

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ ИМ. А.Ф. ИОФФЕ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

Кожберов Андрей Андреевич

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

Специальность 01.03.02 — астрофизика и звездная астрономия

Диссертация
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
кандидат физико-математических наук
Байко Д. А.

Санкт-Петербург
2018

Оглавление

Введение	5
1 Кулоновские кристаллы и их электростатические свойства	11
1.1 Упорядоченные структуры в неидеальной плазме	11
1.1.1 Упорядоченные структуры в неидеальной лабораторной плазме	11
1.1.2 Упорядоченные структуры в недрах вырожденных звезд	13
1.2 Основной формализм	17
1.3 Энергия Маделунга однокомпонентного кулоновского кристалла	20
1.3.1 Энергия Маделунга недеформированных однокомпонентных решеток	21
1.3.2 Энергия Маделунга деформированных решеток	22
1.3.3 Энергия Маделунга деформированных решеток, рассчитанная по теории упругости	25
1.3.4 Энергия Маделунга деформированных решеток с гексагональной сингонией	28
1.3.5 Электростатическое давление в деформированных кристаллах	29
1.4 Энергия Маделунга многокомпонентного кулоновского кристалла	31
1.4.1 Энергия Маделунга бинарных ПК2 и Г2 решеток	32
1.4.2 Энергия Маделунга бинарной ОЦР решетки	34
1.4.3 Электростатическое давление и модули упругости ПК2 решетки	35
1.4.4 Энергия Маделунга бинарной ГЦР решетки	37
1.4.5 Электростатическое давление и модули упругости бинарной ГЦК решетки	39
1.4.6 Энергия Маделунга бинарных решеток NaCl и кристобалита	39
1.4.7 Энергия Маделунга бинарных решеток с гексагональной сингонией	40
1.4.8 Энергия Маделунга трехкомпонентных решеток	43
1.4.9 Энергия Маделунга решетки Дайсона	45
1.5 Правило линейного смешивания для электростатической энергии многокомпонентных кулоновских кристаллов	46
1.6 Энергия статического кулоновского кристалла с поляризуемым электронным фоном	50
1.6.1 Случай слабого экранирования в модели Томаса-Ферми	51
1.6.2 Случай сильного экранирования в модели Томаса-Ферми	52
1.6.3 Случай слабого экранирования в модели Янковичи	54

1.7	Выводы к первой главе	57
2	Динамическая матрица и фононные моды	60
2.1	Динамическая матрица кулоновских кристаллов	60
2.2	Фононный спектр и фононные свойства однокомпонентных кулоновских кристаллов	63
2.2.1	Фононный спектр ОЦК решетки	64
2.2.2	Фононный спектр ПК решетки	69
2.2.3	Фононный спектр ГЦК решетки	70
2.2.4	Фононный спектр ГПУ решетки	71
2.2.5	Фононный спектр гексагональной решетки	73
2.3	Устойчивость деформированных кристаллов	73
2.3.1	Устойчивость и моменты ОЦР и ГЦР решеток	73
2.3.2	Устойчивость других деформированных решеток	75
2.3.3	Устойчивость коры нейтронной звезды	76
2.4	Фононный спектр и устойчивость бинарных кулоновских кристаллов	78
2.4.1	Фононный спектр ПК2 решетки	78
2.4.2	Устойчивость бинарной ОЦР решетки	80
2.4.3	Фононный спектр Г2 решетки	81
2.4.4	Устойчивость других бинарных решеток	82
2.5	Моменты бинарных кулоновских кристаллов	83
2.6	Фононный спектр кулоновских кристаллов в однородном внешнем магнитном поле	86
2.6.1	Дисперсионное уравнение для кулоновского кристалла в однородном внешнем магнитном поле	87
2.6.2	Фононный спектр ОЦК решетки в магнитном поле	87
2.6.3	Моменты ОЦК решетки в магнитном поле	90
2.6.4	Первый момент фононного спектра ГЦК, ОЦР и ГЦР решеток в магнитном поле	92
2.6.5	Фононный спектр и первый момент ГПУ решетки в магнитном поле	93
2.7	Фононный спектр и моменты кулоновских кристаллов с учетом поляризации электронного фона	95
2.7.1	Фононный спектр кулоновских кристаллов с учетом поляризации электронного фона	95
2.7.2	Моменты кулоновских кристаллов с учетом поляризации электронного фона	97
2.7.3	Устойчивость кристаллов Юкавы	100
2.8	Фононный спектр кулоновских кристаллов во внешнем магнитном поле с учетом поляризации электронного фона	100
2.9	Выводы ко второй главе	104

3	Термодинамические функции кулоновских кристаллов	108
3.1	Термодинамические свойства однокомпонентных кулоновских кристаллов . . .	108
3.1.1	Теплоемкость ОЦР и ГЦР решеток	112
3.2	Термодинамические свойства бинарных кулоновских кристаллов	113
3.3	Точность выполнения правила линейного смешивания для теплоемкости ПК2 решетки	117
3.4	Термодинамические свойства однокомпонентных кулоновских кристаллов во внешнем магнитном поле	119
3.5	Термодинамические свойства однокомпонентных кулоновских кристаллов с по- ляризованным электронным фоном	122
3.5.1	Термодинамические свойства кулоновских кристаллов с поляризован- ным электронным фоном в отсутствие магнитного поля	122
3.5.2	Термодинамические свойства кулоновских кристаллов с поляризован- ным электронным фоном во внешнем магнитном поле	124
3.6	Изотопные примеси	125
3.7	Выводы к третьей главе	129
4	Кулоновские кристаллы в недрах вырожденных звезд	132
4.1	Энергия кулоновских кристаллов при $T = 0$	132
4.1.1	Полная энергия кулоновских кристаллов при $T = 0$ с однородным элек- тронным фоном	132
4.1.2	Полная энергия кристалла Юкавы при $T = 0$	134
4.2	Полная энергия кулоновских кристаллов при $T > 0$ с однородным электронным фоном	135
4.2.1	Полная энергия однокомпонентных кулоновских кристаллов при $T > 0$	135
4.2.2	Полная энергия бинарных кулоновских кристаллов при $T > 0$	136
4.2.3	Полная энергия кулоновского кристалла в магнитном поле при $T > 0$.	137
4.3	Полная энергия кристаллов Юкавы при $T > 0$	138
4.3.1	Полная свободная энергия кристалла Юкавы при $T \gg T_p$	139
4.3.2	Полная свободная энергия кристалла Юкавы при $T \lesssim T_p$	141
4.4	Остывание белых карликов	142
4.5	Выводы	147
	Заключение	149
	Список сокращений	151
	Литература	152

Введение

Актуальность темы исследования

Представляемая работа посвящена изучению свойств кулоновских кристаллов ионов, в основном, применительно к вырожденным звездам (белым карликам и нейтронным звездам).

Кулоновские (или вигнеровские, или плазменные) кристаллы хорошо известны как в физике твердого тела, так и в физике сильнонеидеальной плазмы. В данном случае они представляют собой систему ионов, упорядоченных в кристаллическую решетку и погруженных в электронный газ. Ионы взаимодействуют друг с другом кулоновскими силами, и в целом их электростатическое взаимодействие при наличии электронов оказывается притягивательным; оно стремится локализовать ионы. Электронный газ делает систему в целом электронейтральной и рассматривается как сплошная среда, которая может поляризоваться (быть локально неоднородной) под влиянием ионов.

Изучаемые ниже кулоновские кристаллы отличаются от обычных “земных” кристаллов заданным, (почти) кулоновским потенциалом взаимодействия и слабонеоднородным электронным фоном. В обычных кристаллах важны химические связи электронов, ведущие к наличию ионного остова (электронных оболочек) и сильному отличию потенциала взаимодействия ионов от чисто кулоновского взаимодействия точечных зарядов. В этом смысле кулоновские кристаллы ионов проще; их строение проще изучать численными методами. Однако наличие кулоновского дальнего действия привносит в свойства кулоновских кристаллов ионов свою специфику и требует отдельного рассмотрения.

С точки зрения физики плазмы кулоновские кристаллы — эта особая разновидность плазмы. Причем очень часто о такой системе говорят как о плазме ионов, подразумевая, конечно, наличие электронов. Плазму ионов одного сорта называют однокомпонентной, двух сортов — двухкомпонентной (бинарной), и т.д. Ионы в кулоновской однокомпонентной плазме характеризуются параметром Γ , равным отношению типичной кулоновской энергии к тепловой,

$$\Gamma \equiv Z^2 e^2 / (aT). \quad (1)$$

Здесь e — абсолютное значение заряда электрона, T — температура¹, $a \equiv (4\pi n/3)^{-1/3}$ — так называемый радиус ионной сферы (типичное расстояние между ионами), n — концентрация ионов, а Z их зарядовое число. Здесь и далее, если не оговорено особо, ионы считаются полностью ионизованными. При достаточно низкой плотности и/или высокой температуре параметр $\Gamma \lesssim 1$; в этом случае ионы образуют почти идеальный газ. С ростом плотности

¹В приведенных формулах используется система единиц, в которых постоянная Больцмана $k_B = 1$.

(с ростом n) и/или уменьшением температуры Γ растет. При $\Gamma \sim 1$ плазма ионов становится умеренно неидеальной, а при $\Gamma \gg 1$ – сильно неидеальной (тепловая энергия ионов становится много меньше модуля энергии электростатического притяжения). При тех условиях, которые изучаются ниже, переход от слабонеидеальной к сильнонеидеальной плазме происходит плавно. До тех пор, пока $\Gamma < 175$, ионы образуют так называемую кулоновскую жидкость, а при $\Gamma \approx 175$ жидкость превращается в *кулоновский кристалл* (например, [1]). Кристаллизация двух и многокомпонентных смесей ионов изучена гораздо хуже.

Кулоновские кристаллы ионов с неизбежностью образуются в астрофизических условиях, прежде всего, в белых карликах и нейтронных звездах.

Белые карлики представляют собой компактные звезды с массой не более 1.4 массы Солнца (M_{\odot}), но с радиусом примерно в 100 раз меньше солнечного (например, [2]). Они образуются в конце термоядерной эволюции обычных, не слишком массивных звезд (после схода с главной последовательности и прохождения стадии красных гигантов). Плотности в центральных слоях массивных белых карликов превосходят 10^9 г/см³. В белом карлике принято выделять тонкую оболочку (включающую атмосферу звезды), под которой находится обширное вырожденное ядро. В оболочке электроны невырожденные, а ионы могут быть в разных состояниях, в том числе, и не полностью ионизованными. По мере остывания белого карлика оболочка становится все тоньше.

Вещество в ядрах (в недрах) белых карликов состоит из вырожденного электронного газа и ионизированных атомов (зачастую полностью). В ядрах массивных белых карликов электронный газ может быть релятивистским. Ионы, в основном, представлены ядрами гелия ${}^4\text{He}$ (в маломассивных карликах), углерода ${}^{12}\text{C}$ и кислорода ${}^{16}\text{O}$ (в более массивных). В зависимости от эволюции белого карлика в его недрах могут встречаться и другие ионы. При не слишком высокой температуре плазма ионов становится сильно неидеальной, а по мере остывания может превратиться в кулоновский кристалл. Быстрее всего затвердевают более массивные белые карлики, причем этот процесс начинается из центра и распространяется к периферии ядра (например, [3]).

Другим конечным продуктом эволюции обычных звезд являются *нейтронные звезды*² — звезды с массой $M \sim 1.4M_{\odot}$ и радиусом $R \sim 10$ км. По современным представлениям (например, [1]), кулоновские кристаллы формируются в коре нейтронной звезды — в оболочке толщиной около километра и массой около 1% массы звезды. Кора, в основном, состоит из электронов и ионов (атомных ядер). Ее можно разделить на внешнюю и внутреннюю. Внешняя кора, или внешняя оболочка, — неоднородна. Под тонкой (сантиметры или десятки сантиметров) атмосферой звезды может быть слой газообразных или жидких ионов (так называемый *океан*), а под ним находится твердая кора — кулоновский кристалл атомных ядер. По мере остывания звезды толщина океана уменьшается. С ростом плотности электронный газ во внешней коре быстро становится вырожденным и релятивистским.

Внешняя кора простирается до плотности нейтронизации $\rho_d \approx (4 - 6) \times 10^{11}$ г/см³, при

²Кроме того, обычные массивные звезды могут превращаться в черные дыры, которые в данной работе не рассматриваются.

которой в веществе появляются свободные, вырожденные (и, скорее всего, сверхтекучие) нейтроны. Внутренняя кора простирается до плотности $\rho = 0.5\rho_0 \approx 1.5 \times 10^{14}$ г/см³ (примерно половина стандартной ядерной плотности) и состоит из атомных ядер (с сильным избытком нейтронов), электронов и свободных нейтронов. Атомные ядра по-прежнему образуют кулоновский кристалл, но теперь с электронно-нейтронным фоном. Вблизи дна внутренней коры ($\rho \lesssim 0.5\rho_0$) атомные ядра (как и кулоновские кристаллы) исчезают. Глубже находится обширное и массивное ядро нейтронной звезды, содержащее сверхплотную жидкость. В представляемой работе, в основном, изучаются кристаллы во внешней коре нейтронных звезд. Однако многие свойства внутренней коры (например, электростатические или упругие свойства кристаллов [1]) описываются точно теми же формулами, что и внешней.

Изучение свойств коры и кулоновских кристаллов в коре — важный и необходимый элемент исследований внутреннего строения нейтронных звезд. Состав коры (типы атомных ядер) достоверно не известен, и может сильно зависеть от эволюции конкретной звезды (например, [4, 5]). Кора тесно связана со множеством различных астрофизических проявлений нейтронных звезд: пульсарными глитчами (например, [6]), квазипериодическими осцилляциями мягких гамма-репитеров (например, [7]), излучением гравитационных волн (например, [8, 9]) и пр.

Таким образом, исследование структуры и свойств вещества в недрах вырожденных звезд несомненно актуально. Оно содержит множество нерешенных задач, требующих детального теоретического изучения. Реалистические модели сверхплотного вещества необходимы для правильной интерпретации различных наблюдательных проявлений нейтронных звезд и белых карликов.

Цели и задачи диссертационной работы

Целью диссертационной работы являлось изучение электростатических, фононных и термодинамических свойств различных кулоновских кристаллов в белых карликах и нейтронных звездах. 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 полученных 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 белых карликов и нейтронных звезд 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 нейтронных звездах, вспышки сверхновых типа Ia при взрывах массивных белых карликов), сейсмологию, сбои периодов пульсаров, гравитационное излучение вращающихся нейтронных звезд с деформированной корой и пр.

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

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.

Публикации

Результаты диссертации получены в период с 2010 по 2018 год и опубликованы в девяти статьях в ведущих международных рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК.

1. Kozhberov A. A., Baiko D. A. Physical features of binary Coulomb crystals. Madelung energy, collective modes and phonon heat capacity // *Contr. Plasma Ph.* 2012. — Vol. 52. P. 153-156.
2. Kozhberov A. A., Baiko D. A. Coulomb crystals with isotopic impurities // *Contr. Plasma Ph.* 2014. — Vol. 54. P. 859-867.
3. 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.
4. Kozhberov A. A., Baiko D. A. Thermodynamic functions of the hcp Coulomb crystal lattice // *Ap&SS.* 2015. — Vol. 359. id. 10
5. Kozhberov A. A. Thermodynamic properties of the magnetized Coulomb crystal lattices // *Ap&SS.* 2016. — Vol. 361. id. 256.
6. Baiko D. A., Kozhberov A. A. Anisotropic crystal structure of magnetized neutron star crust // *MNRAS.* 2017. — Vol. 470. P. 517-521.
7. 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.
8. Kozhberov A. A. Thermal evolution of old white dwarfs // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2017. — Vol. 929. id. 012012.

9. Kozhberov A. A. Properties of magnetized Coulomb crystals of ions with polarizable electron background // Phys. of Plasmas. 2018. — Vol. 25. id. 062706.

Также имеется ряд публикаций в сборниках тезисов конференций.

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.

Глава 1

Кулоновские кристаллы и их электростатические свойства

1.1 Упорядоченные структуры в неидеальной плазме

Опишем кратко историю исследования упорядоченных систем в неидеальной плазме.

В 1934 году Вигнер [10] теоретически показал, что при низких температурах электроны в поле положительного, равномерно распределенного заряда ионов могут образовать упорядоченную структуру. Уже спустя год вышла работа Фукса, в которой он использовал теорию Вигнера для расчета энергии металлической меди [11, 12]. Среди пионерских работ того времени отметим цикл статей 1940-42 годов Борна и др., посвященных устойчивости кристаллических решеток разного типа относительно малых колебаний [13], а также его книгу в соавторстве с Кунь Хуаном [14]. В дальнейшем модель *вигнеровского кристалла* получила заметное развитие в физике плазмы и в других областях физики (например, [15]), в частности, в теории твердого тела (например, [16]).

1.1.1 Упорядоченные структуры в неидеальной лабораторной плазме

За последние пятьдесят лет было проведено множество экспериментов по поиску и изучению упорядоченных структур в неидеальной плазме. Впервые вигнеровский кристалл электронов обнаружен в эксперименте 1979 года по исследованию двумерной системы электронов на поверхности жидкого гелия, в ходе которого при $\Gamma \approx 140$ ¹ электроны образовывали треугольную ячеистую структуру [17, 18].

В другом эксперименте трехмерные оболочечные и объемноцентрированные кристаллические структуры ионов наблюдались при исследовании однозарядной плазмы ионов Be^+ в ловушке Пеннинга (имитирующей электронный фон), при температуре $T = 10$ мК и $\Gamma \equiv e^2/(aT) > 200$ [19, 20].

¹В этом случае $\Gamma = e^2(4\pi n_e/3)^{1/3}/T$.

Многочисленные эксперименты по поиску фазовых переходов жидкость – кристалл в веществах, сжатых ударными волнами, к сожалению, пока не дали положительных результатов, несмотря на теоретические предсказания (например, [21]).

Активные исследования *пылевой плазмы*, состоящей из частиц микронных размеров (“пылинок”) с зарядовым числом $Z \sim 100 - 1000$, ионов и электронов (их концентрация гораздо больше концентрации пылинок), ведутся достаточно давно, с двадцатых годов прошлого века (например, [15]). Упорядоченные системы пылевых частиц (диаметром несколько мкм) впервые удалось наблюдать лишь в середине 90-х годов в плазме высокочастотного разряда [22, 23, 24, 25]. Эти структуры образуются в приэлектродной области разряда. Пылевые частицы левитируют в прикатодной области вследствие равновесия между электростатической силой и силой тяжести. Благодаря большому заряду пылинок потенциальная энергия электростатического взаимодействия между ними велика. Следовательно, значительно легче реализуется неидеальность пылинок, и оказывается возможным появление дальнего порядка. Сформировавшаяся структура обычно имеет гексагональную симметрию в плоскости, перпендикулярной силе тяжести [26].

В сильнонеидеальных плазменно-пылевых системах обнаружены не только гексагональные, но и орторомбические, объемноцентрированные и гранецентрированные кубические кристаллические решетки [15]. В земных условиях плазменно-пылевые кристаллы из-за силы тяжести анизотропны, что не позволяет строго сопоставить экспериментальные данные с теоретическими расчетами трехмерных систем². Однако ряд качественных экспериментальных результатов удалось подтвердить теоретически с помощью простой модели с экспоненциально экранированным кулоновским потенциалом,

$$U(r) = Z^2 e^2 \exp(-r/\lambda_D)/r, \quad (1.1)$$

где Z — зарядовое число пылинки и λ_D — радиус экранирования³ [21].

Данная модель также позволила выдвинуть пока не подтвержденное предположение о существовании структурного перехода в пылевых кристаллических системах между объемноцентрированной кубической и гранецентрированной кубической решетками [28]. Фазовая диаграмма приведена на рис. 1.1 (точки — результаты молекулярно-динамических симуляций, через них проведены соединительные линии). Образование решеток других типов в рамках данной модели не исключено, но этот вопрос никем детально не рассматривался.

²Изучение пылевой плазмы также проводились в условиях микрогравитации. В ходе эксперимента на борту МКС было обнаружено, что пылевые частицы формируют преимущественно гексагонально-подобный кристалл с содержанием небольшой фракции объемноцентрированных и гранецентрированных кубических решеток (например, [27]).

³В физике электролитов и обычной плазмы этот потенциал называется дебаевским, а радиус экранирования — дебаевским радиусом. В физике пылевой плазмы и при теоретических исследованиях систем с дальнедействующим (но экспоненциально экранированным) потенциалом он же часто называется *потенциалом Юкавы* (поскольку функционально выглядит так же, как и потенциал Юкавы в ядерной физике, не имея по сути с ядерным потенциалом Юкавы ничего общего). Здесь и ниже, следуя историческому недоразумению, при изучении кристаллов ионов и пылинок потенциалы Дебая и Юкавы означают одно и то же.

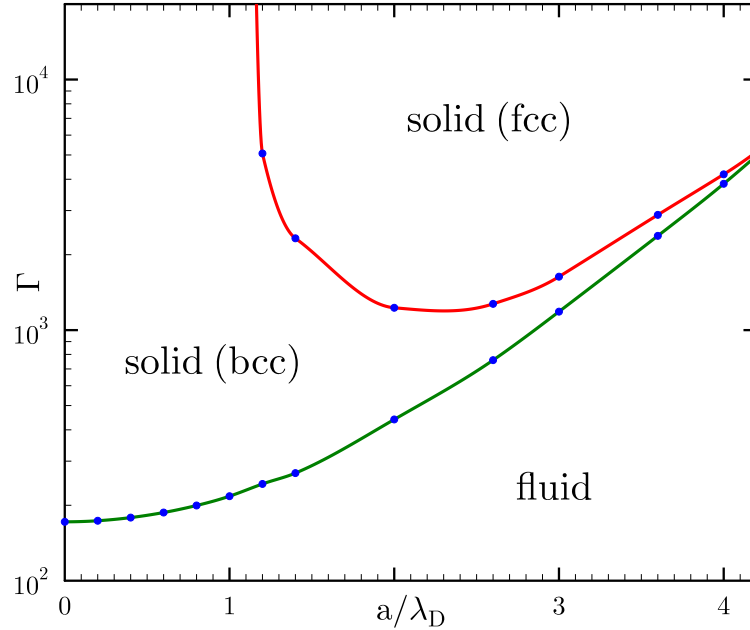


Рис. 1.1: Фазовая диаграмма пылевой плазмы (объемноцентрированная кубическая решетка обозначена как bcc, а гранецентрированная кубическая — как fcc). Детали см. в главе 4. Рисунок сделан на основе данных из работы [28].

Интерес именно к этим двум решеткам, по всей видимости, восходит к работе Фукса [11] и эксперименту Вильямса-Крандалла 1974 года [29], где с помощью брэгговского рассеяния лазерного излучения было обнаружено, что система заряженных полистироловых шариков при низких концентрациях имеет объемноцентрированную кубическую структуру, а при высоких — гранецентрированную кубическую.

Образование пылевых структур из микрочастиц в космосе возможно в туманностях, планетарных кольцах, хвостах комет, а также у спутников планет (например, [30]).

1.1.2 Упорядоченные структуры в недрах вырожденных звезд

Согласно современным представлениям, упорядоченные системы ионов могут образовываться в недрах тяжелых планет типа Юпитера, в вырожденных ядрах красных гигантов и сверхгигантов, а также во внутренних слоях достаточно холодных вырожденных звезд: белых карликов и нейтронных звезд (например, [21, 1, 2]). В недрах белых карликов это происходит на поздних стадиях их тепловой эволюции, а в нейтронных звездах — почти сразу после рождения звезды (например, [31, 2, 32, 33]). Сформированный кристалл обычно называют *кулоновским*.

Нейтронная звезда состоит из атмосферы — тонкого, не превосходящего десятков сантиметров слоя плазмы, в котором формируется тепловое излучение звезды; коры и ядра (рис. 1.2). Кулоновские кристаллы образуются в коре нейтронной звезды (см. введение).

Остановимся на внешней коре нейтронной звезды⁴. Внешняя кора — это оболочка толщи-

⁴Далее многое, что сказано о свойствах вещества во внешней коре нейтронной звезды, относится и к



Рис. 1.2: Схематическая структура нейтронной звезды.

ной несколько сотен метров, простирающаяся от основания атмосферы до слоя с плотностью ρ_d и состоящая, в основном, из вырожденного электронного газа и ионов (см. введение). Последние подвержены ионизации температурой и давлением электронов (например, [1]). В модели Томаса-Ферми полная ионизация давлением для иона с зарядовым числом Z и массовым числом A происходит при плотности $\rho \approx 22Z^2 A \text{ г/см}^3$ (например, [1]). Для углеродной и железной плазмы эта граница показана вертикальными точечными линиями на диаграмме температура-плотность, рис. 1.3.

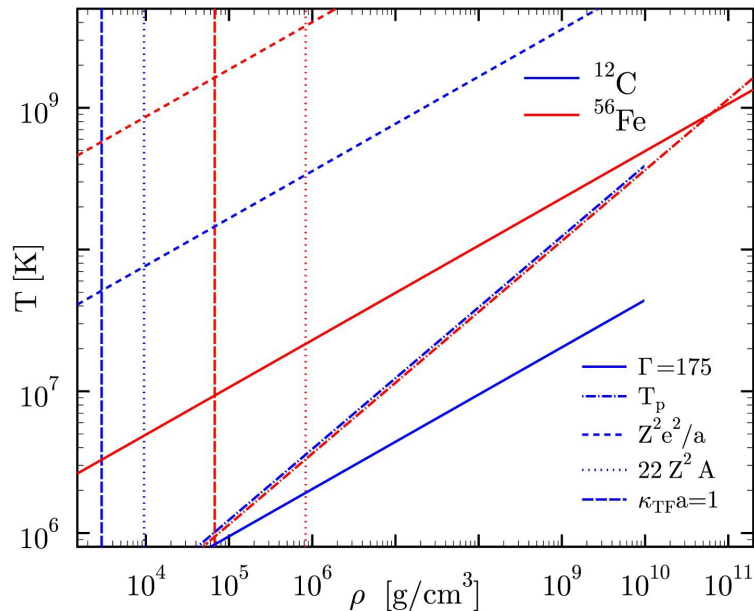


Рис. 1.3: Диаграмма температура-плотность для углеродной и железной плазмы (см. детали в тексте).

Существует несколько моделей ядерного состава вещества в коре нейтронной звезды. Большинство из них предполагает, что при фиксированной плотности вещество состоит из вещества в недрах белых карликов.

электронов и ионов одного сорта с массой M и зарядом Ze [34, 4, 35, 1]. Агрегатное состояние ионов определяет параметр $\Gamma = Z^2 e^2 / (aT)$, описанный во введении. Температура кристаллизации на рис. 1.3 показана сплошными линиями. Эта температура вычислена в приближении однородного фона электронов (потенциал взаимодействия между ионами чисто кулоновский, фон однородный) и без учета квантовых поправок, то есть при условии, что температура вещества больше *плазменной температуры ионов* $T_p \equiv \hbar\omega_p$, где $\omega_p \equiv \sqrt{4\pi n Z^2 e^2 / M}$ — ионная плазменная частота [36]. Температура T_p изображена штрихпунктирными кривыми. Наклонными штриховыми кривыми показана типичная температура $Z^2 e^2 / a$, при которой плазма ионов становится неидеальной. При $\rho \gtrsim 10^9$ г/см³ углерод трансформируется в более тяжелые элементы благодаря бета-захватам и ядерным реакциям. Поэтому на рис. 1.3 синие кривые обрезаны при $\rho = 10^{10}$ г/см³.

Предположение о том, что ионы в коре нейтронной звезды упорядочиваются в кристаллическую объемноцентрированную кубическую (ОЦК⁵) решетку впервые высказал Рудерман в работе [37] (см. также научно-популярную статью [38]). Его вывод был основан на том, что среди всех рассмотренных на тот момент решеток, ОЦК решетка обладала наименьшей электростатической энергией при фиксированной концентрации электронов (приближение несжимаемого электронного фона). В дальнейшем это утверждение широко использовалось (например, [2]).

Фононные и термодинамические свойства однокомпонентного кулоновского кристалла в приближении несжимаемого электронного фона исследуются достаточно давно [39, 40, 31, 41, 42, 43, 44, 45]. Наиболее точно свободная энергия ОЦК и гранецентрированной кубической (ГЦК) решеток в гармоническом приближении была рассчитана в работах [45, 46, 47]. В любом кристалле электронный фон реально чувствителен к присутствию ионов, и считать концентрацию электронов постоянной не всегда корректно. Вертикальными штриховыми линиями на рис. 1.3 показана плотность, при которой обратная длина экранирования $\kappa_{TF} \equiv \sqrt{4\pi e^2 \partial n_e / \partial \mu_e}$ равна $1/a$ ⁶. При этом $\kappa_{TF} a \approx 0.185 Z^{1/3} (1 + x_T^2)^{1/4} / x_T^{1/2} = 1$, где μ_e — химический потенциал электронного газа, n_e его концентрация, $x_T \approx 1.00884 (\rho_6 Z/A)^{1/3}$ — параметр релятивизма вырожденных электронов (для углеродной плазмы эта плотность примерно равна 3000 г/см³, для железной — 67000 г/см³), $\rho_6 = \rho / 10^6$ г/см³. При более высоких плотностях электронный фон можно считать слабо поляризованным и для его описания использовать приближение линейного отклика (подробнее см. параграф 1.6). Однокомпонентным кулоновским кристаллам с таким неоднородным электронным фоном посвящено гораздо меньше теоретических статей [40, 48, 49, 50]. При меньших плотностях приближение линейного отклика использовать, строго говоря, нельзя.

Порядка 5% от общего числа наблюдаемых нейтронных звезд находятся в двойных системах, еще большее число — в облаках плотного межзвездного газа (например, [6]). Атмосфера и кора таких звезд зачастую формируются в ходе аккреции вещества со звезды-компаньона или из межзвездной среды. Не исключено, что при этом во внешней коре при фиксированной

⁵Список, используемых сокращений, приведен в конце работы.

⁶О том, как соотносятся κ_{TF} и величина $\kappa_D \equiv 1/\lambda_D$ написано в параграфе 1.6.2.

плотности будут одновременно присутствовать ионы нескольких типов, то есть формироваться многокомпонентная плазма ионов [51]. Обычно ее свойства описываются с помощью так называемого *правила линейного смешивания* (ПЛС) [52] (также см. работу [53], ссылки в ней и параграф 1.5 представляемой работы). Высокая точность выполнения ПЛС для классической кулоновской жидкости неоднократно подтверждалась с помощью численного моделирования [54, 55, 56, 57]. Исследованию справедливости ПЛС для классических кулоновских кристаллов была посвящена лишь одна работа [54], где рассматривалась электростатическая энергия упорядоченных и неупорядоченных ОЦК решеток. Различные численные методы широко использовались для анализа процессов кристаллизации углеродно-кислородной и других кристаллических смесей (например, [58, 59, 60, 56]).

Отдельный интерес представляют недавние молекулярно-динамические расчеты, выполненные группой под руководством Хоровица (см., например, работы [61, 62, 63] и ссылки в них) и посвященные разделению ионной смеси при кристаллизации коры нейтронной звезды, образовавшейся в ходе аккреции. В работе [61] показано, что в процессе эволюции происходит частичное разделение фаз, и верхние слои коры обогащаются элементами с меньшими Z (взаимодействие между ионами описывалось экранированным потенциалом). Это утверждение было недавно подтверждено в работах [64, 65]. С другой стороны, многокомпонентная сильно неоднородная по составу система (17 химических элементов, модель Гупты [66]) полностью не сегрегируется на слои с постоянным Z и A , а выстраивается в ОЦК решетку, причем ионы с малыми Z занимают междоузлия, а ионы с большими Z стремятся занять узел кристаллической решетки [5]. Отметим, что расчеты Хоровица и др. проводились без учета силы тяжести, которая может играть важную роль при формировании аккрецированной коры. Учет силы тяжести в молекулярной динамике возможен, но технически сложен.

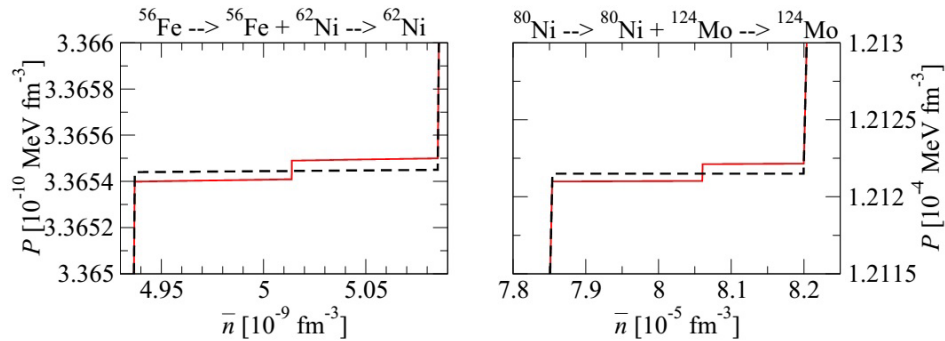


Рис. 1.4: Зависимость давления от барионной концентрации в коре нейтронной звезды (рисунок из работы [68], взятый с разрешения автора).

Кристаллическая структура смесей He-C-O, C-O-Ne и C-O-Fe также рассматривалась в работе [67], где было показано, что между слоями из однокомпонентных ОЦК кристаллов могут формироваться многокомпонентные кристаллы с меньшей симметрией. Аналогичный результат был получен в работе [68], где рассматривался вопрос о формировании многокомпонентных кристаллических смесей на границе слоев, состоящих из ионов одного типа

(предполагалось, что ионы одного сорта образуют ОЦК решетку) во внешней коре холодной неаккрецирующей нейтронной звезды. Путем сравнения свободных энергий Гиббса при фиксированном давлении и $T = 0$ было показано, что между слоями ^{56}Fe и ^{62}Ni , а также ^{80}Ni и ^{124}Mo может образовываться бинарная ОЦК решетка из этих ионов (рис. 1.4, см. детали в параграфе 1.5). Заметим, что при расчете учитывалась только электростатическая энергия кристалла с однородным электронным фоном. Ни энергия нулевых колебаний, ни неоднородность электронного фона учтены не были. В дальнейшем, в коллаборации с авторами работы [68], планируется расширить эти исследования, рассмотрев различные кристаллические смеси в коре аккрецирующей нейтронной звезды.

Первая глава посвящена описанию электростатических свойств кулоновских кристаллов, которые формируются в недрах вырожденных звезд. Рассматриваются энергия Маделунга, электростатическое давление и модули упругости различных кристаллических решеток: деформированных и недеформированных; однокомпонентных и многокомпонентных; с жестким электронным фоном и с поляризованным.

1.2 Основной формализм

Исследуем кристалл методами теории твердого тела (например, [16]), адаптированными для кулоновских кристаллов в работе [45] (из этой же работы взяты основные обозначения).

Кулоновские кристаллы в недрах вырожденных звезд состоят из точечных голых атомных ядер и однородного электронного фона, обеспечивающего электронейтральность. В общем случае заряд иона $Z_i e$ зависит от положения иона в кристалле, где Z_i — зарядовое число иона в i -ом узле решетки. Потенциальная энергия такой системы дается выражением

$$U_{\text{точн}} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{i-1} Z_i Z_j \Phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) - n_e \sum_{i=1}^N Z_i \int_V d\mathbf{r} \Phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) + \frac{n_e^2}{2} \int_V \int_V d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.2)$$

где $\Phi(\mathbf{r}) = e^2/r$, V , N и $n_e \equiv Zn$ — объем, полное число ионов и концентрация электронов, n — концентрация ионов, Z — средний заряд ионов в системе, \mathbf{r}_i — радиус-вектор i -ого иона, $r \equiv |\mathbf{r}|$. Первый член в (1.2) представляет собой энергию взаимодействия ионов друг с другом, второй — энергию взаимодействия ионов с фоном электронов, а третий — энергию взаимодействия зарядов фона друг с другом. Во всех формулах в дальнейшем будет подразумеваться термодинамический предел $N, V \rightarrow \infty$ при постоянной концентрации n .

В кристалле ионы совершают малые колебания относительно положений равновесия (узлов решетки) \mathbf{X}_i , так что $\mathbf{r}_i = \mathbf{X}_i + \mathbf{u}_i$, $\mathbf{u}_i \ll |\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j|$ при любом $j \neq i$. Ввиду малости величин смещений, в разложении потенциальной энергии в ряд Тейлора можно отбросить все члены старше квадратичного. Такое приближение называется *гармоническим*. Чем меньше отношение величины смещений к минимальному межузловому расстоянию, тем выше точность этого приближения. Кулоновские кристаллы вдали от точки плавления ($\Gamma \gg \Gamma_m$) описываются этим приближением с высокой точностью. Оно полезно для изучения статических и динамических свойств кристалла, его термодинамики, а также для исследования кинетических свойств электронов, рассеивающихся на фононах. В некоторых случаях гармоническая

модель позволяет получить результаты, едва ли достижимые применением численных методов. В гармоническом приближении потенциальную энергию кристалла можно записать как

$$U_{\text{точн}} \approx U_{\text{М}} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N u_i^\mu u_j^\lambda \left. \frac{\partial^2 U_{\text{точн}}}{\partial u_i^\mu \partial u_j^\lambda} \right|_{u_i^\mu, u_j^\lambda=0}. \quad (1.3)$$

Член нулевого порядка называется *энергией Маделунга*⁷ и представляет собой электростатическую энергию конфигурации зарядов, закрепленных в равновесных положениях \mathbf{X}_i (с учетом взаимодействия с фоном). Линейный член в (1.3) отсутствует, поскольку конфигурация $\mathbf{r}_i = \mathbf{X}_i$ соответствует минимуму энергии (при фиксированном n). Квадратичный член разложения определяет фононные свойства кристалла, и о нем будет подробно сказано в главе 2. Члены старших порядков определяют ангармонические поправки, которые в настоящей работе не рассматриваются. Для ОЦК и ГЦК решеток ангармонические поправки к потенциальной энергии были исследованы аналитически в работах [69] и [47], а в работе [70] представлены разнообразные аппроксимации ангармонических поправок, полученных в результате численного моделирования.

Если зафиксировать начало системы координат в одном из узлов решетки, то положения всех других узлов кристалла можно задать выражением $\mathbf{X}_i = \mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}_p$. Здесь $i = (l, p)$, $l = (n_1, n_2, n_3)$, а n_1, n_2, n_3 пробегает всевозможные целые значения. Векторы прямой решетки $\mathbf{R}_l = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ определяются линейно независимыми *векторами основных трансляций* $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$. Параллелепипед, образованный векторами $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$, называется *примитивной ячейкой решетки*. Вектора базиса $\boldsymbol{\chi}_p$ принадлежат этой ячейке, причем $p = 1, \dots, N_{\text{cell}}$ (N_{cell} — число ионов в примитивной ячейке). Обычно $\boldsymbol{\chi}_1$ равен нулевому вектору ($\boldsymbol{\chi}_1 = 0$). Решетки с $N_{\text{cell}} = 1$ называют *простыми*, а с $N_{\text{cell}} > 1$ — *решетками с базисом*. Вектора \mathbf{a}_i следует выбирать с таким расчетом, чтобы минимизировать N_{cell} .

Элементарная ячейка кристалла — часть структуры кристалла, параллельными переносами которой в трех измерениях можно построить всю кристаллическую решетку. Элементарная ячейка имеет форму параллелепипеда, выбор ее определяется симметрией кристалла. В большинстве рассматриваемых случаев элементарная ячейка — прямоугольный параллелепипед, декартова система координат направлена вдоль его ребер, а полярные углы ϕ и θ отсчитываются от осей OX и OZ , соответственно.

Векторы вида $\mathbf{G}_m = m_1 \mathbf{g}_1 + m_2 \mathbf{g}_2 + m_3 \mathbf{g}_3$ образуют *обратную решетку* (относительно решетки, состоящей из векторов \mathbf{R}_l). Здесь $m = (m_1, m_2, m_3)$ — всевозможные тройки целых чисел. Между векторами \mathbf{g}_i и \mathbf{a}_j выполняется соотношение $\mathbf{g}_i \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$, например $\mathbf{g}_1 = 2\pi[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]/(\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])$, $\mathbf{g}_2 = 2\pi[\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1]/(\mathbf{a}_2[\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1])$, $\mathbf{g}_3 = 2\pi[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]/(\mathbf{a}_3[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2])$, где через $[\mathbf{a}_i \times \mathbf{a}_j]$ обозначено векторное произведение. Многогранник в обратном пространстве, содержащий начало координат и ограниченный плоскостями, проходящими через середины векторов обратной решетки \mathbf{g}_i перпендикулярно им, называется *первой зоной Бриллюэна*. Ее объем равен $V_{\text{B}} = (2\pi)^3 n/N_{\text{cell}}$.

⁷Далее термин “энергия Маделунга” будет использоваться для обозначения электростатической энергии кулоновского кристалла только с “жестким” фоном.

В представляемой работе исследуется много различных решеток, из которых наиболее подробно рассматриваются три: объемноцентрированная кубическая (ОЦК или bcc от английского “body-centered cubic”), гранецентрированная кубическая (ГЦК или fcc от английского “face-centered cubic”) и гексагональная плотноупакованная (ГПУ или hcp от английского “hexagonal close packed”). Первые две являются простыми решетками, а у ГПУ решетки $N_{\text{cell}} = 2$. В таблице 1.1 приведены элементарные ячейки (для ГПУ решетки три элементарные ячейки) и вектора \mathbf{a}_i и \mathbf{g}_i для этих решеток, а также для простой кубической (ПК или sc от английского “simple cubic”) решетки. ГПУ решетка, в которой ион, отвечающий вектору базиса χ_2 , отсутствует, называется гексагональной (hex) решеткой.

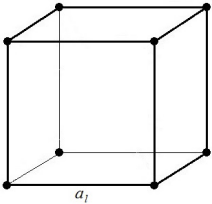
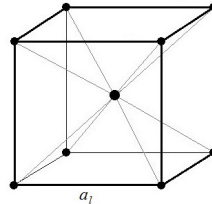
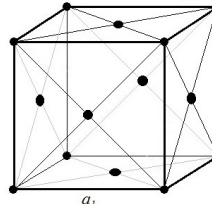
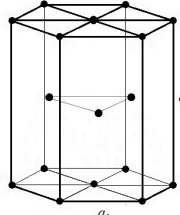
простая кубическая (ПК) решетка	объемно- центрированная кубическая (ОЦК) решетка	гране- центрированная кубическая (ГЦК) решетка	гексагональная плотно- упакованная (ГПУ) решетка
элементарная ячейка			
			
вектора прямой решетки			
$\mathbf{a}_1 = a_1(1, 0, 0)$ $\mathbf{a}_2 = a_1(0, 1, 0)$ $\mathbf{a}_3 = a_1(0, 0, 1)$	$\mathbf{a}_1 = 0.5a_1(1, 1, 1)$ $\mathbf{a}_2 = 0.5a_1(1, 1, -1)$ $\mathbf{a}_3 = 0.5a_1(-1, 1, 1)$	$\mathbf{a}_1 = 0.5a_1(0, 1, 1)$ $\mathbf{a}_2 = 0.5a_1(1, 0, 1)$ $\mathbf{a}_3 = 0.5a_1(1, 1, 0)$	$\mathbf{a}_1 = a_1(1, 0, 0)$ $\mathbf{a}_2 = 0.5a_1(1, \sqrt{3}, 0)$ $\mathbf{a}_3 = a_1(0, 0, \sqrt{8/3})$
вектора обратной решетки			
$\mathbf{g}_1 a_1 = 2\pi(1, 0, 0)$ $\mathbf{g}_2 a_1 = 2\pi(0, 1, 0)$ $\mathbf{g}_3 a_1 = 2\pi(0, 0, 1)$	$\mathbf{g}_1 a_1 = 2\pi(1, 0, 1)$ $\mathbf{g}_2 a_1 = 2\pi(0, 1, -1)$ $\mathbf{g}_3 a_1 = 2\pi(-1, 1, 0)$	$\mathbf{g}_1 a_1 = 2\pi(-1, 1, 1)$ $\mathbf{g}_2 a_1 = 2\pi(1, -1, 1)$ $\mathbf{g}_3 a_1 = 2\pi(1, 1, -1)$	$\mathbf{g}_1 a_1 = 2\pi(1, -\sqrt{3}/3, 0)$ $\mathbf{g}_2 a_1 = 2\pi(0, 2/\sqrt{3}, 0)$ $\mathbf{g}_3 a_1 = 2\pi(0, 0, \sqrt{3}/8)$
$na_1^3 = 1$	$na_1^3 = 2$	$na_1^3 = 4$	$na_1^3 = \sqrt{2}$

Таблица 1.1: Основные типы решеток.

