

На правах рукописи



Кожберов Андрей Андреевич

**Структура и
термодинамические свойства
кулоновских кристаллов
в недрах вырожденных звезд**

Специальность
01.03.02 — астрофизика и звездная астрономия

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург
2018

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-техническом институте им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук.

Научный руководитель: Байко Денис Алексеевич,
к. ф.-м. н., старший научный сотрудник
ФГБУН Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе

Официальные оппоненты: Иосилевский Игорь Львович,
д. ф.-м. н., главный научный сотрудник
ФГБУН Объединенный институт
высоких температур РАН
Юдин Андрей Викторович,
к. ф.-м. н., заведующий лабораторией
ФГБУ Институт теоретической и экспериментальной
физики имени А. И. Алиханова НИЦ “КИ”

Ведущая организация: Санкт-Петербургский государственный университет

Защита состоится 13 декабря 2018 г. в 14 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 002.205.03 при ФТИ им. А. Ф. Иоффе по адресу: 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФТИ им. А. Ф. Иоффе и на веб-сайте института <http://www.ioffe.ru>.

Автореферат разослан 1 ноября 2018 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к. ф.-м. н.

А. М. Красильщиков

Общая характеристика работы

Актуальность темы диссертации

Белые карлики (БК) и нейтронные звезды (НЗ) — самые компактные из всех звезд (например, [1]). Они рождаются из обычных звезд после завершения их термоядерной эволюции. При массе порядка солнечной радиусы БК составляют всего несколько тысяч км, тогда как радиусы НЗ — всего лишь ~ 10 км. Плотность вещества в центре массивных БК может достигать 10^9 г см $^{-3}$, а в центре массивных НЗ — 3×10^{15} г см $^{-3}$. От гравитационного коллапса БК и НЗ удерживаются давлением сильно вырожденных фермионов в их плотном веществе, поэтому их часто называют *вырожденными звездами*.

Наблюдательные проявления вырожденных звезд крайне разнообразны. Процессы с огромным энерговыделением, сопровождающие их эволюцию (например, вспышки новых и сверхновых звезд), позволяют измерять расстояния до галактик, в которых они находятся, и исследовать строение ранней Вселенной. Особенно интересны вырожденные звезды в тесных двойных системах. Системы НЗ–НЗ позволяют проверять правильность теории гравитации и являются основными мишенями для действующих и планируемых гравитационных обсерваторий типа LIGO.

Наблюдения БК и НЗ дают ценную информацию о свойствах их сверхплотного вещества. Однако для правильной интерпретации наблюдений необходимо иметь реалистические теоретические модели такого вещества. Считается, что недра БК состоят из вырожденного электронного газа и ионов (в основном, из атомных ядер гелия ^4He , углерода ^{12}C , кислорода ^{16}O), а во внутреннем строении НЗ можно выделить плотное массивное ядро из вырожденных барионов, электронов и мюонов, и тонкую кору из атомных ядер и электронов (в глубине коры появляются еще свободные нейтроны).

Вещество в недрах БК и коре НЗ — это плазма ионов, погруженных в почти однородный электронный газ. Ионы можно характеризовать параметром кулоновской связи Γ . Для ионов одного типа $\Gamma \equiv Z^2 e^2 / (aT)$, где e — заряд электрона, T — температура, $a \equiv (4\pi n/3)^{-1/3}$ — радиус ионной сферы, n — концентрация ионов, а Z — их зарядовое число. В БК и НЗ обычно $\Gamma \gg 1$, то есть ионы образуют сильно неидеальную кулоновскую плазму. При $\Gamma < 175$ плазма ионов одного сорта представляет собой кулоновскую жидкость, а при $\Gamma = 175$ становится кулоновским кристаллом. По современным представлениям (например, [2]) кулоновские кристаллы формируются в коре молодых НЗ почти сразу, тогда как в недрах БК это происходит гораздо позже ($\sim 10^9$ лет для массивных карликов). Так, в работе [3] приведены свидетельства того, что ядро пульсирующего БК BPM 37093 содержит кристалл.

Свойства кулоновской плазмы, состоящей из ионов одного сорта, изучены неполно (например, [2]), а плазмы из ионов двух или нескольких сортов —

много хуже, что затрудняет надежное моделирование явлений и процессов в вырожденных звездах (ядерное горение, тепловая, вращательная и магнитная эволюция, сейсмическая активность, глитчи пульсаров, активность магнитаров и многое другое). Таким образом, изучение микрофизики кулоновских кристаллов является важной и актуальной задачей астрофизики вырожденных звезд.

Цели работы

Целью диссертационной работы являлось изучение электростатических, фононных и термодинамических свойств различных кулоновских кристаллов в БК и НЗ. Были поставлены следующие задачи:

1. Исследование электростатических свойств различных кристаллических решеток.
2. Определение границы устойчивости многокомпонентных и деформированных однокомпонентных кулоновских кристаллов.
3. Исследование зависимости фононных и термодинамических свойств бинарных кулоновских кристаллов от температуры и от отношения зарядовых и массовых чисел ионов.
4. Расчет влияния магнитного поля звезд и поляризации электронного фона на фононные и термодинамические свойства кулоновских кристаллов ионов.
5. Определение границ применимости теории возмущения для фононного спектра при описании термодинамических свойств кулоновских кристаллов с примесями.
6. Анализ влияния неопределенности в типе кристаллической решетки на темп остывания белых карликов.

Научная новизна работы состоит в том, что:

- Получены аналитические выражения для электростатической энергии и динамической матрицы строго упорядоченных многокомпонентных кулоновских кристаллов.
- Впервые исследована устойчивость различных многокомпонентных и деформированных однокомпонентных кулоновских кристаллов относительно малых колебаний ионов решетки около положения равновесия.
- Впервые рассчитан фононный спектр и термодинамические свойства бинарных кулоновских кристаллов.
- Впервые рассчитаны фононные и термодинамические свойства кристаллов разного типа с одновременным учетом магнитного поля и поляризации электронного фона.

Достоверность результатов

При решении поставленных задач использованы как аналитические, так и надежные численные методы. Достоверность результатов проверена путем

сравнения с известными предельными случаями и (в тех случаях, когда это было возможно) с результатами других авторов.

