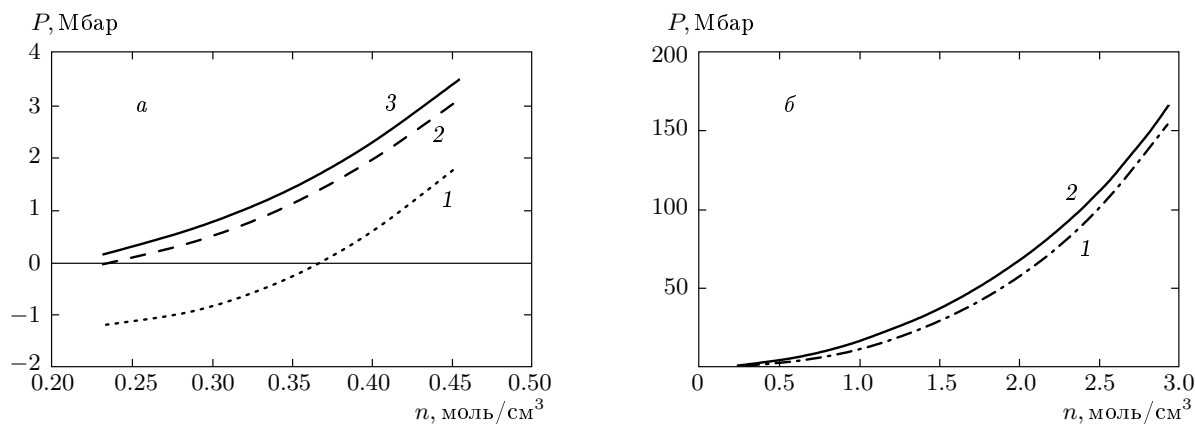


Рис. 4. Зависимости давления металлического водорода от плотности при температурах  $T = 3000$  (а) и  $20000$  (б) К.  $P_0$  (1) — давление водорода без учета электрон-протонного взаимодействия;  $P_2$  — давление, обусловленное вкладом второго порядка по электрон-протонному взаимодействию;  $P_3$  — давление, обусловленное вкладом третьего порядка по электрон-протонному взаимодействию. Кривая 2 соответствует сумме  $P_0 + P_2$ , а кривая 3 — сумме  $P_0 + P_2 + P_3$

металлический водород.

Другим важным моментом теории является принципиальная роль электрон-протонного взаимодействия при формировании не только кинетических, но и термодинамических свойств металлического водорода. Это видно по следующим результатам численных расчетов. Без учета электрон-протонного взаимодействия при температуре  $3000$  К и плотности  $0.3$  моль/см<sup>3</sup> давление имеет нефизическое значение  $-0.27$  Мбар. При учете электрон-протонного взаимодействия во втором порядке теории возмущений давление равно  $1.13$  Мбар. При учете еще и члена третьего порядка давление становится равным  $1.38$  Мбар.

В этом смысле ситуация со сходимостью ряда теории возмущений для энергии лучше, чем, например, для электрического сопротивления [10]. В последнем случае, как видно из рис. 3, ряд теории возмущений, который начинается с членов второго порядка по электрон-протонному взаимодействию, сходится достаточно медленно. На рис. 3 также видно, что член третьего порядка при всех плотностях меньше члена второго порядка всего на несколько десятков процентов. При этом сходимость ряда теории возмущений для электрического сопротивления улучшается с ростом плотности.

Что касается давления, то оно растет как с увеличением температуры, так и с увеличением плотности. Соответствующие зависимости имеют монотонный и нелинейный характер. Это хорошо видно на рис. 4.

На рисунках также видно, что роль элект-

рон-протонного взаимодействия достаточно велика при относительно низких температурах и плотностях, например, при температуре  $3000$  К. При температуре  $20000$  К роль вклада третьего порядка по электрон-протонному взаимодействию в давление уже пренебрежимо мала. При этой температуре с ростом плотности существенно уменьшается и роль вклада второго порядка. В этом случае уравнение состояния металлического водорода все меньше отличается от уравнения состояния смеси электронного и ионного идеальных газов.

В модели твердых сфер легко определить и область существования жидкой металлической фазы. Переходу системы в кристаллическое состояние соответствует приближение плотности упаковки твердых сфер к максимально возможному значению [23]. При температуре  $3000$  К предельное значение плотности жидкой фазы примерно равно  $0.5$  моль/см<sup>3</sup>, при температуре  $9000$  К —  $1.6$  моль/см<sup>3</sup> и т. д. В этой связи заметим, что при предполагаемых значениях плотности и температуры в ядре Юпитера жидкий металлический водород весьма далек от точки перехода в твердое состояние.