Параметр a_1 называется *постоянной решетки* и, в отличие от радиуса ионной сферы, зависит от типа решетки (значения na_1^3 приведены в таблице 1.1). Для кубических решеток a_1 равен длине ребра куба элементарной ячейки. Для ГПУ решетки он равен длине стороны равностороннего шестиугольника, лежащего в основании элементарной ячейки. Высота ГПУ решетки составляет $c_1 = \sqrt{8/3}a_1$, а ненулевой вектор базиса — $\chi_2 = 0.5a_1(1, 1/\sqrt{3}, \sqrt{8/3})$ (центральный ион лежит на половине высоты).

ОЦК решетку иногда удобно рассматривать, как простую кубическую решетку с $N_{\text{cell}} = 2$, векторами основных трансляций $\mathbf{a}_1 = a_1(1, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = a_1(0, 1, 0)$, $\mathbf{a}_3 = a_1(0, 0, 1)$ и векторами базиса $\chi_1 = 0$ и $\chi_2 = 0.5a_1(1, 1, 1)$ [71]. Такую решетку назовем *простой кубической решеткой*

с базисом, ПК2 или sc2 решеткой.

Из таблицы 1.1 легко заметить, что ГЦК решетка является обратной ОЦК решетке, то есть вектора \mathbf{g}_i ОЦК решетки образуют ГЦК решетку и наоборот. Также для описания ОЦК и ГЦК решеток можно использовать следующие вектора основных трансляций: $\mathbf{a}_1 = a_1(-1, 1, c_1)$, $\mathbf{a}_2 = a_1(1, -1, c_1)$, $\mathbf{a}_3 = a_1(1, 1, -c_1)$. При $c_1 = 1$ эти вектора соответствуют векторам ОЦК решетки, а при $c_1 = \sqrt{2}$ — ГЦК решетки [41]. В дальнейшем такое представление использоваться не будет.

1.3 Энергия Маделунга однокомпонентного кулоновского кристалла

Потенциальная энергия любой статической решетки имеет вид:

$$U_M = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{i-1} Z_i Z_j \Phi(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j) - n_e \sum_{i=1}^N Z_i \int_V d\mathbf{r} \Phi(\mathbf{X}_i - \mathbf{r}) + \frac{n_e^2}{2} \int_V \int_V d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \quad (1.4)$$

В простейшем случае, когда все ионы имеют одинаковый заряд Z (кристалл, образованный одним типом ионов, назовем *однокомпонентным*), выражение (1.4) можно записать в виде

$$U_M = \frac{1}{2} \sum_{p,p'=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{l,l'=1}^N \frac{Z^2 e^2}{|\mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}_p - \mathbf{R}_{l'} - \boldsymbol{\chi}_{p'}|} - \sum_{p=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{l=1}^N \int_V \frac{Z n_e d\mathbf{r}}{|\mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}_p - \mathbf{r}|} + \frac{n_e^2}{2} \int_V \int_V \frac{d\mathbf{r} d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} . \quad (1.5)$$

Основная проблема расчета подобных выражений заключается в том, что ряды вида $\sum_{R \neq 0} 1/R$ расходятся⁸. Для ее преодоления используем известный *метод Эвальда* (например, [14]). Его основная идея состоит в представлении выражения $1/R$ в виде суммы двух интегралов:

$$\frac{1}{R} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\int_0^A + \int_A^\infty \right) d\rho e^{-\rho^2 R^2} , \quad (1.6)$$

где A произвольная константа. Первый интеграл можно вычислить, используя преобразование Фурье функции $\exp(-\rho^2 R^2)$:

$$e^{-\rho^2 R^2} = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\rho} \right)^3 e^{i\mathbf{q}\mathbf{R} - q^2/4\rho^2} , \quad (1.7)$$

учитывая соотношения: $\int e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_l} d\mathbf{q} = V_B \delta_{l0}$ и $\sum_l e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_l} = V_B \sum_m \delta(\mathbf{q} - \mathbf{G}_m)$, а второй интеграл — непосредственно:

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_A^\infty d\rho \left(\sum_l' e^{-\rho^2 R_l^2} - \frac{n}{2} \int_V d\mathbf{r} e^{-\rho^2 R^2} \right) = \sum_l' \frac{\text{erfc}(AR_l)}{R_l} - \frac{n}{2} \frac{\pi}{A^2} . \quad (1.8)$$

⁸Процедура обхода расходимости плохо определена и до сих пор широко обсуждается в литературе (например, [72, 73] и ссылки в них).

Окончательная формула для энергии Маделунга с произвольным N_{cell} имеет вид :

$$\begin{aligned}
 U_M &= N \frac{Z^2 e^2}{a_1} \zeta', \\
 \zeta' &= \frac{a_1}{2N_{\text{cell}}} \sum_{p,p'} \sum_l' \frac{\text{erfc}(AY_l)}{Y_l} - \frac{Aa_1}{\sqrt{\pi}} - \frac{\pi n a_1^3}{2(Aa_1)^2} \\
 &+ \frac{2\pi n a_1^3}{a_1^2 N_{\text{cell}}^2} \sum_{p,p'} \sum_m' \frac{1}{G_m^2} \exp\left(-\frac{G_m^2}{4A^2} + i\mathbf{G}_m(\boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'})\right),
 \end{aligned} \tag{1.9}$$

где $\text{erfc}(z)$ — дополнительная функция ошибок, $\mathbf{Y}_l = \mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'}$, константы ζ' и $n a_1^3$ зависят только от типа решетки. Поскольку ряды в уравнении (1.9) сходятся хорошо, во всех формулах далее будем использовать термодинамический предел $N, V \rightarrow \infty$. В представляемых расчетах безразмерный параметр $Aa_1 \cong 2$. Штрихи означают отсутствие слагаемых $\mathbf{G}_m = 0$ и $\mathbf{Y}_l = 0$. Формула (1.9) впервые получена Фуксом в работе [11]. Это выражение удобно для расчета электростатической энергии, но не удобно для сравнения энергий разных решеток между собой. Для этого приведем U_M к виду:

$$U_M = N \frac{Z^2 e^2}{a} \zeta, \quad \zeta = \zeta' \left(\frac{3}{4\pi n a_1^3} \right)^{1/3}. \tag{1.10}$$

Константа ζ называется *постоянной Маделунга*.

1.3.1 Энергия Маделунга недеформированных однокомпонентных решеток

Для простейших однокомпонентных решеток постоянная Маделунга известна достаточно давно (например, [11, 14, 74, 39, 75]). Чаще всего авторы ограничивались рассмотрением ПК, ОЦК, ГЦК, ГПУ и гексагональной решетки. В 1978 году Фолди рассчитал постоянную Маделунга решетки алмаза [76]. В 1991 году Зукер — однокомпонентные флюорит, перовскит и шпинель [77]. Однако, в расчетах последнего была обнаружена ошибка [78]: значение ζ для перовскита оказалось меньше $-9/10^9$. Ошибка скорее всего связана с используемым методом расчета [80] и была исправлена в работе [81].

Таким образом, на сегодняшний момент известны постоянные Маделунга девяти однокомпонентных решеток. Наиболее точно электростатические энергии ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток были получены в работе [45] (12 значащих цифр против 7 в работе [74]):

$$\zeta_{\text{bcc}} = -0.895929255682, \quad \zeta_{\text{fcc}} = -0.895873615195, \quad \zeta_{\text{hcp}} = -0.895838120459, \tag{1.11}$$

что в точности совпадает с результатами, полученными в представляемой работе. Значения других постоянных были известны с меньшей точностью (6-7 значащих цифр). В представляемой работе все они, за исключением шпинели¹⁰, проверены (новых ошибок в предыдущих работах выявлено не было) и пересчитаны с точностью в 11 значащих цифр и выше.

⁹Электростатическая энергия кристалла в приближении Вигнера-Зейтца равна $-9/10(Ze)^2/a$ [2]. Это, как доказано в [79], является нижним пределом для потенциальной энергии.

¹⁰Ее постоянная Маделунга равна -0.8492675 [77].

Постоянная Маделунга простой кубической решетки равна $\zeta_{sc} = -0.88005944211$. Постоянная Маделунга гексагональной решетки — $\zeta_{hex} = -0.77943336427$ [71].

Флюоритом называется кристалл фторида кальция CaF_2 . Его кристаллическую решетку можно рассмотреть, как простую кубическую с векторами базиса $\chi_1 = 0$, $\chi_2 = a_1(1/2, 1/2, 0)$, $\chi_3 = a_1(0, 1/2, 1/2)$, $\chi_4 = a_1(1/2, 0, 1/2)$, $\chi_{5-12} = a_1(\pm 1/4, \pm 1/4, \pm 1/4)$. Для этой решетки $na_1^3 = 12$, а $\zeta_{\text{CaF}_2} = 0.86445318436682$.

Перовскитом называется кристалл титаната кальция CaTiO_3 . Его кристаллическую решетку можно представить, как простую кубическую с векторами базиса $\chi_1 = 0$, $\chi_2 = a_1(1/2, 0, 0)$, $\chi_3 = a_1(0, 1/2, 0)$, $\chi_4 = a_1(0, 0, 1/2)$, $\chi_5 = a_1(1/2, 1/2, 1/2)$. Для этой решетки $na_1^3 = 5$, а $\zeta_{\text{CaTiO}_3} = -0.8473240413727$. Отметим, что в недавней работе [82] было высказано предположение, что ионы во внутренней коре нейтронной звезды образуют однокомпонентные кристаллы перовскита. Этот результат не был подтвержден в работах [68, 67] и требует детального анализа.

Кристаллическую решетку *алмаза* можно рассмотреть, как простую кубическую с векторами базиса $\chi_1 = 0$, $\chi_2 = a_1(1/2, 1/2, 0)$, $\chi_3 = a_1(0, 1/2, 1/2)$, $\chi_4 = a_1(1/2, 0, 1/2)$, $\chi_5 = a_1(1/4, 1/4, 1/4)$, $\chi_6 = a_1(-1/4, -1/4, 1/4)$, $\chi_7 = a_1(1/4, -1/4, -1/4)$, $\chi_8 = a_1(-1/4, 1/4, -1/4)$. Для него $na_1^3 = 8$, а постоянная Маделунга равна $\zeta_{\text{diam}} = -0.83542570276483$.

1.3.2 Энергия Маделунга деформированных решеток

Помимо стандартных решеток, описанных в предыдущем параграфе, имеет практический интерес рассмотрение деформированных решеток. Так, наличие внешних сил, порождаемых, например, неоднородным магнитным полем, может приводить к деформации кристалла в коре нейтронной звезды (например, [83]), что особенно актуально для нейтронных звезд со сверхсильными магнитными полями. Для адекватного описания вещества в недрах таких звезд необходимо знать свойства деформированных кулоновских кристаллов. До нашей работы [83] электростатическая энергия деформированных решеток рассматривалась лишь в работах [41, 42, 84].

В работе [41] исследовался вопрос об изменении энергии Маделунга ОЦК решетки при ее деформации вдоль одного из ребер куба элементарной ячейки. В представляемой работе впервые рассмотрен более общий случай: объемноцентрированная (ОЦР или bco, от английского “body-centered orthorhombic”) и гранецентрированная (ГЦР или fco от английского “face-centered orthorhombic”) ромбические решетки.

Если элементарные ячейки ОЦК и ГЦК решеток — кубы со стороной a_1 , то элементарные ячейки ОЦР и ГЦР решеток — параллелепипеды со сторонами a_1 , b_1 и c_1 , как показано на рис. 1.5А и В (стороны всегда можно выбрать так, что $b_1 \geq a_1$ и $c_1 \geq a_1$). Вектора основных трансляций ОЦР решетки $\mathbf{a}_1 = 0.5a_1(1, c_1, c_2)$, $\mathbf{a}_2 = 0.5a_1(1, c_1, -c_2)$ и $\mathbf{a}_3 = 0.5a_1(-1, c_1, c_2)$, где $c_1 \equiv b_1/a_1$, $c_2 \equiv c_1/a_1$ и $na_1^3 = 2/(c_1c_2)$. Таким образом, ОЦР решетка — это ОЦК решетка, растянутая вдоль осей OY и OZ (направления осей совпадают с ребрами куба элементарной ячейки ОЦК решетки). Аналогично, ГЦР решетка — растянутая ГЦК. При $b_1 = a_1$ и $c_1 = \sqrt{2}a_1$, ОЦР решетка перейдет в ГЦК решетку (вектора основных трансляций получившейся ГЦК

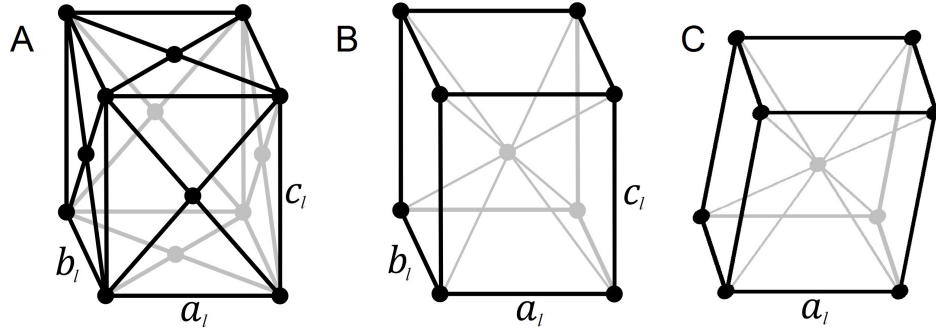


Рис. 1.5: Элементарные ячейки ГЦР решетки (рис. А), ОЦР решетки (рис. В) и ОЦК решетки со сдвигом (рис. С).

решетки будут отличаться от рассмотренных ранее поворотом на полярный угол $\phi = \pi/4$). ГЦР решетка при $b_1 = c_1 = \sqrt{2}a_1$ перейдет в ОЦК решетку¹¹. В принципе ГЦР решетку можно рассматривать, как деформированную вдоль диагоналей основания ОЦК решетку, но в дальнейшем ОЦР и ГЦР решетки будут рассматриваться независимо.

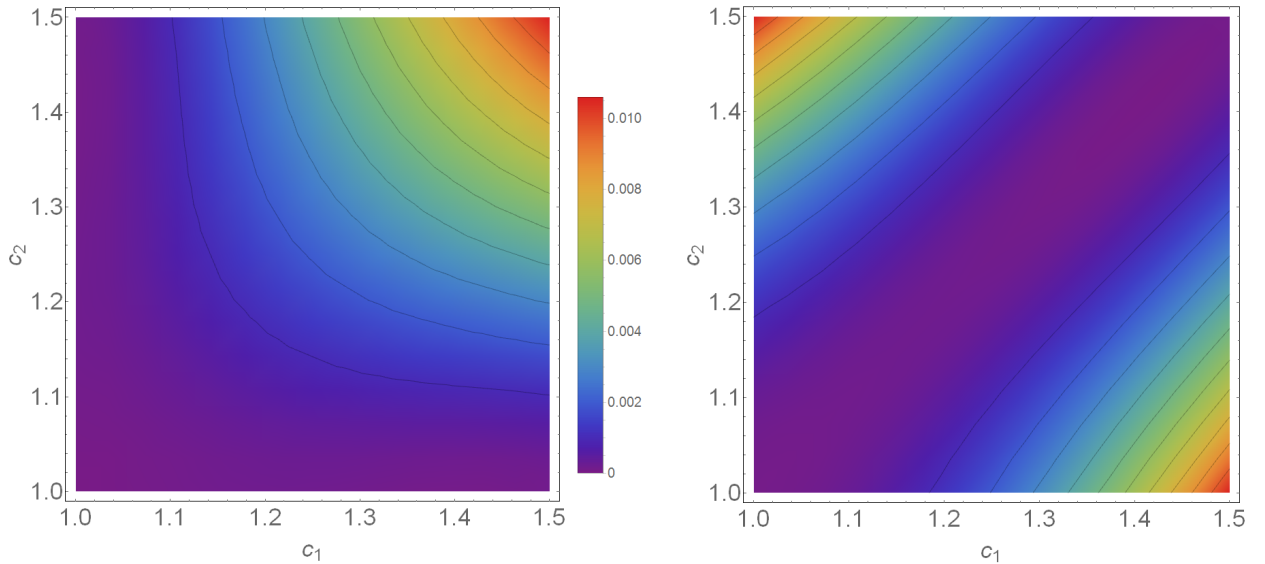


Рис. 1.6: Зависимость разности $\zeta(c_1, c_2) - \zeta(1, 1)$ от c_1 и c_2 для ОЦР (слева) и ГЦР (справа) решеток.

Постоянные Маделунга ОЦР и ГЦР решеток, рассчитанные по формулам (1.9) и (1.10), зависят от параметров c_1 и c_2 . Зависимость разности $\zeta(c_1, c_2) - \zeta(1, 1)$ от c_1 и c_2 изображена на рис. 1.6, где $\zeta(1, 1) = \zeta_{\text{bcc}}$ — постоянная Маделунга ОЦК решетки. Как видно из рис. 1.6, $\zeta(c_1, c_2) = \zeta(c_2, c_1)$ и $\zeta(c_1, c_2) > \zeta(1, 1)$ при любом c_1 и c_2 . Для ОЦР решетки $\zeta(c_1, 1)$ увеличивается гораздо слабее с ростом c_1 , чем $\zeta(c_1, c_1)$, а для ГЦР решетки наоборот: $\zeta(c_1, c_1)$ с ростом c_1 увеличивается быстрее, чем $\zeta(c_1, 1)$. То есть растяжение ОЦК решетки вдоль

¹¹Заметим, что растянутая в $\sqrt{3}$ раз вдоль одного из ребер ГЦК решетка переходит в гексагональную решетку со сдвигом, соседние гексагональные слои в которой сдвинуты друг относительно друга на $a_1/2$, а расстояние между ними $a_1/2$.

одного из ребер куба ее элементарной ячейки требует меньшей энергии, чем сжатие вдоль этого ребра.

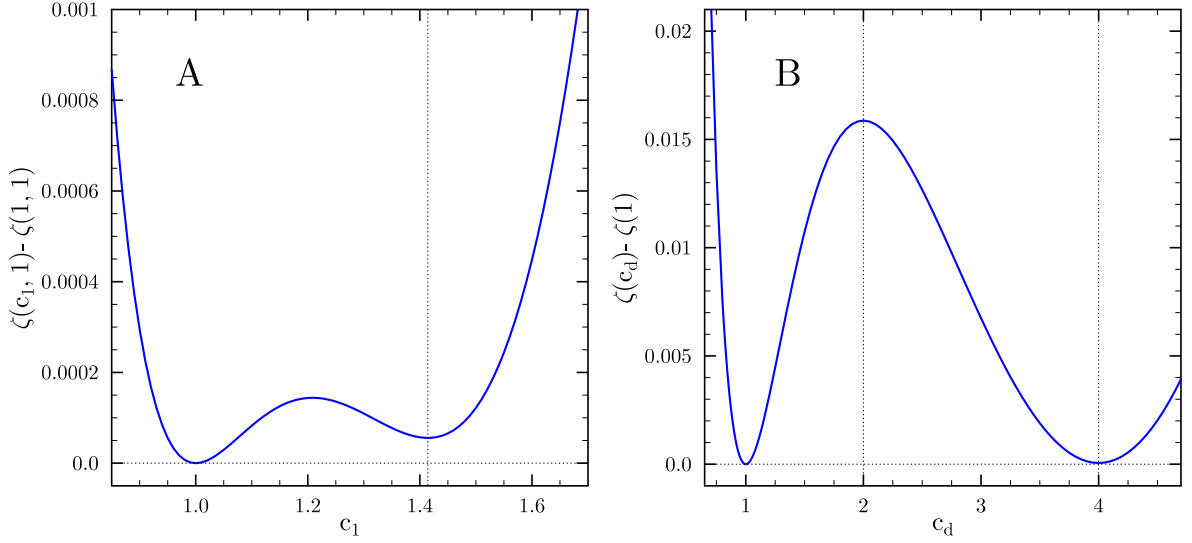


Рис. 1.7: Зависимость разности $\zeta(c_1, 1) - \zeta(1, 1)$ от c_1 для ОЦР решетки (рис. А). Зависимость разности $\zeta(c_d) - \zeta(1)$ от c_d для растянутой вдоль главной диагонали ОЦК решетки (рис. В).

При $c_2 = 1$ полученные результаты можно сравнить с результатами работы [41]. Зависимость $\zeta(c_1, 1) - \zeta(1, 1)$ от c_1 для ОЦР решетки изображена на рис. 1.7А. Приведенный график в точности совпадает с рис. 1 из работы [41]. Локальный минимум при $c_1 = \sqrt{2}$ соответствует ГЦК решетке. Локальный максимум достигается при $c_1 \approx 1.20845$, в этом случае $\zeta(1.20845, 1) \approx -0.895785172628$. Такая конфигурация не соответствует ни одной из известных кристаллических решеток более высокого порядка. График зависимости разности $\zeta(c_1, c_1) - \zeta(1, 1)$ для ГЦР решетки будет совпадать с рис. 1.7А для ОЦР решетки, если c_1 заменить на $1 - c_1 + \sqrt{2}$.

Решетки можно деформировать не только путем сжатия/растяжения вдоль ребер куба элементарной ячейки. Случай растянутой вдоль главной диагонали ОЦК решетки (в направлении “на ближайшего соседа”, с сохранением объема) проиллюстрирован на рис. 1.7В. На нем показано, как изменяется $\zeta(c_d) - \zeta(1)$ в зависимости от c_d , где c_d — отношение длины диагонали, вдоль которой происходит деформация, к длине диагонали перпендикулярной направлению деформации (см. рис. 2а в работе [83]). Локальный максимум достигается при $c_d = 2$ и соответствует ПК решетке, а локальный минимум при $c_d = 4$ — ГЦК решетке. Так как масштаб изменений $\zeta(c_d) - \zeta(1)$ гораздо больше чем разница между постоянными Маделунга ОЦК и ГЦК решеток, создается ложное впечатление, что при $c_d = 4$ кривая доходит до нуля.

Другим примером деформированной ОЦК решетки является ОЦК решетка со сдвигом (рис. 1.5С). В этом случае ее нагляднее представить, как решетку с векторами основных трансляций: $\mathbf{a}_1 = a_1(1, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = a_1(0, 1, 0)$, $\mathbf{a}_3 = a_1(c_x, c_y, 1)$ и ненулевым вектором базиса $\mathbf{x}_2 = 0.5a_1(1 + c_x, 1 + c_y, 1)$. При этом объем элементарной ячейки кристалла не изменится и $na_1^3 = 2$. Зависимость разности между постоянной Маделунга ОЦК решетки со сдвигом

$\zeta(c_x, c_y)$ от двух параметров, характеризующих сдвиг $c_x > 0$ и $c_y > 0$, показана на рис. 1.8. Эта разность всегда больше 0, $\zeta(c_x, c_y) = \zeta(c_y, c_x)$. Причем $\zeta(c_x, c_y)$ практически не изменяется при фиксированном $c_x^2 + c_y^2$. То есть энергия Маделунга зависит только от величины сдвига и практически не зависит от его направления. На рис. 1.8 каждому сплошному контуру соответствует постоянное значение $\zeta(c_x, c_y)$. Для иллюстрации красной пунктирной линией показана кривая $\sqrt{c_x^2 + c_y^2} = 0.15$

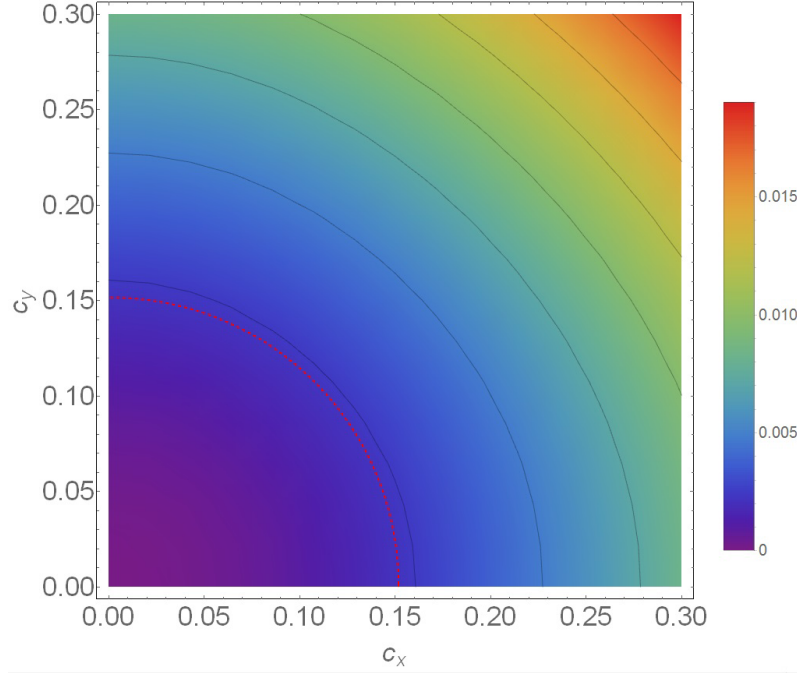


Рис. 1.8: Зависимость разности $\zeta(c_x, c_y) - \zeta(1, 1)$ от c_x и c_y для ОЦК решетки со сдвигом.

Таким образом, при любых рассмотренных деформациях, наименьшей энергией Маделунга обладает ОЦК решетка.

1.3.3 Энергия Маделунга деформированных решеток, рассчитанная по теории упругости

Электростатическую энергию слабо деформированной решетки, можно найти не только воспользовавшись выражением (1.9), но и прибегнув к стандартной теории упругости (например, [85, 86]). Рассмотрим однородную инфинитезимальную деформацию решетки. При этой деформации вектора решетки R_μ перейдут в $R_\mu + u_{\mu\lambda}R_\lambda$. Разложение электростатической энергии в ряд по малым $u_{\mu\lambda}$ до второго порядка дает:

$$U_M(u_{\mu\lambda}) = U_M + VS^{\mu\lambda}u_{\mu\lambda} + \frac{1}{2}VS^{\alpha\beta\mu\lambda}u_{\alpha\beta}u_{\mu\lambda}, \quad (1.12)$$

где V — объем, $S^{\mu\lambda}$ — тензор напряжений, который определяет электростатическое давление в кристалле:

$$S^{\mu\lambda} = -n \frac{Z^2 e^2}{a} p^{\mu\lambda} = -n \frac{Z^2 e^2}{a_1} p'^{\mu\lambda}, \quad (1.13)$$

$$p^{\mu\lambda} = -\frac{a_1}{N_{\text{cell}}} \sum_{p,p'} \sum_l' \frac{Y_l^\mu Y_l^\lambda}{Y_l^3} \left[\frac{AY_l}{\sqrt{\pi}} e^{-A^2 Y_l^2} + \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(AY_l) \right] + \frac{\pi n a_1^3}{2(Aa_1)^2} \delta^{\mu\lambda} \quad (1.14)$$

$$- \frac{2\pi n a_1^3}{a_1^2 N_{\text{cell}}^2} \sum_{p,p'} \sum_m' \frac{1}{G_m^2} \left[\delta^{\mu\lambda} - \frac{2G_m^\mu G_m^\lambda}{G_m^2} \left(1 + \frac{G_m^2}{4A^2} \right) \right] \exp \left(-\frac{G_m^2}{4A^2} + i\mathbf{G}_m(\boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'}) \right).$$

Выражение для электростатического давления в кулоновском кристалле с $N_{\text{cell}} = 1$ впервые было получено в работе [12], в представляемой работе оно обобщено на случай произвольного N_{cell} . Для кубических решеток, таких как ОЦК и ГЦК, электростатическое давление изотропно и равно $S^{\mu\lambda} = P\delta^{\mu\lambda}$ и $p^{\mu\lambda} = \delta^{\mu\lambda}p = \delta^{\mu\lambda}\zeta/3$, где ζ — постоянная Маделунга соответствующей решетки (аналогично, $p'^{\mu\lambda} = \delta^{\mu\lambda}p' = \delta^{\mu\lambda}\zeta'/3$). Коэффициенты $S^{\alpha\beta\mu\lambda} = nZ^2e^2s^{\alpha\beta\mu\lambda}/(2a_1)$ — статические модули упругости (для краткости в обозначении $s^{\alpha\beta\mu\lambda}$ штрих опущен) [12]. Их общий вид для решетки с $N_{\text{cell}} = 1$ можно найти в работе [87].

Считая $c_1 - 1$ и $c_2 - 1$ малыми, для электростатической энергии ОЦР решетки получим

$$\begin{aligned} \zeta'(c_1, c_2) &\approx \zeta'_{\text{bcc}} - p'_{\text{bcc}} [(c_1 - 1) + (c_2 - 1)] \\ &+ 0.25s_{\text{bcc}}^{xxxx} [(c_1 - 1)^2 + (c_2 - 1)^2] + 0.5s_{\text{bcc}}^{xyxy} (c_1 - 1)(c_2 - 1), \end{aligned} \quad (1.15)$$

где $s_{\text{bcc}}^{xxxx} = -1.4848079$ и $s_{\text{bcc}}^{xyxy} = -0.47067387$ (значения взяты из работы [87]¹²). Сравнение с точным расчетом показывает, что приближение линейной теории упругости хорошо работает в большом диапазоне c_1 и c_2 . При $c_1 < 1.3$ и $c_2 < 1.3$ разница между постоянной Маделунга ОЦР решетки, рассчитанной с помощью выражения (1.15), и точным значением составляет не более 8 процентов, а в области допустимых устойчивостью значений c_1 и c_2 — не более 9 процентов (см. параграф 2.3).

Аналогично можно поступить в случае ОЦК решетки со сдвигом (рис. 1.5В), тогда

$$\zeta'(c_x, c_y) \approx \zeta'_{\text{bcc}} + 0.25s_{\text{bcc}}^{xyxy} (c_x^2 + c_y^2), \quad (1.16)$$

где $s_{\text{bcc}}^{xyxy} = 0.74240395$ (значение взято из работы [87]). Разница с точным расчетом из параграфа 1.3.2 не превышает 8 процентов при $c_x < 0.3$ и $c_y < 0.3$, что подтверждает утверждение, что при малых c_x и c_y энергия Маделунга со сдвигом зависит только от $c_x^2 + c_y^2$. Можно заметить, что $s_{\text{bcc}}^{xyxy} = -s_{\text{bcc}}^{xxxx}/2$, однако, это равенство справедливо не для всех решеток¹³. В общем случае любая произвольная деформация кубической решетки определяется тремя независимыми модулями упругости: s^{xxxx} , s^{xyxy} и s^{xyxy} . В предыдущем параграфе было показано, что при растяжении и сдвиге энергия Маделунга ОЦК решетки увеличивается, то есть можно утверждать, что ОЦК решетка устойчива относительно малых однородных деформаций [16].

¹²В работе [88] использовалась другая нормировка, отличающаяся от используемой на множитель $a/(2a_1)$.

¹³Детально это равенство не анализировалось.

Кроме уже упоминавшихся ранее работ [41, 42], энергия Маделунга деформированных решеток исследовалась лишь в работе [84], где численно рассматривалась ОЦК решетка деформированная так, что вектор ее 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 (см. параграф 1.2), ϵ — параметр, характеризующий степень деформации. При такой деформации изменение энергии Маделунга определяется только параметром S^{xyxy} . В работе [84] численно показано, что энергия деформированного кристалла хорошо описывается линейной теорией упругости при $|\epsilon| < 0.02$ (случай больших ϵ не рассматривался). В представляемой работе это подтверждено с помощью простой аналитической модели.

Расчету модулей упругости ОЦК решетки было посвящено несколько работ (например, [12, 89, 90, 87]). Так, в работе [89] с помощью метода Монте-Карло были найдены изменения свободной энергии решетки при деформации. В работе [90] модули упругости были использованы для исследования осцилляций нейтронной звезды. Было показано, что некоторые моды колебаний существенно зависят от эффективного модуля сдвига μ_{eff} (см. также [87]). Однако, вопрос от том, как его следует определять остается открытым [91]. Например, в работе [90] эффективный модуль сдвига определен как

$$\mu_{\text{eff}}^{\text{bcc}} \equiv \frac{a}{10a_1}(S^{xxxx} - S^{xyxy} + 3S^{xyxy} - P') = 0.1194572n \frac{Z^2 e^2}{a}. \quad (1.17)$$

Это значение μ_{eff} согласуется с результатом работы [8], где была построена диаграмма напряженного состояния кулоновского поликристалла (с учетом поляризации электронного фона) с помощью молекулярно-динамических симуляций, для одной конкретной реализации. Угол наклона кривой на диаграмме 1 из работы [8] при малых деформациях дает значение $\mu_{\text{eff}} \approx 0.122nZ^2e^2/a$, что хорошо согласуется со значением, полученным теоретически.

Кроме ОЦК решетки ранее рассматривались только модули упругости ГЦК решетки [12]. Из аппроксимации точного значения электростатической энергии ГЦР решетки, показанной на правой части рис. 1.6, получим: $s_{\text{fcc}}^{xxxx} = -1.89664945$ и $s_{\text{fcc}}^{xyxy} = -0.57996263$. Тогда $-p'_{\text{fcc}} + s_{\text{fcc}}^{xxxx} - s_{\text{fcc}}^{xyxy} = 0.21160053$ (электростатическое давление $p'_{\text{fcc}} = -1.528287358$), что хорошо согласуется со значением 0.2115, полученным в работе [12]. Сами значения s_{fcc}^{xxxx} и s_{fcc}^{xyxy} в работе [12] не приведены. В этой же работе приведено значение $s_{\text{fcc}}^{xyxy} = 0.9479$. Его можно определить из аппроксимации энергии ГЦК решетки со сдвигом. В предыдущих параграфах эта решетка не рассматривалась, однако, необходимые вычисления можно легко провести по аналогии с расчетами для ОЦК решетки со сдвигом, получив, что $s_{\text{fcc}}^{xyxy} = 0.94832473$. Полученное значение хорошо согласуется с результатом из работы [12]. Заметим, что для ГЦК решетки также выполняется соотношение $s_{\text{fcc}}^{xyxy} = -s_{\text{fcc}}^{xxxx}/2$.

Эффективный модуль сдвига ГЦК решетки (выражение 1.17) равен

$$\mu_{\text{eff}}^{\text{fcc}} = 0.11944982n \frac{Z^2 e^2}{a}. \quad (1.18)$$

Он отличается от эффективного модуля сдвига ОЦК решетки только в пятой значащей цифре. Ни один из других способов вычисления μ_{eff} , рассмотренный в работе [91], не дает столь малого отличия в результатах для ОЦК и ГЦК решеток.

Проведенные расчеты показывают, что энергия Маделунга деформированных решеток может быть найдена с помощью модулей упругости недеформированных решеток. Естественно верно и обратное: модули упругости можно найти, используя энергию Маделунга деформированной решетки. Тем не менее точные расчеты энергии Маделунга важны, так как она вносит основной вклад в полную энергию кристалла (без учета энергии электронов, которая не зависит от типа решетки и в представляемой работе не рассматривается).

1.3.4 Энергия Маделунга деформированных решеток с гексагональной сингонией

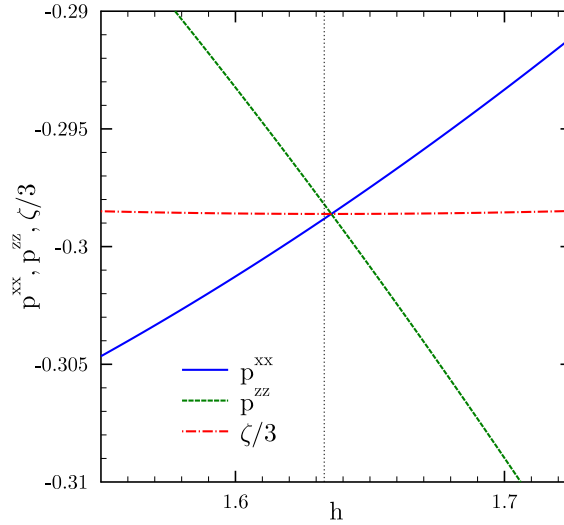


Рис. 1.9: Зависимость электростатического давления и энергии от высоты элементарной ячейки ГУ решетки.

В работе [42] рассматривалась растянутая и сжатая вдоль высоты элементарной ячейки (ребра призмы вдоль которого направлена ось OZ) ГПУ решетка. Далее такую деформированную решетку будем называть *гексагональной упакованной* (ГУ или h_p) решеткой, закрепив термин “ГПУ решетка” за решеткой с высотой элементарной ячейки $\sqrt{8/3}a_1 \approx 1.6329932a_1$. Высоту ГУ решетки, нормированную на a_1 , обозначим как $h \equiv c_1/a_1$. Тогда $h_{hcr} \equiv \sqrt{8/3}$. В работе [42] указано, что электростатическая энергия ГУ решетки минимальна при $h \approx 1.633$, то есть когда она становится ГПУ решеткой. Однако, это не вполне верно.

Как известно, в ГПУ решетке высота элементарной ячейки определяется из решения задачи о *плотной упаковке сфер*. Однако, электростатическое давление в решетке при $h = h_{hcr}$ не изотропно: $p_{hcr}^{xx} = p_{hcr}^{yy} = -0.2988168$, $p_{hcr}^{zz} = -0.2982046$. Давление станет изотропным, если положить высоту элементарной ячейки равной $h_{hp0} \approx 1.6356394$. На рис. 1.9 показана зависимость p^{xx} и p^{zz} от h : точка пересечения p^{xx} и p^{zz} не лежит на вертикальной прямой, соответствующей h_{hcr} . Оказывается, что и электростатическая энергия ГУ решетки достигает минимального значения $\zeta_{hp0} = -0.895838451203$ при $h = h_{hp0}$ против $\zeta_{hcr} = -0.895838120459$

при $h = h_{\text{hp}}$. В этой точке $p_{\text{hp}0}^{xx} = p_{\text{hp}0}^{yy} = p_{\text{hp}0}^{zz} = \zeta_{\text{hp}0}/3$. Отметим, что это различие никем ранее замечено не было, а постоянные Маделунга с той точностью, с которой они приведены в работе [42], для $h = 1.633$ и $h_{\text{hp}0}$ совпадают.

График зависимости трети постоянной Маделунга ГУ решетки ($\zeta_{\text{hp}}/3$) от h показан на рис. 1.9. При h от 1.48 до 1.82 величину ζ_{hp} с точностью 7 значащих цифр была аппроксимирована в представляемой работе, как

$$\zeta_{\text{hp}} = -0.7922842 - 0.1130638h + 0.02212615h^2 + 0.00506955h^3. \quad (1.19)$$

При $h \approx 2.727$ ГУ решетка соответствует решетке α -графита, встречающегося в природе. Ее постоянная Маделунга составляет $\zeta_{\text{graph}} = -0.840878927$.

Аналогично, в гексагональной решетке (описываемой также, как и ГПУ решетка, но без ненулевого вектора базиса) расстояние между гексагональными слоями также может быть произвольным, а не только $\sqrt{8/3}a_1$, как было рассмотрено выше. Постоянная Маделунга гексагональной решетки будет минимальной и составит $\zeta_{\text{hex}0} = -0.887321284742$, если положить расстояние между слоями равным $h_{\text{hex}0} = 0.928a_1$. Таким образом, $\zeta_{\text{hex}0} > \zeta_{\text{hp}0} > \zeta_{\text{bcc}}$.

Суммируя результаты параграфов 1.3.2–1.3.4, можно заключить, что среди всех рассмотренных однокомпонентных решеток, как деформированных, так и недеформированных, наименьшей постоянной Маделунга обладает ОЦК решетка.

1.3.5 Электростатическое давление в деформированных кристаллах

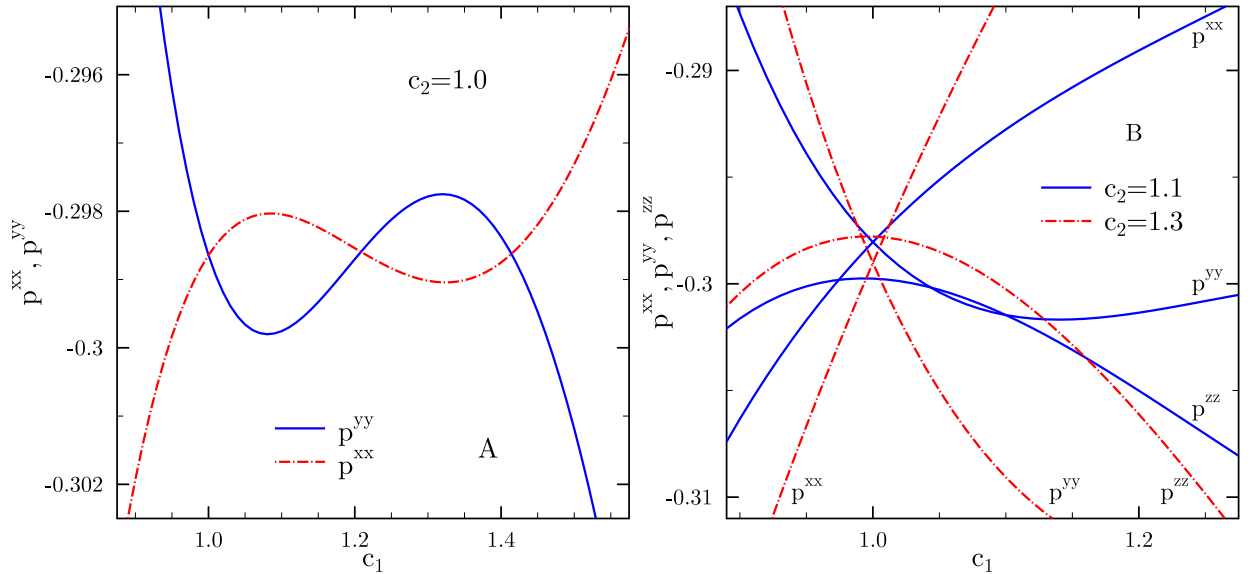


Рис. 1.10: Зависимость p^{xx} , p^{yy} и p^{zz} от c_1 и c_2 для ОЦР решетки.

Выражение (1.14) можно использовать для исследования электростатического давления в деформированных ОЦК решетках, отойдя от линейной теории упругости [83]. В выбранной системе координат $p^{\mu\lambda}$ ОЦР решетки имеет диагональный вид, но в общем случае не изотропно. При $c_2 = 1$ электростатическое давление ОЦР решетки показано на рис. 1.10А

($p^{xx} = p^{zz}$). Помимо точек $c_1 = 1$ и $c_1 = \sqrt{2}$, соответствующих кубическим решеткам, кривые пересекаются в точке локального максимума постоянной Маделунга $c_1 \approx 1.20845$. В этом случае $p^{xx} = p^{yy} \approx -0.298595$. Как видно из рис. 1.10А, давление ОЦР решетки не монотонно. При $c_1 < 1.08$ величина p^{xx} возрастает до значения $p^{xx} \approx -0.298032$. Локальный экстремум при $c_1 \approx 1.08$ компоненты p^{xx} и p^{yy} достигают не одновременно. Давление p^{yy} убывает вплоть до $c_1 \approx 1.081$ (в этой точке $p^{yy} \approx -0.299801$). При $1.08 < c_1 < 1.32$ p^{xx} убывает.