Научная и практическая ценность

Результаты диссертации важны для интерпретации наблюдений БК и НЗ и изучения свойств их сверхплотного вещества. В том числе, они необходимы для численного моделирования многих наблюдательных проявлений вырожденных звезд, включая их тепловую и магнитную эволюцию, ядерное горение и нуклеосинтез их вещества (вспышки и сверхвспышки в НЗ, вспышки сверхновых типа Ia при взрывах массивных БК), сейсмологию, сбои периодов пульсаров, гравитационное излучение вращающихся НЗ с деформированной корой и пр.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Расчет и анализ электростатических, фононных и термодинамических свойств многокомпонентных кулоновских кристаллов в недрах вырожденных звезд. Проверка выполнения правила линейного смешивания для электростатической энергии, модулей упругости и теплоемкости бинарных кулоновских кристаллов.
2. Исследование фононных и термодинамических свойств гексагональной плотноупакованной решетки в отсутствие и при наличии магнитного поля. Определение энергетически выгодных типов кристаллической решетки при различных физических условиях в коре нейтронной звезды и в ядре белого карлика.
3. Анализ фононных и термодинамических свойств кулоновских кристаллов при одновременном учете поляризации электронного фона и магнитного поля.
4. Определение границ устойчивости относительно малых колебаний ионов в деформированных кулоновских кристаллах. Исследование электростатического давления в деформированных кристаллах в коре нейтронной звезды.
5. Вычисление теплоемкости кулоновских кристаллов с изотопными примесями. Анализ влияния изотопных примесей, неопределенности в типе кристаллической решетки и магнитного поля на тепловую эволюцию белых карликов.

Апробация работы и публикации

Основные результаты диссертации неоднократно доложены на объединенном астрофизическом семинаре ФТИ им. А.Ф. Иоффе, а также на всероссийских и международных конференциях: международная молодежная конференция “Физика А. СПб” (Санкт-Петербург, 2016; 2017), международная конференция “Physics of Neutron Stars” (Санкт-Петербург, 2011; 2014; 2017),

всероссийская конференция “Астрофизика высоких энергий сегодня и завтра” (Москва, 2011; 2014; 2015; 2016; 2017), научно-координационная Сессия “Исследования неидеальной плазмы” (Москва, 2011; 2013; 2016), международная конференция “Strongly Coupled Coulomb Systems” (Будапешт, 2011; Киль, 2017), международная школа CompStar “Equation of State for Compact Star Interiors and Supernovae” (Задар, 2012). Материалы диссертации получены в период с 2010 по 2018 год и опубликованы в девяти статьях в ведущих международных рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации — 160 страниц, включая 104 рисунка и 20 таблиц. Библиография включает 131 наименование.

Основное содержание диссертации

Во **Введении** обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цели и задачи работы, указана ее научная новизна, обоснована достоверность результатов и их практическая значимость, приведены основные результаты, выносимые на защиту, а также сведения об апробации работы и публикациях по теме диссертации.

Первая глава посвящена описанию основных параметров кулоновских кристаллов и их электростатических свойств. Результаты этой главы опубликованы в работах [А1, А3, А6].

В разделе 1.1 дана краткая история изучения кулоновских кристаллов в различных областях физики, а также указаны основные параметры рассматриваемых кристаллов.

В разделе 1.2 приведены основные понятия из теории твердого тела, необходимые для решения поставленных задач. В основном, рассмотрены три решетки: объемноцентрированная кубическая (ОЦК, или bcc), гранецентрированная кубическая (ГЦК, или fcc) и гексагональная плотно упакованная (ГПУ, или hcp).

Раздел 1.3 посвящен расчету электростатических энергий однокомпонентных кулоновских кристаллов, то есть кристаллов, состоящих из ионов одного типа и однородного электронного фона. При $T = 0$ электростатическая энергия кристаллов равна $U_M = NZ^2e^2\zeta/a$, где N — число ионов, ζ — постоянная Маделунга, зависящая лишь от типа решетки. Среди наиболее известных решеток наименьшей энергией обладает ОЦК решетка ($\zeta_{bcc} = -0.895929256$). В разделе 1.3.2 рассчитана зависимость U_M деформированных ОЦК и ГЦК решеток от параметров деформации. В разделе 1.3.3 показано, что энергия

U_M этих решеток даже при достаточно больших относительных деформациях может быть с хорошей точностью найдена с помощью электростатического давления и модулей упругости недеформированных решеток. В разделе 1.3.4 рассмотрена энергия и давление деформированных решеток с гексагональной сингонией. Электростатическое давление в ГПУ решетке изотропно только если отношение высоты ее элементарной ячейки к длине основания a_l равно $h_{\text{hp0}} \approx 1.6356$, что не совпадает с использованным в предшествующих работах значением $h_{\text{hcr}} = \sqrt{8/3}$. При высоте $h = h_{\text{hp0}}$ достигается минимальное значение постоянной Маделунга $\zeta_{\text{hp0}} = -0.895838451$ против $\zeta_{\text{hcr}} = -0.89583812$ при $h = h_{\text{hcr}}$. Эта разница мала, и далее при рассмотрении ГПУ решетки будет считаться, что $h = h_{\text{hcr}}$.

Свойствам электростатического давления деформированных ОЦК и ГЦК решеток посвящен раздел 1.3.5. На рис. 1 приведена зависимость электростатического давления ОЦК решетки, растянутой вдоль одного из ребер куба элементарной ячейки (p_{\parallel} и p_{\perp} — давления вдоль и поперек направления растяжения, нормированные на nZ^2e^2/a), параметр c_1 показывает относительное удлинение этого ребра. При $c_1 = 1$ давление изотропно $p_{\parallel} = p_{\perp} = \zeta_{\text{bcc}}/3$. Давление также изотропно при $c_1 \approx 1.20845$ и при $c_1 = \sqrt{2}$, когда растянутая ОЦК решетка переходит в ГЦК решетку. Поведение давления

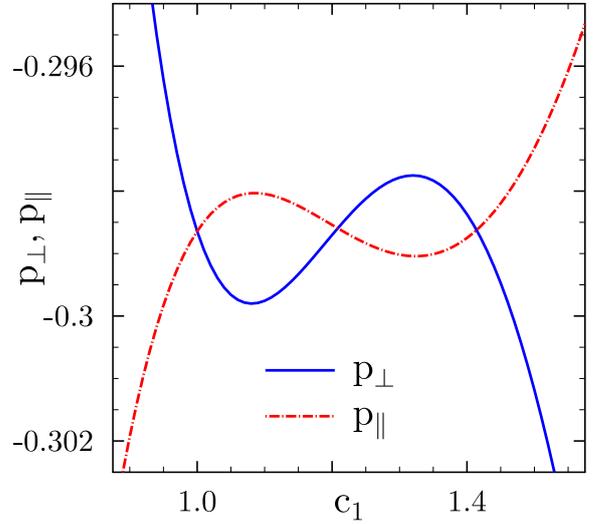


Рис. 1. Зависимость давления от удлинения ребра ОЦК решетки.

в деформируемом кристалле существенно зависит от взаимной ориентации направления деформации и кристаллографических осей, что может влиять на процессы, происходящие в коре НЗ со сверхсильным магнитным полем.