Достоверность полученных результатов при температурах, которые значительно превосходят  $3000$  К, значительно выше, чем при температуре, при которой был получен металлический водород в земных условиях. Причина заключается в наличии в энергетическом спектре электронов металлического водорода при плотности  $0.3$  моль/см<sup>3</sup> запрещенной зоны шириной  $3000$  К. Вместе с тем для высоких температур уже нужно учитывать

температурные поправки к многополюсникам и диэлектрической проницаемости электронного газа. Легко видеть, что даже в рассмотренном диапазоне температур безразмерный параметр  $k_B T / \varepsilon_F$ , который характеризует вырожденность электронного газа, достаточно значителен и его учет может заметно изменить полученные нами результаты.

Возвращаясь к значению давления, при котором был открыт металлический водород, отметим следующее. Электрическое сопротивление и давление рассчитаны нами в рамках одной модели и одинаковых приближений. Экспериментально измеренные значения электрического сопротивления значительно выше, чем полученные нами в результате приближенного суммирования ряда теории возмущений для электрического сопротивления. В этих условиях полученные нами теоретические значения давления не могут быть близкими к экспериментальным. Причина такой неопределенности не связана с использованной моделью металлического водорода. Как отмечалось выше, условия применимости модели достаточно хорошо выполняются. Одной из причин является игнорирование существования запрещенной зоны в энергетическом спектре электронов, существенной лишь при относительно низких температурах и плотностях. Другая причина заключается в невыясненности вопроса о том, какая часть водорода находится в атомарном состоянии. Эта причина также может быть существенной только лишь при относительно низких температурах и плотностях.

Таким образом, предложенная нами теория претендует на количественное описание как равновесных, так и неравновесных свойств металлического водорода лишь в диапазоне высоких температур и плотностей. При этом, если температура равна 3000 К, плотность должна значительно превышать 0.3 моль/см<sup>3</sup>. Если же плотность равна 0.3 моль/см<sup>3</sup>, то температура должна значительно превышать 3000 К.

## ЛИТЕРАТУРА

1. E. Wigner and H. B. Huntington, *J. Chem. Phys.* **3**, 764 (1935).
2. S. T. Weir, A. C. Mitchell, and W. J. Nellis, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1860 (1996).
3. W. J. Nellis, A. C. Mitchell, P. C. McCandless et al., *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2937 (1992).
4. Е. Г. Бровман, Ю. Каган, А. Холас, *ЖЭТФ* **61**, 2429 (1971).
5. P. S. Hawke, T. J. Burgess, D. E. Duerre et al., *Phys. Rev. Lett.* **41**, 994 (1978).
6. S. A. Bonev and N. W. Ashcroft, *Phys. Rev. B* **64**, 224112 (2001).
7. K. Nagao, S. A. Bonev, and N. W. Ashcroft, *Phys. Rev. B* **64**, 224111 (2001).
8. В. В. Кечин, *Письма в ЖЭТФ* **79**, 46 (2004).
9. Е. Г. Максимов, Ю. И. Шилов, *УФН* **42**, 1121 (1999).
10. V. T. Shvets, S. V. Savenko, and Ye. K. Malinovskiy, *Condens. Matt. Phys.* **9**, 1 (2006).
11. В. Т. Швец, *Метод функций Грина в теории металлов*, Латстар, Одесса (2002).
12. Е. Г. Бровман, Ю. М. Каган, *УФН* **112**, 369 (1974).
13. И. А. Вакарчук, *Введение в проблему многих тел*, Львовский национальный университет им. Ивана Франка, Львов (1999).
14. W. H. Shih and D. Stroud, *Phys. Rev. B* **31**, 3715 (1985).
15. P. Lloyd and C. A. Sholl, *J. Phys. C* **1**, 1620 (1968).
16. Е. Г. Бровман, Ю. Каган, *ЖЭТФ* **63**, 1937 (1972).
17. Е. Г. Бровман, А. Холас, *ЖЭТФ* **66**, 1877 (1974).
18. J. Hammerberg and N. W. Ashcroft, *Phys. Rev. B* **9**, 3999 (1974).
19. L. Ballentine and V. Heine, *Philos. Mag.* **9**, 617 (1964).
20. D. J. M. Geldart and S. H. Vosko, *Can. J. Phys.* **44**, 2137 (1966).
21. V. T. Shvets and E. V. Belov, *Acta Physica Polonica A* **96**, 741 (1999).
22. V. T. Shvets, *Phys. Metals Metallogr.* **89**, 211 (2000).
23. И. Р. Юхновский, М. Ф. Головкин, *Статистическая теория классических равновесных систем*, Наукова думка, Киев (1987).