Ход давления определяет динамику деформации кристалла вследствие внешнего воздействия. При действии переменной внешней силы, обусловленной, например, эволюционирующим со временем неоднородным магнитным полем, кристалл будет деформироваться. Рассмотрим такую деформацию, при которой увеличивается c_1 . Уже при достижении $c_1 \simeq 1.08$ давление в кристалле перестает изменяться монотонно. Это может привести либо к существенной перестройке от кристалла с $c_1 \approx 1.081$ к кристаллу с $c_1 \approx 1.461$, либо к потере системой ионов упорядоченной кристаллической структуры. Следовательно, эти эффекты могут иметь важное влияние на эволюцию коры нейтронной звезды [83].

При $c_1 \neq 1$ и $c_2 \neq 1$ электростатическое давление ОЦР решетки также не изотропно, а масштаб изменения больше, чем в предыдущем случае. На рис. 1.10В показаны графики зависимости p^{xx} , p^{yy} и p^{zz} от c_1 при $c_2 = 1.1$ и $c_2 = 1.3$. У них нет общих точек пересечения и не существует таких $c_2 \neq 1$ и $c_2 \neq c_1 \neq 1$ при которых все три компоненты давления были бы равны друг другу.

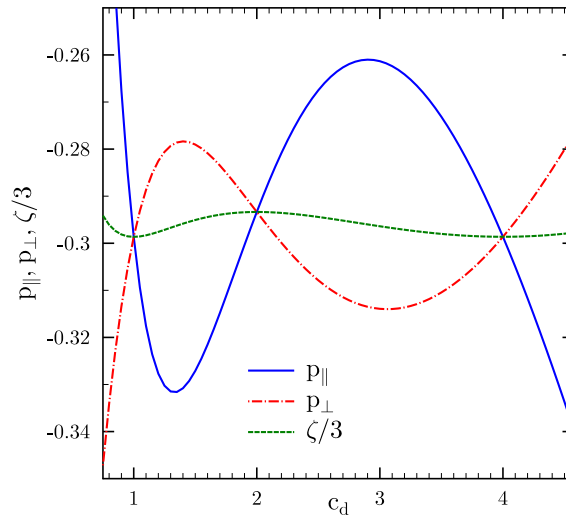


Рис. 1.11: Зависимость давлений $p_{||}$ и p_{\perp} для растянутой вдоль главной диагонали ОЦК решетки.

Случай растянутой вдоль главной диагонали ОЦК решетки (в направлении “на ближайшего соседа”) проиллюстрирован на рис. 1.11. На нем показано, как изменяются при растяжении электростатические давления вдоль направления растяжения ($p_{||}$) и перпендикулярно ему (p_{\perp}). Давление изотропно и равно $\zeta/3$ при $c_d = 1$ (ОЦК решетка), $c_d = 2$ (ПК решетка) и $c_d = 4$ (ГЦК решетка). Зависимость $\zeta/3$ от c_d также изображена на рис. 1.11. Заметим, что в этом случае масштаб изменения электростатического давления гораздо больше (анизотро-

пия давления может достигать 16%), чем в случае растяжения решетки вдоль ребер куба элементарной ячейки (менее 2%)¹⁴.

Таким образом, характер и величина деформации кристалла в коре нейтронной звезды существенно зависят от взаимной ориентации направления деформации и кристаллографических осей. Например, вдоль ребер куба ее элементарной ячейки ОЦК кристалл может растянуться очень сильно и даже перестроиться в другую кристаллическую структуру (ГЦК) при приложении сравнительно малого внешнего напряжения. Можно предположить, что такие существенные растяжения и перестройки могут повлиять на стабильность соседних областей коры и послужить триггерным механизмом для различного рода вспышечной активности в нейтронных звездах со сверхсильными магнитными полями (магнитарах). С другой стороны, вдоль главной диагонали ОЦК решетка может быть растянута сравнительно слабо и почти сразу теряет устойчивость (см. гл. 2). Причем для этого требуется приложить существенно большее внешнее напряжение. Такая сильная анизотропия поведения кристалла при приложении внешнего напряжения ставит под сомнение применимость феноменологических критериев Треска и фон Мизеса¹⁵ (например, [92]), часто используемых при исследованиях устойчивости коры нейтронной звезды [83].

1.4 Энергия Маделунга многокомпонентного кулоновского кристалла

Как уже было сказано в параграфе 1.1, в недрах вырожденных звезд не исключено образование многокомпонентных ионных смесей. Чтобы определить, при каких условиях возможно формирование многокомпонентных кристаллов, необходимо знать их электростатическую энергию. Энергия Маделунга многокомпонентного кулоновского кристалла с произвольным количеством ионов в элементарной ячейке равна:

$$U_M = N \frac{e^2}{a} \left\{ \frac{a}{2N_{\text{cell}}} \sum_{lpp'} Z_p Z_{p'} (1 - \delta_{pp'} \delta_{\mathbf{R}_l 0}) \frac{\text{erfc}(AY_l)}{Y_l} - \frac{3}{8N_{\text{cell}}^2 A^2 a^2} \sum_{pp'} Z_p Z_{p'} \right. \\ \left. - \frac{Aa}{N_{\text{cell}} \sqrt{\pi}} \sum_p Z_p^2 + \frac{3}{2N_{\text{cell}}^2 a^2} \sum_{mpp'} Z_p Z_{p'} \frac{1 - \delta_{\mathbf{G}_m 0}}{G_m^2} \exp \left[-\frac{G_m^2}{4A^2} + i\mathbf{G}_m(\boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'}) \right] \right\}. \quad (1.20)$$

Это выражение впервые было получено в работах [71, 93]. Ранее энергия многокомпонентного кристалла вычислялась другим способом, путем рассмотрения предельных случаев, когда многокомпонентная решетка становится однокомпонентной.

Проиллюстрируем оба метода на примере простейших решеток.

¹⁴Максимум анизотропии ограничен устойчивостью решетки относительно колебаний ионов около положения равновесия, о чем будет подробно сказано в главе 2, параграф 2.3.

¹⁵Критерии Треска и фон Мизеса определяют начало пластической деформации.

1.4.1 Энергия Маделунга бинарных ПК2 и Г2 решеток

Простейшим случаем многокомпонентного кулоновского кристалла, является кристалл, который образован ионами двух типов, причем положения ионов разных типов строго коррелированы между собой [71, 93]. Далее такой кристалл будем называть *бинарным*. Кристалл в котором тип иона в узле выбран произвольным образом, то есть положения ионов разных типов не коррелированы между собой, будем называть *неупорядоченным*. Так как масса ионов на электростатическую энергию не влияет, то важно, чтобы в данном случае ионы отличались друг от друга зарядом.

Рассмотрим упорядоченные бинарные ОЦК и ГПУ кристаллы. В этом случае ОЦК решетку представим, как ПК2 решетку (см. параграф 1.2). Заряд иона Z_2 , отвечающего χ_2 (на рис. 1.12А он выделен красным), отличается от заряда ионов Z_1 , отвечающего χ_1 (синие ионы на рис. 1.12А). Другими словами, эту систему можно представить, как совокупность двух однокомпонентных простых кубических решеток, сдвинутых относительно друг друга на вектор χ_2 . Далее бинарную ОЦК решетку будем называть *ПК2* или *sc2 решеткой* (также в литературе она называется CsCl решеткой). Аналогично, бинарную ГПУ решетку с ионом, отвечающим χ_2 и отличающимся от других ионов в элементарной ячейке, будем называть *гексагональной решеткой с базисом* или *Г2 решеткой* (рис. 1.12В). Очевидно, что в ПК2 и Г2 решетках концентрация ионов с зарядом Z_1 равна концентрации ионов с зарядом Z_2 , а сами решетки не меняются при замене $Z_1 \leftrightarrow Z_2$. В том случае, когда все ионы одинаковые, результаты для ПК2 и Г2 решеток эквивалентны результатам для ОЦК и ГПУ решеток, соответственно, что позволяет проверить правильность новых расчетов.

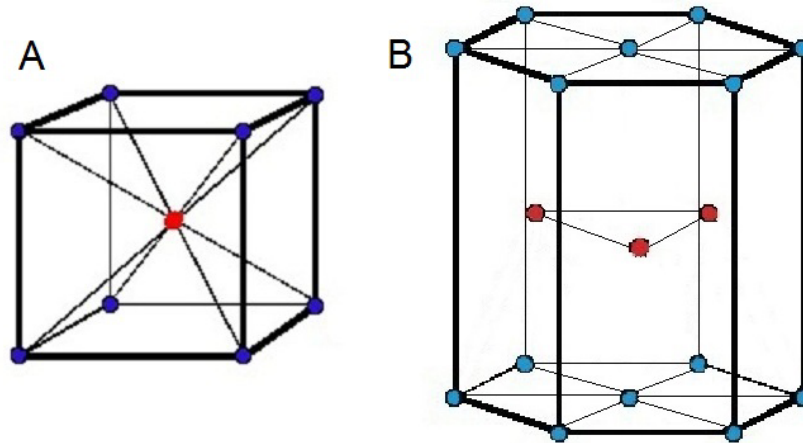


Рис. 1.12: ПК2 (рис. А) и Г2 (рис. В) решетки (разные цвета отвечают разным ионам).

Рассмотрим электростатическую энергию ПК2 и Г2 решеток. Для этого распишем детально выражение (1.4). Первое слагаемое в выражении (1.4), описывающее ион-ионное вза-

имодействие, может быть записано как:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{i-1} Z_i Z_j \Phi(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j) &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{l \\ l \neq l'}} \frac{(Z_1^2 + Z_2^2)e^2}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}|} + \frac{1}{2} \sum_{l'} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'} + \boldsymbol{\chi}|} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{l'} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'} - \boldsymbol{\chi}|} = \frac{1}{2} (Z_1^2 + Z_2^2) e^2 \sum'_{l, l \neq 0} \frac{1}{R_l} + Z_1 Z_2 e^2 \sum_l \frac{1}{|\mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}|} \quad , \quad (1.21) \end{aligned}$$

где $\boldsymbol{\chi} \equiv \boldsymbol{\chi}_2 - \boldsymbol{\chi}_1$.

Второе слагаемое в (1.4), отвечающее ион-электронному взаимодействию, может быть записано в виде:

$$\begin{aligned} n_e \sum_{i=1}^N Z_i \int_V d\mathbf{r} \Phi(\mathbf{X}_i - \mathbf{r}) &= n_e Z_1 e^2 \sum_l \int_V \frac{d\mathbf{r}}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{r}|} + n_e Z_2 e^2 \sum_l \int_V \frac{d\mathbf{r}}{|\mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi} - \mathbf{r}|} \\ &= \frac{n}{2} (Z_1^2 + Z_2^2) e^2 \int_V \frac{d\mathbf{r}}{r} + n Z_1 Z_2 e^2 \int_V \frac{d\mathbf{r}}{r} \quad , \quad (1.22) \end{aligned}$$

где использовано условие электронейтральности: $n_e = 0.5n(Z_1 + Z_2)$. Наконец, энергия взаимодействия электронов фона между собой имеет вид:

$$\frac{n_e^2}{2} \int_V \int_V d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{n}{4} (Z_1^2 + Z_2^2) e^2 \int_V \frac{d\mathbf{r}}{r} + \frac{n}{2} Z_1 Z_2 e^2 \int_V \frac{d\mathbf{r}}{r} \quad . \quad (1.23)$$

Объединяя (1.21), (1.22), (1.23), получим выражение для энергии Маделунга:

$$U_M = e^2 Z_1 Z_2 \left[\sum_l \frac{1}{|\mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}|} - \frac{n}{2} \int_V \frac{d\mathbf{r}}{r} \right] + \frac{e^2}{2} (Z_1^2 + Z_2^2) \left[\sum'_l \frac{1}{R_l} - \frac{n}{2} \int_V \frac{d\mathbf{r}}{r} \right] \quad . \quad (1.24)$$

Выражения в квадратных скобках (1.24), используя преобразование Эвальда, можно свести к более удобному для расчетов виду:

$$\begin{aligned} U_M &= N \frac{e^2}{a_1} \left[\frac{Z_1^2 + Z_2^2}{2} \xi'_{p1} + Z_1 Z_2 \xi'_{p2} \right] , \\ \xi'_{p1} &= \frac{a_1}{2} \left[\sum'_l \frac{\text{erfc}(AR_l)}{R_l} + 4\pi \frac{n}{2} \sum'_m \frac{1}{G_m^2} \exp\left(-\frac{G_m^2}{4A^2}\right) - \frac{2A}{\sqrt{\pi}} - \frac{n}{2} \frac{\pi}{A^2} \right] , \\ \xi'_{p2} &= \frac{a_1}{2} \left[\sum'_l \frac{\text{erfc}(A|\mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}|)}{|\mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}|} + 4\pi \frac{n}{2} \sum'_m \frac{1}{G_m^2} \exp\left(-\frac{G_m^2}{4A^2} + i\mathbf{G}_m \boldsymbol{\chi}\right) - \frac{n}{2} \frac{\pi}{A^2} \right] , \end{aligned} \quad (1.25)$$

или

$$U_M = N \frac{e^2}{a} \left[\frac{Z_1^2 + Z_2^2}{2} \xi_{p1} + Z_1 Z_2 \xi_{p2} \right] , \quad (1.26)$$

где $a = (4\pi n/3)^{-1/3}$, n — суммарная концентрация всех ионов, вне зависимости от типа. Для рассматриваемых ПК2 и Г2 решеток $\xi_{p1}^{\text{sc}2} = -0.698503642101$, $\xi_{p1}^{\text{h}2} = -0.618636671192$, $\xi_{p2}^{\text{sc}2} = -0.19742561358$ и $\xi_{p2}^{\text{h}2} = -0.277201449267$ [93].

Формулу (1.26) можно записать в виде:

$$U_M = N \frac{e^2}{a} \left[\frac{Z_1^2 + Z_2^2}{2^{4/3}} \zeta_1 + Z_1 Z_2 \left(\zeta_2 - \frac{\zeta_1}{2^{1/3}} \right) \right] = N \frac{Z_1^2 e^2}{a} \left[\frac{1 + \alpha^2}{2^{4/3}} \zeta_1 + \alpha \left(\zeta_2 - \frac{\zeta_1}{2^{1/3}} \right) \right] , \quad (1.27)$$

где $\alpha \equiv Z_2/Z_1$ (ионы пронумерованы так, что $Z_2 \geq Z_1$ и $\alpha > 1$). Для ПК2 решетки $\zeta_1 = \zeta_{sc}$ и $\zeta_2 = \zeta_{bcc}$. Для Г2 решетки $\zeta_1 = \zeta_{hex}$ и $\zeta_2 = \zeta_{hcp}$. Для дальнейшего удобства введем

$$\zeta_{sc2}(\alpha) \equiv (1 + \alpha^2)\zeta_{sc}/2^{4/3} + \alpha (\zeta_{bcc} - \zeta_{sc}/2^{1/3}) . \quad (1.28)$$

Энергию Маделунга ПК2 и Г2 решетки можно найти, не используя (1.26), а из предельных случаев. Если $Z_2 = 0$, число ионов уменьшается в два раза и $\xi_{p1} = \zeta_1/(2^{1/3})$, если $Z_1 = Z_2$, $\xi_{p1} + \zeta_{p2} = \zeta_2$. Этим способом в работах [74, 94] были вычислены значения электростатической энергии ПК2 и Г2 решеток, а также бинарной ГЦК решетки. Этот же метод использовался в статьях [95, 68], где были найдены энергии решеток флюорита и NaCl, решетки Дайсона¹⁶, а также решетки трехкомпонентного перовскита. Все результаты для энергии Маделунга многокомпонентных кристаллов, приведенные в параграфах 1.4.2–1.4.7, получены независимо, аналитически с помощью выражения (1.20). Известные ранее значения проверены и пересчитаны с большей точностью.

1.4.2 Энергия Маделунга бинарной ОЦР решетки

По аналогии с однокомпонентной ОЦР решеткой из параграфа 1.3.2, рассмотрим *бинарную ОЦР решетку*, в которой ион с зарядом Z_2 находится в центре элементарной ячейки. Ее также можно назвать растянутой вдоль ребер элементарной ячейки ПК2 решеткой или более обще *деформированной ПК2 решеткой*. Электростатическая энергия бинарной ОЦР решетки зависит не только от Z_1 и Z_2 , но и от отношений сторон элементарной ячейки c_1 и c_2 .

В частном случае при $c_1 = 1$, энергию Маделунга ОЦР решетки можно представить как:

$$U_M = N \frac{Z_1^2 e^2}{a} (K_1(c_2)(1 + \alpha^2) + K_2(c_2)\alpha) , \quad (1.29)$$

где коэффициенты $K_1(c_2)$ и $K_2(c_2)$ зависят только от геометрии решетки. Они были рассчитаны с точностью в 7 значащих цифр и аппроксимированы при $c_2 \in (0.9; 1.5)$ как:

$$K_{1,2}(c_2) = \sum_{i=0}^5 m_i c_2^i. \quad (1.30)$$

Коэффициенты аппроксимации приведены в таблице 1.2.

	m_0	m_1	m_2	m_3	m_4	$-m_5$
$K_1(c_2)$	0.02068415	-1.1884768	1.51271369	-0.98861528	0.343336742	0.04889381
$K_2(c_2)$	-0.5621188	0.8976909	-0.72252046	0.20825685	-0.01624913	0.00248495

Таблица 1.2: Коэффициенты аппроксимации электростатической энергии бинарной ОЦР решетки при $c_1 = 1$.

¹⁶Это название не общепринято и впервые было введено в работе [68].

В более общем случае при $c_1 \geq 1$ и $c_2 \geq 1$ электростатическая энергия бинарной ОЦР решетки была рассчитана и аппроксимирована как

$$U_M = N \frac{Z_1^2 e^2}{a} (K_1(c_1, c_2)(1 + \alpha^2) + K_2(c_1, c_2)\alpha), \quad (1.31)$$

$$K_{1,2}(c_1, c_2) = \sum_{i=0}^4 m_i(c_1^i + c_2^i) + n_1 c_1 c_2 + n_2 c_1^2 c_2^2 + n_3(c_1^2 c_2 + c_1 c_2^2) + n_4(c_1^3 c_2 + c_1 c_2^3).$$

При $c_2 = 1$ эта аппроксимация сводится к выражению (1.29). Коэффициенты аппроксимации m_i и n_i даны в таблице 1.3. Погрешность не превышает 0.02%. Аппроксимация проводилась при $1.0 \leq c_1, c_2 \leq 1.6$.

	i	0	1	2	3	4
$K_1(c_1, c_2)$	m_i	-0.0616385	-0.301618	0.474446	-0.202857	0.041644
	n_i		-0.3857925	0.0428725	0.0924215	-0.045568
$K_2(c_1, c_2)$	m_i	-0.3722545	0.776568	-0.793227	0.240636	-0.021922
	n_i		0.010696	0.021387	0.10033	-0.04487

Таблица 1.3: Коэффициенты аппроксимации электростатической энергии бинарной ОЦР решетки при $c_1 \geq 1$.

При фиксированных Z_1 и Z_2 минимум энергии Маделунга ОЦР решетки достигается при $c_1 = 1$ и $c_2 = 1$, то есть кубическая ПК2 решетка при изменении зарядов ионов остается кубической (в принципе, геометрия решетки может меняться при изменении отношения зарядов, как это происходит с Г2 решеткой, см. параграф 1.4.6) и ПК2 решетка устойчива относительно растяжений вдоль граней куба ее элементарной ячейки. Если зафиксировать α и $c_1 \neq 1$, то минимум энергии будет достигаться при c_2 , лежащем в интервале от 1.0 до 1.1 и слабо зависящем от c_1 . Однако, в этих условиях давление изотропным не будет.

1.4.3 Электростатическое давление и модули упругости ПК2 решетки

Зная точную энергию Маделунга деформированной ПК2 решетки, можно найти ее электростатическое давление и модули упругости. По аналогии с выражением (1.15) постоянную Маделунга бинарной ОЦР решетки можно аппроксимировать как

$$\zeta'(c_1, c_2, \alpha) \approx \zeta'_{sc2} - p'_{sc2} [(c_1 - 1) + (c_2 - 1)] + 0.25 s_{sc2}^{xxxx} [(c_1 - 1)^2 + (c_2 - 1)^2] + 0.5 s_{sc2}^{xyxy} (c_1 - 1)(c_2 - 1), \quad (1.32)$$

где $p'_{sc2} = \zeta'_{sc2}(\alpha)/3 \approx -0.472882(1 + \alpha^2) - 0.267312\alpha$ — электростатическое давление, $\zeta'_{sc2}(\alpha) = \zeta_{sc2}(\alpha)a/a_1$ — постоянная Маделунга ПК2 решетки, а модули упругости (эти значения аналитически рассчитаны впервые):

$$s_{sc2}^{xxxx} = 0.32969383(1 + \alpha^2) - 2.144195558\alpha, \quad s_{sc2}^{xyxy} = -0.637729828(1 + \alpha^2) + 0.804785789\alpha. \quad (1.33)$$

Модули упругости s_{sc2}^{xxxx} и s_{sc2}^{xyxy} нормированы так, чтобы они не зависели от Z_1 , например, $S_{sc2}^{xxxx} \equiv N(Z_1 e)^2 s_{sc2}^{xxxx} / (2a_1)$. Их значения при некоторых α приведены в таблице 1.4. Также введем величину $B \equiv n(Z_1 e)^2 b / a$, где $b \equiv (s_{sc2}^{xxxx} - s_{sc2}^{xyxy} - 2p'_{sc2}) / (512\pi/3)^{1/3}$. Это модуль упругости решетки, растянутой вдоль двух ребер и сжатой вдоль третьего ребра, так что объем элементарной ячейки остался неизменным [84]. Значения b при некоторых α приведены в таблице 1.4. Чем можно объяснить столь резкое поведение b по сравнению с s_{sc2}^{xxxx} и s_{sc2}^{xyxy} при увеличении α (при увеличении α от 1 к 3 она увеличивается в 32 раза, тогда как давление, s_{sc2}^{xxxx} и s_{sc2}^{xyxy} изменяются не более чем в 8.5 раза) остается неясным.

α	$-s_{sc2}^{xxxx}$	$-s_{sc2}^{xyxy}$	b	b^{dis}	c_{44}	c_{44}^{dis}	$\mu_{\text{eff}}^{\text{sc2}}$	$\mu_{\text{eff}}^{\text{dis}}$	$\mu_{\text{eff}}^{\text{lm}}$
1	1.48481	0.47067	0.0244879		0.18277		0.119457		0.119457
4/3	1.94311	0.698424	0.0523506	0.04895	0.239184	0.241	0.164451	0.164	0.164439
2	2.63992	1.57908	0.22627	0.272	0.324956	0.292	0.285482	0.284	0.28544
3	3.13565	3.96294	0.782632	0.532	0.385977	0.549	0.544639	0.542	0.544853

Таблица 1.4: Модули упругости ПК2 решетки.

Энергия Маделунга ПК2 решетки со сдвигом (сдвиг описывается также, как и у ОЦК решетки со сдвигом, отличие состоит только в ионном составе решетки) может быть аппроксимирована аналогично выражению (1.16) как

$$\zeta'(c_x, c_y) \approx \zeta'_{sc2} + 0.25 s_{sc2}^{xyxy} (c_x^2 + c_y^2), \quad s_{sc2}^{xyxy} = -0.164846915(1 + \alpha^2) + 1.072097779\alpha. \quad (1.34)$$

Видно, что $s_{sc2}^{xyxy} = -s_{sc2}^{xxxx} / 2$ (аппроксимационные выражения для s_{sc2}^{xyxy} и s_{sc2}^{xxxx} были получены независимо), как и для однокомпонентной ОЦК решетки. Значения $c_{44} \equiv s_{sc2}^{xyxy} / (64\pi/3)^{1/3}$ для некоторых α приведены в таблице 1.4.

Как сказано в [16] критерием устойчивости кристалла под действием малых однородных деформаций является положительность значения изменения электростатической энергии для всех комбинаций деформации, что накладывает ограничения на модули упругости. В частности, $c_{44} > 0$. Это неравенство справедливо только при $0.157577 < \alpha < 6.34603$. Таким образом при $\alpha > 6.34603$ и $\alpha < 0.157577$ ПК2 решетка неустойчива относительно малых деформаций. Как будет показано в гл. 2 ПК2 решетка теряет устойчивость относительно малых колебаний ионов около положения равновесия уже при $\alpha \approx 3.6$, что является более жестким критерием устойчивости.

Ранее модули упругости бинарных кулоновских кристаллов рассматривались только численно в работе [84]. Так в этой работе для двухкомпонентной неупорядоченной ОЦК решетки с одинаковой концентрацией ионов обоих типов были рассчитаны величины b и c_{44} при $\alpha = 4/3, 2$ и 3 . Эти значения, обозначенные как b^{dis} и c_{44}^{dis} (dis от англ. *disordered* — неупорядоченный), приведены в таблице 1.4 (в размерных величинах $C_{44}^{\text{dis}} \equiv n(Z_1 e)^2 c_{44}^{\text{dis}} / a$ и $B^{\text{dis}} \equiv n(Z_1 e)^2 b^{\text{dis}} / a$). Видно, что отличие между модулями упругости упорядоченного и неупорядоченного бинарного кристалла может быть существенно.

Модули упругости бинарного кристалла также можно вычислить с помощью “правила линейного смешивания”. Подробно о правиле линейного смешивания для энергии Маделунга будет сказано в параграфе 1.5. Здесь укажем только, что согласно ему модуль упругости b любой (вне зависимости от того, упорядочены ионы в ней или нет) двухкомпонентной ОЦК решетки с одинаковой концентрацией ионов обоих типов равен $b^{\text{lm}} = b^{\text{bcc}}(0.5 + 0.5\alpha^{5/3})(0.5 + 0.5\alpha)^{1/3}$, где $b^{\text{bcc}} = 0.0244879$ отвечает ОЦК кристаллу. Тогда $b^{\text{lm}} = 0.058515$ при $\alpha = 2$, что более чем в 4 раза меньше значений b , вычисленных другими способами. Для модулей $s_{\text{sc}2}^{\text{xxxx}}$ и $s_{\text{sc}2}^{\text{xxyy}}$ ситуация схожа. Следовательно, правило линейного смешивания не позволяет точно рассчитать эти модули упругости бинарного кристалла.

Иначе обстоит с эффективным модулем сдвига. В работе [84] он определен¹⁷ как $\mu_{\text{eff}} \equiv (2B + 3C_{44})/5$. В таблице 1.4 приведены значения μ_{eff} , нормированные на $nZ_1^2e^2/a$, вычисленные тремя разными способами:

- Эффективный модуль сдвига ПК2 решетки, найденный из разложения точного значения энергии Маделунга деформированной ПК2 решетки, равен

$$\mu_{\text{eff}}^{\text{sc}2} = n \frac{Z_1^2 e^2}{a} (0.0465669(1 + \alpha^2) + 0.0263234\alpha) . \quad (1.35)$$

- Эффективный модуль сдвига, рассчитанный по правилу линейного смешивания, обозначен как $\mu_{\text{eff}}^{\text{lm}}$ и равен

$$\mu_{\text{eff}}^{\text{lm}} = \mu_{\text{eff}}^{\text{bcc}}(0.5 + 0.5\alpha^{5/3})(0.5 + 0.5\alpha)^{1/3} = 0.119457n \frac{Z_1^2 e^2}{a} (0.5 + 0.5\alpha^{5/3})(0.5 + 0.5\alpha)^{1/3} , \quad (1.36)$$

где $\mu_{\text{eff}}^{\text{bcc}}$ — эффективный модуль сдвига ОЦК решетки состоящей из ионов с зарядом Z_1 .

- $\mu_{\text{eff}}^{\text{dis}}$ — эффективный модуль сдвига неупорядоченного бинарного ОЦК кристалла, рассчитанный численно в работе [84].

Видно, что при таком выборе μ_{eff} все три значения хорошо согласуются друг с другом. Это позволяет утверждать, что разница между μ_{eff} упорядоченного и неупорядоченного кристалла не превышает долей процента, а так же то, что правило линейного смешивания позволяет найти μ_{eff} с хорошей для практического использования точностью.

1.4.4 Энергия Маделунга бинарной ГЦР решетки

Примером решетки, в которой одних ионов (с зарядом Z_2) в три раза больше, чем других (с зарядом Z_1), является *бинарная ГЦК решетка*. В ней ионы с зарядом Z_1 расположены в вершинах куба элементарной ячейки, а ионы с зарядом Z_2 — в центрах граней. Такую ГЦК решетку удобно представить, как простую решетку с векторами базиса $\chi_1 = 0$, $\chi_2 =$

¹⁷Это совпадает с определением из работы [90], упоминавшейся ранее.

$0.5a_1(1, 1, 0)$, $\chi_3 = 0.5a_1(0, 1, 1)$ и $\chi_4 = 0.5a_1(1, 0, 1)$. Электростатическая энергия бинарной ГЦК решетки равна

$$U_M \equiv -N \frac{Z_1^2 e^2}{a} \zeta'_{\text{fccb}}(\alpha) = -N \frac{Z_1^2 e^2}{a} (0.138600677 + 0.1707354535\alpha + 0.5865374846\alpha^2). \quad (1.37)$$

Впервые она была рассчитана в работе [94], а здесь представлена с большей точностью.

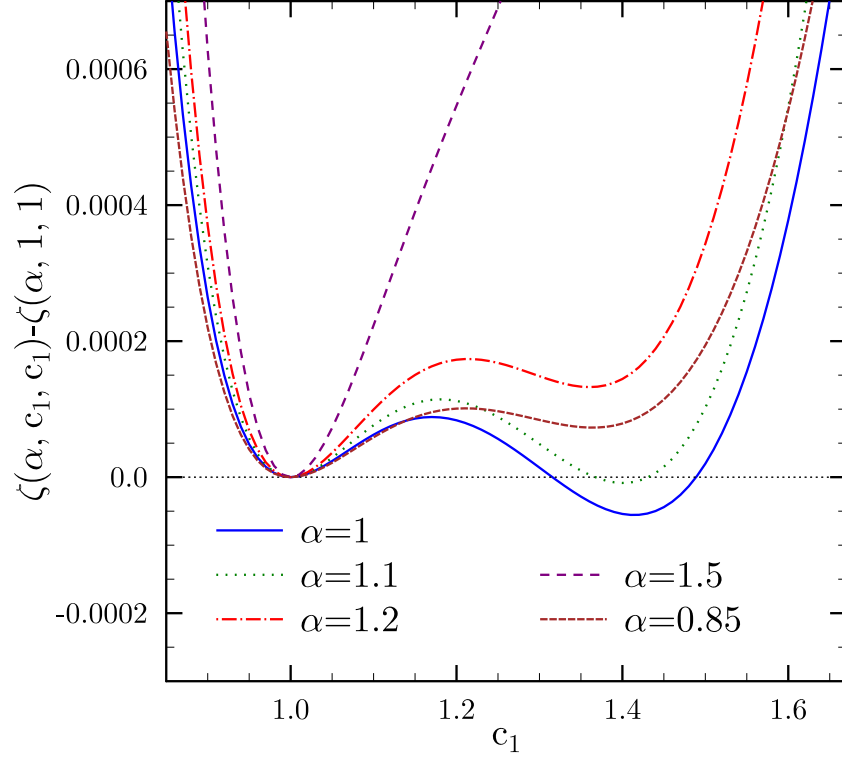


Рис. 1.13: Энергия Маделунга бинарной ГЦР при $c_2 = c_1$.

Энергия Маделунга *бинарной ГЦР решетки* решетки нигде ранее не рассматривалась. По аналогии с ОЦР решеткой она может быть записана в виде

$$U_M = N \frac{Z_1^2 e^2}{a} \zeta_{\text{fco}}(\alpha, c_1, c_2). \quad (1.38)$$

Величина $\zeta_{\text{fco}}(\alpha, c_1, c_2)$ была рассчитана для большого набора параметров, но в общем случае не была аппроксимирована. При малых $c_1 - 1$ и $c_2 - 1$ приближенное значение $\zeta'_{\text{fco}}(\alpha, c_1, c_2)$ можно найти с помощью модулей упругости, которые приведены в следующем параграфе. При $c_2 = c_1 = 1$ постоянная Маделунга бинарной ГЦР решетки равна постоянной Маделунга бинарной ГЦК решетки [выражение (1.37)], а при $\alpha = 1$ — однокомпонентной ГЦР решетки. При фиксированном α минимальное значение $\zeta_{\text{fco}}(\alpha, c_1, c_2)$ всегда достигается при $c_2 = c_1$, но не обязательно при $c_1 = 1$.

Зависимость $\zeta_{\text{fco}}(\alpha, c_1, c_1) - \zeta_{\text{fco}}(\alpha, 1, 1)$ от c_1 при разных α показана на рис. 1.13. Случай $\alpha = 1$ подробно обсуждался ранее, в параграфе 1.3.2. Минимум при $\zeta_{\text{fco}}(1, \sqrt{2}, \sqrt{2})$ соответствует ОЦК решетке. Из рисунка хорошо видно, что при $|\alpha - 1| \lesssim 0.1$ минимальной энергией Маделунга обладает решетка с $c_1 \approx 1.4$, то есть, со структурой, схожей, если пренебречь

зарядовым различием, с ОЦК решеткой. Например, при $\alpha = 1.1$ минимальное значение $\zeta_{\text{fco}}(\alpha, c_1, c_2)$ равно -1.036128545 достигается при $c_1 = c_2 \approx 1.40094$. При бóльших $|\alpha - 1|$ минимальную энергию среди всех бинарных ГЦР решеток имеет бинарная ГЦК решетка. При любом α и $c_1 = c_2 = 1$ функция $\zeta_{\text{fco}}(\alpha, c_1, c_1)$ имеет локальный минимум, следовательно относительно малых растяжений бинарная ГЦК решетка устойчива [16].

1.4.5 Электростатическое давление и модули упругости бинарной ГЦК решетки

Модули упругости бинарной ГЦК решетки ранее не рассматривались. Их можно определить по аналогии с модулями упругости бинарной ПК2 решетки из разложения электростатических энергий бинарной ГЦР решетки и бинарной ГЦК решетки со сдвигом. Как и ПК2 решетка, бинарная ГЦК решетка имеет два независимых модуля упругости (так как $s_{\text{fccb}}^{xyxy} = -s_{\text{fccb}}^{xxxx}/2$):

$$\begin{aligned} s_{\text{fccb}}^{xxxx} &= -0.78347781 - 1.27801856\alpha + 0.16484692\alpha^2, \\ s_{\text{fccb}}^{xyxy} &= -0.60884623 + 0.34774851\alpha - 0.31886491\alpha^2, \end{aligned} \quad (1.39)$$

Электростатическое давление бинарной ГЦК решетки изотропно и равно $p'_{\text{fccb}} = \zeta'_{\text{fccb}}(\alpha)/3 \approx -0.236442 - 0.291261\alpha - 1.00058\alpha^2$. Как и ПК2 решетка бинарная ГЦК решетка должна быть устойчива при $s_{\text{fccb}}^{xyxy} > 0$, то есть при $\alpha < 8.32374$, что лежит далеко за границей устойчивости ГЦК решетки относительно колебаний ионов в ней около положения равновесия.

Эффективный модуль сдвига бинарной ГЦК решетки равен:

$$\mu_{\text{eff}}^{\text{fccb}} = n \frac{Z_1^2 e^2}{a} (0.07820500 + 0.02276473\alpha + 0.01848009\alpha^2). \quad (1.40)$$

Его также можно найти с помощью правила линейного смешивания. В этом случае он равен

$$\mu_{\text{eff}}^{\text{lm}} = 0.11944982n \frac{Z_1^2 e^2}{a} (0.25 + 0.75\alpha^{5/3})(0.25 + 0.75\alpha)^{1/3}. \quad (1.41)$$

Отношение $\mu_{\text{eff}}^{\text{lm}}/\mu_{\text{eff}}^{\text{fccb}}$ всегда больше 1 и не превосходит 1.01 при $0.36 < \alpha < 3$. То есть и для бинарной ГЦК решетки правило линейного смешивания позволяет найти μ_{eff} с хорошей для практического применения точностью.

1.4.6 Энергия Маделунга бинарных решеток NaCl и кристобалита

Рассмотрим еще две решетки с кубической сингонией, часто встречающиеся в литературе (например, [95, 67, 68]).

В решетке NaCl ионы с зарядом Z_1 образуют ГЦК решетку. Такую же ГЦК решетку, только сдвинутую на вектор $0.5a_1(1, 1, 1)$ относительно ионов с Z_1 , образуют ионы с зарядом Z_2 . Таким образом бинарную NaCl решетку можно описать как ГЦК решетку с векторами базиса $\chi_1 = 0$ и $\chi_2 = 0.5a_1(1, 1, 1)$. При $Z_1 = Z_2$ она становится простой кубической, а при $Z_2 = 0$ — ГЦК решеткой. В общем случае энергия Маделунга бинарной NaCl решетки равна:

$$U_{\text{M}} = -N \frac{Z_1^2 e^2}{a} (0.3555276798(1 + \alpha^2) + 0.1690040825\alpha), \quad (1.42)$$

что согласуется и уточняет результаты работ [95, 68]. При $\alpha < 4.3$ энергия ПК2 решетки меньше, чем NaCl решетки.

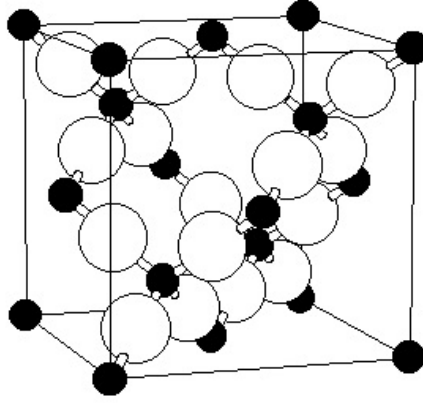


Рис. 1.14: Решетка β -квистобалита.

Одна из полиморфных модификаций диоксида кремния называется β -квистобалитом. Его решетка может быть описана как простая кубическая решетка с 24 векторами базиса. Она показана на рис. 1.14, где маленькими черными шарами изображены ионы Si с зарядом Z_1 , а большими белыми — ионы O с зарядом Z_2 . Энергия Маделунга квистобалита равна:

$$U_M = -N \frac{Z_1^2 e^2}{a} (0.1930839433 - 0.1014330353\alpha + 0.43098544745\alpha^2). \quad (1.43)$$

Это выражение получено впервые. Отметим, что решетка квистобалита, обозначенная как θ , рассматривалась в работе [67] как одна из возможных кристаллических конфигураций смеси неона и углерода. Однако, в работе [67] для описания решеток использовался экранированный кулоновский потенциал, что не позволяет провести точное сравнение с представляемыми расчетами. К тому же, значения электростатических энергий решеток в работе [67] явно не приведены.

При $Z_1 = Z_2$ постоянная Маделунга квистобалита равна -0.522636355 , то есть однокомпонентный квистобалит обладает наибольшей энергией Маделунга среди всех рассмотренных решеток.

1.4.7 Энергия Маделунга бинарных решеток с гексагональной сингонией

Как и в случае однокомпонентной ГПУ решетки, высоту элементарной ячейки Г2 решетки можно считать произвольной (этот случай раньше никем не рассматривался). Электростатическую энергию Г2 решетки с высотой $h \in (1.1; 1.8)$ можно аппроксимировать как

$$U_M = N \frac{Z_1^2 e^2}{a} \zeta_{h2}(h, \alpha) = N \frac{Z_1^2 e^2}{a} (K_1(h)(1 + \alpha^2) + K_2(h)\alpha), \quad K_{1,2}(h) = \sum_{i=0}^5 m_i h^i. \quad (1.44)$$

Значения m_i приведены в таблице 1.5. Точность аппроксимации такая же, как и для ОЦР решетки.

	m_0	m_1	m_2	m_3	m_4	m_5
$K_1(h)$	-0.16189364	-0.5579413	0.5939561	-0.3011056	0.08557277	-0.01011867
$K_2(h)$	-0.5115757	1.0714258	-1.1718758	0.56326835	-0.14312075	0.0150406

Таблица 1.5: Коэффициенты аппроксимации электростатической энергии Г2 решетки.

При любом фиксированном α зависимость $\zeta_{h_2}(h, \alpha)$ от h имеет минимум при некотором $h_{h_20}(\alpha)$. Тогда можно ввести величину $\zeta_{h_20}(\alpha) \equiv \zeta_{h_2}(h_{h_20}, \alpha)$. При увеличении относительной разницы между зарядами (решетка не меняется при замене $Z_1 \leftrightarrow Z_2$) высота Г2 решетки уменьшается. Это проиллюстрировано в таблице 1.6, где приведены значения $h_{h_20}(\alpha)$ и $\zeta_{h_20}(\alpha)$ для некоторых α . Как видно из таблицы, $h_{h_20}(\alpha)$ может изменяться значительно, и, в общем случае, при рассмотрении Г2 решетки фиксировать h некорректно. Однако, как будет показано в главе 2, Г2 решетка с $h = h_{h_20}(\alpha)$ перестает быть устойчивой при $\alpha \gtrsim 1.25$, и в столь небольшом диапазоне по α (от 0.8 до 1.25) масштаб изменения h_{h_20} не превосходит 3.5%. Далее при рассмотрении свойств Г2 решетки будем считать, что ее высота не зависит от α и равна $h_{\text{нсп}}$ (если не сказано иного).

α	$h_{h_20}(\alpha)$	$\zeta_{h_20}(\alpha)$
1.2	1.6	-1.0874421492
1.5	1.47435	-1.4230969646
2	1.2586	-2.1200861237

Таблица 1.6: Значения $h_{h_20}(\alpha)$ Г2 решетки и $\zeta_{h_20}(\alpha)$ для некоторых α .

При одинаковой плотности и при любых $\alpha \sim 1$ энергия Г2 решетки больше, чем электростатическая энергия ПК2 решетки. Это проиллюстрировано на рис. 1.15, где представлена зависимость $\Delta\zeta \equiv \zeta_{h_20}(\alpha) - \zeta_{\text{сск2}}(\alpha)$ от α (устойчивость Г2 решетки при больших α во внимание не принята).