Раздел 1.4 посвящен электростатическим свойствам многокомпонентных упорядоченных кристаллов (положение ионов разных типов строго коррелировано и определяется только номером иона p в элементарной ячейке). Для кристалла с N_{cell} ионами в элементарной ячейке получено (раздел 1.4.1):

$$U_M = N \frac{e^2}{a} \left\{ \sum_{lpp'} \frac{aZ_p Z_{p'}}{2N_{\text{cell}}} (1 - \delta_{pp'} \delta_{\mathbf{R}_l, 0}) \frac{\text{erfc}(AY_l)}{Y_l} - \sum_{pp'} \frac{3Z_p Z_{p'}}{8N_{\text{cell}}^2 A^2 a^2} - \sum_p \frac{AaZ_p^2}{N_{\text{cell}} \sqrt{\pi}} + \sum_{mpp'} \frac{3Z_p Z_{p'}}{2N_{\text{cell}}^2 a^2} \frac{1 - \delta_{\mathbf{G}_m, 0}}{G_m^2} \exp \left[-\frac{G_m^2}{4A^2} + i\mathbf{G}_m(\boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'}) \right] \right\}, \quad (1)$$

где $\mathbf{Y}_l = \mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'}$, $\boldsymbol{\chi}_p$ — базисные вектора, константа A выбрана так, чтобы суммы по векторам прямой \mathbf{R}_l и обратной

\mathbf{G}_m решетки сходились одинаково быстро ($Aa \cong 2$), $\operatorname{erfc}(z)$ — дополнительная функция ошибок. Для бинарных ОЦК и ГПУ решеток $U_M = NZ_1^2 e^2 [\zeta_1 (1 + \alpha^2) / 2^{4/3} + \alpha (\zeta_2 - \zeta_1 / 2^{1/3})] / a$, где $\alpha \equiv Z_2 / Z_1$ — отношение зарядов ионов (положено $\alpha \geq 1$). Для бинарной ОЦК решетки $\zeta_1 = \zeta_{sc} = -0.880059442$ и $\zeta_2 = \zeta_{bcc}$, а для бинарной ГПУ решетки $\zeta_1 = \zeta_{hex} = -0.779433364$ и $\zeta_2 = \zeta_{hcp}$ (sc отвечает простой кубической решетке, hex — гексагональной).

С помощью (1) можно рассчитать U_M , давление и модули упругости для деформированных многокомпонентных решеток. Эффективный модуль сдвига [2] бинарной ОЦК решетки равен $\mu_{\text{eff}} = nZ_1^2 e^2 (0.0465669(1 + \alpha^2) + 0.0263234\alpha) / a$, что хорошо согласуется с результатами численного моделирования неупорядоченных бинарных ОЦК кристаллов [4] (отличие не превышает долей процента) и с результатом, полученным, по правилу линейного смешивания (см. ниже). Для бинарной ГЦК решетки получено $\mu_{\text{eff}} = nZ_1^2 e^2 (0.07820500 + 0.02276473\alpha + 0.01848009\alpha^2) / a$, что также согласуется с правилом линейного смешивания. Для других модулей упругости бинарных ОЦК и ГЦК решеток линейное смешивание работает гораздо хуже. В разделе 1.4 рассчитаны значения U_M и для других многокомпонентных решеток; для бинарной ГПУ решетки и решетки диборида магния показано, что высота их элементарных ячеек зависит от α .

В разделе 1.5 проанализирована точность правила линейного смешивания для электростатической энергии разных многокомпонентных кулоновских кристаллов. При линейном смешивании энергия многокомпонентного кристалла равна сумме энергий таких же однокомпонентных кристаллов с соответствующими статистическими множителями [5]. Оказалось, что точность правила линейного смешивания неудовлетворительна для расчета энергии U_M всех рассмотренных решеток, за исключением бинарной ОЦК. Расхождение имеет тот же порядок, что и характерная разность энергий решеток разных типов.

В разделе 1.6 рассчитана энергия статического кристалла с поляризуемым электронным фоном. В модели Томаса-Ферми для описания поляризации фона использована диэлектрическая функция $\epsilon(q) = 1 + \kappa_{\text{TF}}^2 / q^2$, где q — модуль волнового вектора, $\kappa_{\text{TF}} \equiv (4\pi e^2 \partial n_e / \partial \mu_e)^{1/2}$ — волновое число Томаса-Ферми, n_e — концентрация электронов, μ_e — химический потенциал электронного газа. В этой модели U_M зависит только от типа решетки и $\kappa_{\text{TF}} a$. В случае слабого экранирования ($\kappa_{\text{TF}} a < 1$, раздел 1.6.1) минимальной энергий обладает ОЦК решетка, а в случае сильного экранирования (раздел 1.6.2) при $\kappa_{\text{TF}} a > 1.066$ уже ГЦК решетка, что совпадает с результатами молекулярно-динамического моделирования [6]. Величина U_M для ГПУ решетки, ранее не рассматривавшейся в модели Томаса-Ферми, всегда больше, чем для ГЦК.

Модель экранирования Янкови-ча (диэлектрическая проницаемость вырожденного электронного газа в приближении случайных фаз) [7] рассмотрена в разделе 1.6.3. В этом случае энергия статической решетки зависит не только от типа решетки и $\kappa_{TF}a$, но и от параметра релятивизма электронов $x_r \equiv p_F/(m_e c)$, где $p_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$ — импульс Ферми. На рис. 2 показано, какая из трех решеток (ОЦК, ГЦК или ГПУ) обладает наименьшей энергией. Видно, что при $\kappa_{TF}a \ll 1$ наименьшей энергией всегда обладает ОЦК решетка.

Вторая глава посвящена изучению фоновых свойств кулоновских кристаллов; результаты этой главы опубликованы в [A1, A3–A7, A9].

Фоновый спектр кристалла определяется квадратичным членом разложения его потенциальной энергии в ряд по степеням смещений ионов из узлов решетки. В разделе 2.1 приведен вывод дисперсионного уравнения, позволяющего найти фоновый спектр $\omega_\nu(\mathbf{k})$ любого упорядоченного кристалла: $\det\{D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) - \omega_\nu^2(\mathbf{k})\delta_{pp'}\delta^{\mu\lambda}\} = 0$, где $D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k})$ — динамическая матрица решетки, \mathbf{k} — волновой вектор, μ, λ — декартовы координаты, а индекс ν нумерует моды колебаний: $\nu = 1 \dots 3N_{\text{cell}}$.

В разделе 2.2 рассмотрены фоновые свойства однокомпонентных кристаллов. Спектр ОЦК и ГЦК решеток состоит из трех мод: двух оптических ($\omega_{1,2} \propto k$ при $ka < 1$) и одной акустической ($\omega_3 \approx \text{const}$ при $ka < 1$). Спектр ГПУ решетки состоит из шести мод. Кроме описанных выше, имеется три дополнительные оптические моды. Информация о спектре позволила найти плотность числа фоновых состояний, энергию нулевых колебаний и моменты частот фононов решетки. Плотность фоновых состояний для ОЦК и ГПУ решеток имеет те же особенности, что и у кристаллов, образующихся в земных условиях. Энергия нулевых колебаний кулоновских кристаллов равна $E_0 \equiv 1.5N\hbar\langle\omega_\nu(\mathbf{k})\rangle = 1.5N\hbar\omega_p u_1$, где $\omega_p \equiv \sqrt{4\pi n Z^2 e^2 / M}$ — ионная плазменная частота, M — масса ионов, константа $u_1 \equiv \langle\omega_\nu / \omega_p\rangle$ — первый момент спектра колебаний решетки ($\langle\dots\rangle$ означает усреднение по всем фоновым модам в первой зоне Бриллюэна). Численно $u_1^{\text{bcc}} = 0.5113877$, $u_1^{\text{fcc}} = 0.513194$ и $u_1^{\text{hcp}} = 0.5133369$. Аналогично были найдены и другие мо-

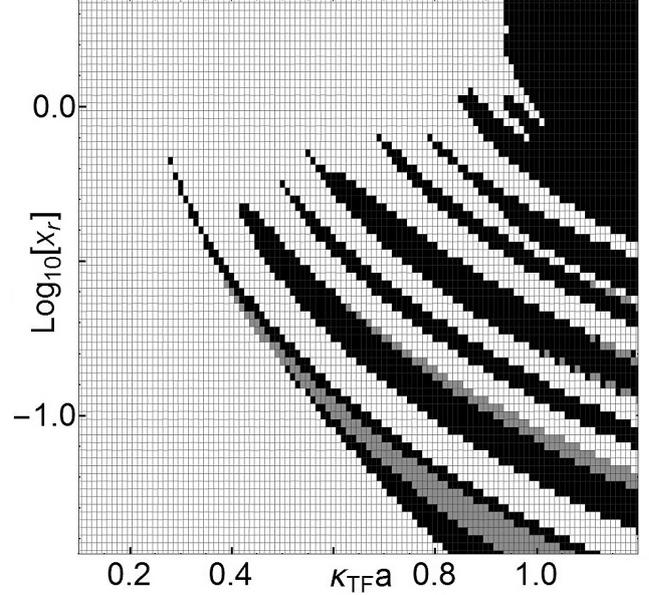


Рис. 2. Область значений параметра релятивизма электронов и параметра экранирования, при которых ОЦК (белая область), ГЦК (черная область) или ГПУ (серая область) обладает наименьшей энергией U_M .

менты: $u_{-1} \equiv \langle \omega_p / \omega_\nu \rangle$, $u_{-2} \equiv \langle (\omega_p / \omega_\nu)^2 \rangle$ и $u_{\ln} \equiv \langle \ln(\omega_\nu / \omega_p) \rangle$. Простая кубическая и гексагональная решетки неустойчивы, в их спектрах при некоторых \mathbf{k} у одной или нескольких мод колебаний $\omega_\nu^2(\mathbf{k}) < 0$.

Устойчивость деформированных кристаллов с однородным электронным фоном изучена в разделе 2.3. Устойчивость ОЦК решетки, растянутой вдоль двух ребер куба элементарной ячейки, характеризуется безразмерными параметрами c_1 и c_2 – относительными удлинениями этих ребер. Область значений c_1 и c_2 , при которых решетка устойчива, показана на рис. 3. Видно, что ОЦК решетка может растягиваться в 1.49 раза вдоль одного из ребер, тогда как сжатие ($c_1 = c_2$) в этом направлении возможно лишь на 6.5%. Аналогична ситуация с растянутой ГЦК решеткой. Устойчивость кристалла существенно зависит от направления деформации (раздел 2.3.2). Так, растянутая вдоль диагонали основания ОЦК решетка устойчива, когда c_d – отношение длин диагоналей основания деформированной и недеформированной решеток лежит в диапазоне от 0.9 до 1.06. ГПУ решетка устойчива, когда h изменяется от 1.48 до 1.82.

Исследования различных деформированных решеток важны для понимания многих процессов в НЗ. Так, разработан ряд моделей, которые связывают разрушение кристаллической коры НЗ с наблюдаемыми параметрами НЗ (например, [8]). Работы по исследованию максимального напряжения σ^{\max} , которое выдерживает кора, ранее проводились лишь численно [9], при $T = 0$ и без учета квантовых эффектов: $\sigma \equiv \partial(U_M/V)/\partial\epsilon$, где ϵ – параметр, характеризующий степень деформации. Значение σ при максимальном допустимом значении ϵ и определяет σ^{\max} . В разделе 2.3.3 показано, что для ОЦК решетки σ^{\max} зависит от направления деформации. Характерное значение $\sigma^{\max} a / (nZ^2 e^2) \approx 0.02 - 0.03$.

Раздел 2.4 посвящен фононному спектру бинарных кристаллов. Спектр бинарных ОЦК и ГПУ решеток состоит из шести мод, только две из которых акустические. Нормированный на $\omega_s \equiv \sqrt{\pi n Z_1^2 e^2 (1 + \alpha) (1 + \alpha/\beta) / M_1}$ спектр зависит от двух параметров: α и отношения масс ионов $\beta \equiv M_2 / M_1$. Бинар-

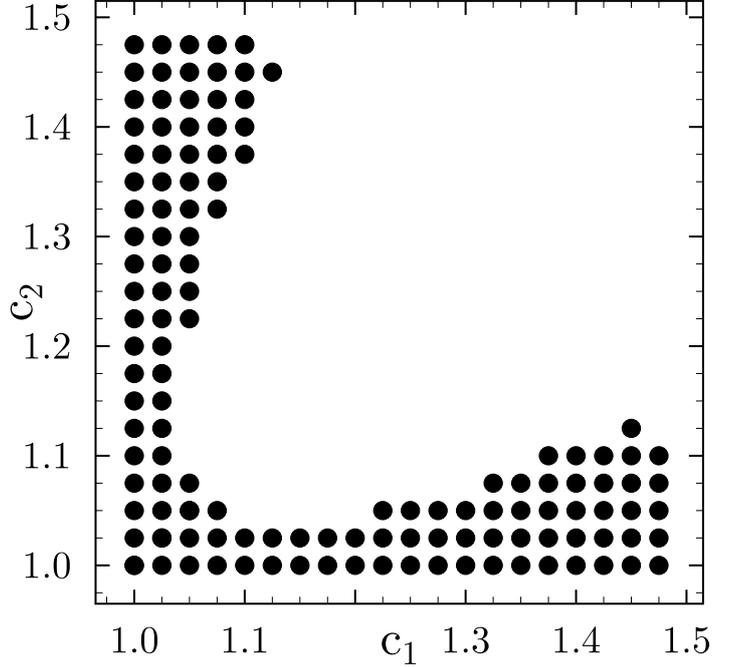


Рис. 3. Область значений параметров растяжения, при которых ОЦК решетка устойчива.