Более сложной структурой, чем Г2 решетка, является *решетка диборида магния* (как и решетка кристобалита, она рассматривалась в работе [67], где она названа γ -решеткой, но ее энергия Маделунга ранее не рассчитывалась). Ее можно описать теми же векторами основных трансляций решетки, что и Г2 решетку: $\mathbf{a}_1 = a_1(1, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = 0.5a_1(1, \sqrt{3}, 0)$, $\mathbf{a}_3 = a_1(0, 0, h)$ и тремя векторами базиса: $\boldsymbol{\chi}_1 = 0$ (он соответствует иону с зарядом Z_1), $\boldsymbol{\chi}_2 = 0.5a_1(1, \sqrt{3}/3, h)$ и $\boldsymbol{\chi}_3 = a_1(1, \sqrt{3}/3, h/2)$. Расстояние между слоями ионов с зарядом Z_1 , обозначенное как h , не фиксировано (для кристалла, существующего в природе, $h \approx 1.142$). Следовательно, электростатическая энергия бинарного MgB_2 кристалла зависит от двух параметров h и α :

$$U_{\text{M}} = N \frac{Z_1^2 e^2}{a} \zeta_{\text{MgB}_2}(h, \alpha) = N \frac{Z_1^2 e^2}{a} (K_1(h) + K_2(h)\alpha + K_3(h)\alpha^2), \quad (1.45)$$

где параметры $K_1(h)$, $K_2(h)$ и $K_3(h)$ зависят только от h . При h между 0.5 и 1.85 они могут

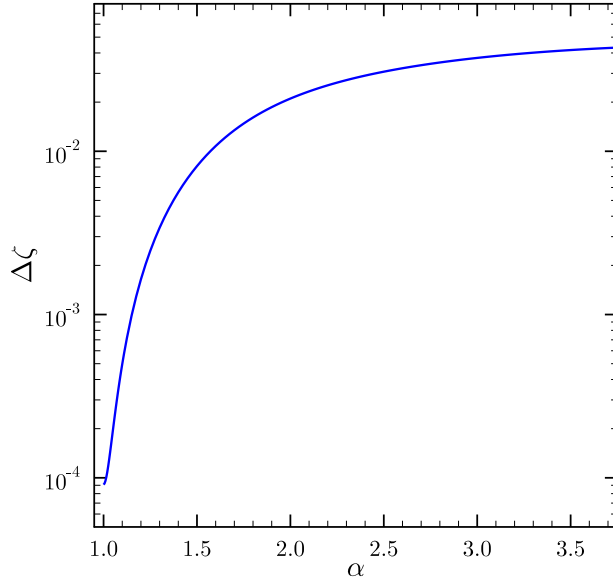


Рис. 1.15: Зависимость разности между энергиями Маделунга ПК2 и Г2 решеток от α .

быть аппроксимированы с погрешностью не превышающей 0.05% как

$$K_{1,2,3}(h) = \sum_{i=0}^7 m_i h^i, \quad (1.46)$$

где коэффициенты аппроксимации даны в таблице 1.7.

	m_0	m_1	m_2	m_3
$K_1(h)$	0.383321	3.09006	7.21763	-9.63175
$K_2(h)$	-0.677904	1.87234	-3.26584	3.70539
$K_3(h)$	0.381939	-4.85327	11.5234	-15.4381
	m_4	m_5	m_6	m_7
$K_1(h)$	7.80169	-3.7803	1.00879	-0.114044
$K_2(h)$	-2.97767	1.51651	-0.430256	0.0514738
$K_3(h)$	12.646	-6.19333	1.66776	-0.189958

Таблица 1.7: Коэффициенты аппроксимации электростатической энергии MgB_2 решетки.

При $Z_1 = Z_2$ постоянная Маделунга решетки диборида магния достигает минимума, равного -0.89450562823 при $h \approx 0.593936$, что больше постоянных Маделунга ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток, но меньше однокомпонентных решеток флюорита, перовскита, алмаза и многих других. Как и у Г2 решетки обозначим высоту MgB_2 решетки, при которой достигается минимальное значение $\zeta_{\text{MgB}_2}(h, \alpha)$ при фиксированном α , как $h_{\text{MgB}_2}(\alpha)$ и введем $\zeta_{\text{MgB}_2}(\alpha) \equiv \zeta_{\text{MgB}_2}(h_{\text{MgB}_2}, \alpha)$. Отличие состоит в том, что $h_{\text{MgB}_2}(\alpha)$ изменяется не монотонно при изменении α . Это показано в таблице 1.8 (см. также рис. 2.22), где приведены значения $h_{\text{MgB}_2}(\alpha)$ и $\zeta_{\text{MgB}_2}(\alpha)$ для некоторых α .

α	$h_{\text{MgB}_2\text{O}}(\alpha)$	$\zeta_{\text{MgB}_2\text{O}}(\alpha)$	α	$h_{\text{MgB}_2\text{O}}(\alpha)$	$\zeta_{\text{MgB}_2\text{O}}(\alpha)$
0.2	1.028	-0.2641376075	1.25	0.591	-1.22218432727
0.4	0.914	-0.3600172447	1.5	0.595	-1.61057883013
0.5	0.729	-0.42325073365	1.75	0.601	-2.0597607806
0.75	0.619	-0.62771700828	2	0.607	-2.56981540483

Таблица 1.8: Значения $h_{\text{MgB}_2\text{O}}(\alpha)$ MgB_2 решетки и $\zeta_{\text{MgB}_2\text{O}}(\alpha)$ для некоторых α .

1.4.8 Энергия Маделунга трехкомпонентных решеток

Исследуем энергию Маделунга нескольких решеток, состоящих из трех типов ионов. Все рассмотренные ниже решетки либо изучались ранее [68, 67], либо являются естественным развитием более частных случаев. Отметим, что все рассматриваемые конфигурации ионов соответствуют локальному минимуму энергии.

Постоянную Маделунга *трехкомпонентного перовскита* (BaTiO_3) можно найти с помощью представления, использованного в параграфе 1.3.2 для однокомпонентного перовскита. При таком подходе ион с зарядом Z_2 (Ti) соответствует вектору базиса χ_1 , ион с зарядом Z_3 (O) — векторам χ_2 , χ_3 и χ_4 , а ион с зарядом Z_1 — вектору χ_5 . Тогда согласно (1.20):

$$U_M = -N \frac{e^2}{a} (0.102932376777(Z_1^2 + Z_2^2) + 0.058185774325Z_1Z_2 + 0.126797403936Z_1Z_3 + 0.020881575292Z_2Z_3 + 0.435594534266Z_3^2), \quad (1.47)$$

что согласуется и уточняет значение полученное в работе [68].

Энергия Маделунга остальных трехкомпонентных решеток ранее в общем случае не рассматривалась и здесь представлена впервые.

Трехкомпонентный флюорит — кристалл соединения типа AB_3C_8 . В нем ион с зарядом Z_1 соответствует вектору базиса χ_1 , ион с зарядом Z_2 — векторам базиса χ_{2-4} , а ион с зарядом Z_3 — векторам χ_{5-12} (вектора базиса приведены в параграфе 1.3.2, при описании однокомпонентного флюорита). При $Z_3 = 0$ такая решетка становится бинарной ГЦК решеткой, а при $Z_2 = Z_3 = 0$ — простой кубической. Энергия трехкомпонентного флюорита равна:

$$U_M = -N \frac{e^2}{a} (0.03203344735Z_1^2 + 0.1355607926Z_2^2 + 0.51253515762Z_3^2 + 0.03946045054Z_1Z_2 + 0.03621583406Z_1Z_3 + 0.10864750219Z_2Z_3). \quad (1.48)$$

Выражение (1.48) точно воспроизводит не только предельные случаи, указанные выше, но и при $Z_1 = Z_2$ рассмотренный в [68] случай двухкомпонентного флюорита, который важен тем, что обычно решетку флюорита имеют именно двухкомпонентные соединения типа AB_2 , например, CaF_2 .

В *трехкомпонентном алмазе* ион с зарядом Z_1 расположен в узле решетки с χ_1 , ионы зарядом Z_2 — в узлах решетки χ_{2-4} , а с зарядом Z_3 в остальных узлах (см. параграф 1.3.1).

Его электростатическая энергия равна:

$$U_M = -N \frac{e^2}{a} (0.05500371513Z_1^2 + 0.23276755503Z_2^2 + 0.3555276798Z_3^2 + 0.06775640963Z_1Z_2 + 0.09327775738Z_1Z_3 + 0.03109258579Z_2Z_3). \quad (1.49)$$

При $Z_2 = Z_1$ концентрация ионов с зарядом Z_3 равна концентрации ионов с зарядом Z_1 . Энергия Маделунга такого бинарного алмаза при любых α больше, чем U_M ПК2 решетки.

Таким образом, обобщив всю информацию о бинарных решетках с равной концентрацией ионов (решетки ПК2, Г2, NaCl и алмаз), получим, что ПК2 решетка обладает минимальной энергией Маделунга при любых допустимых ее устойчивостью α (см. гл. 2).

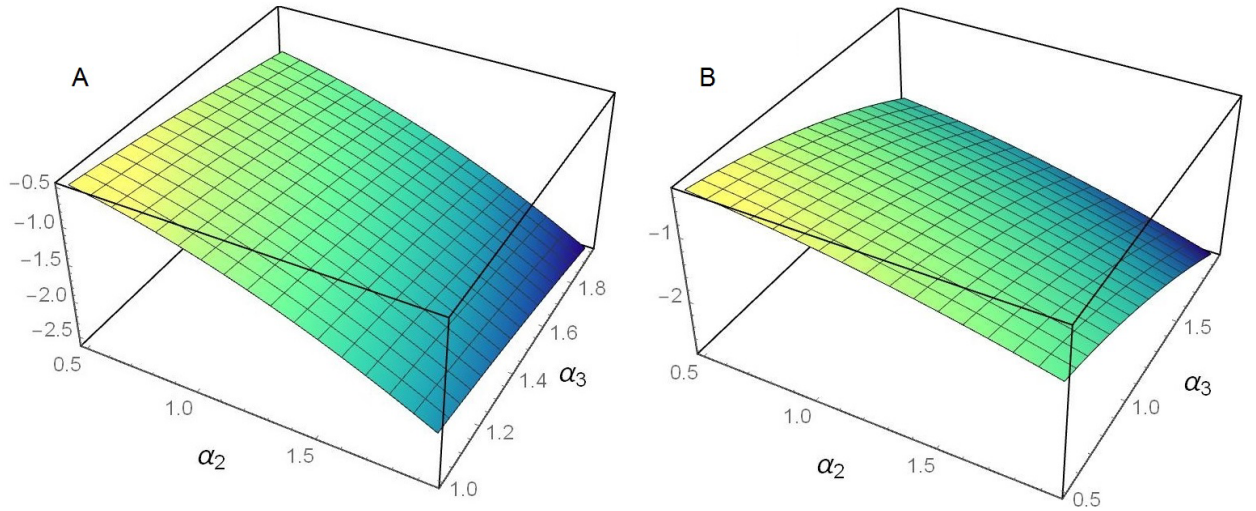


Рис. 1.16: Зависимость $\zeta_Z(\alpha_2, \alpha_3)$ (рис. А) и $\zeta_H(\alpha_2, \alpha_3)$ (рис. В) от α_2 и α_3 .

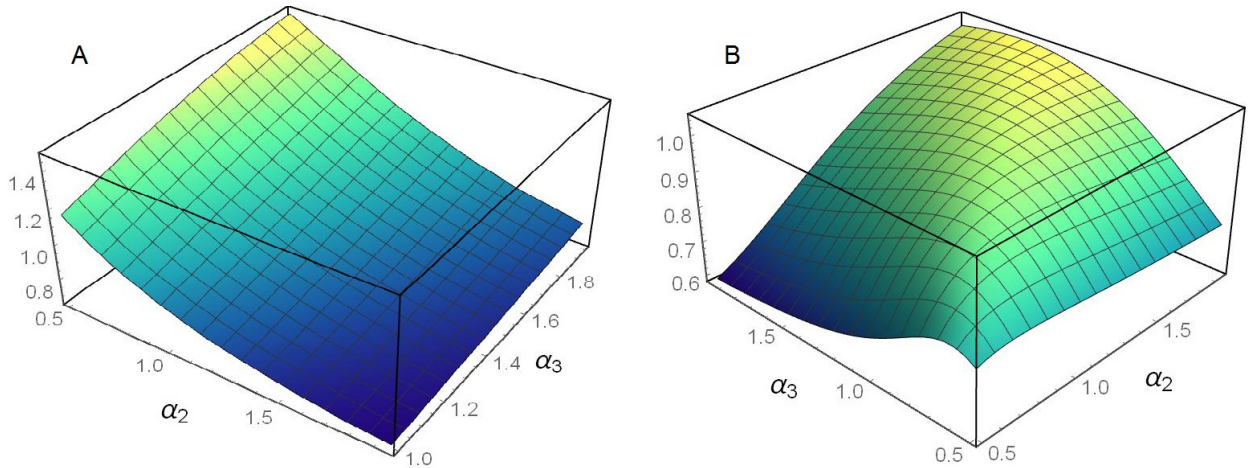


Рис. 1.17: Зависимость $h_Z(\alpha_2, \alpha_3)$ (рис. А) и $h_H(\alpha_2, \alpha_3)$ (рис. В) от α_2 и α_3 .

Рассмотрим энергию Маделунга еще двух решеток, упомянутых в работе [67]: кристаллы обозначенные там как ζ (соединение типа FeOC_2) и η (соединение типа FeO_3C_2).

ζ -решетку можно описать, как гексагональную (вектора основных трансляций такие же как у ГУ решетки) с четырьмя векторами базиса: вектор $\chi_1 = 0$ соответствует иону с зарядом

Z_1 ; вектора $\chi_2 = 0.5a_1(1, \sqrt{3}/3, 0)$ и $\chi_3 = a_1(1, \sqrt{3}/3, 0)$ ионам с зарядом Z_2 ; а $\chi_4 = 0.5a_1(0, 0, h)$ иону с зарядом Z_3 . При фиксированных $\alpha_2 \equiv Z_2/Z_1$ и $\alpha_3 \equiv Z_3/Z_1$ выберем h таким, что U_M минимальна и обозначим его $h_Z(\alpha_2, \alpha_3)$. Решетка не изменится при замене $Z_3 \leftrightarrow Z_1$ поэтому ионы пронумерованы так, что $\alpha_3 \geq 1$. Энергию Маделунга ζ -решетки представим в виде

$$U_M = N \frac{Z_1^2 e^2}{a} \zeta_Z(\alpha_2, \alpha_3). \quad (1.50)$$

Зависимость $\zeta_Z(\alpha_2, \alpha_3)$ от α_2 и α_3 показана на рис. 1.16А, а зависимость $h_Z(\alpha_2, \alpha_3)$ — на рис. 1.17А. При $Z_1 = Z_2 = Z_3$ постоянная Маделунга равна -0.8242044637442 , а $h_Z(1, 1) = 0.867108$.

η -решетку можно описать, как гексагональную с шестью векторами базиса: вектор $\chi_1 = 0$ соответствует иону с зарядом Z_1 ; вектора $\chi_2 = 0.5a_1(1, \sqrt{3}/3, 0)$ и $\chi_3 = a_1(1, \sqrt{3}/3, 0)$ — ионам с зарядом Z_2 ; а вектора $\chi_4 = 0.5a_1(1, 0, h)$, $\chi_5 = 0.25a_1(3, \sqrt{3}, 2h)$ и $\chi_6 = 0.25a_1(5, \sqrt{3}, 2h)$ — ионам с зарядом Z_3 . Здесь также не фиксированное h выбирается из условия минимальности энергии Маделунга: $h_H(\alpha_2, \alpha_3)$. Энергию Маделунга η -решетки запишем как

$$U_M = N \frac{Z_1^2 e^2}{a} \zeta_H(\alpha_2, \alpha_3). \quad (1.51)$$

Зависимости $\zeta_H(\alpha_2, \alpha_3)$ и $h_H(\alpha_2, \alpha_3)$ от α_2 и α_3 показаны на рис. 1.16В и 1.17В, соответственно. При $Z_1 = Z_2 = Z_3$ постоянная Маделунга равна $\zeta_H(1, 1) = -0.8721352931537$ и $h_H(1, 1) = 0.95162$.

Всего в работе [67] было рассмотрено восемь решеток: четыре упомянуты выше; также подробно исследованные однокомпонентная ОЦК решетка (α -решетка) и ПК2 решетка (β -решетка); не рассмотренные в представляемой работе, орторомбическая δ -решетка и тетрагональная ϵ -решетка. Заметим, что в общем случае δ -решетка — это деформированная (как решетка со сдвигом, так и растянутая) NaCl решетка.

1.4.9 Энергия Маделунга решетки Дайсона

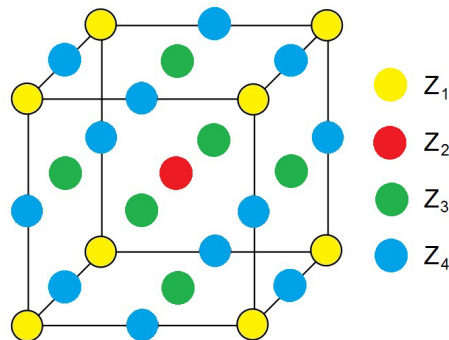


Рис. 1.18: Решетка Дайсона.

В общем случае кристалл Дайсона состоит из четырех типов ионов. Его элементарная ячейка изображена на рис. 1.18: желтые ионы имеют заряд Z_1 , красные ионы — Z_2 , зеленые ионы — Z_3 , синие ионы — Z_4 . Случай $Z_1 = Z_2$ и $Z_3 = Z_4$ был впервые рассмотрен в работе

[95], а также исследовался в работе [68]. Общий случай, когда кристалл состоит из ионов четырех разных типов, ранее не рассматривался.

Решетку Дайсона можно рассмотреть как простую кубическую с восемью векторами базиса: $\chi_1 = 0$, $\chi_2 = 0.5a_1(1, 1, 1)$, $\chi_3 = 0.5a_1(1, 1, 0)$, $\chi_4 = 0.5a_1(1, 0, 1)$, $\chi_5 = 0.5a_1(0, 1, 1)$, $\chi_6 = 0.5a_1(1, 0, 0)$, $\chi_7 = 0.5a_1(0, 1, 0)$ и $\chi_8 = 0.5a_1(0, 0, 1)$. При $Z_1 = Z_2$ и $Z_3 = Z_4 = 0$ решетка Дайсона становится ОЦК решеткой, при $Z_1 = Z_3$ и $Z_2 = Z_4$ — NaCl решеткой, при $Z_1 = Z_3$ и $Z_2 = Z_4 = 0$ — ГЦК решеткой, а при $Z_1 = Z_2 = Z_3 = Z_4$ — простой кубической. При одновременной замене $Z_1 \leftrightarrow Z_2$ и $Z_3 \leftrightarrow Z_4$ решетка не изменится. Энергия Маделунга решетки Дайсона равна

$$U_M = -N \frac{e^2}{a} (0.0550037151(Z_1^2 + Z_2^2) + 0.232767555(Z_3^2 + Z_4^2) + 0.0310925858Z_1Z_2 + 0.0677564096(Z_1Z_3 + Z_2Z_4) + 0.0111584348(Z_2Z_3 + Z_1Z_4) + 0.115594627Z_3Z_4). \quad (1.52)$$

Это выражение рассчитано впервые, а при $Z_1 = Z_2$ и $Z_3 = Z_4$ находится в полном согласии с результатами работ [95, 68].

1.5 Правило линейного смешивания для электростатической энергии многокомпонентных кулоновских кристаллов

Чаще всего для описания многокомпонентных кулоновских кристаллических смесей использовалось *правило линейного смешивания* (ПЛС). Оно заключается в том, что любая термодинамическая величина (например, энергия Маделунга) многокомпонентного кристалла представляется в виде взвешенного среднего термодинамических величин однокомпонентных кристаллов, имеющих ту же концентрацию электронов, что и многокомпонентный кристалл (например, [52]). Правило линейного смешивания просто и удобно для использования, зачастую оно дает хорошую точность вычислений, однако, это происходит не всегда (см. параграф 1.4.3). Насколько точно оно выполняется необходимо проверять при каждом конкретном использовании.

В данном параграфе рассмотрим, насколько точно правило линейного смешивания выполняется для энергии Маделунга и можно ли его использовать при сравнении энергий различных решеток между собой. Предполагается, что кристаллическая структура однокомпонентных кристаллов такая же, что и у многокомпонентных. Представлять многокомпонентный кристалл в виде суммы однокомпонентных кристаллов с другой структурой в данном случае неразумно, хотя бы потому, что пределе $\alpha \rightarrow 1$ отношение их энергии не будет стремиться к 1, а следовательно точность таких вычислений заведомо хуже.

Согласно ПЛС энергия Маделунга бинарных кулоновских кристаллов должна описываться выражением:

$$U_M^{\text{lm}} = N_1 \frac{Z_1^2 e^2}{a_1} \zeta_0 + N_2 \frac{Z_2^2 e^2}{a_2} \zeta_0, \quad (1.53)$$

где N_i — число ионов i -ого сорта, a_j выбираются таким образом, чтобы концентрация электронов для каждой компоненты смеси по отдельности равнялась концентрации электронов в смеси $a_j = (4\pi n_j/3)^{-1/3} = a (Z_j/\bar{Z})^{-1/3}$, n_j — концентрация ионов j -ой компоненты смеси, ζ_0 — постоянная Маделунга рассматриваемого однокомпонентного кристалла, $\bar{Z} = (N_1 Z_1 + N_2 Z_2)/N$ — средний заряд.

Выражение (1.53) можно переписать в виде

$$U_M^{\text{lm}} = N \frac{Z_1^2 e^2}{a} \zeta_0 \left(\frac{N_1}{N} + \frac{N_2}{N} \alpha \right)^{1/3} \left(\frac{N_1}{N} + \frac{N_2}{N} \alpha^{5/3} \right). \quad (1.54)$$

Используя точное значение энергии Маделунга многокомпонентного кристалла U_M , рассчитанное с помощью выражения (1.20), можно исследовать, насколько точно выполняется ПЛС для различных решеток. Например, для ПК2 решетки $N_1 = N_2 = N/2$, а $\zeta_0 = \zeta_{\text{bcc}}$. Отношение U_M^{lm} к U_M равно [93]:

$$\frac{U_M^{\text{lm}}}{U_M} = \frac{(1 + \alpha)^{1/3} (1 + \alpha^{5/3}) \zeta_{\text{bcc}}}{(1 - \alpha)^2 \zeta_{\text{sc}} + 2^{4/3} \alpha \zeta_{\text{bcc}}}. \quad (1.55)$$

Оно симметрично относительно замены α на $1/\alpha$, при $\alpha = 1$ равно 1.

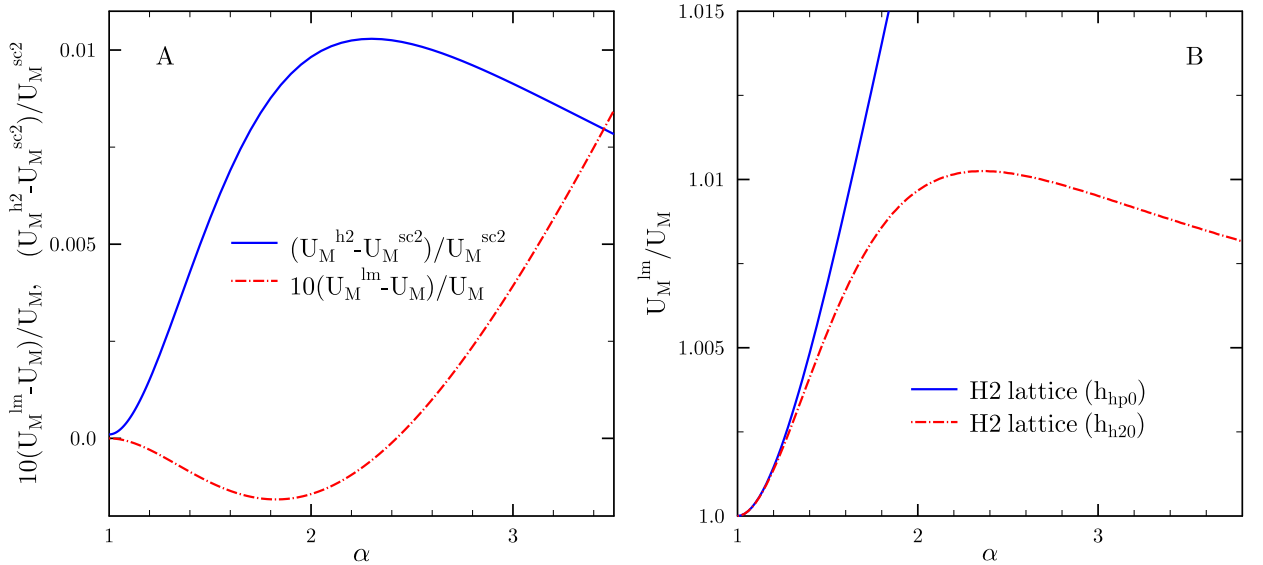


Рис. 1.19: Зависимость отклонения от правила линейного смешивания для ПК2 решетки (рис. А) и Г2 решетки (рис. В).

График зависимости $10(U_M^{\text{lm}} - U_M)/U_M$ для ПК2 решетки от α показан на рис. 1.19А. Множитель 10 использован для того, чтобы показать, что отношение $(U_M^{\text{lm}} - U_M)/U_M$ на порядок меньше, чем относительная разность между энергиями ПК2 решетки и Г2 решетки с $h = h_{\text{h20}}$, которое также представлено на рис. 1.19А. Для смеси $^{16}\text{O} + ^{12}\text{C}$ относительная разница $U_M^{\text{lm}}/U_M - 1 \approx -6.7 \times 10^{-5}$, а при максимально допустимом устойчивостью ПК2 решетки $\alpha = 3.6$ достигается максимальное значение: $U_M^{\text{lm}}/U_M \approx 1.00094$ (об устойчивости см. параграф 2.4). Таким образом с помощью ПЛС можно вычислить энергию ПК2 решетки с точностью в 3 – 4 значащие цифры (в зависимости от α). Это является наиболее точным

воспроизведением электростатической энергии с помощью правила линейного смешивания. Для других решеток, рассмотренных ниже, точность на порядок или более хуже.

Точность выполнения правила линейного смешивания для энергии Маделунга проверялась численно в работе [54]. В этой работе приведено значение Δu , относительной ошибки выполнения ПЛС для электростатической энергии полностью упорядоченного ПК2 кристалла, состоящего из 432 ионов.

$$\Delta u \equiv \frac{U_M^{\text{lm}} - U_M}{NZ_1^2 e^2 / a_1} = \frac{0.5(1 + \alpha^2)\zeta_{\text{sc}} + \alpha(2^{1/3}\zeta_{\text{bcc}} - \zeta_{\text{sc}})}{(1 + \alpha)^{1/3}} - 0.5\zeta_{\text{bcc}}(1 + \alpha^{5/3}). \quad (1.56)$$

Как видно из таблицы 1.9 эти значения хорошо согласуются с аналитическими, полученными с помощью выражения (1.55).

Δu	$\alpha = 4/3$	$\alpha = 5/3$	$\alpha = 2$	$\alpha = 3$	$\alpha = 4$
Значение по формуле (1.55)	-0.0000781	-0.000219	-0.000268	0.00127	0.00668
Значение из работы [54]	-0.00006	-0.00019	-0.00024	0.00134	0.00678

Таблица 1.9: Точность выполнения правила линейного смешивания.

Заметим, что в работе [54] также показано, что разница между электростатической энергией ОЦК решетки, состоящей из двух типов ионов, в которой, в отличие от ПК2 решетки, при фиксированных α и N_1/N тип иона в узле решетки выбран случайным образом, и правилом линейного смешивания, на порядок больше, чем в рассматриваемом случае (полностью упорядоченная ПК2 решетка), причем $\Delta u > 0$ при любом α и N_1/N . То есть в данном случае ПЛС точнее описывает упорядоченный кристалл, чем неупорядоченный, что противоречит физической интуиции.

Как видно из рис. 1.19А, $U_M^{\text{lm}} \leq U_M$ при $1/2.4229 \lesssim \alpha \lesssim 2.4229$ для ПК2 решетки. Энергия ПК2 кристалла меньше суммы энергий двух однокомпонентных решеток, состоящих из тех же ионов (энергии отрицательны), следовательно, его образование при таких α энергетически выгоднее при $T = 0$, чем образование двух однокомпонентных решеток. Соответственно, при $\alpha \gtrsim 2.4229$ и $\alpha \lesssim 1/2.4229$ ПК2 решетке энергетически выгоднее распасться на две однокомпонентные ОЦК решетки. Впервые этот интервал значений был получен в работе [95]. В этой работе кроме ПК2 решетки, также были рассмотрены двухкомпонентная решетка Дайсона и решетка NaCl, проанализирована их устойчивость, относительно аналогичного распада на две однокомпонентные ОЦК решетки, а также оценено влияние электронного экранирования. В дальнейшем, этот подход был развит для неупорядоченных кристаллов и кристаллов типа AB_3 в работах [96, 84]. На этом же основан критерий образования многокомпонентных кристаллов в коре нейтронной звезды, использованный в работе [68] (см. параграф 1.1). Подчеркнем, что в работах [95, 96, 84, 68] предполагается, что любой многокомпонентный кристалл распадается на однокомпонентные ОЦК кристаллы, так как ОЦК решетка имеет наименьшую энергию Маделунга среди всех однокомпонентных, что отличается от рассматриваемой в данном параграфе проблемы.

В $\Gamma 2$ кристалле с $h = h_{h20}(\alpha)$, так же как и в ПК2, $N_1 = N_2$. Отличие состоит в том, что при изменении ионного состава будут изменяться размеры решетки (см. параграф 1.4.7).

$$\frac{U_M^{\text{lm}}}{U_M} = \frac{(1 + \alpha)^{1/3} (1 + \alpha^{5/3}) \zeta_{\text{hp0}}}{2^{4/3} \zeta_{h20}(\alpha)}. \quad (1.57)$$

График отношения U_M^{lm}/U_M показан штрих-пунктирной кривой на рис. 1.19В. Отношение U_M^{lm}/U_M всегда больше 1, а в максимуме достигает 1.01025. Как видно из рис. 1.19А и 1.19В отношение U_M^{lm}/U_M для $\Gamma 2$ решетки и отношение $U_M^{\text{h2}}/U_M^{\text{sc2}}$ одного порядка. Таким образом, при сравнении энергий ПК2 и $\Gamma 2$ решеток между собой следует пользоваться точными расчетами, точности ПЛС для этого недостаточно.

Если вместо $h_{h20}(\alpha)$ зафиксировать $h = h_{\text{hp0}}$, отношение U_M^{lm}/U_M еще сильнее будет превышать 1 (сплошная кривая рис. 1.19В). Оно будет непрерывно расти с ростом α и, например, при $\alpha = 3$ достигнет 1.04136.

Для бинарной ГЦК решетки с $N_2 = 3N_1$ отношение энергий Маделунга, вычисленных двумя разными способами, равно:

$$\frac{U_M^{\text{lm}}}{U_M} = \frac{0.141091253 (1 + 3\alpha)^{1/3} (1 + 3\alpha^{5/3})}{(0.138600677 + 0.1707354535\alpha + 0.5865374846\alpha^2)}. \quad (1.58)$$

Это отношение всегда больше 1 и достигает максимума равного 1.00197 при $\alpha = 0.66$.

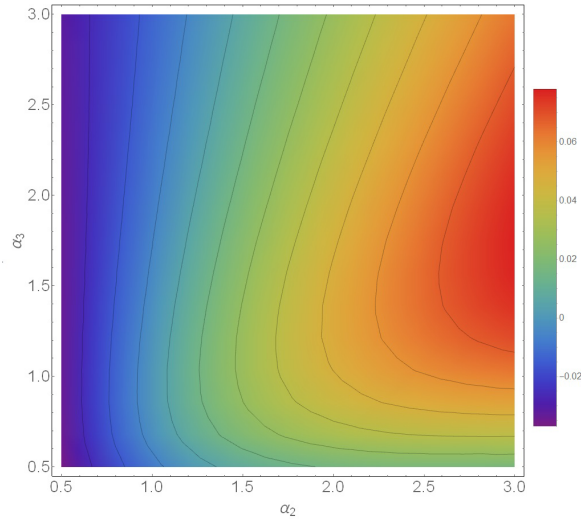


Рис. 1.20: Зависимость отклонения от правила линейного смешивания для решетки перовскита.

Правило линейного смешивания можно распространить и на трехкомпонентные кристаллы, например на трехкомпонентный кристалл перовскита. В этом кристалле концентрация ионов с зарядом Z_3 в три раза больше, чем с зарядом Z_1 и Z_2 , следовательно $n_i Z_i = n(Z_1 + Z_2 + 3Z_3)/5$. Согласно правилу линейного смешивания энергия Маделунга перовскита равна:

$$\begin{aligned} U_M^{\text{lm}} &= N_1 \frac{Z_1^2 e^2}{a_1} \zeta_{\text{BaTiO}_3} + N_2 \frac{Z_2^2 e^2}{a_2} \zeta_{\text{BaTiO}_3} + N_3 \frac{Z_3^2 e^2}{a_3} \zeta_{\text{BaTiO}_3} \\ &= N \zeta_{\text{BaTiO}_3} \frac{e^2}{a} \left[\frac{1}{5} Z_1^2 \left(\frac{n_1}{n} \right)^{1/3} + \frac{1}{5} Z_2^2 \left(\frac{n_2}{n} \right)^{1/3} + \frac{3}{5} Z_3^2 \left(\frac{n_3}{n} \right)^{1/3} \right]. \end{aligned} \quad (1.59)$$

Отношение $U_M^{\text{lm}}/U_M - 1$ показано на рис. 1.20 при разных $\alpha_2 \equiv Z_2/Z_1$ и $\alpha_3 \equiv Z_3/Z_1$. Каждому контуру соответствует постоянное значение $U_M^{\text{lm}}/U_M - 1$. Для реалистичных значений α_2 и α_3 отклонение не превышает нескольких процентов. Так же как для ПК2 решетки относительная разница изменяет свой знак при изменении α_2 и α_3 .

Таким образом, правило линейного смешивания позволяет найти только 2–3 значащие цифры энергии (в зависимости от α), и с ростом α точность уменьшается. Только для ПК2 решетки точность выполнения правила линейного смешивания на порядок выше. Следовательно при сравнении энергий Маделунга различных многокомпонентных решеток между собой следует пользоваться точными расчетами. Точности правила линейного смешивания для этого недостаточно. С другой стороны, с этой же точностью можно найти модуль сдвига бинарного кристалла, чего для практического использования достаточно. Другие модули упругости, рассмотренные в параграфе 1.4.3, правило линейного смешивания найти со сколько-нибудь приемлемой точностью не позволяет.

1.6 Энергия статического кулоновского кристалла с поляризуемым электронным фоном

В расчетах, представленных выше, предполагалось, что плотность нейтрализующего фона электронов постоянна. Однако, электронный фон обладает конечной поляризуемостью, которая приводит к изменению электронной плотности вследствие наличия точечных зарядов ионов.

Для более реалистичного описания вещества в недрах вырожденных звезд рассмотрим влияние поляризации электронного фона на энергию кулоновского кристалла при нулевой температуре. В широкой области параметров достаточно ограничиться *приближением линейного отклика*, которое применимо когда электрон-ионное взаимодействие мало по сравнению с кинетической энергией электронов. Соответственно, для сильно вырожденного электронного газа должно выполняться условие $Ze^2/a \ll E_F$, что эквивалентно $\kappa_{\text{TF}}a \ll 1$ (рис. 1.3), где $E_F \equiv m_e c^2(\gamma_T - 1)$ – энергия Ферми, $\kappa_{\text{TF}} \equiv (4\pi e^2 \partial n_e / \partial \mu_e)^{1/2} = 2p_F \sqrt{\alpha_f / (\pi \beta_T)} / \hbar$ – волновое число Томаса-Ферми, μ_e – химический потенциал электронного газа, $p_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$ – импульс Ферми, $\alpha_f = e^2 / (\hbar c) \approx 1/137.036$ – постоянная тонкой структуры, $\beta_T \equiv x_T / \gamma_T$, $\gamma_T \equiv \sqrt{1 + x_T}$, $x_T \equiv p_F / (m_e c) \approx 0.01(\rho Z/A)^{1/3}$ – релятивистский параметр электрона, ρ – плотность¹⁸.

Для описания электронного фона в приближении линейного отклика [97] достаточно использовать статическую продольную диэлектрическую функцию $\epsilon(q)$, так как ионы движутся медленно или не движутся вовсе. Тогда поправка к полной энергии статического (все ионы находятся в положениях равновесия) однокомпонентного кристалла с произвольным

¹⁸Далее для вырожденного электронного газа будем считать, что $\kappa_{\text{TF}}a < 1$. Для кристалла, образованного ионами ^{12}C , это справедливо при $\rho \gtrsim 2941 \text{ г/см}^3$.

$\epsilon(q)$, обусловленная поляризацией электронного фона, равна

$$\begin{aligned} \frac{\Delta U}{Z^2 e^2} &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \sum_{p,p'=1}^{N_{\text{cell}}} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi (1 - \delta_{\mathbf{R}_l 0} \delta_{pp'})}{q^2 \epsilon(q)} \exp [i\mathbf{q}(\mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'})] \\ &+ \frac{1}{2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{q^2} \left[\frac{1}{\epsilon(q)} - 1 \right] - \frac{n}{2} \int \int \frac{dr d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^{i\mathbf{q}r}}{q^2 \epsilon(q)} - \frac{U_M}{Z^2 e^2}. \end{aligned} \quad (1.60)$$

В работе [50] с помощью этого подхода были исследованы изменения полной энергии ОЦК и ГЦК решеток. В представляемой работе эти исследования проверены и обобщены на случай решетки с $N_{\text{cell}} > 1$ (на примере ГПУ решетки). Вклад в энергию однородной составляющей электронного фона во внимание не принят, так как для всех решеток он одинаковый.

1.6.1 Случай слабого экранирования в модели Томаса-Ферми

Простейшим приближением для рассматриваемых систем является *приближение Томаса-Ферми*, согласно которому $\epsilon(q) = 1 + \kappa_{\text{TF}}^2/q^2$. Тогда выражение (1.60) с помощью модифицированного преобразования Эвальда [50] можно привести к удобному для использования виду:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta U_{\text{TF}}}{NZ^2 e^2} &= \left\{ \frac{1}{N_{\text{cell}}} \sum_{l,p,p'} (1 - \delta_{\mathbf{R}_l 0} \delta_{pp'}) \frac{E_- + E_+}{4Y_l} - \frac{\kappa_{\text{TF}}}{2} \text{erf} \left(\frac{\kappa_{\text{TF}}}{2A} \right) - \frac{A}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\kappa_{\text{TF}}^2}{4A^2}} \right. \\ &+ \left. \frac{1}{N_{\text{cell}}^2} \sum_{m,p,p'} \frac{2\pi n}{G_m^2 + \kappa_{\text{TF}}^2} e^{-\frac{G_m^2 + \kappa_{\text{TF}}^2}{4A^2}} e^{-i\mathbf{G}_m(\boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'})} - \frac{2\pi n}{\kappa_{\text{TF}}^2} \right\} - \frac{U_M}{NZ^2 e^2}, \end{aligned} \quad (1.61)$$

где $E_{\pm} = e^{\pm \kappa_{\text{TF}} Y_l} \text{erfc} \left(AY_l \pm \frac{\kappa_{\text{TF}}}{2A} \right)$, $Y_l = \mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'}$ и $\text{erf}(z)$ — функция ошибок.

Данное выражение эквивалентно (1.60) с диэлектрической функцией Томаса-Ферми при любой величине κ_{TF} . Однако, само выражение (1.60) корректно описывает электронное экранирование только в случае слабого экранирования, так как оно основано на теории линейного отклика. Поэтому для корректного описания вещества в недрах вырожденных звезд достаточно разложить выражение (1.61) в ряд по κ_{TF} , оставив только коэффициенты пропорциональные κ_{TF}^0 и κ_{TF}^2 (очевидно, что коэффициент пропорциональный κ_{TF} отсутствует). Члены более старшего порядка по κ_{TF} лежат за пределами приближения линейного отклика. Нулевой член разложения выражения в фигурных скобках — электростатическая энергия кристалла с однородным электронным фоном $\epsilon(q) = 1$ (выражение (1.9)), а квадратичный равен

$$\begin{aligned} \frac{\Delta U_{2\text{TF}}}{NZ^2 e^2 \kappa_{\text{TF}}^2} &= \frac{1}{4N_{\text{cell}}} \sum_{l,p,p'} (1 - \delta_{\mathbf{R}_l 0} \delta_{pp'}) \left[Y_l \text{erfc} (AY_l) - \frac{e^{-A^2 Y_l^2}}{A\sqrt{\pi}} \right] - \frac{1}{4A\sqrt{\pi}} + \frac{n\pi}{16A^4} \\ &- \frac{n\pi}{N_{\text{cell}}^2} \sum_{m,p,p'} \frac{1 - \delta_{\mathbf{G}_m 0}}{G_m^2} \left[\frac{1}{2A^2} + \frac{2}{G_m^2} \right] e^{-\frac{G_m^2}{4A^2} - i\mathbf{G}_m(\boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'})} \equiv \eta_{\text{TF}a}, \end{aligned} \quad (1.62)$$

где константа η_{TF} определяется только типом решетки:

$$\begin{aligned} \eta_{\text{TF}}^{\text{bcc}} &= -0.103732333707 & \eta_{\text{TF}}^{\text{fcc}} &= -0.103795687531 \\ \eta_{\text{TF}}^{\text{hcp}} &= -0.103809851801 & \eta_{\text{TF}}^{\text{MgB}_2} &= -0.104080616256. \end{aligned} \quad (1.63)$$

Для ОЦК и ГЦК решеток эти значения были получены в работе [50], а результаты для решеток ГПУ и однокомпонентного диборида магния (с высотой $h \approx 0.593936$, отвечающей минимуму электростатической энергии при $\kappa_{\text{TF}}a = 0$) представлены впервые.

Для сравнения энергий разных решеток введем¹⁹

$$U_{2\text{TF}} \equiv N \frac{Z^2 e^2}{a} (\zeta + \eta_{\text{TF}}(\kappa_{\text{TF}}a)^2), \quad (1.64)$$

где ζ — постоянная Маделунга, определяемая выражением (1.10). Значение $U_{2\text{TF}}$ ОЦК решетки всегда меньше, чем $U_{2\text{TF}}$ ГПУ решетки при малых $\kappa_{\text{TF}}a$. $U_{2\text{TF}}^{\text{bcc}} = U_{2\text{TF}}^{\text{fcc}}$ при $\kappa_{\text{TF}}a \approx 0.93715$, что согласуется с рис. 2 из работы [50], и при больших $\kappa_{\text{TF}}a$ минимальной энергией обладает ГЦК решетка. При дальнейшем увеличении $\kappa_{\text{TF}}a$ до 1.583, $U_{2\text{TF}}^{\text{hcp}}$ станет меньше $U_{2\text{TF}}^{\text{bcc}}$ и $U_{2\text{TF}}^{\text{fcc}}$, что находится за рамками рассматриваемого приближения²⁰.

Если вместо ГПУ решетки рассмотреть ГУ решетку с $h = h_{\text{min}}$, соответствующему минимуму $\zeta + \eta_{\text{TF}}(\kappa_{\text{TF}}a)^2$, то ситуация существенно не изменится. С ростом $\kappa_{\text{TF}}a$ высота решетки будет лишь незначительно уменьшаться, достигнув $h_{\text{min}} \approx 1.63511$ при $\kappa_{\text{TF}}a = 1$. При этом $\kappa_{\text{TF}}a$ минимум $\zeta + \eta_{\text{TF}}(\kappa_{\text{TF}}a)^2$ ГУ решетки равен -0.9996481344 , тогда как для ГПУ решетки $\zeta + \eta_{\text{TF}}(\kappa_{\text{TF}}a)^2 = -0.9996479723$. Структурный переход между ГЦК и ГУ решеткой будет лежать между $\kappa_{\text{TF}}a = 1.58$ и $\kappa_{\text{TF}}a = 1.585$.

Таким образом в приближении линейного отклика при малых $\kappa_{\text{TF}}a$ наименьшей $U_{2\text{TF}}$ среди всех рассмотренных решеток обладает ОЦК решетка.

1.6.2 Случай сильного экранирования в модели Томаса-Ферми

Если принять, что выражение (1.61) точно описывает энергию кристалла при любой силе экранирования, то в модели с диэлектрической функцией Томаса-Ферми получается *кристалл Юкавы*. Кристалл Юкавы достаточно популярен в литературе, однако, в случае сильного экранирования он не дает корректного описания вещества в недрах вырожденных звезд и может быть использован для качественных предсказаний. Полная энергия кристалла Юкавы равна²¹:

$$U_{\text{YUK}} \equiv U_{\text{M}} + \Delta U_{\text{TF}}, \quad (1.65)$$

где U_{M} — энергия Маделунга (выражение (1.9)).

В этом приближении значения U_{YUK} для ОЦК и ГЦК решеток, полученные с помощью выражения (1.61), совпадают с “энергией Маделунга сильно связанной системы Юкавы” $U_{\text{YUK}}^{\text{HF}}$, численно рассчитанной в работах Хамагучи и Фароуки [98] и [28] (см. также [99]), если вместо κ_{TF} использовать обратную длину экранирования $\kappa_{\text{D}} \equiv \sqrt{4\pi e^2 n_e / (\kappa_{\text{B}} T)} = 1/\lambda_{\text{D}}$ ²². Другими словами, $U_{\text{YUK}} = U_{\text{YUK}}^{\text{HF}}$ при любом фиксированном $\kappa_{\text{TF}}a$ численно равным $\kappa_{\text{D}}a$.

¹⁹В статье [50] эта величина обозначалась как $U_{1\text{TF}}$.

²⁰Отметим, что в этом приближении энергия решетки однокомпонентного диборида магния станет наименьшей, среди рассматриваемых, при $\kappa_{\text{TF}}a \gtrsim 2.21838$. Это также находится за рамками рассматриваемого приближения.

²¹В статье [50] эта величина обозначалась как U_{TF} .

²²В модели, рассматриваемой в работах [98] и [28] фон состоит не только их электронов, но и ионов, что на общее рассмотрение задачи не влияет: изменится только определение κ_{D} .

Далее для кристаллов Юкавы будем использовать $\kappa_{\text{D}a}$, тогда как для кристаллов со слабым экранированием $\kappa_{\text{T}Fa}$.

В работе [98] модель Хамагучи и Фароуки²³ была использована для исследования термодинамических свойств систем Юкавы (жидкости, ОЦК и ГЦК кристаллических решеток) при $1 \leq \Gamma \leq 1000$, а в работе [28], для построения фазовой диаграммы (см. рис. 1.1 и параграф 3.5.2 представляемой работы). Расчет термодинамических функций в этих работах проводился с помощью молекулярно-динамических симуляций, а сама “энергия Маделунга” определялась как $\lim_{\Gamma \rightarrow \infty} u(\kappa_{\text{D}a}, \Gamma)/\Gamma$, где $u(\kappa_{\text{D}a}, \Gamma) \equiv U/(NT)$, U — внутренняя энергия. В статье [98] представлены расчеты U_{YUK} для ОЦК и ГЦК решеток до $\kappa_{\text{D}a} = 1$, а в статье [28] до $\kappa_{\text{D}a} = 5$. Также в [98] представлена аппроксимация U_{YUK} ОЦК решетки при $\kappa_{\text{D}a} < 1$. В ней не было учтено, что энергия не зависит от нечетных степеней $\kappa_{\text{D}a}$. Новые расчеты позволяют исправить эту ошибку, аппроксимировав U_{YUK} при $\kappa_{\text{D}a} < 1$ как:

$$U_{\text{YUK}} = -N \frac{Z^2 e^2}{a} (0.89592926 + 0.10373233(\kappa_{\text{D}a})^2 - 0.00309133(\kappa_{\text{D}a})^4 + 0.00014304(\kappa_{\text{D}a})^6 - 7.186 \times 10^{-6}(\kappa_{\text{D}a})^8). \quad (1.66)$$

Подобные выражения могут быть написаны для U_{YUK} решеток ГЦК, ГПУ с $h = \sqrt{8/3}$ и MgB_2 с $h = 0.593936$.

$$U_{\text{YUK}} = -N \frac{Z^2 e^2}{a} (\zeta_0 + \zeta_2(\kappa_{\text{D}a})^2 + \zeta_4(\kappa_{\text{D}a})^4 + \zeta_6(\kappa_{\text{D}a})^6 + \zeta_8(\kappa_{\text{D}a})^8), \quad (1.67)$$

где параметры аппроксимации ζ_i даны в таблице 1.10. Параметр ζ_0 — постоянная Маделунга кулоновского кристалла (1.10), а $\zeta_2 = \eta$ из выражения (1.63).

	ГЦК	ГПУ	MgB_2
ζ_0	0.8958736152	0.8958381205	0.8945056294
ζ_2	0.1037956875	0.1040806163	0.1038098518
ζ_4	-0.0031060725	-0.0031410914	-0.0031091345
ζ_6	0.0001451182	0.0001485484	0.0001455958
ζ_8	-7.4104×10^{-6}	-7.4708×10^{-6}	-7.7141×10^{-6}

Таблица 1.10: Параметры аппроксимации ζ_i для U_{YUK} решеток ГЦК, ГПУ и MgB_2 .

Нормированные на NZ^2e^2/a значения энергий U_{YUK} и $U_{\text{YUK}}^{\text{HF}}$ обозначим как ζ_{YUK} и $\zeta_{\text{YUK}}^{\text{HF}}$, соответственно:

$$U_{\text{YUK}} = N \frac{Z^2 e^2}{a} \zeta_{\text{YUK}}, \quad U_{\text{YUK}}^{\text{HF}} = N \frac{Z^2 e^2}{a} \zeta_{\text{YUK}}^{\text{HF}}. \quad (1.68)$$

Для ОЦК решетки при некоторых $\kappa_{\text{D}a}$ они приведены в таблице 1.11. Значения $\zeta_{\text{YUK}}^{\text{HF}}$ взяты из работ [98] и [28], а ζ_{YUK} вычислены по формуле (1.61). Из таблицы 1.11 видно, что все

²³Рассматриваемая Хамагучи и Фароуки система отличается от системы, в которой ионы взаимодействуют с помощью потенциала Юкавы, а электронный фон однороден [100].

κ_{Da}	ОЦК		ГЦК	ГУ		MgB ₂	
	$-\zeta_{YUK}^{HF}$	$-\zeta_{YUK}$	$-\zeta_{YUK}$	$-\zeta_{YUK}$	h_{min}	$-\zeta_{YUK}$	h_{min}
0.0	0.895929	0.895929256	0.895873616	0.895838451	1.635639	0.894505630	0.593936
0.2	0.900074	0.900073612	0.900020482	0.899985873	1.635623	0.898663839	0.593958
0.5	0.921671	0.921671339	0.921630646	0.921598798	1.635543	0.920331769	0.594074
1.0	0.996706	0.996706468	0.996701309	0.996677534	1.635278	0.995586492	0.594458
2.0	1.269026	1.269025941	1.269079142	1.269071279	1.634495	1.268452721	0.595636
3.0	1.651144	1.651143676	1.651193657	1.651192170	1.633786	1.650930425	0.596801
4.0	2.091283	2.091283389	2.091308661	2.091308471	1.633349	2.091219086	0.597578

Таблица 1.11: Значения ζ_{YUK} и ζ_{YUK}^{HF} для ОЦК, ГЦК, ГУ и MgB₂ решеток.

значачие цифры ζ_{YUK} и ζ_{YUK}^{HF} совпадают. Аналогичное совпадение имеет место и для ГЦК решетки. Значения U_{YUK} для ОЦК и ГЦК решеток согласуются с результатами и других работ по изучению систем Юкавы, например с работой [101], где были рассчитаны энергии при $\kappa_{Da} \lesssim 8$. Отличие результатов работы [101] от работ [99, 28] состоит лишь в выборе нормировки электростатической энергии и параметра экранирования. Полученное согласие результатов является подтверждением точности как численных, так и аналитических расчетов.

Также в таблице 1.11 приведены значения ζ_{YUK} ГУ и MgB₂ решеток. Их высоты определялись из условия минимальности энергии U_{YUK} . В таблице 1.11 эти высоты обозначены как h_{min} . Видно, что с ростом $\kappa_{Tf}a$ высота ГУ решетки уменьшается, а высота решетки MgB₂ — увеличивается. Однако, эти изменения незначительны и не превышают долей процента (поэтому аппроксимация проводилась для решеток с фиксированным h). Значение h_{min} ГУ решетки, энергия которой рассчитана в приближении слабого экранирования не совпадает с h_{min} ГУ решетки, энергия которой рассчитана в приближении сильного экранирования.

Отличие между энергиями ГУ и ГПУ решеток в приближении сильного экранирования незначительно. Например, при $\kappa_{Da} = 1$ для ГПУ решетки $\zeta_{YUK} = -0.996677339$, а для ГУ решетки с $h = h_{min} - \zeta_{YUK} = -0.996677534$. При любом κ_{Da} значение ζ_{YUK} ГУ и MgB₂ решеток всегда больше, чем ζ_{YUK} ГЦК решетки и в кристалле Юкавы имеет место только структурный переход между ОЦК и ГЦК решетками (в отличии от приближения слабого экранирования). Энергия U_{YUK} ОЦК решетки меньше, чем U_{YUK} ГЦК решетки при $\kappa_{Da} < 1.066$ [50].

1.6.3 Случай слабого экранирования в модели Янковичи

Более точным выражением для расчета диэлектрической функции вырожденного электронного газа, чем приближение Томаса-Ферми, является приближение случайных фаз или *приближение Янковичи*. Его также корректно использовать только в случае слабого экраниро-

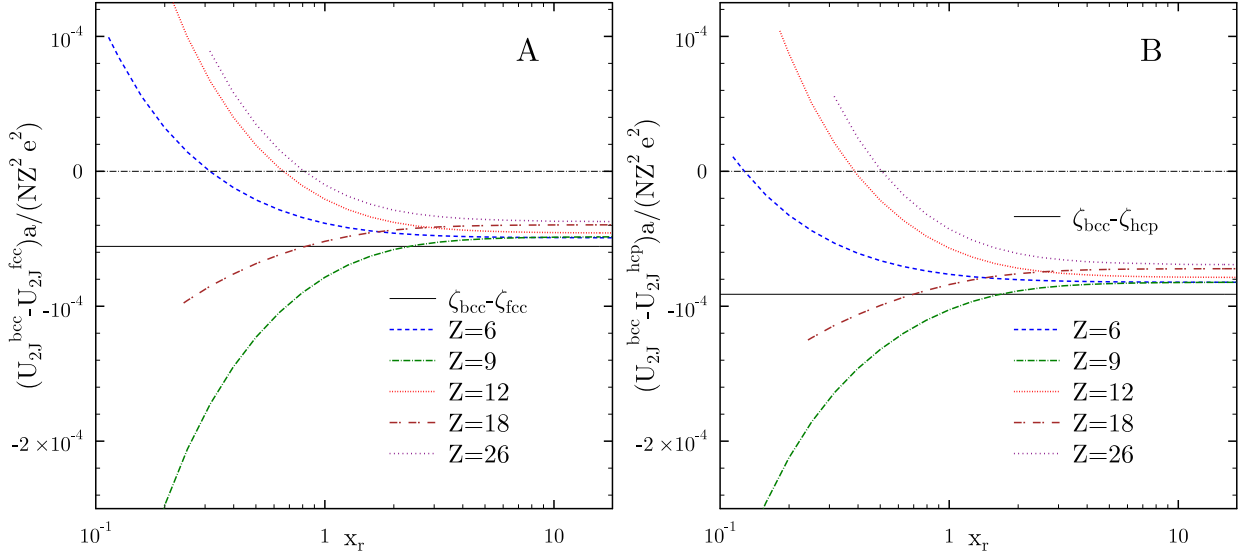


Рис. 1.21: Зависимость $(U_{2J}^{\text{bcc}} - U_{2J}^{\text{fcc}})a/(NZ^2 e^2)$ и $(U_{2J}^{\text{bcc}} - U_{2J}^{\text{hcp}})a/(NZ^2 e^2)$ от x_r .

вания. Оно более точно учитывает зависимость поляризации электронного фона от q :

$$\begin{aligned} \epsilon(q) = & 1 + \frac{\kappa_{\text{TF}}^2}{q^2} \left\{ \frac{2}{3} - \frac{2}{3} \frac{y_r x_r}{\gamma_r} \ln(x_r + \gamma_r) + \frac{x_r^2 + 1 - 3x_r^2 y_r^2}{6y_r x_r^2} \ln \left| \frac{1 + y_r}{1 - y_r} \right| \right. \\ & \left. + \frac{2y_r^2 x_r^2 - 1}{6y_r x_r^2} \frac{\sqrt{1 + x_r^2 y_r^2}}{\gamma_r} \ln \left| \frac{y_r \gamma_r + \sqrt{1 + x_r^2 y_r^2}}{y_r \gamma_r - \sqrt{1 + x_r^2 y_r^2}} \right| \right\} = 1 + \frac{\kappa_{\text{TF}}^2}{q^2} \epsilon_2(q), \end{aligned} \quad (1.69)$$

где q — модуль волнового вектора, $y_r = \hbar q / (2p_F) \approx 0.26qaZ^{-1/3}$, $\gamma_r \equiv \sqrt{1 + x_r^2}$. Впервые выражение (1.69) было получено в работе [102] в приближении случайных фаз ($a \ll a_0$, где $a_0 = \hbar^2 / (m_e e^2)$ — радиус Бора) и нулевой температуры ($T \ll E_F / k_B$). Можно показать, что в пределе длинных волн ($y_r \ll 1$) диэлектрическая функция в приближении Янковичи переходит в диэлектрическую функцию в приближении Томаса-Ферми $\epsilon(q) \approx 1 + \kappa_{\text{TF}}^2 / q^2$.

Согласно работам [48, 50] поправку к полной энергии кристалла вследствие поляризации электронного фона (выражение (1.60)) можно записать как:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta U}{Z^2 e^2} &= \frac{1}{2} \sum_{l,p,p'} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{q^2} \left[\frac{1}{\epsilon(q)} - 1 \right] e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_l + \mathbf{x}_p - \mathbf{x}_{p'})} - \frac{n}{2} \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{q^2} \left[\frac{1}{\epsilon(q)} - 1 \right] e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \\ &= \frac{2\pi n N}{N_{\text{cell}}^2} \sum_m \frac{1 - \delta_{\mathbf{G}_m 0}}{G_m^2} \left[\frac{1}{\epsilon(q)} - 1 \right] \sum_{p,p'} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_{p'})}. \end{aligned} \quad (1.70)$$

Приближение Янковичи позволяет точно рассчитать поправку к полной энергии пропорциональную $(\kappa_{\text{TF}} a)^2$. Тогда, разлагая выражение (1.70) в ряд, получим:

$$\frac{\Delta U_{2J}}{NZ^2 e^2} \equiv \eta_J \frac{(\kappa_{\text{TF}} a)^2}{a} = -\frac{2\pi n \kappa_{\text{TF}}^2}{N_{\text{cell}}^2} \sum_{m,p,p'} (1 - \delta_{\mathbf{G}_m 0}) \frac{\epsilon_2(G_m)}{G_m^4} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_{p'})}. \quad (1.71)$$

Если в приближении Томаса-Ферми η_{TF} зависит только от типа решетки, то η_J еще от n и Z . Эту зависимость можно исследовать и в других переменных. В частности график зависимости η_J от x_r при разных $\kappa_{\text{TF}} a$ для ОЦК решетки можно найти в работе [50]. Однако, полную

энергию кристалла в рассматриваемом приближении равную²⁴

$$U_{2J} \equiv N \frac{Z^2 e^2}{a} (\zeta + \eta_J (\kappa_{\text{TFA}})^2), \quad (1.72)$$

удобнее рассматривать как величину, зависящую от Z и x_r .

На рис. 1.21А для разных Z показана зависимость $(U_{2J}^{\text{bcc}} - U_{2J}^{\text{fcc}})a/(NZ^2e^2)$ от x_r , а на рис. 1.21В — зависимость $(U_{2J}^{\text{bcc}} - U_{2J}^{\text{hcp}})a/(NZ^2e^2)$ от x_r . Сплошной горизонтальной линией показана разность между постоянными Маделунга рассматриваемых на рисунке решеток. При больших x_r величины $(U_{2J}^{\text{bcc}} - U_{2J}^{\text{fcc}})a/(NZ^2e^2)$ и $(U_{2J}^{\text{bcc}} - U_{2J}^{\text{hcp}})a/(NZ^2e^2)$ отрицательны при любых Z . Следовательно, при таких x_r ОЦК решетка обладает наименьшей U_{2J} . Однако, при некоторых Z и малых x_r , вблизи границы применимости теории, $(U_{2J}^{\text{bcc}} - U_{2J}^{\text{fcc}})a/(NZ^2e^2)$ и $(U_{2J}^{\text{bcc}} - U_{2J}^{\text{hcp}})a/(NZ^2e^2)$ становятся положительными. Например, при $Z = 12$ и $x_r < 0.657$ полная энергия ГЦК решетки меньше энергий двух других решеток.

На рис. 1.22 желтым показана область значений параметров при которых ОЦК решетка обладает наименьшей полной энергией; синим — ГЦК решетка, а оранжевым — ГПУ. На рис. 1.22А в качестве независимых параметров выбраны $\log_{10}(x_r)$ и κ_{TFA} , а на рис. 1.22В — $\log_{10}(x_r)$ и Z . На рис. 1.22В зеленая пунктирная линия соответствует $\kappa_{\text{TFA}} = 0.75$ красная кривая — $\kappa_{\text{TFA}} = 1$. Результаты, полученные для ОЦК и ГЦК решеток, совпадают с результатами из работы [50]. Из рис. 1.22В видно, что ГПУ решетка обладает минимальной полной энергией при $\kappa_{\text{TFA}} < 1$ только когда $Z = 1$ и 4. Разница между энергиями мала, и не исключено, что поправки старшего порядка приведут к противоположному результату. Также нужно еще учесть вклад энергии нулевых колебаний, что в представляемой работе не было сделано.

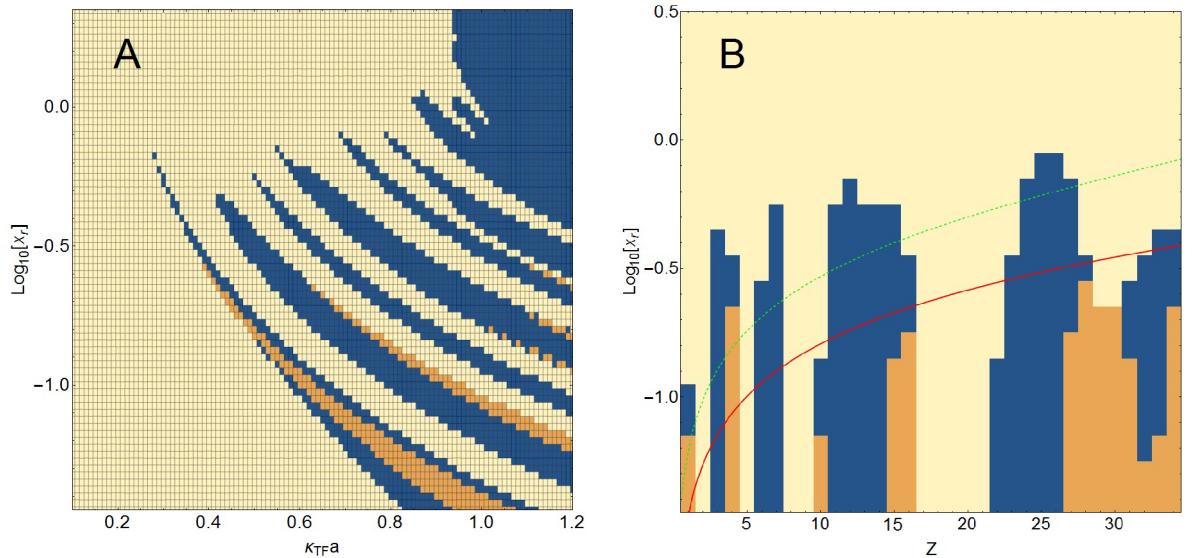


Рис. 1.22: Область значений $\log_{10}(x_r)$ и κ_{TFA} (рис. А); $\log_{10}(x_r)$ и Z (рис. В) при которых та или иная решетка обладает наименьшей U_{2J} .

Используя [48] выражение (1.70) можно обобщить на случай многокомпонентных кри-

²⁴В статье [50] эта величина обозначалась как U_1 .

сталлов:

$$\frac{\Delta U_{2J}}{Ne^2} = \frac{2\pi n}{N_{\text{cell}}^2} \sum_m \frac{1 - \delta_{\mathbf{G}_m 0}}{G_m^2} \left[\frac{1}{\epsilon(q)} - 1 \right] \sum_{p,p'} Z_p Z_{p'} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_{p'})}. \quad (1.73)$$

Исследование этого выражения — предмет будущей работы. Ранее многокомпонентные кристаллы рассматривались в работах [95, 103], но с помощью других подходов.

1.7 Выводы к первой главе

Первая глава посвящена описанию кулоновских кристаллов, которые формируются в недрах вырожденных звезд, и их электростатических свойств.

В параграфе 1.1 дан краткий обзор экспериментальных результатов связанных с образованием упорядоченных структур в неидеальной плазме, а также рассмотрена краткая история исследования кулоновских кристаллов. Существенная часть этих исследований посвящена образованию упорядоченных структур ионов в недрах белых карликов и нейтронных звезд (при $\Gamma > \Gamma_m$) и их свойствам.

В параграфе 1.2 приведены основные понятия теории твердого тела, необходимые для описания кулоновских кристаллов, а также параметры наиболее подробно рассмотренных решеток: ОЦК, ГЦК и ГПУ.

Параграф 1.3 посвящен электростатической энергии и давлению однокомпонентных кристаллов. Постоянные Маделунга восьми ранее рассматривавшихся решеток были уточнены с помощью аналитического выражения из работы [19]. Впервые рассмотрены электростатические свойства деформированных решеток: растянутых вдоль ребер куба элементарной ячейки ОЦК и ГЦК решеток (ОЦР и ГЦР решетки); растянутой вдоль главной диагонали ОЦК решетки; ОЦК решетки со сдвигом относительно ее основания. Показано, что их энергия Маделунга может быть найдена не только с помощью точных аналитических выражений, но и из стандартной теории упругости. Рассчитаны давление и модули сдвига ГЦК решетки. Было найдено, что ее эффективный модуль сдвига отличается от эффективного модуля сдвига ОЦК решетки только в пятой значащей цифре. Электростатическое давление ОЦР и ГЦР решеток в общем случае не изотропно и при изменении отношения сторон изменяется не монотонно, что может свидетельствовать о перестройке всей кристаллической коры нейтронной звезды при деформации. Отдельно выделен случай решеток с гексагональной структурой (ГПУ и MgB_2 решетки). Для ГПУ решетки, показано, что минимум электростатической энергии достигается, когда “высота” ее элементарной ячейки равна $1.6356394a_1$, а не $\sqrt{8/3}a_1$, как предполагалось ранее до настоящей работы. Было выявлено, что среди всех рассмотренных однокомпонентных решеток наименьшей постоянной Маделунга обладает ОЦК решетка.

Параграф 1.4 посвящен энергии Маделунга многокомпонентных решеток. Для ПК2 решетки и Г2 решетки с фиксированной высотой элементарной ячейки, равной $\sqrt{8/3}a_1$, приведены два метода вычисления их энергии: из предельных однокомпонентных случаев и с помощью удобного аналитического выражения. Последнее впервые было обобщено на случай

многокомпонентного кулоновского кристалла с произвольным числом ионов в элементарной ячейке. Оно было использовано для проверки предыдущих результатов (бинарной ГЦК решетки, решетки NaCl и решетки трехкомпонентного пировскита), а также для расчета электростатических свойств различных кристаллических структур, ранее не исследованных: бинарных ОЦР и ГЦР решеток, решетки кристаболтита и некоторых других. Было показано, что при любом α (отношение зарядов ионов, образующих решетку) энергия Маделунга ПК2 решетки больше, чем энергия любой бинарной ОЦР решетки, а среди всех ГЦР решеток при $|\alpha - 1| \lesssim 0.1$ минимальной энергией обладает, решетка по своей структуре близкая к ПК2 решетке, а при ббльших $|\alpha - 1|$ — бинарная ГЦК решетка. В Г2 решетке с произвольной высотой элементарной ячейки высота, при которой достигается минимум, уменьшается с ростом $|\alpha - 1|$, а в бинарной MgB_2 решетке зависимость высоты от α немонотонна. Среди всех рассмотренных бинарных решеток с равной концентрацией ионов разного сорта ПК2 решетка обладает минимальной энергией Маделунга при любых допустимых ее устойчивостью α . Также для ПК2 и бинарной ГЦК решеток впервые найдены электростатическое давление и модули упругости. Показано, что правило линейного смешивания дает хорошую точность для расчета эффективного модуля сдвига этих решеток, а разница между эффективным модулем сдвига упорядоченного и неупорядоченного бинарного ОЦК кристалла не превышает долей процента. Кроме бинарных решеток в параграфе 1.4 были рассмотрены энергии Маделунга пяти трехкомпонентных решеток и решетки Дайсона, состоящей из ионов четырех типов. Полученные результаты были использованы в параграфе 1.5 для проверки точности выполнения правила линейного смешивания, которое ранее использовалось для описания многокомпонентных кристаллических смесей. Оказалось, что расхождение между точным значением и вычисленным по правилу линейного смешивания, может превышать несколько процентов.

В параграфе 1.6 рассчитана электростатическая энергия однокомпонентных ОЦК, ГЦК, ГПУ и MgB_2 решеток с учетом поляризации электронного фона. Показано, что в приближении Томаса-Ферми полученные результаты хорошо согласуются с расчетами из работ [98, 28] для пылевого кристалла Юкавы: при $\kappa_{TF}a < 1.066$ наименьшей энергий обладает ОЦК решетка, а при $\kappa_{TF}a > 1.066$ — ГЦК решетка. В приближении Янковичи ситуация более сложная, так как электростатическая энергия обезразмеренная на Z^2e^2/a зависит от Z и x_r . Существуют такие Z и x_r при которых любая их трех решеток обладает наименьшей энергией.

Полученные результаты могут быть использованы для описания ионов во внешней коре холодной нейтронной звезды.

Результаты полученные впервые:

- Рассчитаны электростатическая энергия и давление деформированных ОЦК и ГЦК решеток.
- Показано, что энергия ГУ решетки минимальна при $h \approx 1.6356394$.
- Рассчитаны энергии Маделунга различных многокомпонентных решеток.

- Найдены модули упругости ПК2 и бинарной ГЦК решетками, показано, что разница между модулем сдвига неупорядоченной и упорядоченной бинарной ОЦК решетки не превышает долей процента.
- Проверена точность выполнения правила линейного смешивания для энергии Маделунга, модулей упругости и эффективного модуля сдвига многокомпонентных кристаллов.
- Рассчитана энергия статической ГПУ решетки с поляризуемым электронным фоном. Показано, что в приближении Томаса-Ферми полученные результаты для ОЦК и ГЦК решеток хорошо согласуются с расчетами из работы [28] для пылевого кристалла Юкавы. Найдено, что в этом приближении энергия ГПУ решетки всегда больше, чем энергия ГЦК решетки.

Глава 2

Динамическая матрица и фононные моды

В главе 1 считалось, что ионы неподвижны в узлах кристаллической решетки. На самом деле, даже при нулевой температуре они совершают малые колебания относительно положений равновесия. Нормальные моды таких колебаний называются *фононными*. Изучению их свойств посвящена вторая глава. Подобные исследования важны, так как фононный спектр позволяет исследовать устойчивость кристалла, его термодинамические свойства (о чем пойдет речь в третьей главе), а также кинетические коэффициенты, обусловленные электрон-фононным взаимодействием.

2.1 Динамическая матрица кулоновских кристаллов

Рассмотрим многокомпонентный упорядоченный кристалл, положения ионов в котором строго коррелированы между собой (заряд и масса иона зависят не от номера конкретного i ого узла во всем кристалле, а только от номера узла в элементарной ячейке, обозначенного индексом p , то есть $Z_i = Z_p$ и $M_i = M_p$, соответственно). Следуя работе [45], найдем законы колебаний ионов в таком кристалле. Для этого разложим его потенциальную энергию в ряд Тейлора по степеням смещений. Пользуясь гармоническим приближением, имеем

$$U_{\text{точн}} \approx U_M + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N u_i^\mu u_j^\lambda \left. \frac{\partial^2 U_{\text{точн}}}{\partial u_i^\mu \partial u_j^\lambda} \right|_{u_i^\mu, u_j^\lambda=0} \equiv U_M + \frac{e^2}{2} \sum_{i,j=1, i \neq j}^N u_i^\mu u_j^\lambda Z_p Z_{p'} V_{ij}^{\mu\lambda} + \frac{e^2}{2} \sum_{i=1}^N u_i^\mu u_i^\lambda Z_p W_i^{\mu\lambda}. \quad (2.1)$$

Квадратичный член разложения, определяющий фононный спектр кристалла, можно записать как:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 U_{\text{точн}}}{\partial u_i^\mu \partial u_j^\lambda} &= Z_p Z_{p'} (1 - \delta_{ij}) \frac{\partial^2 \Phi_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{\partial u_i^\mu \partial u_j^\lambda} \\ &+ Z_p \delta_{ij} \left(\sum_{k \neq i} Z_k \frac{\partial^2 \Phi_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k)}{\partial u_i^\mu \partial u_i^\lambda} - n_e \int_V d\mathbf{r} \frac{\partial^2 \Phi_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r})}{\partial u_i^\mu \partial u_i^\lambda} \right), \end{aligned} \quad (2.2)$$

где, как и в первой главе, $\Phi(\mathbf{r}) = e^2/r$, $i = (l, p)$, $j = (l', p')$, μ и $\lambda = x, y, z$ или 1, 2, 3 — декартовы координаты. Первое слагаемое в правой части (2.2) соответствует $V_{ij}^{\mu\lambda}$, а сумма второго и третьего — $W_i^{\mu\lambda}$.

Для описания рассматриваемой системы введем функцию Лагранжа:

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N M_p (i_i^\mu)^2 - U_{\text{точн}} , \quad (2.3)$$

где первое слагаемое — кинетическая энергия. Решение задачи о поведении системы в потенциале (2.1) достигается переходом к коллективным координатам $A_{\mathbf{k}p}^\mu$:

$$A_{\mathbf{k}p}^\mu = \sqrt{\frac{M_p N}{N_{\text{cell}}}} \sum_l \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R}_l) u_{lp}^\mu , \quad u_{lp}^\mu = \sqrt{\frac{N_{\text{cell}}}{M_p N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_l) A_{\mathbf{k}p}^\mu . \quad (2.4)$$

Область значений \mathbf{k} определяется из соображений периодичности кристалла с периодами $N_1 \mathbf{a}_1, N_2 \mathbf{a}_2, N_3 \mathbf{a}_3$. Следовательно, должно выполняться условие $\mathbf{k}\mathbf{a}_m = 2\pi j_{\mathbf{k}m}/N_m$, где $j_{\mathbf{k}m}$ — целое число от 0 до $N_m - 1$, $m = 1, 2, 3$. В силу эквивалентности векторов \mathbf{k} , отличающихся вектором обратной решетки, в качестве области определения Фурье-компонент можно рассматривать только *первую зону Бриллюэна* — многогранник в обратном пространстве, содержащий 0 и ограниченный плоскостями, проходящими через середины векторов обратной решетки перпендикулярно последним. В этом случае, все особенности, возникающие при волновых векторах, равных вектору обратной решетки, концентрируются в единственной точке $\mathbf{k} = 0$.

Подставляя (2.4) в выражение (2.1), получим:

$$U_{\text{точн}} = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') A_{\mathbf{k}p}^\mu A_{\mathbf{k}'p'}^\lambda . \quad (2.5)$$

Величина $D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ называется *динамической матрицей*. Она определяется выражением:

$$D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{N_{\text{cell}} e^2}{N \sqrt{M_p M_{p'}}} \sum_{ll'} \exp(i(\mathbf{k}\mathbf{R}_l + \mathbf{k}'\mathbf{R}_{l'})) \left[(1 - \delta_{ll'} \delta_{pp'}) Z_p Z_{p'} V_{lp'l'}^{\mu\lambda} + \delta_{ll'} \delta_{pp'} Z_p W_{lp}^{\mu\lambda} \right] . \quad (2.6)$$

Дальнейшее упрощение в (2.6) связано с тем, что $V_{lp'l'}^{\mu\lambda}$ зависит только от разности $|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}|$, а не от каждого из векторов по-отдельности. Тогда можно ввести Фурье-образ величины $V_{lp'l'}^{\mu\lambda}$:

$$V_{lp'l'}^{\mu\lambda} = \int_{V_B} \frac{d\mathbf{q}}{V_B} B_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'})) . \quad (2.7)$$

В пределе $N_m \rightarrow \infty$ любые суммы по \mathbf{k} превращаются в интегралы $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow V/(2\pi)^3 \int d\mathbf{k}$, и

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{ll'} \exp\{i(\mathbf{k}\mathbf{R}_l + \mathbf{k}'\mathbf{R}_{l'})\} \exp\{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'})\} = V_B^2 \sum_{mm'} \delta(\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{G}_m) \delta(\mathbf{k}' + \mathbf{q} - \mathbf{G}'_m) . \quad (2.8)$$

Тогда матрица $W_{lp}^{\mu\lambda}$ не зависит от l (в бесконечной решетке узел l ничем не выделен), а вся динамическая матрица становится функцией одного аргумента

$$\frac{V}{(2\pi)^3} D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rightarrow D_{pp'}^{\mu\lambda}(\tilde{\mathbf{k}}) \delta(\mathbf{k}' - \tilde{\mathbf{k}}) , \quad D_{pp'}^{\mu\lambda}(\tilde{\mathbf{k}}) = \frac{Z_p Z_{p'} e^2}{\sqrt{M_p M_{p'}}} B_{pp'}^{\mu\lambda}(\tilde{\mathbf{k}}) + \frac{Z_p e^2}{M_p} W_p^{\mu\lambda} \delta_{pp'} , \quad (2.9)$$

где $\tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 + \mathbf{g}_3 - \mathbf{k}$.

Вычисление матриц $W_p^{\mu\lambda}$ и $B_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k})$ (штрих у \mathbf{k} здесь и далее опущен) проводится с использованием преобразования Эвальда аналогично вычислению энергии Маделунга. Подробный вывод матриц приведен в работах [45] и [104], а окончательное выражение имеет следующий вид [71]:

$$\begin{aligned}
B_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) &= \frac{4\pi n}{N_{\text{cell}}} \sum_m \frac{(G_m^\mu - k^\mu)(G_m^\lambda - k^\lambda)}{|\mathbf{G}_m - \mathbf{k}|^2} \exp \left[-\frac{|\mathbf{G}_m - \mathbf{k}|^2}{4A^2} + i(\mathbf{G}_m - \mathbf{k})(\boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'}) \right] \\
&- \sum_l (1 - \delta_{pp'} \delta_{\mathbf{R}_l 0}) \left\{ \left(\frac{3Y_l^\mu Y_l^\lambda}{Y_l^2} - \delta^{\mu\lambda} \right) \left[\frac{\text{erfc}(AY_l)}{Y_l^3} + \frac{2A}{\sqrt{\pi}Y_l^2} e^{-A^2 Y_l^2} \right] \right. \\
&+ \left. \frac{4A^3}{\sqrt{\pi}} \frac{Y_l^\mu Y_l^\lambda}{Y_l^2} e^{-A^2 Y_l^2} \right\} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} - \frac{4A^3}{3\sqrt{\pi}} \delta^{\mu\lambda} \delta_{pp'} , \\
W_p^{\mu\lambda} &= -\frac{4\pi n}{N_{\text{cell}}} \sum_{p''} Z_{p''} \sum_m' \frac{G_m^\mu G_m^\lambda}{G_m^2} \exp \left[-\frac{G_m^2}{4A^2} + i\mathbf{G}_m(\boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p''}) \right] + \frac{4A^3}{3\sqrt{\pi}} Z_p \delta^{\mu\lambda} \\
&+ \sum_{l p''} Z_{p''} (1 - \delta_{pp''} \delta_{\mathbf{R}_l 0}) \left\{ \left(\frac{3S_l^\mu S_l^\lambda}{S_l^2} - \delta^{\mu\lambda} \right) \left[\frac{\text{erfc}(AS_l)}{S_l^3} + \frac{2A}{\sqrt{\pi}S_l^2} e^{-A^2 S_l^2} \right] + \frac{4A^3}{\sqrt{\pi}} \frac{S_l^\mu S_l^\lambda}{S_l^2} e^{-A^2 S_l^2} \right\} ,
\end{aligned} \tag{2.10}$$

где $\mathbf{Y}_l = \mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'}$, $\mathbf{S}_l = \mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p''}$. Штрихи означают, что в $B_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k})$ в сумме по \mathbf{R}_l нет слагаемого с $\mathbf{R}_l = 0$, а в $W_p^{\mu\lambda}$ в сумме по \mathbf{R}_l и $\boldsymbol{\chi}_{p''}$ нет слагаемого с $\mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p''} = 0$.

Функция Лагранжа кулоновского кристалла равна

$$L = \frac{1}{2} \int_{V_B} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_p \dot{A}_{\mathbf{k}p}^\mu \dot{A}_{\mathbf{k}p}^\mu - U_0 - \frac{1}{2} \int_{V_B} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_{pp'} D_{pp'}^{\mu\lambda}(\tilde{\mathbf{k}}) A_{\mathbf{k}p}^\mu A_{\mathbf{k}p'}^\lambda . \tag{2.11}$$

Рассматривая $A_{\mathbf{k}p}^\mu$ как обобщенные координаты кристалла, можно записать следующее уравнение Эйлера:

$$\ddot{A}_{\mathbf{k}p}^\mu + \frac{1}{2} \sum_{p'} \left[D_{p'p}^{\lambda\mu}(\tilde{\mathbf{k}}) + D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) \right] A_{\mathbf{k}p'}^\lambda = \ddot{A}_{\mathbf{k}p}^\mu + \sum_{p'} D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}p'}^\lambda = 0 . \tag{2.12}$$

Производя преобразование Фурье по времени

$$A_{\mathbf{k}p}^\mu(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\omega t) A_{\mathbf{k}p}^\mu(t) , \tag{2.13}$$

получим систему линейных однородных уравнений:

$$-\omega^2(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}p}^\mu + \sum_{p'} D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}p'}^\lambda = 0 . \tag{2.14}$$

Эта система разрешима при

$$\det \left(D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) - \omega^2(\mathbf{k}) \delta_{pp'} \delta^{\mu\lambda} \right) = 0 . \tag{2.15}$$

Уравнение (2.15) — это *дисперсионное уравнение*. Величины $\omega^2(\mathbf{k})$ являются собственными значениями динамической матрицы. Когда ионы находятся в положениях равновесия, потенциальная энергия решетки минимальна, что приводит к положительной определенности

матрицы $D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k})$ (так как она определяется второй производной потенциальной энергии). Соответственно, в общем случае, она имеет $3N_{\text{cell}}$ неотрицательных собственных значений — квадратов частот фононных мод, $\omega_i^2(\mathbf{k})$ (нумерация по i ведется от наименьшей частоты). В свою очередь решетка, в которой при некоторых \mathbf{k} одна или несколько частот комплекснозначные ($\omega_i^2(\mathbf{k}) < 0$), неустойчива.

При рассмотрении свойств колебаний решетки удобно обезразмерить квадраты всех частот и саму динамическую матрицу на квадрат частоты

$$\omega_s^2 \equiv \frac{4\pi n e^2}{N_{\text{cell}}^2} \sum_{pp'} \frac{Z_p Z_{p'}}{M_p} = 4\pi n e^2 \overline{Z} \left(\frac{\overline{Z}}{M} \right), \quad (2.16)$$

где \overline{A} означает среднее значение величины A в смеси. Сумма квадратов всех собственных частот кристалла¹ при любом \mathbf{k} равна $N_{\text{cell}}\omega_s^2$. Отметим, что ω_s отличается от плазменной частоты многокомпонентных систем, обычно используемой в литературе (например, [48]): $\hat{\omega}_s^2 = 4\pi n e^2 \overline{(Z^2/M)}$.

Для однокомпонентных кристаллов ω_s совпадает с обычной плазменной частотой $\omega_p = \sqrt{4\pi n Z^2 e^2 / M}$ и $\sum_i \omega_i^2(\mathbf{k}) = \omega_p^2$.

Для бинарных кристаллов ($N_{\text{cell}} = 2$):

$$\omega_s^2 = \pi n e^2 (Z_1 + Z_2) \left(\frac{Z_1}{M_1} + \frac{Z_2}{M_2} \right) = \pi n e^2 \frac{Z_1^2}{M_1} (1 + \alpha) \left(1 + \frac{\alpha}{\beta} \right), \quad (2.17)$$

где $\alpha = Z_2/Z_1$ и $\beta \equiv M_2/M_1$.

Для бинарной системы удобно явно выделить зависимость матрицы $W_p^{\mu\lambda}$ от Z_p , так что $W_p^{\mu\lambda} = Z_1 \widetilde{W}_{p1}^{\mu\lambda} + Z_2 \widetilde{W}_{p2}^{\mu\lambda}$. Тогда динамическая матрица, имеющая размерность 6×6 , может быть записана следующим образом:

$$\begin{aligned} D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} \frac{Z_1^2}{M_1} B_{11}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) + \frac{Z_1^2}{M_1} \widetilde{W}_{11}^{\mu\lambda} + \frac{Z_1 Z_2}{M_1} \widetilde{W}_{12}^{\mu\lambda} & \frac{Z_1 Z_2}{\sqrt{M_1 M_2}} B_{12}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) \\ \frac{Z_1 Z_2}{\sqrt{M_1 M_2}} B_{21}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) & \frac{Z_2^2}{M_2} B_{22}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) + \frac{Z_2^2}{M_2} \widetilde{W}_{22}^{\mu\lambda} + \frac{Z_1 Z_2}{M_2} \widetilde{W}_{21}^{\mu\lambda} \end{pmatrix} \\ &= \frac{Z_1^2}{M_1} \begin{pmatrix} B_{11}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) + \widetilde{W}_{11}^{\mu\lambda} + \alpha \widetilde{W}_{12}^{\mu\lambda} & \frac{\alpha}{\sqrt{\beta}} B_{12}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) \\ \frac{\alpha}{\sqrt{\beta}} B_{21}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) & \frac{\alpha^2}{\beta} B_{22}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) + \frac{\alpha^2}{\beta} \widetilde{W}_{22}^{\mu\lambda} + \frac{\alpha}{\beta} \widetilde{W}_{21}^{\mu\lambda} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

2.2 Фононный спектр и фононные свойства однокомпонентных кулоновских кристаллов

Исследуем свойства фононных спектров однокомпонентных кулоновских кристаллов, то есть кристаллов, состоящих из одного типа ионов. Ранее фононные спектры исследовались только у ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток [105, 39, 41, 42, 45], а простая кубическая и гексагональная решетки были известны, как неустойчивые. В представляемой работе результаты предыдущих работ были проверены и пересчитаны с большей точностью. Кроме того, впервые, исследованы плотности фононных состояний ОЦК и ГПУ решеток.

¹Если все $\omega_i^2(\mathbf{k}) > 0$.