ная ОЦК решетка устойчива при $\alpha < 3.6$, а ГЦК — при $\alpha < 1.25$. Параметр β на устойчивость не влияет, что позволяет рассмотреть предельный случай $\beta \gg 1$. Область устойчивости растянутой бинарной ОЦК решетки с $c_2 = 1$ исследована в разделе 2.4.2; при любом c_1 параметр α не превосходит 3.6. Устойчивость других бинарных решеток исследована в разделе 2.4.4. Например, если в бинарной ГЦК решетке ионов с зарядом Z_1e в три раза меньше, чем ионов с зарядом Z_2e , то она устойчива при $0.66 \leq \alpha \leq 1.38$. Решетка типа NaCl устойчива при $\alpha \geq 3.9$.

Моменты частот фононов бинарных кристаллов зависят только от параметров α и β (раздел 2.5). Для бинарных ОЦК и ГПУ решеток моменты u_1 , u_{-1} , u_{-2} и u_{in} аппроксимированы удобными формулами с точностью в три значащие цифры при $\alpha < 2.5$ и $0.6 < \beta < 2.5$.

В разделе 2.6 рассмотрен фононный спектр $\Omega_\nu(\mathbf{k})$ кристалла в однородном внешнем магнитном поле $\mathbf{B} = B\mathbf{n}$. Дисперсионное уравнение для фононного спектра в этом случае имеет вид $\det\{D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) - \Omega_\nu^2(\mathbf{k}, \mathbf{B})\delta^{\mu\lambda}\delta_{pp'} - i\Omega_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{B})\omega_B\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}n^\gamma\delta_{pp'}\} = 0$, где $\omega_B = ZeB/(Mc)$ — ионная циклотронная частота (частоты в магнитном поле обозначены как Ω_ν , а без поля — ω_ν). Поведение фононного спектра зависит от волнового вектора \mathbf{k} , направления магнитного поля \mathbf{n} и параметра $h \equiv \omega_B/\omega_p$. Зависимость мод от взаимной ориентации векторов \mathbf{k} и \mathbf{n} детально проанализирована в разделе 2.6.2 на примере ОЦК решетки. При $\mathbf{kn} \neq 0$ вблизи центра зоны Бриллюэна для низкочастотной моды $\Omega_1 \propto k^2/h$, мода 2 становится оптической, а для высокочастотной моды $\Omega_3 \approx \text{const}$, как и в отсутствие магнитного поля. При $\mathbf{kn} = 0$ и $ka < 1$ частоты акустических мод $\Omega_{1,2}$ не изменяют свою зависимость от k , причем одна из них не зависит от h , другая — пропорциональна $(1 + h^2)^{-1/2}$, а $\Omega_3^2 \approx (1 + h^2)\omega_p^2$. На устойчивость кристалла магнитное поле не влияет.

Считается, что магнитное поле направлено так ($\mathbf{n} = \mathbf{n}_{\text{min}}$), чтобы минимизировать энергию нулевых колебаний кристалла. Для ОЦК и ГЦК решеток это направление “на ближайшего соседа”. Это же относится и к растянутым ОЦК и ГЦК решеткам, причем для разных c_1 и c_2 ближайшими соседями являются разные ионы. Поведение трех из шести мод ГПУ решетки в магнитном поле схоже с поведением мод ОЦК решетки, другие три моды остаются оптическими. Энергия нулевых колебаний ГПУ решетки минимальна, когда вектор магнитного поля направлен на “четвертого ближайшего соседа”, при любом h величина $u_1(h, \mathbf{n}_{\text{min}})$ ОЦК решетки меньше, чем $u_1(h, \mathbf{n}_{\text{min}})$ для ГЦК и ГПУ решеток.

Раздел 2.7 посвящен фононному спектру ОЦК и ГПУ решеток с учетом поляризации электронного фона (приближение Томаса-Ферми). В этих решетках при $\kappa_{\text{TF}}a > 0$ оптическая мода (с наибольшей частотой для ГПУ решетки) становится акустической вблизи центра зоны Бриллюэна, осталь-

ные моды существенно не меняются. Изменение оптической моды приводит к изменению моментов u_n . Так, u_1 убывает $\propto (\kappa_{\text{TFA}})^{-2}$. Для ОЦК решетки в разделе 2.7.2 моменты u_1 и u_{-1} рассчитаны с помощью модели Янковича. Они слабо (доли процента) и немонотонно зависят от x_T ; их отличие от моментов, рассчитанных с помощью модели Томаса-Ферми, также составляет доли процента.

Устойчивость кристалла с поляризованным электронным фоном проанализирована в разделе 2.7.3. Рассмотрена деформация ОЦК решетки, при которой вектор прямой решетки $0.5a_1(n_1, n_2, n_3)$ переходит в вектор $0.5a_1(n_1 + n_2\epsilon/2, n_2 + n_1\epsilon/2, n_3 + n_3\epsilon^2/4)$, где n_1, n_2 и n_3 — некоторые целые числа, а ϵ — параметр, характеризующий степень деформации. Для этой деформации найдена зависимость максимального разрушающего напряжения от κ_{TFA} при $T = 0$. При $\kappa_{\text{TFA}} = 4/7$ величина $\sigma^{\text{max}} = 0.019349nZ^2e^2/a$. Это значение хорошо согласуется с результатами численного моделирования (в работе [9] было получено, что $\sigma^{\text{max}} = 0.0195nZ^2e^2/a$). Для других κ_{TFA} величина σ^{max} ранее не исследовалась. Оказалось, что при малых κ_{TFA} она меняется достаточно слабо. При $\kappa_{\text{TFA}} = 0$ получено $\sigma^{\text{max}} = 0.019912nZ^2e^2/a$, а при $\kappa_{\text{TFA}} = 1.3$ имеем $\sigma^{\text{max}} = 0.0165615nZ^2e^2/a$. Недеформированная ОЦК решетка теряет устойчивость при $\kappa_{\text{TFA}} = 4.76$; ГЦК и ГПУ решетки устойчивы при $\kappa_{\text{TFA}} = 5$, а при больших κ_{TFA} не исследовались.

В разделе 2.8 рассмотрен фононный спектр кристалла в однородном магнитном поле с учетом поляризации электронного фона. Исследовано дисперсионное уравнение при $ka \ll 1$; показано, что при $h > 0$ частота одной из оптических мод ОЦК решетки становится $\propto k^2$, а две другие моды остаются акустической и оптической, соответственно, вне зависимости от направления магнитного поля. Направление поля, при котором момент u_1 минимален, не зависит от κ_{TFA} .