2.2.1 Фононный спектр ОЦК решетки

Для ОЦК решетки первая зона Бриллюэна определяется неравенствами $\pm k_x \pm k_y \leq 2\pi/a_1$, $\pm k_z \pm k_y \leq 2\pi/a_1$, $\pm k_x \pm k_z \leq 2\pi/a_1$. Вместо исследования мод по всей зоне достаточно ограничиться одной из 48 эквивалентных подзон. Подзону, в которой будет производиться исследование, назовем *основной*. Для ОЦК решетки она может быть задана неравенствами $k_x \geq k_y \geq k_z \geq 0$, $k_x + k_y \leq 2\pi/a_1$ и показана на рис. 2.1. Точка Γ соответствует центру зоны Бриллюэна, ребро ΓH лежит на оси k_x , точка P имеет координаты $\pi(1, 1, 1)/a_1$, а точка N — $\pi(1, 1, 0)/a_1$. Все плоские углы, образующие трехгранный угол при вершине N , прямые. Полярные углы θ и ϕ отсчитываются от осей OZ и OX , соответственно, так что направление на ближайший ион задается углами $\theta = \arctg \sqrt{2}$ и $\phi = \pi/4$.

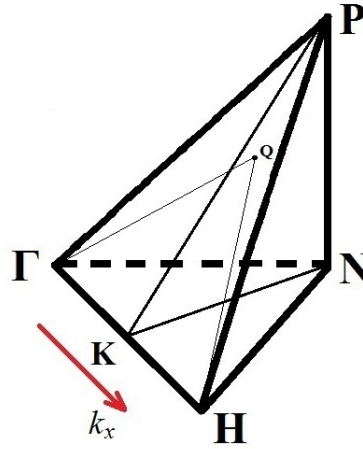


Рис. 2.1: Основная подзона первой зоны Бриллюэна ОЦК решетки.

Вычисленная по формуле (2.9) динамическая матрица ОЦК решетки совпадает с результатами, полученными в работах [105, 41, 45]. Матрица² $W_p^{\mu\lambda} = \delta^{\mu\lambda}\omega_p/3$.

При любом фиксированном $\mathbf{k} > 0$ фононный спектр ОЦК решетки состоит из трех мод колебаний, причем $\sum_i \omega_i^2(\mathbf{k}) = \omega_p^2$. При $ka_1 \sim 1$ для нахождения фононного спектра нужно решать уравнение (2.15) честно. Однако, поведение мод вблизи центра зоны Бриллюэна удобнее исследовать с помощью приближенного выражения для динамической матрицы $D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k})$:

$$\frac{D^{\mu\lambda}(\mathbf{k})}{\omega_p^2} = \frac{k^\mu k^\lambda}{k^2} - \frac{(ka_1)^2}{16\pi} \left(\alpha_0 \frac{k^\mu k^\lambda}{k^2} + \beta_0 \delta^{\mu\lambda} + \gamma^{\mu\lambda\rho\sigma} \frac{k^\rho k^\sigma}{k^2} \right). \quad (2.19)$$

Для решеток с $N_{\text{cell}} = 1$ это выражение имеет универсальный вид и впервые было найдено в работе [105]. Для ОЦК решетки коэффициенты равны $\alpha_0 \approx 4.1243864$, $\beta_0 \approx 0.84911538$, $\gamma^{xxxx} = \gamma^{yyyy} = \gamma^{zzzz} = \gamma_1 \approx -3.4886939$ и $\gamma^{xyxy} = \gamma^{yxyx} = \gamma^{xyyx} = \dots = \gamma_2 \approx -1.5915193$, причем $\alpha_0 + 3\beta_0 + \gamma_1 + 2\gamma_2 = 0$. Последнее равенство справедливо для всех кубических решеток. Если подставить численные коэффициенты в (2.19), получим, что при $\mu \neq \lambda$

$$\frac{D^{\mu\lambda}(\mathbf{k})}{\omega_p^2} = \frac{k^\mu k^\lambda}{k^2} - 0.0187275 k^\mu k^\lambda a_1^2, \quad (2.20)$$

²Это справедливо для любых кубических решеток (например, ОЦК и ГЦК).

а при $\mu = \lambda$

$$\frac{D^{\mu\mu}(\mathbf{k})}{\omega_p^2} = \frac{k^\mu k^\mu}{k^2} + 0.0147697a_1^2(k^2 - 3k^\mu k^\mu). \quad (2.21)$$

Дисперсионное уравнение (2.15) при малых k примет вид:

$$-\frac{\omega^6}{\omega_p^6} + \frac{\omega^4}{\omega_p^4} + E_0 \frac{\omega^2}{\omega_p^2} + F_0 = 0, \quad (2.22)$$

где

$$\begin{aligned} 8\pi E_0 k^4 &= (ka_1)^2 [(\beta_0 + \gamma_2)k^4 + (\gamma_1 - 3\gamma_2)((k^x k^y)^2 + (k^x k^z)^2 + (k^y k^z)^2)] , \\ 256\pi^2 F_0 k^6 &= (ka_1)^4 [(\beta_0 + \gamma_2)k^6 + 2(\beta_0 + \gamma_2)(\gamma_1 - 3\gamma_2)((k^x k^y)^2 + (k^x k^z)^2 + (k^y k^z)^2) \\ &\quad + 3(\gamma_1 - 3\gamma_2)(k^x k^y k^z)^2] . \end{aligned} \quad (2.23)$$

При малых ka_1 две наименьшие моды можно найти из уравнения (2.22), отбросив член ω^6 . Тогда $\omega_{1,2}^2 = \omega_p^2(-E_0 \pm \sqrt{E_0^2 - 4F_0})/2$, и так как $E_0 \propto k^2$, а $F_0 \propto k^4$, то $\omega_{1,2} \propto k$. Если в уравнении (2.22) отбросить член ω^0 , можно получить выражение для третьей моды: $\omega_3^2 = \omega_p^2(1 + \sqrt{1 + 4E_0})/2 \approx \omega_p^2(1 + E_0)$. Следовательно при $ka_1 \ll 1$ спектр ОЦК решетки состоит из двух акустических мод ($\omega_{1,2} \propto k$) и одной оптической ($\omega_3 \approx \omega_p$).

На рис. 2.2 представлен фононный спектр вдоль направлений высокой симметрии основной зоны Бриллюэна ОЦК решетки [106]. Частоты показаны как функция расстояния от соответствующей вершины в единицах $1/a_1$ и нормированы на ω_p . В направлениях ГН и ГР, и только в них, две акустические моды совпадают.

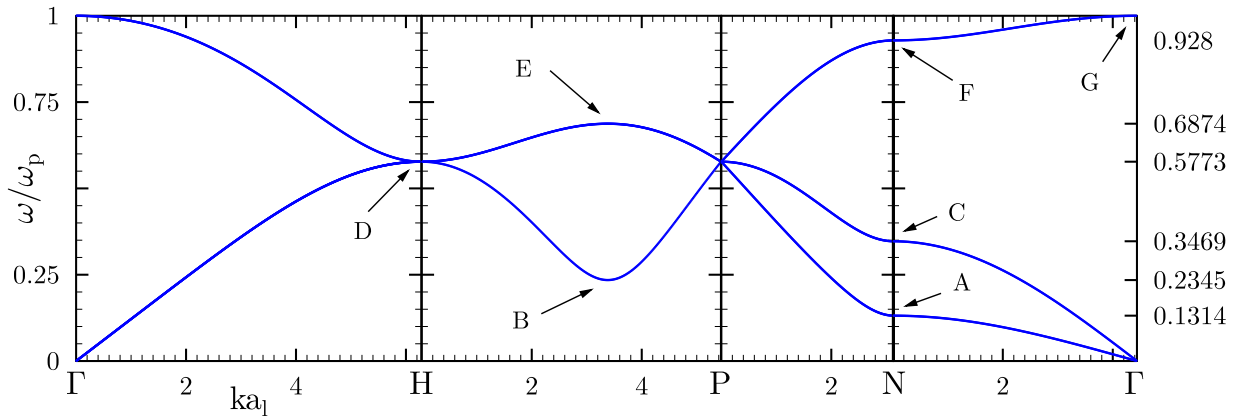


Рис. 2.2: Фононный спектр ОЦК решетки.

Здесь стоит также отметить, что с помощью матрицы (2.19) можно определить поведение векторов поляризации в центре зоны Бриллюэна. Для этого достаточно найти собственные вектора этой матрицы, как было сделано в [45, 107]. Очевидно, что один из них будет параллелен \mathbf{k} , а два других — перпендикулярны.

Фононный спектр ОЦК решетки, как простой кубической с базисом

ОЦК решетку можно представить как простую кубическую решетку с ненулевым вектором базиса, ПК2 решетку (см. параграф 1.2). Первая зона Бриллюэна такой решетки, как и у

обычной кубической решетки, — куб, ограниченный плоскостями $|k_x, k_y, k_z| = \pi/a_1$, а основную подзону зоны Бриллюэна можно определить неравенствами $k_x \geq k_y \geq k_z \geq 0$ и $k_x \leq \pi/a_1$. На рис. 2.1 это пирамида ГКНР, где точка К имеет координаты $(\pi, 0, 0)/a_1$. Ее объем в два раза меньше, чем объем подзоны ОЦК решетки.

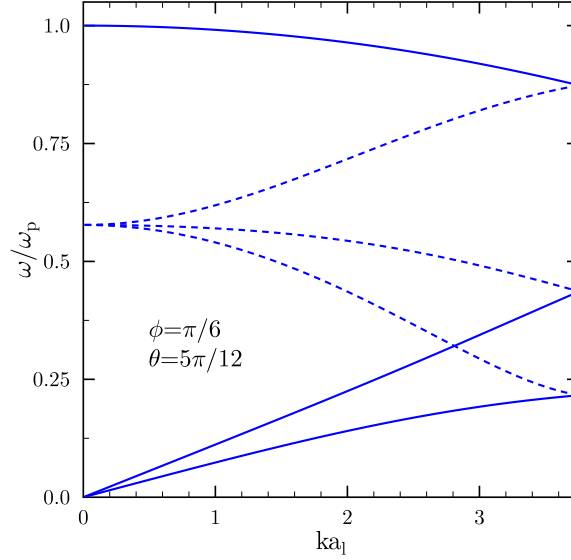


Рис. 2.3: Фононный спектр ОЦК решетки, как простой кубической с базисом.

В этом представлении спектр ОЦК решетки изображен на рис. 2.3 в направлении ГQ, описываемом углами $\theta = 5\pi/12$ и $\phi = \pi/6$ [71]. Фононный спектр ПК2 решетки состоит из шести мод ($N_{\text{cell}} = 2$). Три из них совпадают с модами ОЦК решетки в обычном представлении (синие сплошные линии на рис. 2.3). Три другие моды ПК2 решетки (сходящиеся в одну точку при $ka_1 = 0$ синие пунктирные линии на рис. 2.3) совпадают с дисперсионными кривыми ОЦК решетки в направлении HQ. Иными словами, эти моды можно получить из мод обычной ОЦК решетки, если отразить область изменения вектора \mathbf{k} в зоне Бриллюэна ПК2 решетки относительно границы этой зоны (в данном случае, относительно плоскости $k_x = \pi/a_1$). В результате такого отражения точка Г переходит в Н. В точке Н, являющейся вершиной зоны Бриллюэна, частоты всех трех мод ОЦК решетки совпадают. Этим объясняется слияние трех мод ПК2 решетки при $ka_1 = 0$ (рис. 2.3). Интересно отметить, что в ОЦК решетке моды пересекались только в точках высокой симметрии, а в ПК2 решетке они имеют пересечения и внутри первой зоны Бриллюэна.

Плотность фононных состояний ОЦК решетки

Одной из важнейших характеристик фононного спектра является *плотность фононных состояний* $\nu(\omega)$, определяемая как отношение числа фононных мод, лежащих в интервале от

ω до $\omega + d\omega$, к ширине интервала³:

$$\nu(\omega) \equiv \frac{V\omega_p}{(2\pi)^3} \sum_i \int_{\omega_i(\mathbf{k})=\omega} \frac{d\Omega}{|\nabla\omega_i(\mathbf{k})|} = \frac{\omega_p}{3N} \sum_{\mathbf{k}i} \delta(\omega - \omega_i(\mathbf{k})). \quad (2.24)$$

Чаще всего эта плотность нормирована на единицу: $\int_0^\infty d\omega\nu(\omega) = 1$.

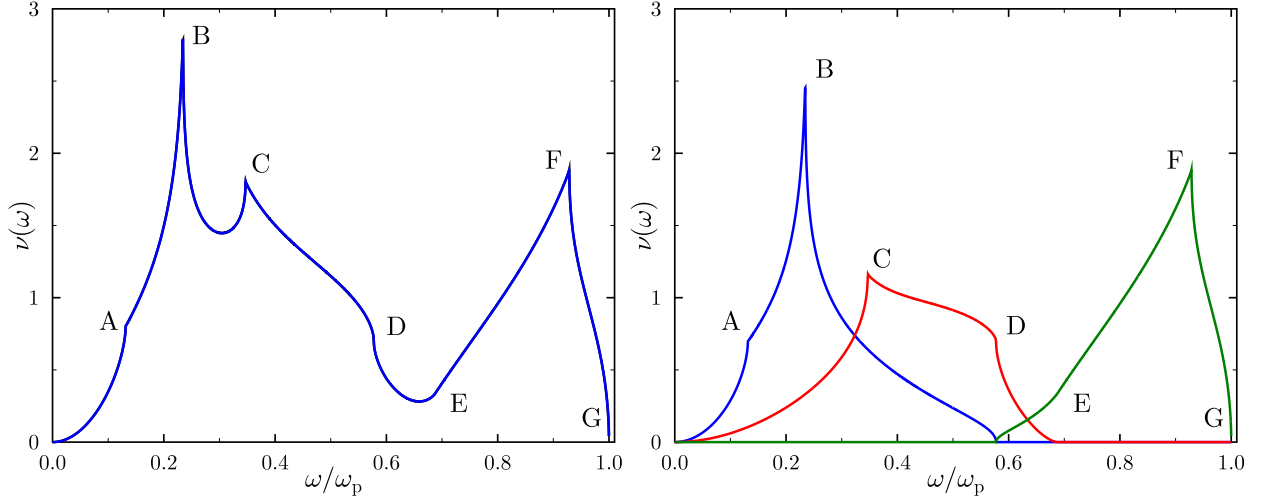


Рис. 2.4: Плотность фононных состояний ОЦК решетки.

На рис. 2.4 изображена плотность фононных состояний ОЦК решетки (на левой части рисунка показана полная плотность, а на правой части — вклад отдельных мод). Она рассчитана по 5×10^8 точкам в основной подзоне зоны Бриллюэна, а диапазон по ω разбит на 6000 равных интервалов. При малых ω имеет место квадратичная зависимость плотности фононных состояний от частоты, и $\nu(\omega) \approx 32.3(\omega/\omega_p)^2$ при $\omega \ll \omega_p$. Такая зависимость обусловлена наличием акустических мод вблизи центра зоны Бриллюэна. До работы [106] плотность фононных состояний кулоновских кристаллов не рассматривалась.

В спектре любого кристалла существуют точки (точки высокой симметрии зоны Бриллюэна), в которых обращаются в нуль частные производные ω_i по \mathbf{k} . В зависимости от поведения вторых производных в этих точках наблюдается минимум или максимум закона дисперсии, а также эта точка может оказаться седловой (первого или второго рода). Фононная плотность при частотах, которые достигаются в этих точках, имеет изломы. Они называются *особенностями ван Хова* [108]. Для ОЦК решетки эти особенности обозначены буквами A-G на рис. 2.2 и 2.4.

В ОЦК решетке фононный спектр кристалла непрерывен (то есть щель отсутствует) и изменяется в пределах от 0 до ω_p . Вблизи максимума спектра, ω_p , обозначенного буквой G, $\nu(\omega) \approx C_G\sqrt{\omega_p - \omega}$, где C_G — константа⁴. Частота $\omega_D = \omega_p/\sqrt{3}$ является максимальной для первой, и минимальной для третьей, оптической моды. Эта же частота соответствует седловой особенности первого рода второй моды колебаний. Таким образом, вблизи ω_D

³Вместо плотности частот колебаний, иногда используется плотность квадратов частот: $g(z) = g(\omega^2) = 0.5\nu(\omega)/\omega$.

⁴Под “вблизи” подразумевается расстояние порядка $(0.02 - 0.03)\omega/\omega_p$ от описываемой точки.

корневая зависимость $\nu(\omega)$ от ω двухсторонняя. В окрестности $\omega_E \approx 0.6874\omega_p$ никакой особенности нет, несмотря на то, что она максимальна для второй моды колебаний. Частота $\omega_F = 0.928\omega_p$ соответствует седловой особенности первого рода третьей моды колебаний: $\nu(\omega) \approx \nu(\omega_F) - C_F\sqrt{\omega - \omega_F}$ при $\omega > \omega_F$ и $\nu(\omega) \approx \nu(\omega_F) + o(\sqrt{\omega_F - \omega})$ при $\omega < \omega_F$. Аналогично, вблизи частот ω_A и ω_C фононная плотность $\nu(\omega) \approx \nu(\omega_{A,C}) - C_{A,C}\sqrt{\omega_{A,C} - \omega}$ при $\omega < \omega_{A,C}$ (седловая особенность второго рода). Частота $\omega_B \approx 0.2345\omega_p$ соответствует седловой особенности первого рода первой моды колебаний, однако, точный анализ поведения плотности в окрестности этой частоты не проведен в связи с ограниченностью расчетных мощностей (нужно увеличить число точек, по которым рассчитывается плотность больше, чем на порядок). Производная $\partial\nu(\omega)/\partial\omega \rightarrow -\infty$, когда $\omega = \omega_B - 0$ и $\partial\nu(\omega)/\partial\omega \rightarrow +\infty$, когда $\omega = \omega_B + 0$.

Моменты фононного спектра ОЦК решетки

Еще одной важной характеристикой фононного спектра являются его *моменты*. Например, *первый момент* $u_1 \equiv \langle \omega_i(\mathbf{k})/\omega_p \rangle$, где $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по всем фононным модам в первой зоне Бриллюэна:

$$\langle f_i(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{3N_{\text{cell}}} V_B \sum_{i=1}^{3N_{\text{cell}}} \int_{V_B} d\mathbf{k} f_i(\mathbf{k}). \quad (2.25)$$

Первый момент определяет энергию нулевых колебаний кристалла: $E_0 = 1.5N\hbar\langle \omega_i(\mathbf{k}) \rangle = 1.5N\hbar\omega_p u_1$. Моменты $u_{-1} \equiv \langle \omega_p/\omega_i(\mathbf{k}) \rangle$ и $u_{-2} \equiv \langle (\omega_p/\omega_i(\mathbf{k}))^2 \rangle$ — среднеквадратичное смещение ионов относительно узла решетки при квантовых и классических температурах, соответственно. Момент $u_{\ln} \equiv \langle \ln(\omega_i(\mathbf{k})/\omega_p) \rangle$ входит в классическую асимптотику свободной энергии Гельмгольца. В ОЦК решетке $\sum_i \omega_i^2(\mathbf{k}) = \omega_p^2$ при любом \mathbf{k} , следовательно момент $u_2 \equiv \langle \omega_i^2(\mathbf{k})/\omega_p^2 \rangle = 1/3$ (это справедливо для всех рассматриваемых в представляемой работе устойчивых решеток).

Для ОЦК решетки в представляемой работе было найдено, что $u_1 = 0.5113877$, $u_{-1} = 2.79853$, $u_{-2} = 12.9725$ и $u_{\ln} = -0.831295$. Это хорошо согласуется с результатами работы [45]. Ранее эти моменты также рассчитывались в работах [74, 109, 42, 69], но с несколько меньшей точностью.

Здесь следует сказать несколько слов о методе интегрирования в k -пространстве, использованном при расчете моментов. Как уже говорилось ранее в этом параграфе, первая зона Бриллюэна ОЦК решетки может быть разбита на 48 эквивалентных подзон. Вместо интегрирования по всей первой зоне Бриллюэна достаточно ограничиться интегрированием по основной подзоне, объем которой $V_I = V_B/48$. Для вычисления u_1 с пятью значащими цифрами достаточно использовать порядка 10^3 узлов интегрирования, расположенных равномерно в этой подзоне, так как чем больше частота, тем больший вклад она вносит в u_1 . В случае u_{-1} ситуация обратная. Наибольший вклад вносят акустические моды вблизи центра зоны Бриллюэна, и для обеспечения той же точности, что и для u_1 , количество точек необходимо увеличить до $10^7 - 10^8$ при равномерной сетке. Это существенно увеличивает время расчетов.

Для повышения скорости был использован модифицированный метод Гаусса, впервые предложенный Холасом⁵ [110], а позже развитый Альберсом и Губернатисом [109]. Согласно ему интеграл по основной подзоне для ОЦК решетки может быть записан в виде:

$$\frac{1}{V_I} \int_{V_I} d\mathbf{k} f(\mathbf{k}) = 6 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 d\xi d\eta d\zeta \eta \xi^2 f[\mathbf{q}(\xi, \eta, \zeta)], \quad \mathbf{q}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{\pi}{a_1} \xi(2 - \eta, \eta, \eta\xi). \quad (2.26)$$

Каждый из трех получившихся интегралов можно вычислить методом Гаусса по узлам полиномов Якоби $P_n^{(0,0)}(x)$. В представляемой работе промежутки интегрирования $[0, 1]$ по ζ и η не разбивались, а степень полинома Якоби n выбиралась равной 8-12. Промежуток интегрирования по ξ разбивался на интервалы $[0, 10^{-\epsilon}]$, $[10^{-\epsilon}, 10^{-\epsilon+1}]$, \dots , $[10^{-1}, 1]$, где ϵ выбирался равным 5-7. В каждом промежутке проводилось интегрирование методом Гаусса по 12-16 узлам.

Для ПК2 решетки объем подзоны в два раза меньше, а интеграл по ней:

$$\frac{1}{V_I} \int_{V_I} d\mathbf{k} f(\mathbf{k}) = 6 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 d\xi d\eta d\zeta \eta \xi^2 f[\mathbf{q}(\xi, \eta, \zeta)], \quad \mathbf{q}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{\pi}{a_1} \xi(1, \eta, \eta\zeta). \quad (2.27)$$

Помимо только что описанного метода Холаса моменты можно вычислить, используя плотность фононных состояний: $u_n = \int_0^\infty dx x^n \nu(x)$ (для ОЦК решетки верхний предел интегрирования можно заменить на 1, так как при $x > 1$ $\nu(x) = 0$). Рассчитанный этим методом u_1 ОЦК решетки равен 0.51135 (погрешность 0.008 %), а $u_{-2} = 12.986$ (погрешность 0.1%) [106].

2.2.2 Фононный спектр ПК решетки

Как известно, простая кубическая решетка неустойчива. Отметим, что в литературе доказательства этого утверждения найдено не было. В часто упоминаемом в этом контексте цикле работ Борна [13] среди рассмотренных потенциалов нет чисто кулоновского.

Первую зону Бриллюэна ПК решетки можно определить так же как и для ПК2 решетки (вектора базиса не изменяют геометрию зоны Бриллюэна). На рис. 2.5 показана действительная часть фононного спектра ПК решетки в нескольких направлениях, начинающихся в центре зоны Бриллюэна и заканчивающихся на ее границе. В направлении, задаваемом углами $\phi = \pi/4$ и $\theta = \pi/3$, все частоты действительные, как и в направлении ГР (в этом случае две акустические моды совпадают). В направлении, задаваемом углами $\phi = \pi/6$ и $\theta = 5\pi/12$, частоты одной из мод в центре зоны Бриллюэна комплексные, но они становятся действительными ближе к границе зоны. В направлении ГН комплексность сохраняется всегда.

Таким образом это простое исследование наглядно демонстрирует неустойчивость ПК решетки.

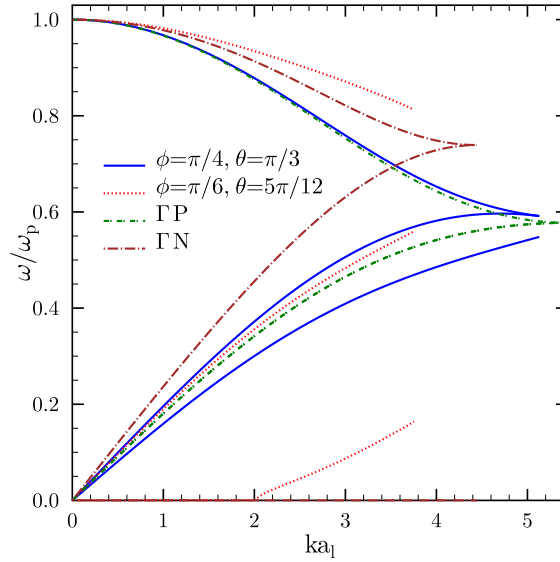


Рис. 2.5: Фононный спектр ПК решетки.

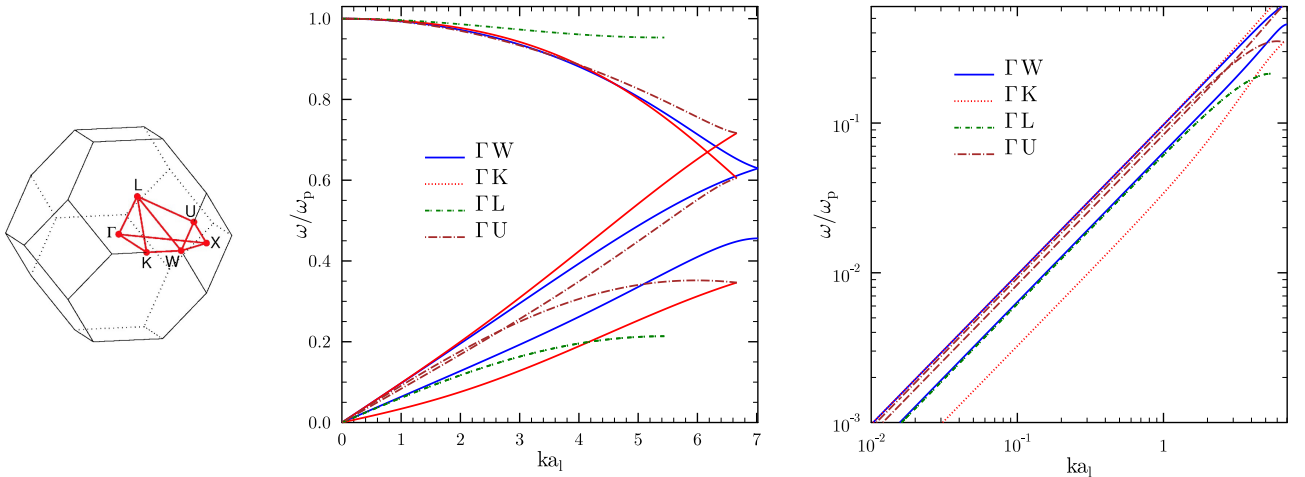


Рис. 2.6: Фононный спектр ГЦК решетки и ее зона Бриллюэна.

2.2.3 Фононный спектр ГЦК решетки

Для ГЦК решетки первая зона Бриллюэна — усеченный октаэдр, определяемый неравенствами $\pm k_x \pm k_y \pm k_z \leq 3\pi/a_1$, $|k_x|, |k_y|, |k_z| \leq 2\pi/a_1$. Неравенства $k_x \geq k_y \geq k_z \geq 0$, $k_x + k_y + k_z \leq 3\pi/a_1$ и $k_x \leq 2\pi/a_1$ ограничивают объем основной подзоны зоны Бриллюэна. Она показана на левой части рис. 2.6 (рисунок из работы [112]) — многогранник $\Gamma K W X U L$, где Γ — центр зоны Бриллюэна, координаты точки K — $\pi(1.5, 1.5, 0)/a_1$, W — $\pi(2, 1, 0)/a_1$, X — $\pi(2, 0, 0)/a_1$, U — $\pi(2, 0.5, 0.5)/a_1$ и L — $\pi(1, 1, 1)/a_1$.

На центральной и правой частях рис. 2.6 показан фононный спектр ГЦК решетки в направлениях ΓW , ΓK , ΓL и ΓU . Моды обрываются на границе первой зоны Бриллюэна. Спектр ГЦК решетки состоит из двух акустических и одной оптической моды, а основное

⁵В работе [110] этот метод был использован для всех простейших решеток: ПК, ОЦК, ГЦК, ГПУ, а также для некоторых других, в представляемой работе не рассматривающихся.

отличие от спектра ОЦК решетки состоит в том, что здесь вдоль некоторых направлений (например, ΓK и ΓU) моды пересекаются. На правой части рис. 2.6 отдельно показаны акустические моды. Видно, что линейная зависимость от k для этих мод сохраняется только до $ka_1 \sim 1$.

Моменты ГЦК решетки, рассчитанные методом Холаса в представляемой работе (он подробно описан в [110] и схож с методом для ОЦК решетки), равны $u_1 = 0.513194$, $u_{-1} = 2.719817$, $u_{-2} = 12.14314$ и $u_{1n} = -0.8179085$. Ранее эти моменты также рассчитывались в работах [42, 69, 45], но с несколько меньшей точностью.

Для полноты приведем коэффициенты разложения динамической матрицы при малых k , полученные в работе [45]. Для ГЦК решетки они равны $\alpha_0 \approx 4.0036483$, $\beta_0 \approx 1.2376805$, $\gamma_1 \approx -4.2930041$ и $\gamma_2 \approx -1.71184285$.

2.2.4 Фононный спектр ГПУ решетки

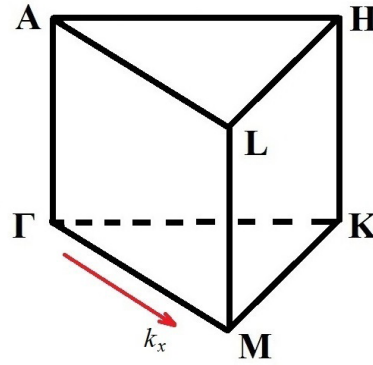


Рис. 2.7: Основная подзона первой зоны Бриллюэна ГПУ решетки.

Первая зона Бриллюэна ГПУ решетки (с $h = h_{\text{hcp}}$) определяется неравенствами $\pm\sqrt{3}k_y \pm k_x \leq 4\pi/(\sqrt{3}a_1)$, $|k_x| \leq 2\pi/(\sqrt{3}a_1)$ и $|k_z| \leq \sqrt{3}\pi/(\sqrt{8}a_1)$, а ее основная подзона — неравенствами⁶ $k_x, k_y, k_z > 0$, $k_x \leq 2\pi/(\sqrt{3}a_1)$, $k_y \leq k_x/\sqrt{3}$ и $k_z \leq \sqrt{3}\pi/(\sqrt{8}a_1)$. Она изображена на рис. 2.7, где точка Γ соответствует центру зоны Бриллюэна, а ребра ΓM и ΓA лежат на осях k_x и k_z , соответственно.

Вычисленная по формуле (2.9) динамическая матрица ГПУ решетки совпадает с соответствующим выражением, полученным в работе [42], с точностью до нормировки и выбора базисных векторов, и не совпадает с результатами работы [45], где была допущена ошибка в вычислении матрицы $W_p^{\mu\lambda}$ [111]. Для ГПУ решетки матрица $W_p^{\mu\lambda} \neq \delta^{\mu\lambda}\omega_p^2/3$, как предполагалось в работе [45]. На самом же деле в выбранной системе координат $W_p^{\mu\lambda}$ имеет диагональный, но анизотропный вид: $W_1^{xx} = W_1^{yy} = 0.3331431\omega_p^2$ и $W_1^{zz} = 0.3337138\omega_p^2 \neq W_1^{xx}$. В ГУ решетке матрица $W_p^{\mu\lambda}$ изотропна, если высота решетки равна 1.63451958, что не соответствует ни $h_{\text{hcp}0} \approx 1.6356394$, ни $h_{\text{hcp}} = \sqrt{8/3}$.

⁶Соответственно основная подзона ГУ решетки с произвольным h определяется неравенствами $k_x, k_y, k_z > 0$, $k_x \leq 2\pi/(\sqrt{3}a_1)$, $k_y \leq k_x/\sqrt{3}$ и $k_z \leq \pi/(ha_1)$.

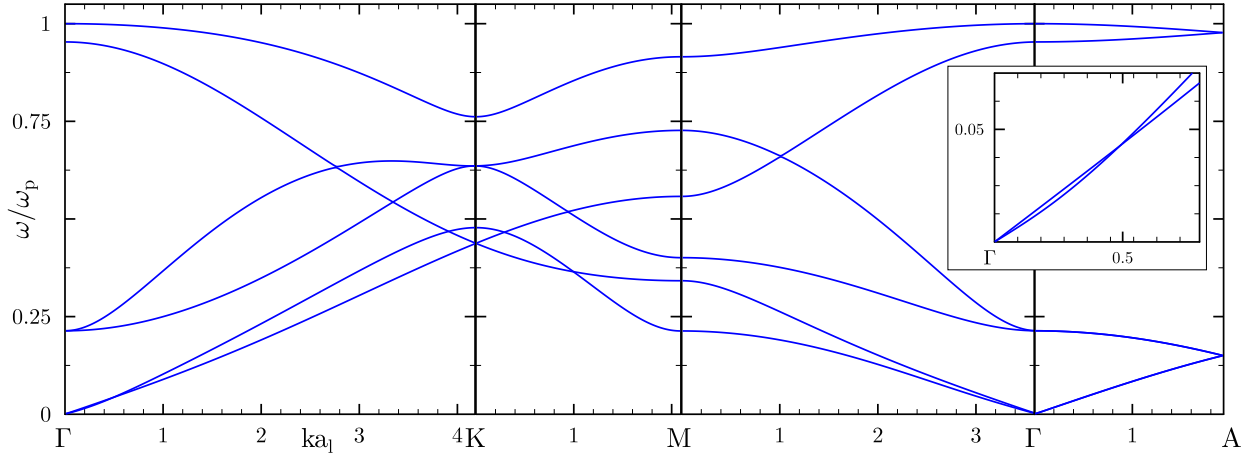


Рис. 2.8: Фононный спектр ГПУ решетки.

В отличие от ОЦК решетки, фононный спектр ГПУ решетки состоит из шести мод ($N_{\text{cell}} = 2$). В окрестности точки Γ две из них акустические, а четыре — оптические. Спектр вдоль направлений высокой симметрии зоны Бриллюэна ГПУ решетки представлен на рис. 2.8. Как видно из этого рисунка, моды ГПУ решетки пересекаются внутри первой зоны Бриллюэна [111]. Характерной особенностью спектра ГПУ решетки является то, что фазовая скорость одной из акустических мод сильно меняется при малых \mathbf{k} (то есть быстро перестает быть постоянной по k) в областях, близких к некоторым плоскостям высокой симметрии зоны Бриллюэна. Например, в направлении ΓK , как показано на рис. 2.8 справа. Для ГПУ решетки детальный анализ мод при малых k не проводился.

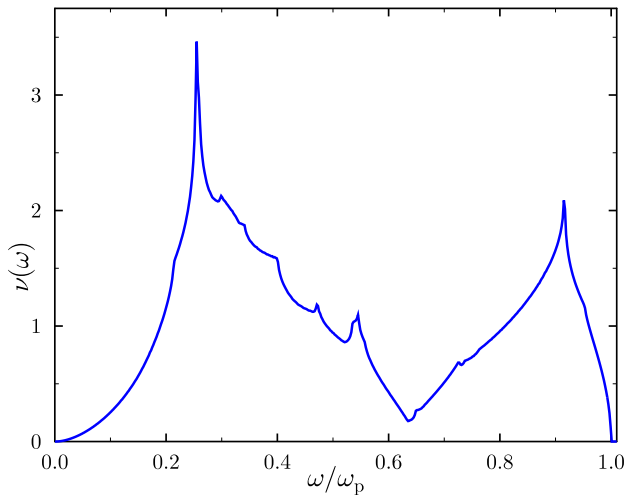


Рис. 2.9: Плотность фононных состояний ГПУ решетки.

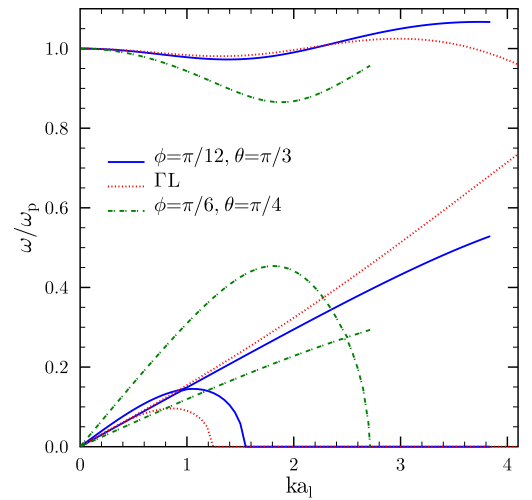


Рис. 2.10: Фононный спектр гексагональной решетки.

Плотность фононного спектра ГПУ решетки показана на рис. 2.9. Она рассчитана по 6×10^7 точкам, диапазон по ω разбит на 1500 интервалов [111]. При $\omega \ll \omega_p$ $\nu(\omega)$ можно аппроксимировать как $38(\omega/\omega_p)^2$. Как и в ОЦК решетке в спектре ГПУ решетки есть

особенности Ван-Хова, однако, из-за их многочисленности и невысокой точности расчета детально они не исследовались.

В работе [45] моменты ГПУ решетки были рассчитаны с меньшей точностью нежели количество указанных там знаков (за исключением u_1). Это связано с уже упомянутой ошибкой в расчете матрицы $W_p^{\mu\lambda}$. В представляемой работе, моменты рассчитаны с точностью в 6 значащих цифр и равны: $u_1 = 0.5133369$, $u_{-1} = 2.70183$, $u_{-2} = 11.8421$ и $u_{\text{ln}} = -0.816031$, что отличается от приведенных в работе [45] значений: $u_{-1} = 2.7026$, $u_{-2} = 12.015$ и $u_{\text{ln}} = -0.81597$ (метод интегрирования тот же).

2.2.5 Фононный спектр гексагональной решетки

Как и простая кубическая решетка гексагональная решетка с высотой h_{hcp} неустойчива. Отличие от ПК решетки состоит в том, что при выбранных векторах основных трансляций, а они совпадают с векторами ГПУ решетки, комплекснозначные частоты появляются не в центре зоны Бриллюэна, а на ее границе. Это проиллюстрировано на рис. 2.10, где изображены фононные моды гексагональной решетки. При $h = h_{\text{hex0}}$ гексагональная решетка также неустойчива. Устойчивость при других h не исследовалась.

2.3 Устойчивость деформированных кристаллов

В этом параграфе рассмотрим границы устойчивости ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток при тех или иных деформациях, а также определим как изменяются момент u_1 ОЦР и ГЦР решеток при изменении c_1 и c_2 .

2.3.1 Устойчивость и моменты ОЦР и ГЦР решеток

Как уже было сказано в параграфе 1.3.2, простейшим примером деформации кубических ОЦК и ГЦК решеток является растяжение или сжатие их вдоль ребер куба элементарной ячейки, а получившиеся при этом деформации решетки называются ромбическими: ОЦР и ГЦР, соответственно. Фононный спектр ОЦР и ГЦР решеток состоит из трех мод: двух акустических и одной оптической. Однако, при некоторых c_1 и c_2 в центре зоны Бриллюэна частота одной из акустических мод становится комплекснозначной. Это соответствует потере решетками ОЦР и ГЦР устойчивости и тем самым позволяет описать предельную деформацию ОЦК и ГЦК решеток при растяжении вдоль ребер.

Области значений c_1 и c_2 , при которых ОЦР и ГЦР решетки устойчивы, изображены на рис. 2.11 (шаг по c_1 и c_2 равен 0.025). При $c_1 = 1$ и $c_2 = \sqrt{2}$ (а так же при $c_1 = \sqrt{2}$ и $c_2 = 1$) ОЦР решетка становится ГЦК решеткой. Эта структура отмечена красной точкой на рис. 2.11А. Аналогично при $c_1 = c_2 = \sqrt{2}$ ГЦР решетка становится ОЦК (красная точка на рис. 2.11В).

При $c_1 = 1$ и $c_2 = 1.49$ ОЦР решетка устойчива, а при $c_1 = 1$ и $c_2 = 1.5$ уже нет [83]. При $c_2 = c_1$ ОЦР решетка остается устойчивой только до $c_1 = 1.07$ [83]. Это проиллюстри-

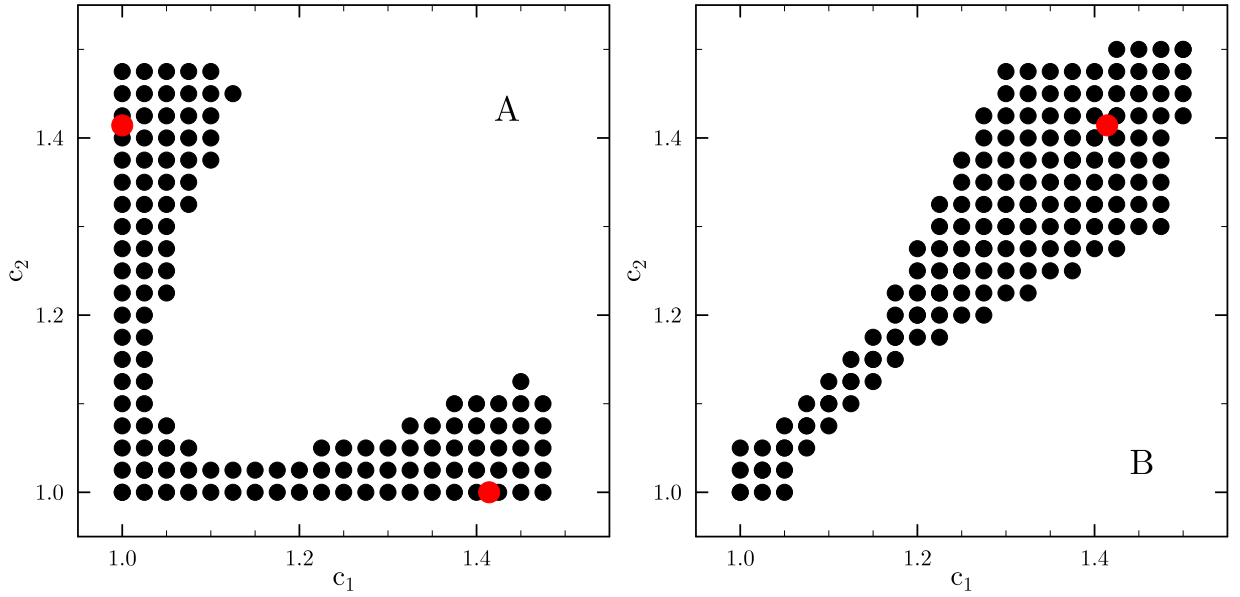


Рис. 2.11: Область значений c_1 и c_2 при которых решетки ОЦР (рис. А) и ГЦР (рис. В) устойчивы.

ровано на рис. 2.12, где изображена наименьшая мода спектра вблизи центра первой зоны Бриллюэна в направлении, задаваемым волновым вектором $\mathbf{k} = k(0, 1, 1)/\sqrt{2}$ (см. также рис. 2.34). Одновременное растяжение вдоль двух осей эквивалентно сжатию вдоль третьей оси. Следовательно, если ОЦК решетка может свободно растягиваться в 1.5 раза вдоль одного из ребер куба элементарной ячейки, то сжатие в том же направлении возможно лишь на 6.5 %.

По аналогии с ПК2 и ОЦК решетками, ОЦР решетку можно представить как ромбическую решетку с базисом. Следовательно, первая зона Бриллюэна такой решетки — прямоугольный параллелепипед, ограниченный плоскостями $|k_x| = \pi/a_1$, $|k_y| = \pi/b_1$ и $|k_z| = \pi/c_1$, а основная подзона — параллелепипед, ограниченный плоскостями $k_x = 0$, $k_y = 0$, $k_z = 0$, $k_x = \pi/a_1$, $k_y = \pi/b_1$ и $k_z = \pi/c_1$. Эту подзону, в свою очередь, можно разбить на шесть пирамид, в основании которых прямоугольные треугольники, а вершина — начало координат. Для вычисления интегралов в каждой из пирамид можно использовать метод Холаса. Этот же метод применим для вычисления интегралов по зоне Бриллюэна ГЦР решетки. Границы ее основной подзоны, имеющую сложную структуру, можно найти в работе [112]. Отметим, что форма подзоны ГЦР решетки зависит от знака $1/a_1^2 - (1/b_1^2 + 1/c_1^2)$.