Третья глава посвящена термодинамическим свойствам кулоновских кристаллов; результаты этой главы опубликованы в работах [A1–A5, A9].

Термодинамические свойства однокомпонентных кристаллов вычислены и аппроксимированы удобными формулами в разделе 3.1. В температурной

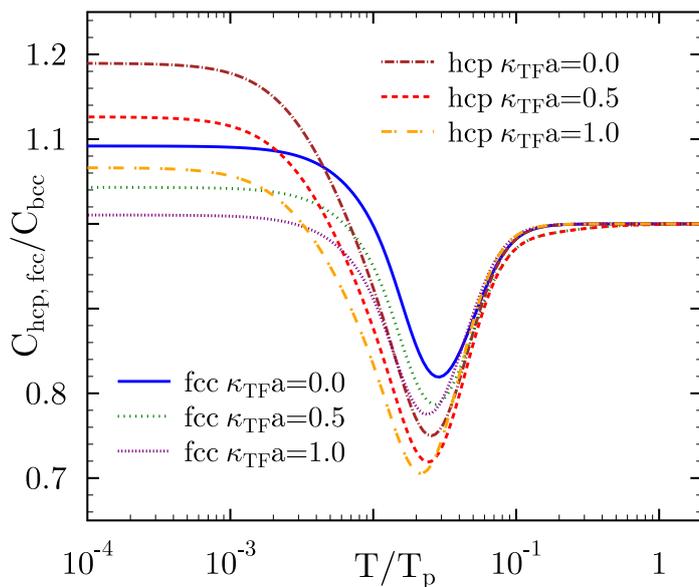


Рис. 4. Отношение теплоемкостей ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток.

зависимости любой термодинамической величины (в основном, рассмотрены свободная энергия Гельмгольца $F \equiv 3NT \langle \ln(1 - e^{-w}) \rangle$ и теплоемкость $C \equiv 3N \langle w^2 / (4 \sinh^2(w/2)) \rangle$, где $w \equiv \hbar\omega/T$) можно выделить два предельных случая. При высоких температурах $T \gg T_p$, когда все моды вносят вклад в термодинамические величины, выполняется закон Дюлонга-Пти: $F \approx 3NT(u_{\text{ln}} - \ln t) - 1.5N\omega_p u_1$ и $C \approx 3N$, где $t \equiv T/T_p$, а $T_p \equiv \hbar\omega_p$ — плазменная температура. При низких температурах $T \ll T_p$, когда возбуждены и вносят вклад в термодинамику только акустические моды вблизи центра зоны Бриллюэна, имеет место закон Дебая: $F \approx NTH_0 t^3/12$ и $C \approx NH_0 t^3$, где H_0 не зависит от температуры. Вычисления дают $H_0^{\text{bcc}} \approx 2512.0$, $H_0^{\text{fcc}} \approx 2744$, и $H_0^{\text{hcp}} \approx 2988.2$. Различия между термодинамическими функциями ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток существенны, но не превосходят 25%. Это показано на рис. 4, где представлена температурная зависимость отношений теплоемкостей (при $\kappa_{\text{TFA}} = 0$). Кроме этого, в разделе 3.1 исследован вклад электронов в полную теплоемкость вещества и проведено сравнение точных расчетов с использовавшейся ранее моделью.

В разделе 3.2 рассчитаны термодинамические функции бинарных ОЦК и ГЦК решеток. Помимо температуры, они зависят от параметров α и β . При $T \ll T_s$ получено $C = H(\alpha, \beta)N(T/T_s)^3$, где $T_s \equiv \hbar\omega_s$.

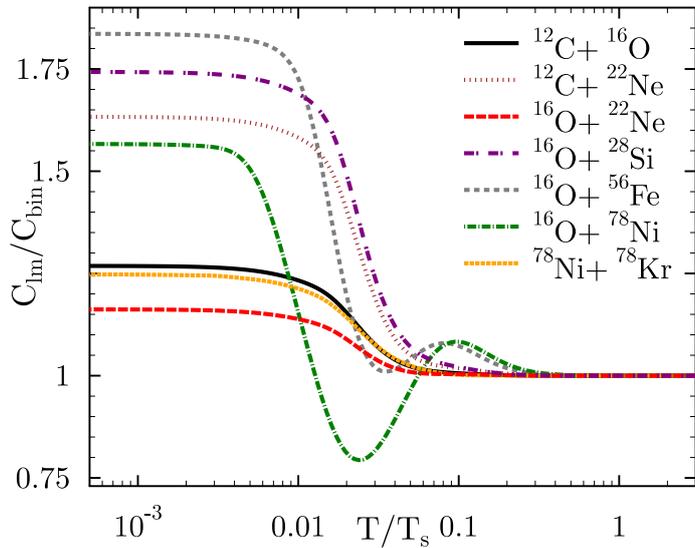


Рис. 5. Точность выполнения правила линейного смешивания для некоторых смесей.

Точность выполнения правила линейного смешивания для теплоемкости бинарной ОЦК решетки исследована в разделе 3.3; для некоторых смесей она проиллюстрирована на рис. 5, где C_{lm} — теплоемкость, рассчитанная для линейного смешивания, а C_{bin} — точный результат. Как видно из рисунка, при низких температурах расхождение может достигать более 80%. С другой стороны, при $T \lesssim 0.01T_s$ и $\rho \sim 10^6 - 10^8$ г см⁻³ основной вклад в полную теплоемкость вносят электроны, и фононной теплоемкостью решетки можно пренебречь.

Зависимость $H(\alpha, \beta)$ от α и β аппроксимирована удобными аналитическими формулами. При $\beta \gg 1$ зависимость теплоемкости от температуры имеет горизонтальный участок при $C/N = 1.5$. Подобное происходит при температурах, при которых все три низкочастотные моды полностью возбуждены, а высокочастотные все еще экспоненциально подавлены и вклад в теплоемкость не вносят.

Точность выполнения правила линейного смешивания для теплоемкости бинарной ОЦК решетки

Термодинамическим свойствам однокомпонентных кристаллов в магнитном поле посвящен раздел 3.4. Согласно теореме Бора-ван Левена, в высокотемпературном классическом пределе магнитное поле на термодинамику кристалла не влияет. При низких температурах термодинамические величины определяются поведением самой низкочастотной моды вблизи центра зоны Бриллюэна. При $T \ll T_p/\sqrt{1+h^2}$ имеем $F \propto T^{5/2}$ и $C \propto T^{3/2}$, а если $h \gg 1$, то F и $C \propto B^{3/2}$. При высоких магнитных полях частоты разных фононов в кристалле отличаются на несколько порядков, и моды возбуждаются постепенно (в ГПУ решетке — попарно); это приводит к появлению двух плато на зависимости теплоемкости от температуры: $C/N = 1$ и $C/N = 2$.