С помощью указанных выше методов, можно найти моменты фононного спектра ОЦР и ГЦР решеток, в частности, u_1 . Он, как и любой другой момент, зависит от параметров c_1 и c_2 . На рис. 2.13А показано как изменяется $u_1(c_1, c_2)$ ОЦР решетки при некоторых c_1 и c_2 в области их допустимых значений [учтено, что $u_1(c_1, c_2) = u_1(c_2, c_1)$]. Большими красными кругами изображены известные ранее значения первого момента ОЦК и ГЦК решеток: $u_1(1, 1)$ и $u_1(\sqrt{2}, 1)$. Как известно $u_1(\sqrt{2}, 1) > u_1(1, 1)$, однако, $u_1(c_1, 1)$ изменяется не монотонно. При $|c_1 - 1| \ll 1$ значение $u_1(c_1, c_2)$ уменьшается. Из рис. 2.13А видно, что это имеет место

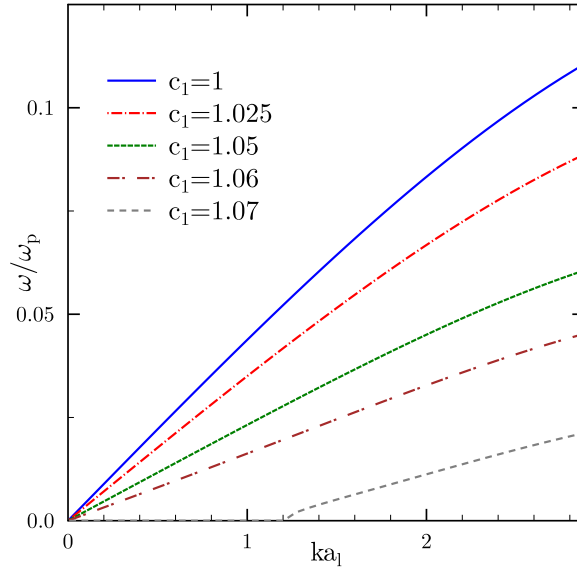


Рис. 2.12: Фононный спектр ОЦР решетки вблизи $k = 0$.

для всех рассматриваемых c_2 . Также $u_1(c_1, c_2) < u_1(1, 1)$ на “дальней границе устойчивости”, например, $u(1.45, 1.125) = 0.510932$.

На рис. 2.13В показано, как изменяется $u_1(c_1, c_2)$ ГЦР решетки. Большими красными кругами также обозначены кубические решетки. В этом случае при всех рассматриваемых c_1 и c_2 $u_1(c_1, c_2) < u_1(1, 1)$.

2.3.2 Устойчивость других деформированных решеток

Пользуясь обозначениями, введенными в параграфе 1.3.2, рассмотрим несколько других деформаций ОЦК решетки.

Растянутая вдоль главной диагонали ОЦК решетка устойчива, когда $0.92 < c_d < 1.13$, где c_d — отношение длины диагонали, вдоль которой происходит деформация, к длине диагонали перпендикулярной направлению деформации [83].

Растянутая вдоль диагонали основания (в направлении на третьего ближайшего соседа) ОЦК решетка устойчива, когда c_d лежит в диапазоне от 0.9 до 1.06. Здесь c_d — отношение длины диагонали основания деформированной решетки к длине диагонали основания недеформированной решетки.

Граница области значений c_x и c_y , при которых ОЦК решетка со сдвигом устойчива, изображена на рис. 2.14. Черными кругами показаны значения c_x и c_y , при которых решетка устойчива (решетка устойчива при всех c_x и c_y лежащих левее и ниже указанных точек), синими квадратами показана область неустойчивости. Красными кривыми показаны контуры $\sqrt{c_x^2 + c_y^2} = 0.08\sqrt{2} \approx 0.113$ и $\sqrt{c_x^2 + c_y^2} = 0.13$. Видно, что границу устойчивости ОЦК решетки при сдвиговой деформации нельзя считать зависящей только от $\sqrt{c_x^2 + c_y^2}$.

Таким образом, границы устойчивости ОЦК решетки существенно зависят от направления деформации. Во всех рассмотренных случаях неустойчивости появляются вблизи центра

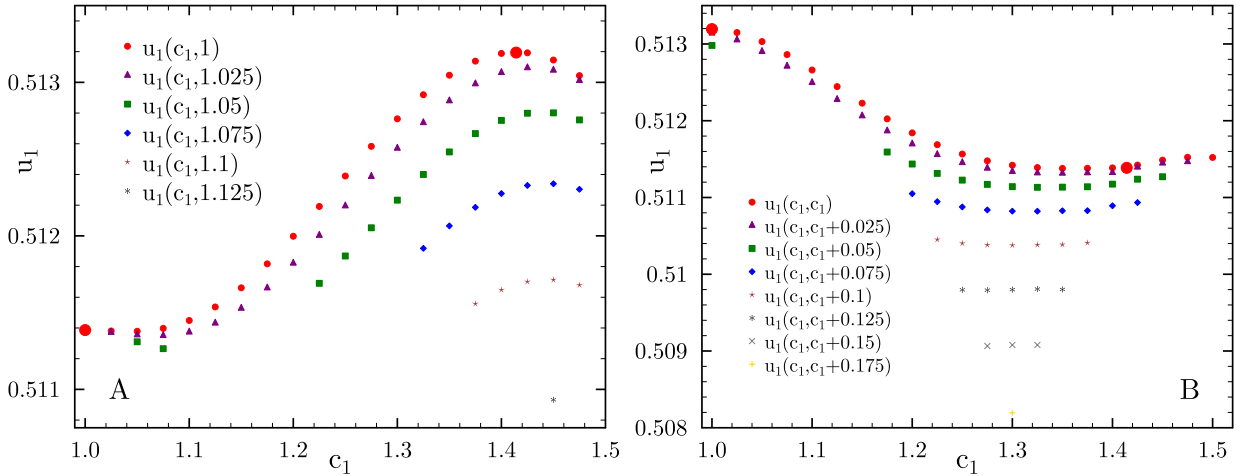


Рис. 2.13: Зависимость первого момента от c_1 для ОЦР (рис. А) и ГЦР (рис. В) решеток.

зоны Бриллюэна в некотором выделенном направлении волнового вектора. При увеличении деформации кристалла область “неустойчивых” волновых векторов (при которых $\omega^2(\mathbf{k}) < 0$) увеличивается. Эволюция этих областей рассматривалась в работе [83] на примере растянутой вдоль главной диагонали ОЦК решетки.

Устойчивость других решеток подробно не исследовалась. Было найдено, что помимо простой кубической и гексагональной решеток неустойчивыми являются простые ромбическая и тетрагональная, а также базоцентрированные ромбическая и моноклинная. Таким образом, из 14 решеток Браве детально не исследованными остались простые моноклинная, триклинная и ромбоэдрическая решетки. Поверхностное рассмотрение показало, что в широком диапазоне параметров они также неустойчивы. Кроме этого, было найдено, что ГУ решетка устойчива, когда h изменяется в диапазоне $(1.48; 1.82)$.

2.3.3 Устойчивость коры нейтронной звезды

Как показано в предыдущем параграфе, а также в параграфе 1.3.5, поведение кристаллических решеток при различных деформациях не универсально. Поэтому устойчивость кристаллической коры нейтронной звезды и ее поведение при деформации существенно зависят от взаимной ориентации направления деформации и кристаллографических осей, а также от типа кристаллической решетки. Исследования различных деформированных решеток важны для понимания эволюционных процессов в недрах нейтронных звезд (например, [83]). Так, существует несколько моделей, которые связывают разрушение кристаллической коры нейтронной звезды с наблюдательными проявлениями. Например, в некоторых моделях предполагается, что разрушение коры является причиной *глитчей* — сбоев в частоте вращения пульсаров (например, [6]). Максимальное напряжение, которое может выдержать кора, ограничивает высоту гор на поверхности нейтронной звезды. Образование которых может играть важную роль в теории излучения гравитационных волн (например, [8, 9]): горы, характерной высотой 1 см., приводят к появлению ненулевого квадрупольного момента нейтронной

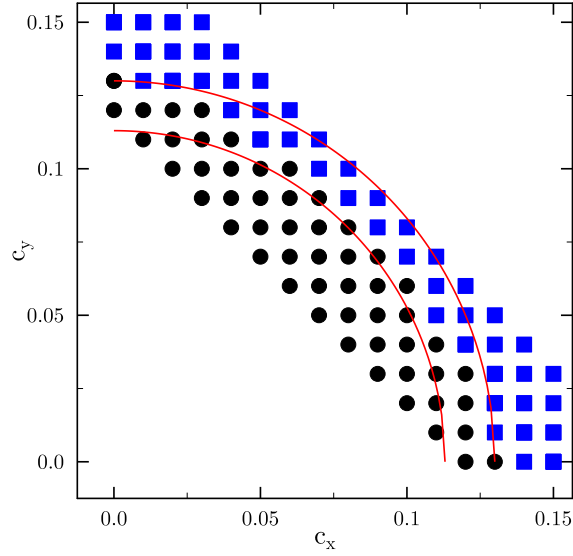


Рис. 2.14: Область значений c_x и c_y при которых ОЦК решетка со сдвигом устойчива.

звезды.

Работы по исследованию максимального разрушающего напряжения, которое может выдержать кора, ранее проводились лишь численно. Так, в работе [9] методами молекулярной динамики рассматривалась система ионов, упорядоченных в ОЦК решетку и взаимодействующих с помощью потенциала: $\phi(r) = Z^2 e^2 \exp(-r/\lambda)/r$, где $\lambda \approx 1.75a$. Максимальное напряжение, которое может выдержать такая кора, есть

$$\sigma_b^{\max} = \left(0.0195 - \frac{1.27}{\Gamma - 71} \right) n \frac{Z^2 e^2}{a}, \quad (2.28)$$

то есть при нулевой температуре $\sigma_b^{\max} = 0.0195nZ^2e^2/a$. Этот результат, полученный для одной конкретной деформации кристалла, можно сопоставить с результатами теоретической модели, используемой в представляемой работе.

При деформации ОЦК решетки, рассмотренной в работе [9], вектор прямой решетки $0.5a_1(n_1, n_2, n_3)$ переходит в вектор $0.5a_1(n_1 + n_2\epsilon/2, n_2 + n_1\epsilon/2, n_3/(1 - \epsilon^2/4))$, где n_1, n_2 и n_3 — некоторые целые числа, ϵ — параметр, характеризующий степень деформации. Наши исследования фононного спектра деформированной таким образом ОЦК решетки показывают, что она устойчива при $\epsilon \leq 0.110$. При бóльших значениях ϵ в фононном спектре появляется мода с $\omega_i^2(\mathbf{k}) < 0$.

В работе [9] напряжение σ определяется как $\sigma \equiv \partial E / \partial \epsilon$, где E — внутренняя энергия на единицу объема. При $T = 0$ и без учета квантовых эффектов $E = U_M/V$, где U_M — энергия Маделунга, которую можно найти с помощью выражения (1.20). Тогда дифференцируя точное выражение по ϵ и подставляя $\epsilon = 0.11$ получим $\sigma^{\max} = 0.019912nZ^2e^2/a$. Этот результат хорошо согласуется со значением σ_b^{\max} , полученным в работе [9]. Небольшую разницу (около 2%), скорее всего, можно объяснить тем, что в этом рассматривается кулоновский кристалл с однородным электронным фоном. Об устойчивости кристаллов с поляризованным фоном

сказано в параграфе 2.7.3.

Из рис. 1.8 видно, что с достаточно хорошей точностью энергия Маделунга ОЦК решетки со сдвигом зависит только от $\sqrt{c_x^2 + c_y^2}$. В тоже время ее граница устойчивости не имеет такой зависимости. Например, при $c_x = c_y$ значение $\sqrt{c_x^2 + c_y^2}$, при котором ОЦК решетка со сдвигом теряет свою устойчивость, лежит в интервале от $0.08\sqrt{2}$ до $0.09\sqrt{2}$, и, соответственно, в этом случае $0.03005 < \sigma^{\max}a/(nZ^2e^2) < 0.03404$, где $\sigma \equiv \partial E/\partial c_x$. В противоположной ситуации при $c_x = 0$ (или $c_y = 0$) аналогичное значение $\sqrt{c_x^2 + c_y^2}$ лежит в интервале от 0.13 до 0.14, а $0.02389 < \sigma^{\max}a/(nZ^2e^2) < 0.02574$.

2.4 Фононный спектр и устойчивость бинарных кулоновских кристаллов

Выражения (2.10) и (2.15) позволяют исследовать спектр многокомпонентных кристаллов, состоящих из нескольких типов ионов. В этом параграфе эти выражения используются для исследования фононных свойств бинарных ПК2 и Г2 решеток, а также для определения границ устойчивости различных многокомпонентных кристаллических структур.

2.4.1 Фононный спектр ПК2 решетки

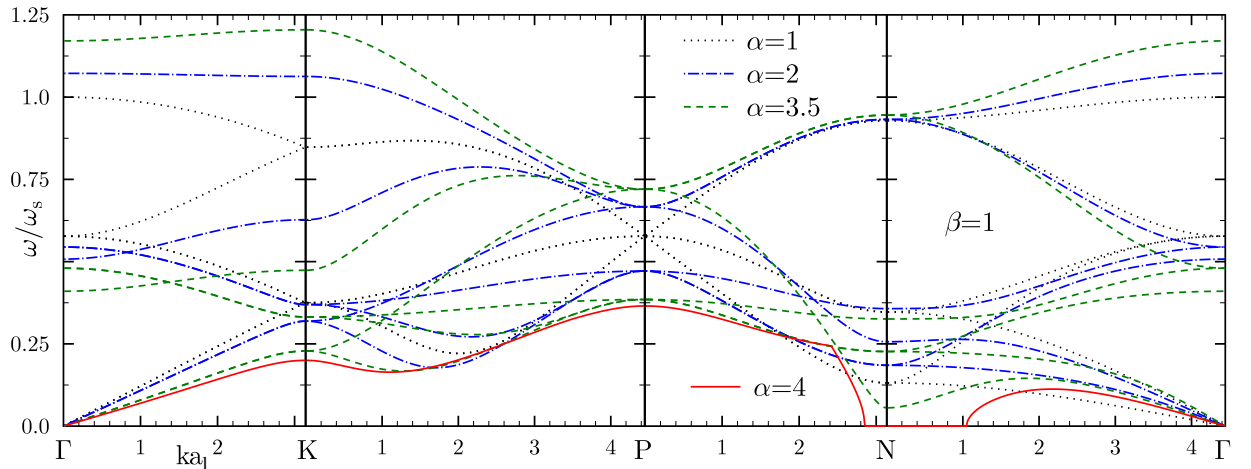


Рис. 2.15: Дисперсионные кривые ПК2 решетки при разных α и $\beta = 1$.

Спектр бинарной ПК2 решетки, нормированный⁷ на $\omega_s = \sqrt{\pi n e^2 Z_1^2 / M_1 (1 + \alpha)(1 + \alpha/\beta)}$, состоит из шести мод и зависит от двух параметров: отношения зарядов ионов $\alpha = Z_2/Z_1$ и отношения их масс $\beta = M_2/M_1$. При разных α и β он представлен на рис. 2.15 и 2.16 [71]. Видно, что максимальная частота фонона может превышать ω_s .

⁷Отметим, что при рассмотрении некоторых задач выбранная нормировка не является оптимальной, так от α и β зависит не только сам спектр, но и ω_s . Чтобы избавиться от этой двойственности, необходимо домножить все моды представленные на рис. 2.15 и 2.16 на $\sqrt{(1 + \alpha)(1 + \alpha/\beta)}$.

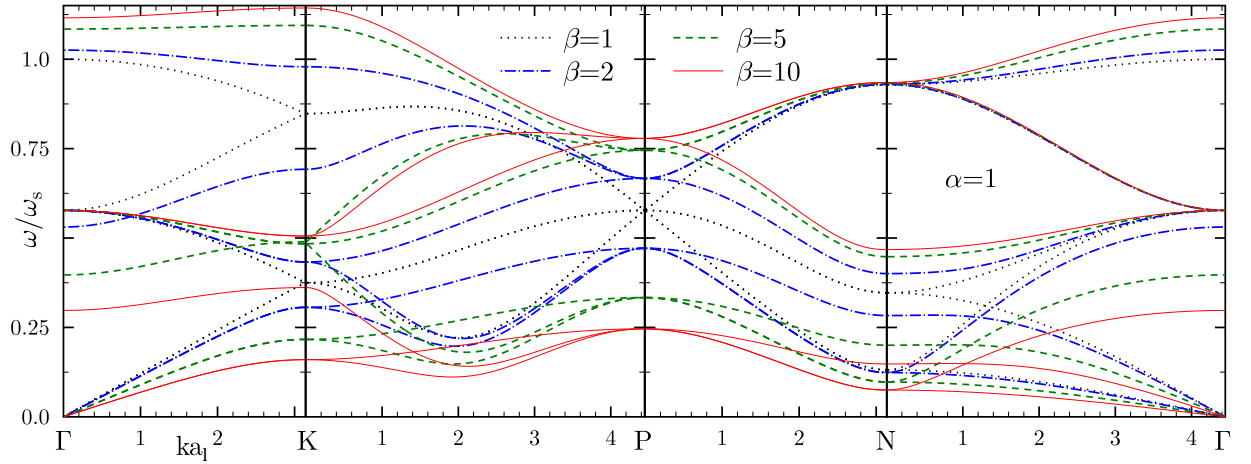


Рис. 2.16: Дисперсионные кривые ПК2 решетки при разных β и $\alpha = 1$.

Как было показано в параграфе 2.2.1, при $\alpha = \beta = 1$ моды ПК2 решетки пересекаются. При отклонении α и/или β от 1 на месте пересечений возникают антипересечения. На рис. 2.17 показан детально один из таких случаев. При этом на границах зон и в направлениях высокой симметрии (например, $k_x = k_y = k_z$) слияния и пересечения остаются. В общем случае спектр бинарной ПК2 решетки, состоящий из шести мод, не сводится к спектру более простой решетки с меньшим числом мод, как это имело место при $\alpha = \beta = 1$.

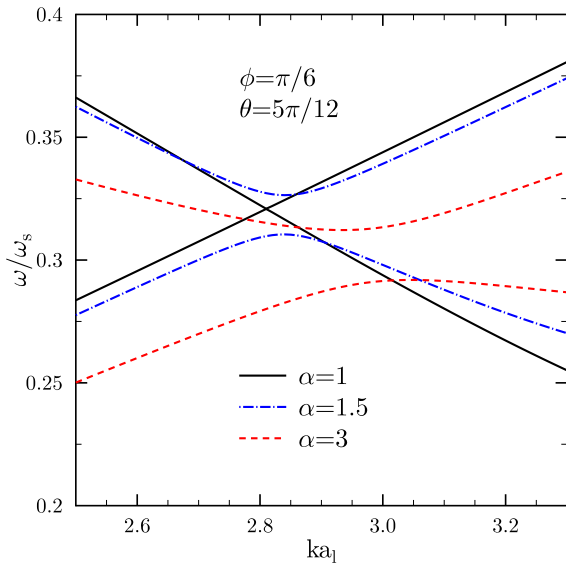


Рис. 2.17: Дисперсионные кривые ПК2 решетки при разных α и $\beta = 1$.

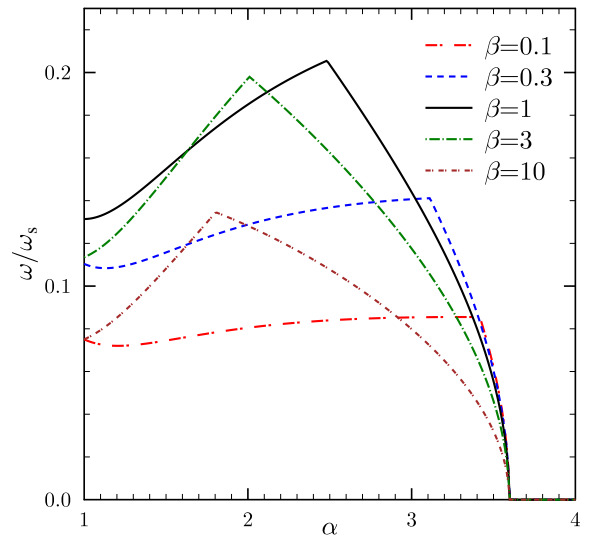


Рис. 2.18: Минимальная частота в точке N, как функция α при разных β .

Условие положительной определенности динамической матрицы накладывает ограничения на область изменения параметра α . При $\alpha > \alpha_{кр}$ наименьшая из собственных частот при некоторых \mathbf{k} становится комплексной. Для ПК2 решетки $\alpha_{кр} \approx 3.6$ [71]. При этом значении α комплексной становится наименьшая частота в точке N (рис. 2.1). С увеличением α множе-

ство \mathbf{k} , при которых спектр комплексный, увеличивается. Так, на рис. 2.15 сплошной красной кривой изображена наименьшая мода спектра при $\alpha = 4$ и $\beta = 1$. Комплекснозначные частоты этой моды вблизи точки N не показаны, их значение принято равным 0. При $\alpha = \infty$ ПК2 решетка переходит в неустойчивую ПК решетку. Бинарная ПК2 решетка неустойчива при всех $\alpha > \alpha_{\text{кр}}$. Аналогичные пределы изменения α были недавно найдены (но позднее работы [71]) из молекулярно-динамических расчетов [113]: $(1/3.596) < \alpha < 3.596$.

На рис. 2.18 изображена минимальная частота в точке N , как функция α при разных β (здесь также комплекснозначные частоты приняты равными 0). Рисунок показывает, что устойчивость решетки не зависит от β , то есть от масс образующих ее ионов.

Зависимость частот фононных мод от β может быть исследована на основании следующей простой модели. При $\beta \gg 1$ и $\beta \ll 1$ верхние три моды описывают колебания легких ионов. Нормированные на ω_s они практически не изменяются (рис. 2.19). Нижние же три моды описывают совместные колебания легких и тяжелых ионов. Если пренебречь кинетической энергией легких ионов, то дисперсионное уравнение (2.15) для этих мод можно записать в следующем виде:

$$\det \begin{pmatrix} R & P/\sqrt{\beta} \\ P^+/\sqrt{\beta} & S/\beta - \omega_i^2(\mathbf{k})/\omega_s^2 \end{pmatrix} = \det ((S - P^+R^{-1}P)/\beta - \omega_i^2(\mathbf{k})/\omega_s^2) = 0, \quad (2.29)$$

где R , P , S — матрицы размерности 3×3 , не зависящие от β . Из уравнения (2.29) следует, что частоты наименьших трех мод, нормированные на ω_s , не изменяя своей формы, уменьшаются пропорционально $\beta^{0.5}$ при $\beta \gg 1$ и пропорционально $\beta^{-0.5}$ при $\beta \ll 1$.

Различие в поведении мод при $\beta \gg 1$ приводит к тому, что фононная плотность перестает быть непрерывной от 0 до ω_p . Фононная плотность ПК2 решетки при $\beta = 10$ и $\alpha = 1$ приведена на центральной части рис. 2.20. Она построена по 4×10^6 точкам в основной подзоне зоны Бриллюэна. Диапазон по ω имеет шаг $\omega_p/600$ (рисунок сглажен). В таком кристалле максимальная частота равна $686/600\omega_p$, а частот с $\omega \cong 0.4\omega_p$ нет. Соответственно, в диапазоне от $217/600\omega_p$ до $280/600\omega_p$ в спектре кристалла имеется щель, то есть $\nu(\omega) = 0$. В верхнем правом углу рис. 2.20 показана фононная плотность ПК2 решетки с $\alpha = 2$ и $\beta = 1$. Она построена тем же способом, что и предыдущая. Однако, эта функция не имеет нулей во всей области определения от 0 до $644/600\omega_p$.

2.4.2 Устойчивость бинарной ОЦР решетки

Устойчивость деформированной бинарной ПК2 решетки может быть исследована, как функция направления и величины деформации, а также параметра α . Параметр β на устойчивость решетки не влияет.

Среди всех деформированных ПК2 решеток рассмотрим только бинарную ПК2 решетку, растянутую вдоль одного ребра ее элементарной ячейки, то есть бинарную ОЦР решетку с $c_2 = 1$. Фононный спектр такой решетки состоит из шести мод и имеет те же особенности, что и спектр бинарной ПК2 решетки. Область значений параметров α и c_1 , при которых бинарная ПК2 решетка устойчива, показана на рис. 2.21 ($\alpha \geq 1$, так как решетка симметрична при

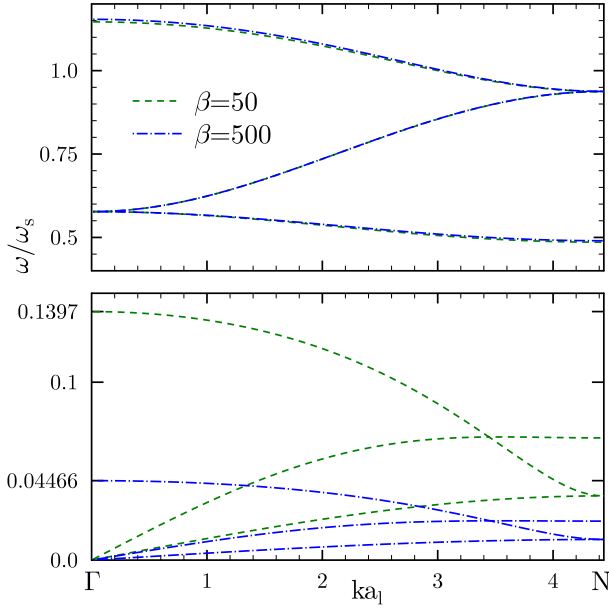


Рис. 2.19: Дисперсионные кривые ПК2 решетки при $\beta \gg 1$ (при $\alpha = 1$).

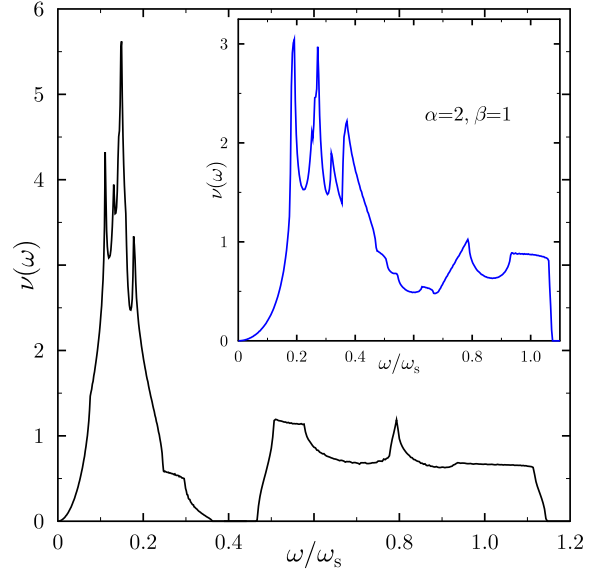


Рис. 2.20: Плотность фоновых состояний ПК2 решетки при $\alpha = 1$ и $\beta = 10$.

замене $\alpha \rightarrow 1/\alpha$). При изменении c_1 диапазон по α изменяется, но всегда остается в пределах от 1 до $\alpha_{кр}$.

2.4.3 Фононный спектр Г2 решетки

Фононные свойства Г2 решетки ($c h = h_{hcp}$) схожи с фононными свойствами ПК2 решетки. Ее спектр также состоит из шести мод, которые представлены на рис. 2.23 и 2.24 в некоторых направлениях высокой симметрии [111]. Как и в случае ГПУ решетки, фазовая скорость одной из акустических мод Г2 решетки быстро перестает быть постоянной по k в областях, близких к некоторым плоскостям высокой симметрии зоны Бриллюэна, например, в направлении НГ. Укрупненное изображение наименьшей моды в этом направлении приведено на рис. 2.24. Отметим, что эта особенность заметно сказывается на термодинамических свойствах Г2 решетки при низких температурах.

Г2 решетка теряет устойчивость при $\alpha_{кр} \approx 1.25$, когда одна из мод становится комплексной в точке Н [93]. Параметр β на устойчивость не влияет. На рис. 2.23 представлена наименьшая мода в спектре кристалла при $\alpha = 1.3$. В районе точки Н ее частоты становятся комплекснозначными, и на рис. 2.23 они обозначены равными 0.

Г2 решетка с $h = h_{hp0}$ устойчива практически в таком же диапазоне по α . Она перестает быть устойчивой при $\alpha \approx 1.26$, а при $\alpha \approx 1.24$ еще устойчива. При других h устойчивость Г2 решетки исследована не была.

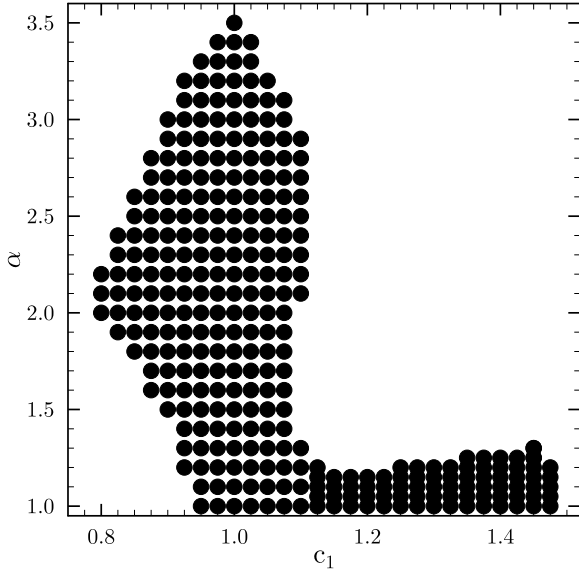


Рис. 2.21: Область значений α и c_1 при которых бинарная ОЦР решетка с $c_2 = 1$ устойчива.

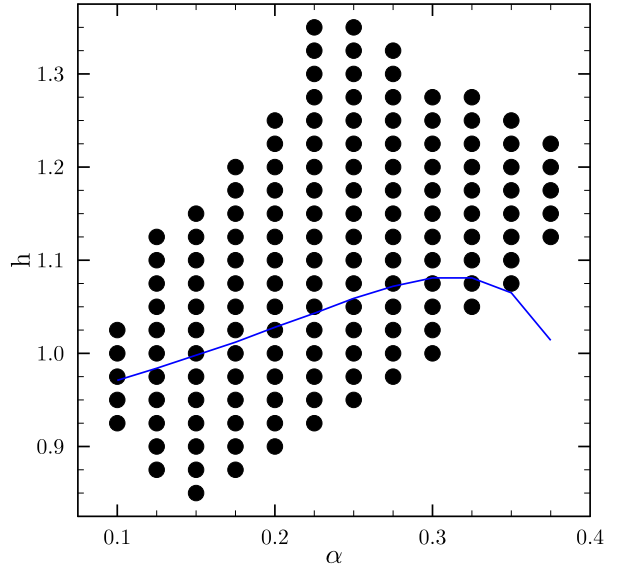


Рис. 2.22: Область значений α и h при которых MgB_2 решетка устойчива. Синяя кривая — зависимость h_{MgB_20} от α .

2.4.4 Устойчивость других бинарных решеток

Фононный спектр бинарной ГЦК решетки, представленной как простая решетка с четырьмя векторами базиса, состоит из двенадцати мод. Согласно исследованиям, проведенным в представляемой работе, она устойчива при $0.66 \leq \alpha \leq 1.38$ (шаг по α равен 0.02). Этот результат согласуется с границами, приведенными в работе [113]: $0.661 \leq \alpha \leq 1.368$.

Фононный спектр и устойчивость бинарной ГЦР решетки не рассматривались.

Фононный спектр MgB_2 решетки состоит из 9 мод. Однокомпонентная MgB_2 решетка неустойчива. Решетка становится устойчивой, когда заряд ионов с большей концентрацией существенно меньше заряда других ионов. Область значений α и h , при которых MgB_2 решетка устойчива, показана на рис. 2.22. Из него видно, что α не превышает 0.375 (шаг по α равен 0.025), а h изменяется в диапазоне от 0.85 до 1.35 (шаг по h — 0.025). Отметим, что при всех рассматриваемых α , кроме $\alpha = 0.375$, зависимость $h_{\text{MgB}_20}(\alpha)$ (см. параграф 1.4.6) лежит в области устойчивости решетки. На рис. 2.22 зависимость $h_{\text{MgB}_20}(\alpha)$ показана сплошной синей кривой.

Фононный спектр бинарной NaCl решетки состоит из 6 мод. Она устойчива при $\alpha \geq 3.9$. При $\alpha = 1$ эта решетка становится неустойчивой простой кубической, а при $\alpha = \infty$ — устойчивой ГЦК решеткой.

Бинарная решетка Дайсона с $Z_2 = Z_1$ и $Z_3 = Z_4$ не устойчива (см. параграф 1.4.9). Устойчивость четырех компонентной решетки Дайсона подробно не исследовалась. Известно, что она устойчива в предельных случаях, например, при $Z_3 = Z_4 = 0$, как бинарная ПК2 решетка, но при $Z_3 \neq 0$ и/или $Z_4 \neq 0$ быстро теряет устойчивость. Так уже при $Z_2 = Z_1$,

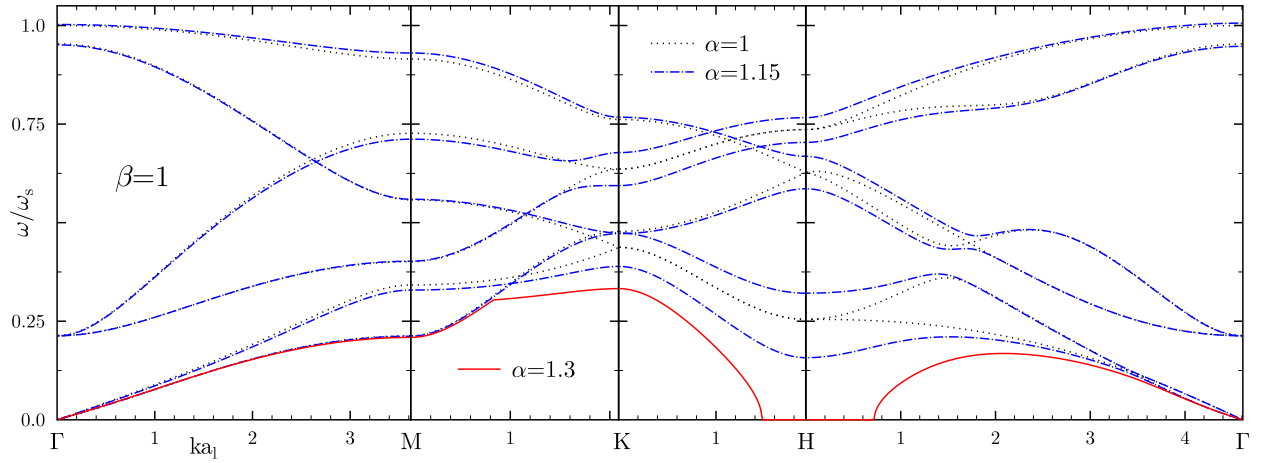


Рис. 2.23: Дисперсионные кривые $\Gamma 2$ решетки при разных α и $\beta = 1$.

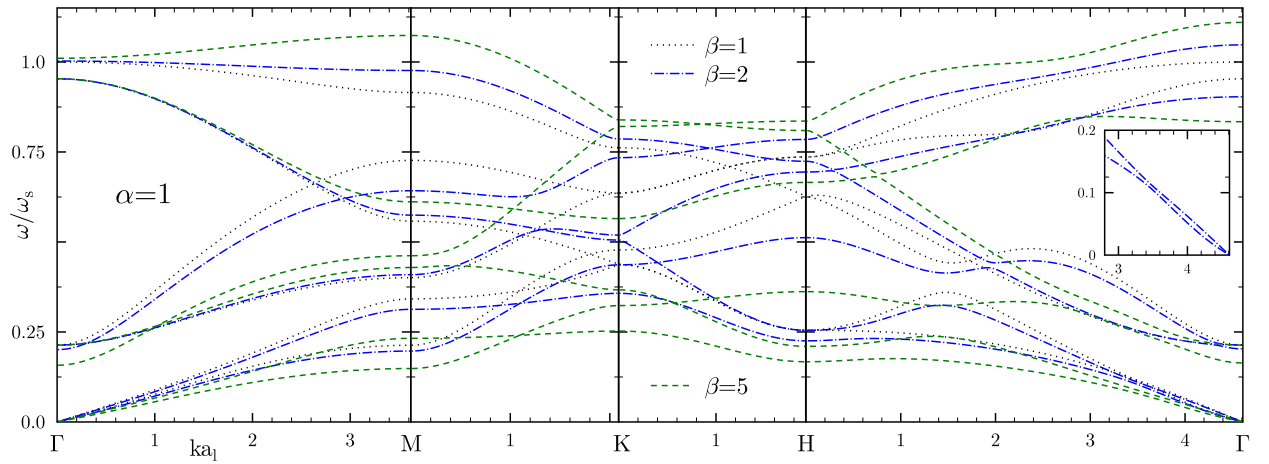


Рис. 2.24: Дисперсионные кривые $\Gamma 2$ решетки при разных β и $\alpha = 1$.

$Z_3 = 0.025Z_1$, $Z_4 = 0.025Z_1$ появляются комплекснозначные частоты колебаний. Аналогично, при $Z_2 = Z_4 = 0$ решетка Дайсона устойчива, как устойчива бинарная ГЦК решетка, но уже при $Z_2 = 0$, $Z_3 = Z_1$, $Z_4 > 0.1Z_1$ устойчивость теряет.

Таким образом, если концентрация ионов с Z_1 равна концентрации ионов с Z_2 , то при $0.278 < \alpha < 3.6$ они могут образовать бинарную ПК2 решетку, а при $\alpha > 3.9$ и $\alpha < 0.256$ — бинарную NaCl решетку, в диапазонах от $0.256 < \alpha < 0.278$ и $3.6 < \alpha < 3.9$ устойчивых решеток найдено не было. Однако, при $0.1 < \alpha < 0.375$ устойчива решетка MgB_2 , в которой ионов с зарядом Z_2 в два раза больше, чем ионов зарядом Z_1 .

2.5 Моменты бинарных кулоновских кристаллов

Из всех бинарных кристаллов остановимся на рассмотрении моментов только ПК2 и $\Gamma 2$ решеток [93]. Для бинарных кристаллов $u_n(\alpha, \beta) \equiv \langle (\omega_i(\mathbf{k})/\omega_s)^n \rangle$ и $u_{\ln}(\alpha, \beta) \equiv \langle \ln(\omega_i(\mathbf{k})/\omega_s) \rangle$:

моменты зависят от α и β ⁸.

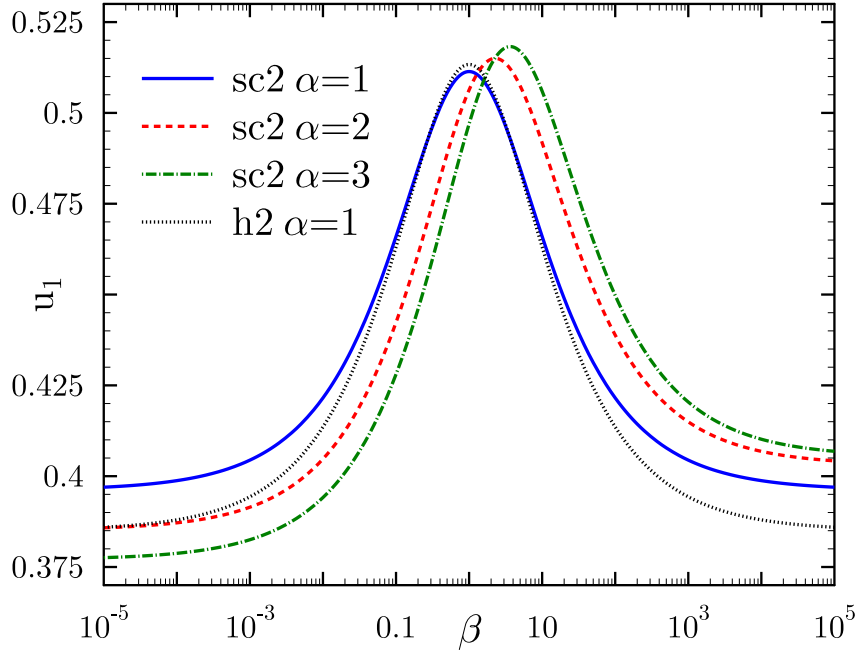


Рис. 2.25: Зависимость первого момента от β для ПК2 и Г2 решетки.

На рис. 2.25 показана зависимость $u_1(\alpha, \beta)$ от α и β для ПК2 и Г2 решеток (здесь $h = h_{\text{hcp}}$). При $\beta \ll 1$ и $\beta \gg 1$ первый момент имеет асимптотику равную константе. Это связано с тем, что при таких β основной вклад вносят практически не изменяющиеся три наибольшие моды. Также из рис. 2.25 видно, что при $1/3.6878 \leq \beta \leq 3.6878$ $u_1(1, \beta)$ Г2 решетки больше, чем $u_1(1, \beta)$ ПК2 решетки. При $\alpha = 1.2$ $u_1(\alpha, \beta)$ Г2 решетки всегда меньше, чем $u_1(\alpha, \beta)$ ПК2 решетки.

При $\alpha < 2.5$ и $0.6 < \beta < 2.5$ первый момент ПК2 решетки можно аппроксимировать как

$$C1 \frac{(C2 - \alpha)^2}{(C2 + \alpha)^{1.5}} + C3, \quad C_i = \frac{Ci1\beta^3 + Ci2\beta^2 + Ci3\beta + Ci4}{\beta^3 + Ci5\beta^2 + Ci6\beta + Ci7}. \quad (2.30)$$

Параметры аппроксимации приведены в таблице 2.5. Максимальная погрешность не превышает 0.1%. Аналогичным выражением можно аппроксимировать и остальные моменты.

i	$Ci1$	$Ci2$	$Ci3$	$Ci4$	$Ci5$	$Ci6$	$Ci7$
1	-0.0466612	0.080198	-0.0806417	0.0183059	-1.46871	1.92298	-0.493513
2	7.11253	-12.2458	11.258	-2.21168	2.15089	-4.63355	5.20236
3	0.52182	-0.623386	1.17664	-0.353893	-1.18457	2.28919	-0.69419

Таблица 2.1: Значения коэффициентов аппроксимации.

⁸Способ вычисления интеграла по зоне Бриллюэна ПК2 решетки описан в параграфе 2.2.1, а интеграл по зоне Бриллюэна Г2 решетки ничем не отличается от интеграла по зоне Бриллюэна ГПУ решетки и может быть найден в работе [110].