В разделе 3.5 рассмотрены термодинамические свойства однокомпонентных кристаллов с поляризованным электронным фоном. В отсутствие магнитного поля при появлении новой акустической моды термодинамические функции кристалла существенно изменяются только при низких температурах ($C(t, \kappa_{\text{TF}}a)/C(t, 0) - 1 \propto (\kappa_{\text{TF}}a)^2$). На рис. 4 показано отношение теплоемкостей различных решеток при $\kappa_{\text{TF}}a = 0.5$ и 1. Оно имеет тот же порядок, что и при $\kappa_{\text{TF}}a = 0$. При $B > 0$ влияние поляризуемости электронного фона существенно лишь при $\kappa_{\text{TF}}a \sim 1$.

В разделе 3.6 с помощью теории возмущения для расчета спектра неупорядоченного кристалла, разработанной И.М. Лифшицем [10], определено влияние изотопных примесей на термодинамику кристаллов на примере ОЦК решетки. Когда концентрация примесных ионов мала, температурная зависимость отношения $\Delta c/c$ имеет две асимптотики: $\Delta c/c \approx \varepsilon'/(36t^2)$ при высоких температурах и $\Delta c/c = 1.5$ при низких температурах, где Δc — изменение теплоемкости кристалла на один примесный ион с массой M' , c — теплоемкость кристалла без примесей на один “основной” ион с массой M , а $\varepsilon' \equiv (M' - M)/M'$. При $M' \gg M$ даже небольшая концентрация примесей при температурах $0.01T_p \lesssim T \lesssim 0.1T_p$ может привести к значительному изменению теплоемкости. Например, 1% примесей с $M' = 11M$ увеличивает фононную теплоемкость кристалла на 40%. Аналогичное исследование проведено при произвольных концентрациях примесей и $|M' - M| \ll M$. Оказалось, что при $M' = 1.1M$ предсказания теории Лифшица с точностью в две значащие цифры совпадают с точными расчетами для бинарного кристалла.

Четвертая глава посвящена астрофизическим приложениям теории кулоновских кристаллов; результаты этой главы опубликованы в работах [А3–А5, А8–А9].

В гармоническом приближении полная энергия однокомпонентного кристалла при $T = 0$ равна $E_0 = NT_p(\Gamma_p \zeta + 1.5u_1)$, где $\Gamma_p \equiv Z^2 e^2/(a\hbar\omega_p)$. Для типичных условий в НЗ и БК параметр $\Gamma_p > 10$. Среди всех однокомпонентных решеток с изотропным давлением наименьшей полной энергией обладает

ОЦК решетка. Среди всех многокомпонентных кристаллов проведено сравнение только бинарных ОЦК и ГПУ решеток. Согласно модели из работы [11], в НЗ возможно образование бинарных кристаллов ^{80}Ni и ^{124}Mo , а также ^{56}Fe и ^{62}Ni . Для первой смеси $\alpha = 1.5$, а значит, образование бинарной ГПУ решетки невозможно. Во втором случае $\alpha \approx 1.077$, $\beta \approx 1.107$ и бинарная ОЦК решетка для такой смеси энергетически предпочтительна. Бинарная ГПУ решетка обладает минимальной энергией E_0 в крайне редких для вырожденных звезд случаях. Структурный переход между ОЦК и ГЦК решетками с поляризованным электронным фоном имеет место при $\kappa_{\text{Tf}} a > 1.066$. Энергия ГПУ решетки с поляризованным электронным фоном всегда больше полной энергии одной из двух других рассматриваемых решеток.

Для железного кристалла приближение нулевой температуры хорошо работает при $T \lesssim 180\sqrt{\rho_1}$ К, где $\rho_1 = \rho/1$ г см $^{-3}$. Влияние температурных эффектов на полную свободную энергию Гельмгольца $F^{\text{tot}} \equiv NT(\Gamma\zeta + 1.5u_1/t) + F$ рассмотрено в разделе 4.2.1 на примере однокомпонентных ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток. Показано, что при любых t и $\Gamma > 175$ выполняется неравенство $F_{\text{bcc}}^{\text{tot}} < F_{\text{fcc}}^{\text{tot}} < F_{\text{hcp}}^{\text{tot}}$. Это же неравенство выполняется и в магнитном поле, если предположить, что оно направлено так, что энергия нулевых колебаний минимальна. В данном приближении магнитное поле кристаллическую структуру коры нейтронной звезды не изменяет. При высоких температурах полная свободная энергия бинарного ОЦК кристалла всегда меньше, чем бинарного ГПУ кристалла. При низких температурах $T < 0.01T_s$ возможен переход к бинарной ГПУ решетке, но только для небольшого набора ионных смесей, образование которых в вырожденных звездах маловероятно (например, с $\alpha = 1.1$ и $\beta = 0.3$).

В разделе 4.3 показано, что полная энергия кристалла с поляризованным электронным фоном, описываемым моделью Томаса-Ферми, при сколь угодно большом параметре экранирования ka совпадает с полной энергией пылевого кристалла из работы [6], и полученные результаты могут быть использованы для описания пылевой плазмы в межпланетном пространстве Солнечной системы (например, [12]).

В разделе 4.4 полученные результаты для теплоемкости кристаллов использованы для исследования тепловой эволюции БК (полученные результаты носят качественный характер; рассмотрена простейшая модель БК, нед-

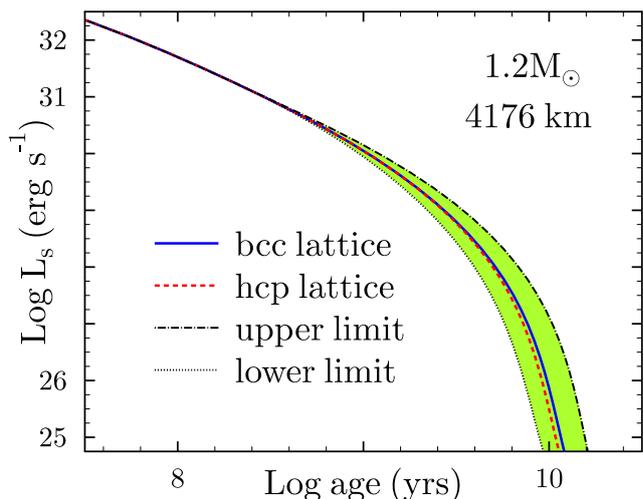


Рис. 6. Изменение светимости белого карлика со временем.

ра которого состоят только из углерода). Показано, что для БК массой $0.6M_{\odot}$ различие в типе кристаллической решетки существенно только при возрастах, превышающих возраст Вселенной. Для более массивных БК различие проявляется раньше. На рис. 6 показана эволюция светимости $L_s(t)$ БК с массой $1.2M_{\odot}$. При возрасте карлика 10^{10} лет вариация светимости за счет рассмотренных эффектов (тип кристаллической решетки, поправки к правилу линейного смешивания и поляризация электронного фона) не превосходит 20%. Всевозможные кривые остывания лежат в закрашенной области на рис. 6 (нижняя кривая описывается теплоемкостью $C_{\text{lower}} = C_1 C_{\text{bcc}}$, а верхняя — $C_{\text{upper}} = C_{\text{bcc}}/C_1$, где $C_1 = 1/3/(1 + 100 \exp(-20t + 1)) + 2/3$). Так как увеличение теплоемкости приводит к уменьшению скорости остывания, то БК, образованный кристаллами с ГПУ решеткой, остывает немного быстрее, чем с ОЦК решеткой, однако полная разница между двумя кривыми остывания не превышает нескольких процентов.

В **Заключении** сформулированы основные результаты работы:

- Получены аналитические выражения, позволяющие найти электростатическую энергию и фононный спектр любой упорядоченной многокомпонентной кристаллической решетки.
- Исследован вопрос о том, формирование какой кристаллической решетки энергетически выгоднее при разных физических условиях. Показано, что при температурах и плотностях, характерных для вырожденных звезд, наименьшей энергией среди всех кулоновских кристаллов обладает ОЦК решетка.
- Изучены условия, при которых кулоновские решетки устойчивы относительно малых колебаний ионов. Так, бинарная ОЦК решетка устойчива при $\alpha < 3.6$ (α — отношение зарядов ионов, образующих решетку), а бинарная ГПУ решетка при $\alpha < 1.25$. Показано, что максимальное напряжение, выдерживаемое корой нейтронной звезды, как и его поведение при деформации, существенно зависят от взаимной ориентации направления деформации и кристаллографических осей, а также от типа решетки. Так, ОЦК решетка может растягиваться в 1.5 раза вдоль одного из ребер, тогда как сжатие в этом же направлении возможно лишь на 6.5%.
- Показано, что правило линейного смешивания для электростатической энергии и фононной теплоемкости кристаллов выполняется далеко не всегда. С другой стороны, его можно успешно использовать для расчета эффективного модуля сдвига.
- Изменение теплоемкости кулоновского кристалла за счет изотопных примесей рассчитано с помощью теории возмущения для фононного спектра, надежность расчетов подтверждена на примере бинарного кристалла.
- Проанализировано влияние неопределенности в типе кристаллической ре-

шетки и других факторов на тепловую эволюцию белых карликов.

Публикации по теме диссертации

- A1** Kozhberov A.A., Baiko D.A. Physical features of binary Coulomb crystals. Madelung energy, collective modes and phonon heat capacity // *Contr. Plasma Ph.*, 2012. – No 2, P. 153–156.
- A2** Kozhberov A.A., Baiko D.A. Coulomb crystals with isotopic impurities // *Contr. Plasma Ph.*, 2014. – No 10, P. 859–867.
- A3** Kozhberov A.A., Baiko D.A. Coulomb crystal mixtures in white dwarf cores and neutron star crusts // *Phys. of Plasmas*, 2015. – Vol. 22, id. 092903.
- A4** Kozhberov A.A., Baiko D.A. Thermodynamic functions of the hcp Coulomb crystal lattice // *Ap&SS*, 2015. – Vol. 359, id. 10.
- A5** Kozhberov A.A. Thermodynamic properties of the magnetized Coulomb crystal lattices // *Ap&SS*, 2016. – Vol. 361, id. 256.
- A6** Baiko D.A., Kozhberov A.A. Anisotropic crystal structure of magnetized neutron star crust // *MNRAS*, 2017. – Vol. 470, P. 517–521.
- A7** Baiko D. A., Kozhberov A. A. Phonons in a magnetized Coulomb crystal of ions with polarizable electron background // *Phys. of Plasmas*. 2017. — Vol. 24. id. 112704.
- A8** Kozhberov A. A. Thermal evolution of old white dwarfs // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2017. — Vol. 929. id. 012012.
- A9** Kozhberov A. A. Properties of magnetized Coulomb crystals of ions with polarizable electron background // *Phys. of Plasmas*. 2018. — Vol. 25. id. 062706.

Список литературы

- [1] Шапиро Л.С., Тьюкольски С.А. Черные дыры, белые карлики и нейтронные звезды. Москва: Мир, 1985. Том 2.
- [2] Haensel P., Potekhin A.Y., Yakovlev D.G. *Neutron Stars 1: Equation of State and Structure*. Springer, New York, 2007. Vol. 326 of *Astrophysics and Space Science Library*.
- [3] Kanaan A., Nitta A., Winget D.E. et al. Whole Earth Telescope observations of BPM 37093: A seismological test of crystallization theory in white dwarfs // *A&A*. 2005. — Vol. 432. P. 219–224.
- [4] Igarashi T., Iyetomi H. Phase characteristics and elastic properties of binary Coulomb compounds // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2003. — Vol. 36. P. 6197–6206.
- [5] Chabrier G., Ashcroft N.W. Linear mixing rule in screened binary ionic mixtures // *Phys. Rev. A*. 1990. — Vol. 42. P. 2284–2291.
- [6] Hamaguchi S., Farouki R.T., Dubin D.H.E. Triple point of Yukawa systems // *Phys. Lett. E*. 1997. — Vol. 56. P. 4671–4682.

- [7] Jancovici B. On the relativistic degenerate electron gas // *Nuovo Cim.* 1962 — Vol. 25. P. 428–455.
- [8] Horowitz C.J., Kadau K. Breaking Strain of Neutron Star Crust and Gravitational Waves // *Phys. Rev. Lett.* 2009. — Vol. 102. id. 191102.
- [9] Chugunov A.I., Horowitz C.J. Breaking stress of neutron star crust // *MNRAS.* 2010. — Vol. 407. P. L54-L58.
- [10] Лифшиц И.М., Степанова Г.И. О спектре колебаний неупорядоченных кристаллических решеток // *ЖЭТФ.* 1956. — Т. 30. С.938–946.
- [11] Chamel N., Fantina A.F. Binary and ternary ionic compounds in the outer crust of a cold nonaccreting neutron star // *Phys. Lett. C.* 2016. — Vol. 94. id. 065802.
- [12] Хораньи М., Хавнес О., Морфилл Е. Пылевая плазма в Солнечной Системе // *Комплексная и пылевая плазма из лаборатории в космос / Под ред. Фортова В.Е., Морфилла Г.Е.* Москва: Физматлит, 2012.