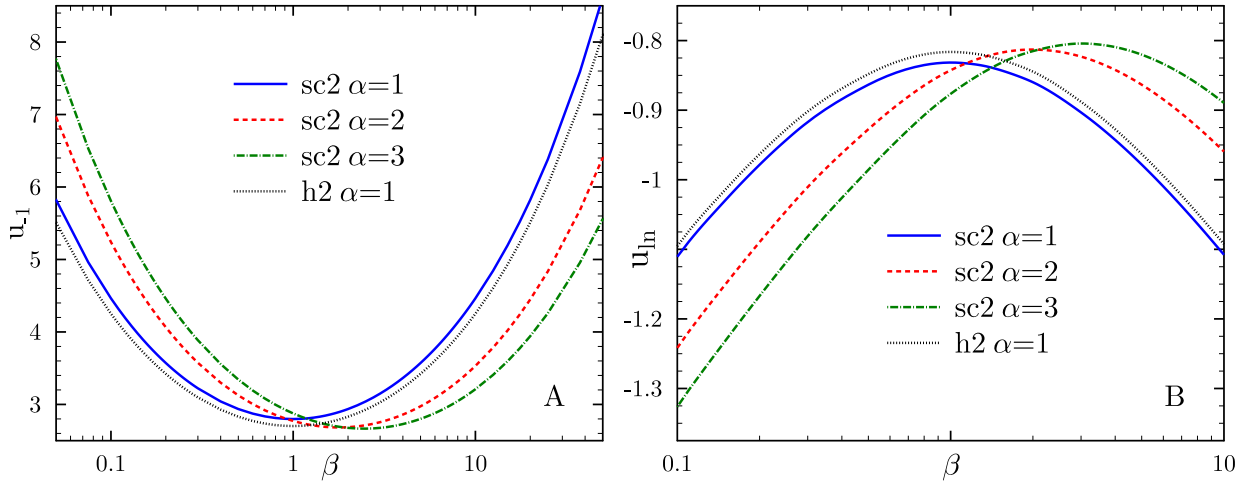


Рис. 2.26: Зависимость $u_{-1}(\alpha, \beta)$ и $u_{\ln}(\alpha, \beta)$ от β для ПК2 и Г2 решеток.

При $\beta \ll 1$ моменты $u_{-1}(\alpha, \beta)$ и $u_{-2}(\alpha, \beta)$ растут $\propto \beta^{-0.5}$ и $\propto \beta^{-1}$, соответственно, а при $\beta \gg 1$ $u_{-1}(\alpha, \beta) \propto \beta^{0.5}$ и $u_{-2}(\alpha, \beta) \propto \beta^{0.5}$, так как в них основной вклад вносят три наименьшие частоты. График зависимости $u_{-1}(\alpha, \beta)$ от β для разных α представлен на рис. 2.26А, а для $u_{-2}(\alpha, \beta)$ его можно найти в работе [93]. В $u_{\ln}(\alpha, \beta)$ при больших β вклад вносят все шесть мод: вклад наименьших трех $\sim \ln \beta$, а трех наибольших — равен константе. Для ПК2 решетки $u_{\ln}(1, \beta) \approx u_{\ln}(1, 1)(1 + 0.5214 \ln \beta)$, а для Г2 решетки $u_{\ln}(1, \beta) \approx u_{\ln}(1, 1)(1 + 0.5313 \ln \beta)$, что показано на рис. 2.26В.

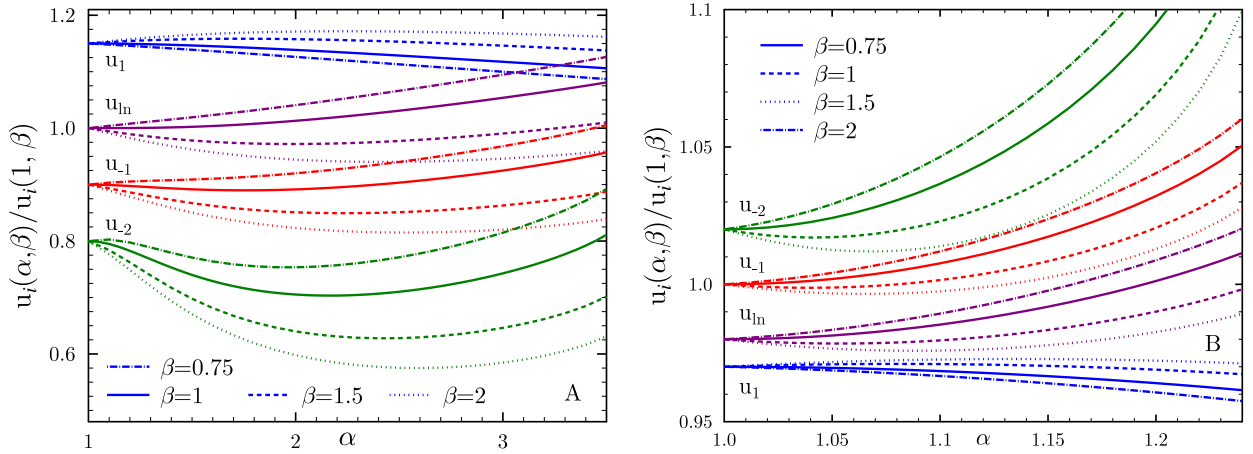


Рис. 2.27: Зависимость моментов от α для ПК2 (рис. А) и Г2 (рис. В) решеток.

Так как при $\alpha > \alpha_{\text{кр}}$ решетки становятся неустойчивыми, провести анализ поведения моментов при больших α невозможно. На рис. 2.27 показана зависимость $u_i(\alpha, \beta)/u_i(1, \beta)$ от α при $\beta = 0.75, 1, 1.5$ и 2 для ПК2 и Г2 решеток. Для удобства на рис. 2.27А отношения u_1, u_{-1} и u_{-2} умножены на 1.15, 0.9 и 0.8, соответственно, а на рис. 2.27В отношения u_{-2}, u_{\ln} и u_1 на 1.02, 0.98 и 0.97. Значения $u(1, \beta)$, использованные при построении рис. 2.27, приведены в таблице 2.2.

Среди всех бинарных Г2 решеток с произвольным h моменты исследовались лишь у тех, у

	sc2 (1,0.75)	sc2 (1,1.5)	sc2 (1,2)	h2 (1,0.75)	h2 (1,1.5)	h2 (1,2)
u_1	0.51034	0.509323	0.505521	0.512183	0.511061	0.506868
u_{-1}	2.82212	2.84545	2.93644	2.72385	2.74563	2.83054
u_{-2}	13.2431	13.5131	14.5941	12.0888	12.3356	13.3225
$-u_{1n}$	0.836452	0.841501	0.860741	0.821185	0.826236	0.845477

Таблица 2.2: Значения $u(1, \beta)$, использованные при построении рис. 2.27.

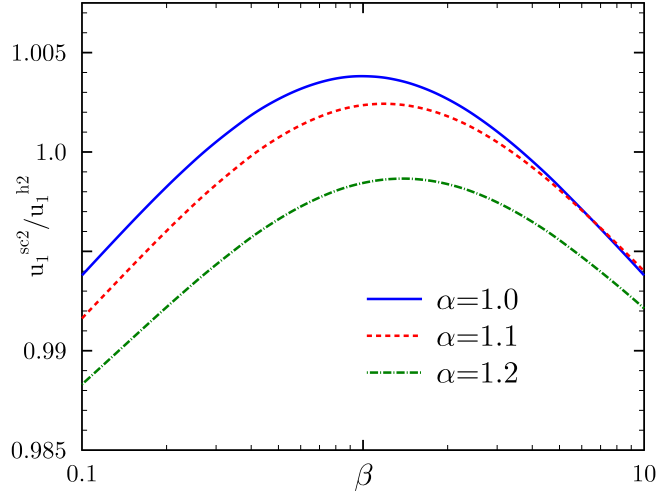


Рис. 2.28: Зависимость отношения первых моментов ПК2 решетки и Г2 решетки с h_{h20} .

которых при заданном α энергия Маделунга минимальна ($h = h_{h20}$). Отношение u_1 бинарной ПК2 решетки к u_1 бинарной Г2 решетки с h_{h20} представлено на рис. 2.28. Отметим, что для Г2 решетки при $\alpha = 1.2$ отношение $u_1(h_{h20})/u_1(h_{hcp})$ не превышает 1.001 для $\beta \in [0.1, 10]$.

2.6 Фононный спектр кулоновских кристаллов в однородном внешнем магнитном поле

Одной из уникальных особенностей нейтронных звезд является возможное наличие чрезвычайно сильного магнитного поля. Магнитные поля на поверхности магнитаров могут достигать $B \sim 10^{15}$ Гаусс и даже больше [114]. К сожалению, влияние таких полей на внутреннее строение нейтронных звезд изучено слабо, поэтому исследование кулоновских кристаллов в магнитном поле несомненно важно.

Впервые кулоновские кристаллы во внешнем однородном магнитном поле были рассмотрены Усовым и др. [115]. Ими был качественно исследован фононный спектр таких кристаллов, асимптотическое поведение теплоемкости и магнитного момента в разных режимах (низкие температуры, очень сильные магнитные поля и т.д.). Уже упомянутые работы Нагаи и Фукуямы [41, 42] посвящены сравнению энергий ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток в магнитном поле при нулевой температуре (как и в нашей работе учитывалась только электростатиче-

ская энергия и энергия нулевых колебаний), а работы Байко и др. [116] и [117] — фононному спектру и термодинамическим свойствам ОЦК решетки в магнитном поле.

Далее в этом параграфе будем следовать работе [107], в которой рассматривалось влияние магнитного поля на фононный спектр кулоновских кристаллов как с однородным электронным фоном, так и с поляризованным.

2.6.1 Дисперсионное уравнение для кулоновского кристалла в однородном внешнем магнитном поле

Векторный потенциал i -ого иона кристалла в однородном магнитном поле \mathbf{B} можно записать как $A_i^\alpha = [\mathbf{B} \times \mathbf{u}_i] / 2 = \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} B^\beta u_i^\gamma / 2$, тогда функция Лагранжа кулоновского кристалла в магнитном поле равна:

$$L_B = L_0 + \frac{Ze}{c} \sum_{i=1}^N A_i^\alpha \dot{u}_i^\alpha = L_0 + \frac{M\omega_B}{2} \sum_{i=1}^N \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \dot{u}_i^\alpha n^\beta u_i^\gamma, \quad (2.31)$$

где $\omega_B = ZeB/(Mc)$ — циклотронная частота, \mathbf{n} — единичный вектор вдоль направления магнитного поля, $\mathbf{B} = B\mathbf{n}$, L_0 — функция Лагранжа без магнитного поля (2.11). Однородное внешнее магнитное поле не влияет на электростатические свойства кулоновских кристаллов, однако изменяет их фононный спектр. Действуя аналогично параграфу 2.1, можно получить дисперсионное уравнение

$$\det\{D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) - \Omega_\nu^2(\mathbf{k}, \mathbf{B})\delta^{\mu\lambda}\delta_{pp'} - i\Omega_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{B})\omega_B\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}n^\gamma\delta_{pp'}\} = 0. \quad (2.32)$$

Это уравнение определяет фононный спектр кулоновских кристаллов в магнитном поле, а задача по поиску его корней уже не является задачей по поиску собственных чисел.

Для удобства, через Ω обозначены частоты кулоновского кристалла в магнитном поле, а через ω далее будут обозначаться частоты при $B = 0$. При фиксированном \mathbf{k} фононный спектр состоит из $3N_{\text{cell}}$ мод колебаний, но теперь Ω зависит не только от \mathbf{k} , но и от величины и направления магнитного поля. За счет этого изменится и правило сумм Кона:

$$\sum_{\nu} \Omega_\nu^2(\mathbf{k}, \mathbf{B}) = N_{\text{cell}}\omega_p^2(1 + h^2), \quad (2.33)$$

где $h \equiv \omega_B/\omega_p$ — отношение циклотронной частоты к плазменной, $h \approx B_{15}/\sqrt{\rho_8}$, $B_{15} = B/10^{15}$ Гаусс и $\rho_8 = \rho/10^8$ г/см³.

В представляемой работе ограничимся рассмотрением только однокомпонентных решеток⁹.

2.6.2 Фононный спектр ОЦК решетки в магнитном поле

Спектр ОЦК решетки в магнитном поле детально исследован в работах [116, 107]. Он состоит из трех мод, как и у любой другой решетки с $N_{\text{cell}} = 1$. При малых k дисперсионное уравнение

⁹Влияние внешнего магнитного поля на фононный спектр многокомпонентных кулоновских кристаллов никогда не исследовалось.

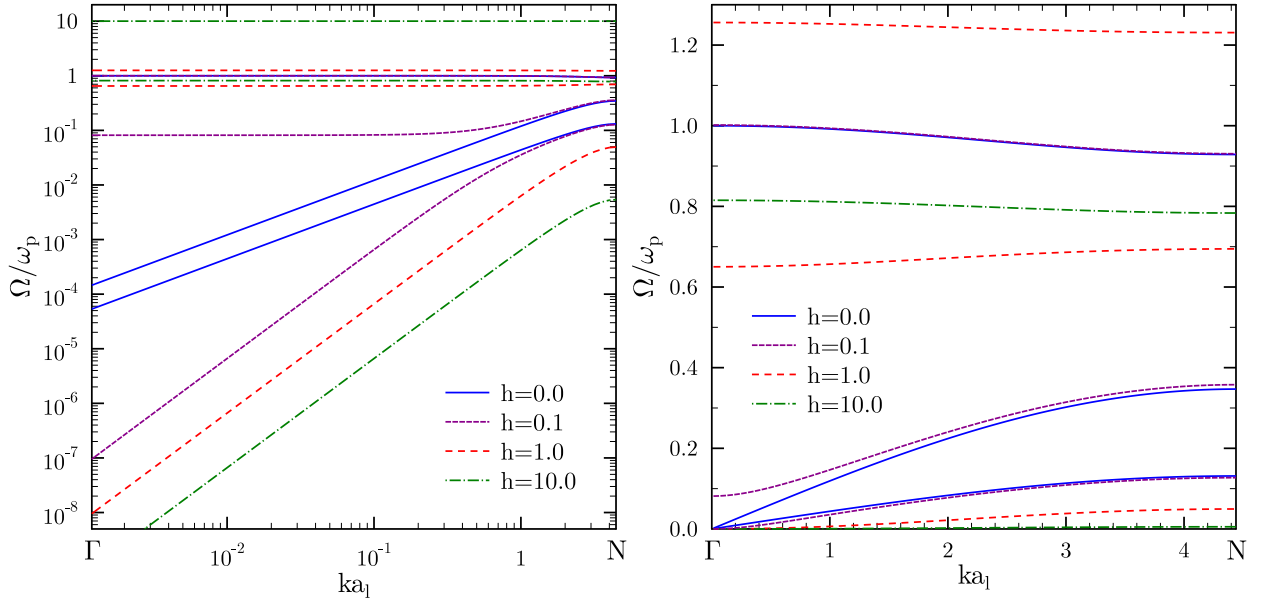


Рис. 2.29: Фононный спектр ОЦК решетки в магнитном поле при $\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n} \neq 0$.

(2.32) имеет вид [116]:

$$-\frac{\Omega^6}{\omega_p^6} + (1 + h^2)\frac{\Omega^4}{\omega_p^4} + E_B\frac{\Omega^2}{\omega_p^2} + F_0 = 0. \quad (2.34)$$

По сравнению с (2.22) коэффициент F_0 не изменился.

$$E_B = E_0 - (\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n})^2 h^2 + E_2 h^2 \quad (2.35)$$

$$E_2 = \frac{(ka_1)^2}{16\pi k^2} [(\beta_0 + \gamma_2)k^2 + (\alpha_0 + 2\gamma_2)(\mathbf{k}\mathbf{n})^2 + (\gamma_1 - 3\gamma_2)((k^x n^x)^2 + (k^y n^y)^2 + (k^z n^z)^2)],$$

где $\hat{\mathbf{k}} \equiv \mathbf{k}/k$. $E_2 \propto k^2$, при $\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n} \neq 0$ $E_B \approx -(\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n})^2 + O(k^2)$, а при $\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n} = 0$ $E_B \propto k^2$.

По аналогии с параграфом 2.2.1 наибольшую частоту при $ka_1 \ll 1$ можно найти из уравнения (2.34), отбросив член F_0 и поделив на Ω^2 . Частота Ω_3 соответствует наибольшему корню оставшегося биквадратного уравнения¹⁰:

$$\frac{\Omega_3^2}{\omega_p^2} = \frac{1}{2} \left[1 + h^2 + \sqrt{(1 + h^2)^2 - 4h^2 (\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n})^2} \right] \quad (2.36)$$

При малых ka_1 эта мода всегда оптическая. Если $\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n} = 0$, то $\Omega_3^2 = (1 + h^2)\omega_p^2$ и исходя из правила сумм Кона при $ka_1 \ll 1$ обе оставшиеся частоты $\Omega_{1,2}$ стремятся к 0. При $\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n} \neq 0$ $\Omega_2 \approx \text{const}$ и от k не зависит. Ее асимптотику можно найти из того же биквадратного уравнения, что и Ω_3 , взяв его наименьший корень:

$$\frac{\Omega_2^2}{\omega_p^2} = \frac{1}{2} \left[1 + h^2 - \sqrt{(1 + h^2)^2 - 4h^2 (\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n})^2} \right]. \quad (2.37)$$

При $\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n} = 0$ Ω_2 можно найти из уравнения (2.34), отбросив $-\Omega^6$. В этом случае $\Omega_2 = \omega_2 \propto k$ и не зависит от \mathbf{B} . Второй корень этого уравнения соответствует Ω_1 . При малых

¹⁰Частоты нумерованы от наименьшей к наибольшей.

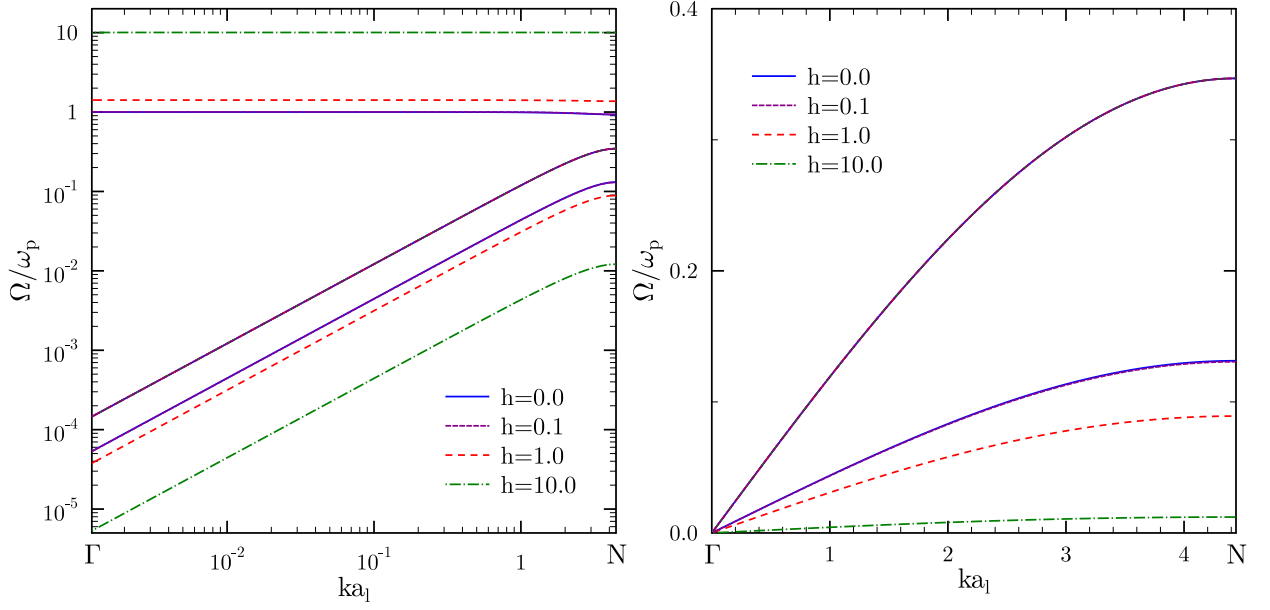


Рис. 2.30: Фононный спектр ОЦК решетки в магнитном поле при $\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n} = 0$.

$ka_1 \Omega_1^2/\omega_p^2 \approx -F_0/E_B$. Если $\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n} \neq 0$ $\Omega_1^2/\omega_p^2 \approx F_0/(\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n})^2/h^2$, то есть $\Omega_1/\omega_p \propto k^2/h$: появляется квадратичная зависимость частоты от величины волнового вектора, а если волновой вектор перпендикулярен направлению магнитного поля, то сохраняется линейная зависимость $\Omega_1/\omega_p \propto k/\sqrt{1+h^2}$.

На рис. 2.29 изображен фононный спектр ОЦК решетки, когда $\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n} \neq 0$, в данном случае $\hat{\mathbf{k}} = (1, 1, 0)/\sqrt{2}$ и $\mathbf{n} = (1, 1, 1)/\sqrt{3}$, слева в $\log - \log$ масштабе, справа в линейном (верхние моды не показаны). Аналогично, на рис. 2.30 изображен фононный спектр ОЦК решетки, когда $\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n} = 0$: $\hat{\mathbf{k}} = (1, 1, 0)/\sqrt{2}$ и $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$.

Выделим отдельно случай, когда направление магнитного поля совпадает с направлением вектора поляризации. Вектора поляризации решетки с $N_{\text{cell}} = 1$ и без магнитного поля хорошо известны (см. например, [45, 107]). При малых k достаточно найти алгебраические дополнения для любой строки матрицы $D^{\mu\lambda} - \omega_{1,2}^2 \delta^{\mu\lambda}$ (для более симметричной формы можно найти дополнения для всех трех строк и сложить их вместе). Это даст ненормированные поляризационные вектора двух акустических мод $\tilde{\mathbf{e}}_{1,2}$ (для удобства записи индексы обозначающие декартовы координаты указаны нижними индексами):

$$\begin{aligned}
\tilde{e}_{1,2x} &= k_y^2 k_z^2 (k_y^2 + k_z^2) + k_x (k_x^2 - k_y k_z) (k_y^3 + k_z^3) - k_x^2 (k_y^4 + k_z^4) \\
&\pm [k_y^2 + k_z^2 - k_x (k_y + k_z)] \sqrt{k_x^4 k_y^4 + k_y^4 k_z^4 + k_z^4 k_x^4 - k^2 k_x^2 k_y^2 k_z^2}, \\
\tilde{e}_{1,2y} &= k_x^2 k_z^2 (k_x^2 + k_z^2) + k_y (k_y^2 - k_x k_z) (k_x^3 + k_z^3) - k_y^2 (k_x^4 + k_z^4) \\
&\pm [k_x^2 + k_z^2 - k_y (k_x + k_z)] \sqrt{k_x^4 k_y^4 + k_y^4 k_z^4 + k_z^4 k_x^4 - k^2 k_x^2 k_y^2 k_z^2}, \\
\tilde{e}_{1,2z} &= k_x^2 k_y^2 (k_x^2 + k_y^2) + k_z (k_z^2 - k_x k_y) (k_x^3 + k_y^3) - k_z^2 (k_x^4 + k_y^4) \\
&\pm [k_x^2 + k_y^2 - k_z (k_x + k_y)] \sqrt{k_x^4 k_y^4 + k_y^4 k_z^4 + k_z^4 k_x^4 - k^2 k_x^2 k_y^2 k_z^2}.
\end{aligned} \tag{2.38}$$

Нормированные вектора поляризации равны $\mathbf{e}_{1,2} = \tilde{\mathbf{e}}_{1,2}/|\tilde{\mathbf{e}}_{1,2}|$. Не сложно заметить, что $\tilde{\mathbf{e}}_1 \perp \tilde{\mathbf{e}}_2$ и $\tilde{\mathbf{e}}_{1,2} \perp \mathbf{k}$, следовательно, вектор соответствующий оптической моде ω_3 равен $\mathbf{e}_3 = \hat{\mathbf{k}}$.

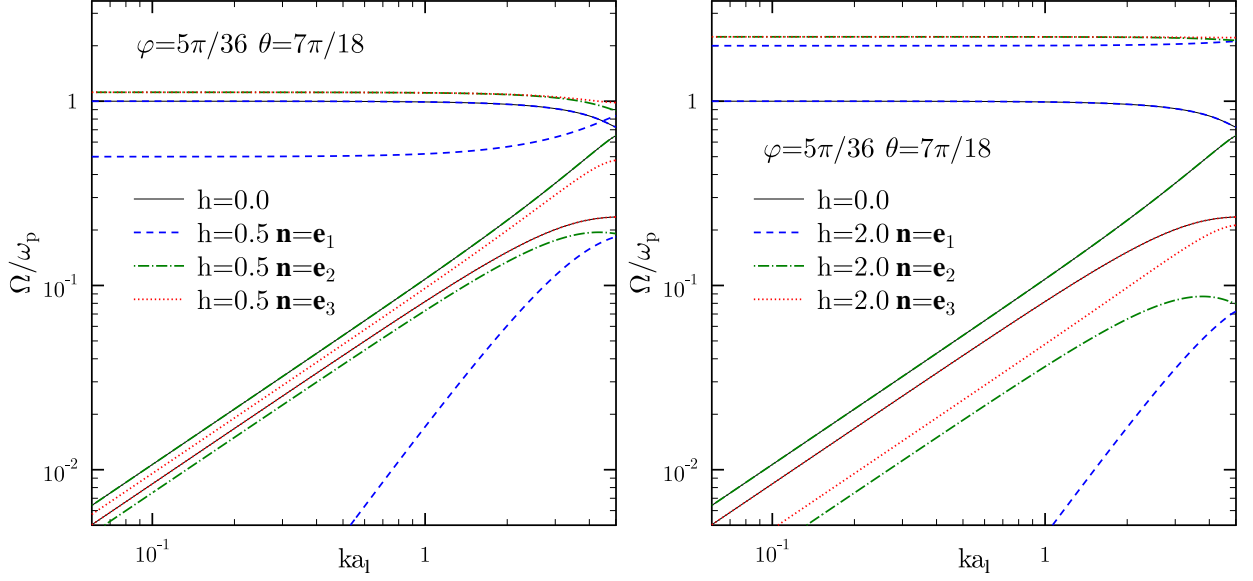


Рис. 2.31: Фононный спектр ОЦК решетки в магнитном поле при $\mathbf{n} = \mathbf{e}_i$.

Если магнитное поле направлено вдоль одного из векторов поляризации ($\mathbf{n} = \mathbf{e}_m$), то одна из частот кристалла в магнитном поле не будет изменяться ($\Omega_m = \omega_m$), тогда как между другими двумя будет выполняться соотношение: $\Omega_{(n,l)}^2 \omega_B^2 = (\omega_n^2 - \Omega_{(n,l)}^2)(\omega_l^2 - \Omega_{(n,l)}^2)$, где $m \neq n \neq l \neq m$. В общем случае нет никакой связи между индексами при Ω и ω . Как видно из рис. 2.31 при $h = 0.5$ если $\mathbf{n} = \mathbf{e}_i$, то $\Omega_i = \omega_i$, тогда как при $h = 2$, если $\mathbf{n} = \mathbf{e}_i$, то $\Omega_2 = \omega_i$.

Если вектора \mathbf{k} и \mathbf{n} сонаправлены ($\mathbf{n} = \mathbf{e}_3$), то при малых k $\Omega_3 = \max(1, h)\omega_p$, а $\Omega_2 = \min(1, h)\omega_p$, что видно из выражений (2.36) и (2.37). Оставшаяся мода равна $\Omega_1 = \omega_1\omega_2/\omega_B$. Как было показано выше, при любом \mathbf{n} перпендикулярном $\hat{\mathbf{k}}$ в том числе и для $\mathbf{n} = \mathbf{e}_{1,2}$ $\Omega_3 = \sqrt{\omega_B + \omega_p}$. При $\mathbf{n} = \mathbf{e}_1$ $\Omega_2 = \omega_2$, а $\Omega_1 = \omega_1/\sqrt{1+h^2}$. При $\mathbf{n} = \mathbf{e}_2$ $\Omega_1 = \omega_1$, а $\Omega_2 = \omega_2/\sqrt{1+h^2}$.

2.6.3 Моменты ОЦК решетки в магнитном поле

Как и сам спектр, моменты фононного спектра зависят не только от величины, но и направления магнитного поля относительно осей кристалла. Из всех рассматриваемых моментов $u_{\mathbf{n}}$ не изменяется (по теореме Виета $\Omega_1^2\Omega_2^2\Omega_3^2 = F_0$) [116], u_{-2} расходятся из-за того, что $\omega_1 \propto k^2$, поэтому остановимся только на $u_1(h, \mathbf{n})$ и $u_{-1}(h, \mathbf{n})$.

Можно предположить, что магнитное поле в кристалле направлено так, чтобы минимизировать энергию нулевых колебаний, то есть u_1 , о чем впервые было сказано в работе [115]. Для ОЦК решетки это направление — направление на “ближайшего соседа” \mathbf{n}_{\min} (красная стрелка на рис. 2.32), впервые было найдено в работе [45]. Заметим, что оно не совпадает с направлением, выбранным в работе [41], в которой магнитное поле направлено вдоль оси OZ \mathbf{n}_{NF} (зеленая стрелка на рис. 2.32).

В отличие от случая $B = 0$ при интегрировании по первой зоне Бриллюэна кристалла в магнитном поле нельзя ограничиваться интегрированием по основной подзоне, а нужно рассматривать всю зону полностью, так как в системе есть выделенное направление. Для $\mathbf{n} = \mathbf{n}_{\text{NF}}$ задача упрощается: $u_1(h, \mathbf{n}_{\text{NF}}) = \hat{u}_1(h, \mathbf{n}_{\text{NF}})$, где $\hat{u}_1(h, \mathbf{n}_{\text{NF}})$ вычисляется в основной

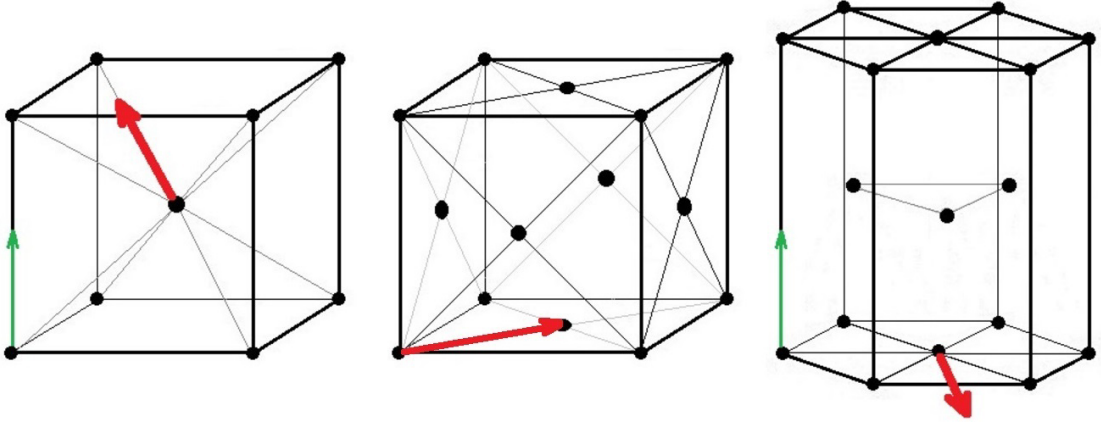


Рис. 2.32: Направление магнитного поля соответствующее минимуму энергии нулевых колебаний (красная стрелка) и направление магнитного поля, рассмотренное в работах [41, 42] (зеленые стрелки) для ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток.

подзоне. Аналогично для $\mathbf{n} = \mathbf{n}_{\min} = (n_x, n_y, n_z)$: $u_1(h, \mathbf{n}_{\min}) = (\hat{u}_1(h, \mathbf{n}_{\min}) + 3\hat{u}_1(h, \mathbf{n}'_{\min}))/4$, где $\mathbf{n}'_{\min} = (-n_x, n_y, n_z)$.

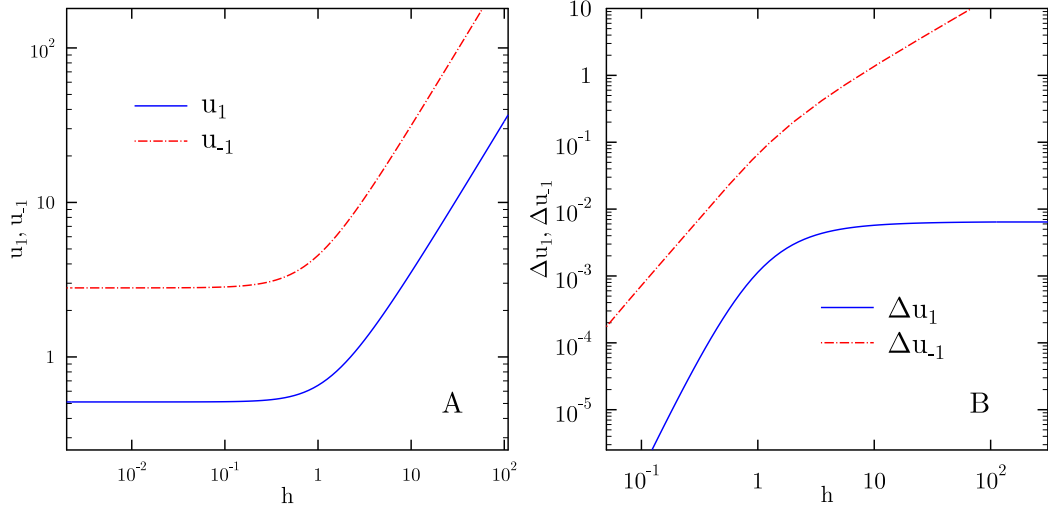


Рис. 2.33: Зависимость u_1 и u_{-1} от h для ОЦК решетки (рис. А) и зависимость Δu_1 и Δu_{-1} от h для ОЦК решетки (рис. В). Рисунок повторяет рис. 13 и 14 из главы 1 работы [45] и рис. 8 из работы [116].

На рис. 2.33А показана зависимость $u_1(h, \mathbf{n}_{\min})$ и $u_{-1}(h, \mathbf{n}_{\min})$ от h . При $h \gg 1$ основной вклад в u_1 вносит наибольшая мода $\Omega_3 \approx \omega_B$, следовательно, и первый момент увеличивается $\propto h$. u_{-1} также $\propto h$ при больших магнитных полях, что связано с наименьшей модой Ω_1 , которая $\propto 1/B$. Для $u_1(h, \mathbf{n}_{\text{NF}})$ в работе [41] приведено аппроксимационное выражение, выполняющееся для $h > 2$ с точностью в четыре значащие цифры, $u_1(h, \mathbf{n}_{\text{NF}}) \approx (0.560866 + 0.512144/h + h)/3$. Для направления \mathbf{n}_{\min} можно записать аналогичное выражение $u_1(h, \mathbf{n}_{\min}) \approx (0.543204 + 0.501456/h + h)/3$. Аппроксимационное выражение $u_1(h, \mathbf{n}_{\min})$ для любого h можно найти в работе [117].

На рис. 2.33В изображен график $\Delta u_1 \equiv u_1(h, \mathbf{n}_{\text{NF}}) - u_1(h, \mathbf{n}_{\text{min}})$. При малых h эта разность имеет достаточно сложную зависимость, связанную с необходимостью рассчитывать момент с очень высокой точностью, а при больших h выходит на насыщение. Максимальное значение отношения $\Delta u_1/u_1(h, \mathbf{n}_{\text{min}})$ достигается при $h \approx 2$ и равно 0.003. Разница между $u_1(h, \mathbf{n}_{\text{min}})$ и $u_1(h, \mathbf{n}_2)$, где $\mathbf{n}_2 = (1, 1, 0)/\sqrt{2}$ еще меньше, чем Δu_1 , а ее зависимость от h имеет тот же характер. Также на рис. 2.33В показана зависимость $\Delta u_{-1} \equiv u_{-1}(h, \mathbf{n}_{\text{NF}}) - u_{-1}(h, \mathbf{n}_{\text{min}})$. При $h \ll 1$ $\Delta u_{-1} \propto h^2$, а при $h \gg 1$ $\Delta u_{-1} \propto h$.

2.6.4 Первый момент фононного спектра ГЦК, ОЦР и ГЦР решеток в магнитном поле

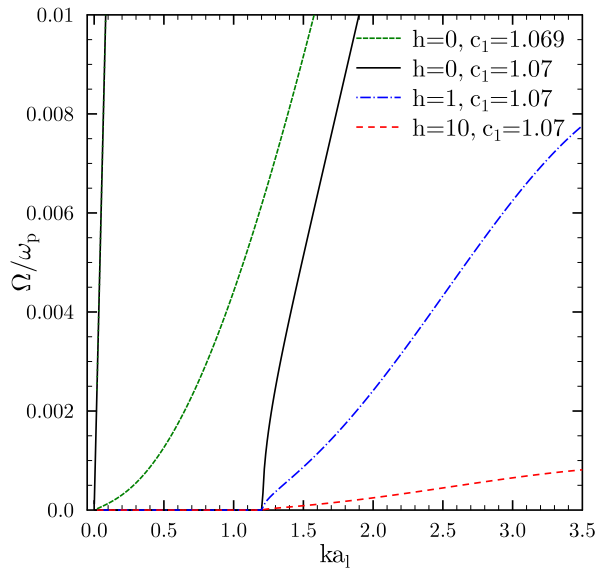


Рис. 2.34: Наименьшая мода колебаний ОЦР решетки в магнитном поле.

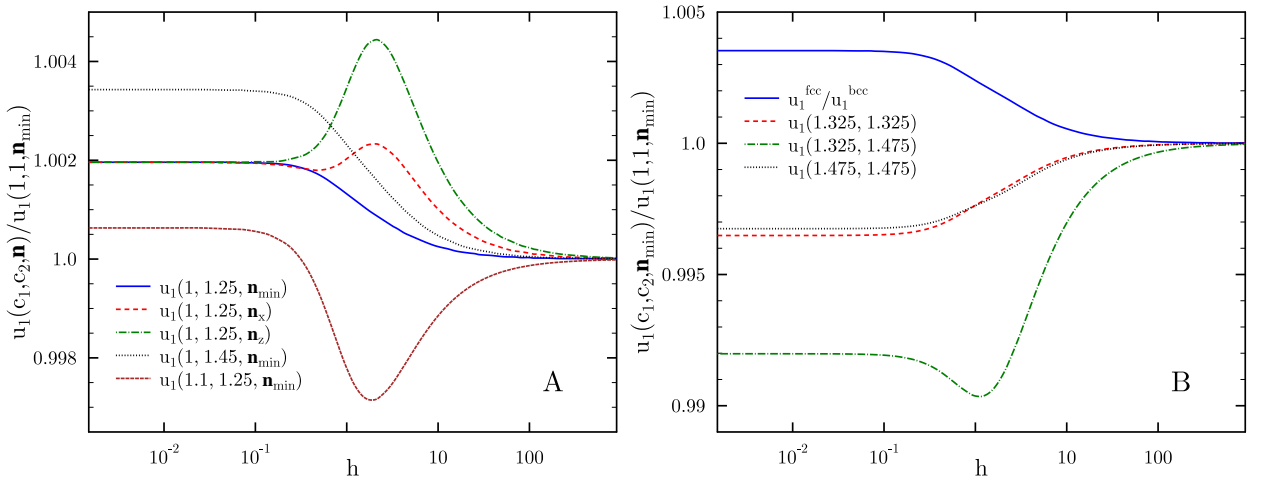


Рис. 2.35: Зависимость u_1 от h для ГЦК, ОЦР и ГЦР решеток.

Не будем останавливаться на описании фононных спектров ГЦК, ОЦР и ГЦР решеток

в магнитном поле. По всей видимости в целом они имеют те же особенности, что и спектр ОЦК решетки.

Что касается устойчивости ОЦР и ГЦР решеток, то магнитное поле не влияет на их стабильность, хотя и приводит к уменьшению среднеквадратичного смещения иона относительно положения равновесия [45]. На рис. 2.34 изображена наименьшая мода ОЦР решетки с $c_2 = c_1$ в магнитном поле и без него. Направление волнового вектора определяются углами $\phi = \pi/4$ и $\theta = \pi/2$, вектор магнитного поля сонаправлен с волновым вектором.

Большой интерес представляет изучение первого момента этих решеток. У ГЦК, ОЦР и ГЦР решеток u_1 минимален, когда направление магнитного поля совпадает с направлением на “ближайшего соседа”. Например, для ГЦК решетки $\mathbf{n}_{\min} = (1, 1, 0)/\sqrt{2}$, на рис. 2.32, это направление показано красной стрелкой. Отметим, что для разных c_1 и c_2 ближайшими соседями являются разные ионы, так для ОЦР решетки с $c_1 = 1.1$ и $c_2 = 1.45$ минимальное расстояние между ионами равно a_1 , а $\mathbf{n}_{\min} = (1, 0, 0)$.

На рис. 2.35А показана зависимость отношений $u_1(c_1, c_2, \mathbf{n}_{\min})/u_1(1, 1, \mathbf{n}_{\min})$ для ОЦР решетки, где $u_1(1, 1, \mathbf{n}_{\min})$ — первый момент ОЦК решетки. Кроме этого, на рисунке показано, как меняется $u_1(1, 1.25, \mathbf{n})/u_1(1, 1, \mathbf{n}_{\min})$ при разных \mathbf{n} . Вектор \mathbf{n}_x направлен вдоль оси OX , вектор \mathbf{n}_z — вдоль оси OZ (как и раньше ОЦР решетку с $c_1 = 1$ и $c_2 \neq 1$ можно рассматривать как ОЦК решетку, растянутую вдоль оси OZ). Из рис. 2.35А видно, что масштаб изменения $u_1(c_1, c_2, \mathbf{n})$ при изменении c_1 и c_2 того же порядка, что и масштаб изменения $u_1(c_1, c_2, \mathbf{n})$ при изменении \mathbf{n} . При больших h все отношения стремятся к 1, а зависимость от направления вектора \mathbf{n} существенна при $h \sim 1$. На рис. 2.35В изображена аналогичная картина для ГЦР решетки.

На рис. 2.35В также показан график зависимости отношения $u_1^{\text{fcc}}(\mathbf{n}_{\min})/u_1^{\text{bcc}}(\mathbf{n}_{\min})$ от h . Видно, что тип кристаллической решетки и направление магнитного поля вносят изменения в энергию нулевых колебаний одного порядка. В работе [41] было получено аппроксимационное выражение для $u_1(h, \mathbf{n}_{\text{NF}})$ ГЦК решетки при больших h : $\approx (0.559795 + 0.520163/h + h)/3$. При малых h отношение $u_1^{\text{fcc}}(\mathbf{n}_{\min})/u_1^{\text{bcc}}(\mathbf{n}_{\min}) \approx 0.513194/0.511388 \approx 1.00353$, а при больших h равно 1. И если $u_1^{\text{fcc}}(\mathbf{n}_{\text{NF}}) < u_1^{\text{bcc}}(\mathbf{n}_{\text{NF}})$ при $h \gtrsim 7.29$, то $u_1^{\text{fcc}}(\mathbf{n}_{\min})$ всегда больше $u_1^{\text{bcc}}(\mathbf{n}_{\min})$.

2.6.5 Фононный спектр и первый момент ГПУ решетки в магнитном поле

Фононный спектр ГПУ решетки в магнитном поле состоит из шести мод [118, 107]. Поведение трех из них схоже с поведением мод ОЦК решетки. Одна из акустических мод становится оптической ($\Omega \approx \text{const}$ при $ka_1 \ll 1$, рис. 2.36А и В), а другая остается акустической и не зависящей от h при $\mathbf{kn} = 0$ (рис. 2.36D) или становится квадратично зависимой от k при $\mathbf{kn} \neq 0$ ($\Omega \propto k^2/h$, рис. 2.36А и В). Если эти акустические моды ГПУ решетки пересекались при $h = 0$, то при $h \neq 0$ это пересечение быстро пропадает. Наибольшая мода остается оптической ($\Omega \approx \sqrt{\omega_p^2 + \omega_B^2}$). Другие три моды, которых нет в ОЦК решетке, — оптические. При $h \gg 1$ одна из них растет $\propto h$, другая убывает $\propto h^{-1}$, а третья в магнитном поле не меняется. На

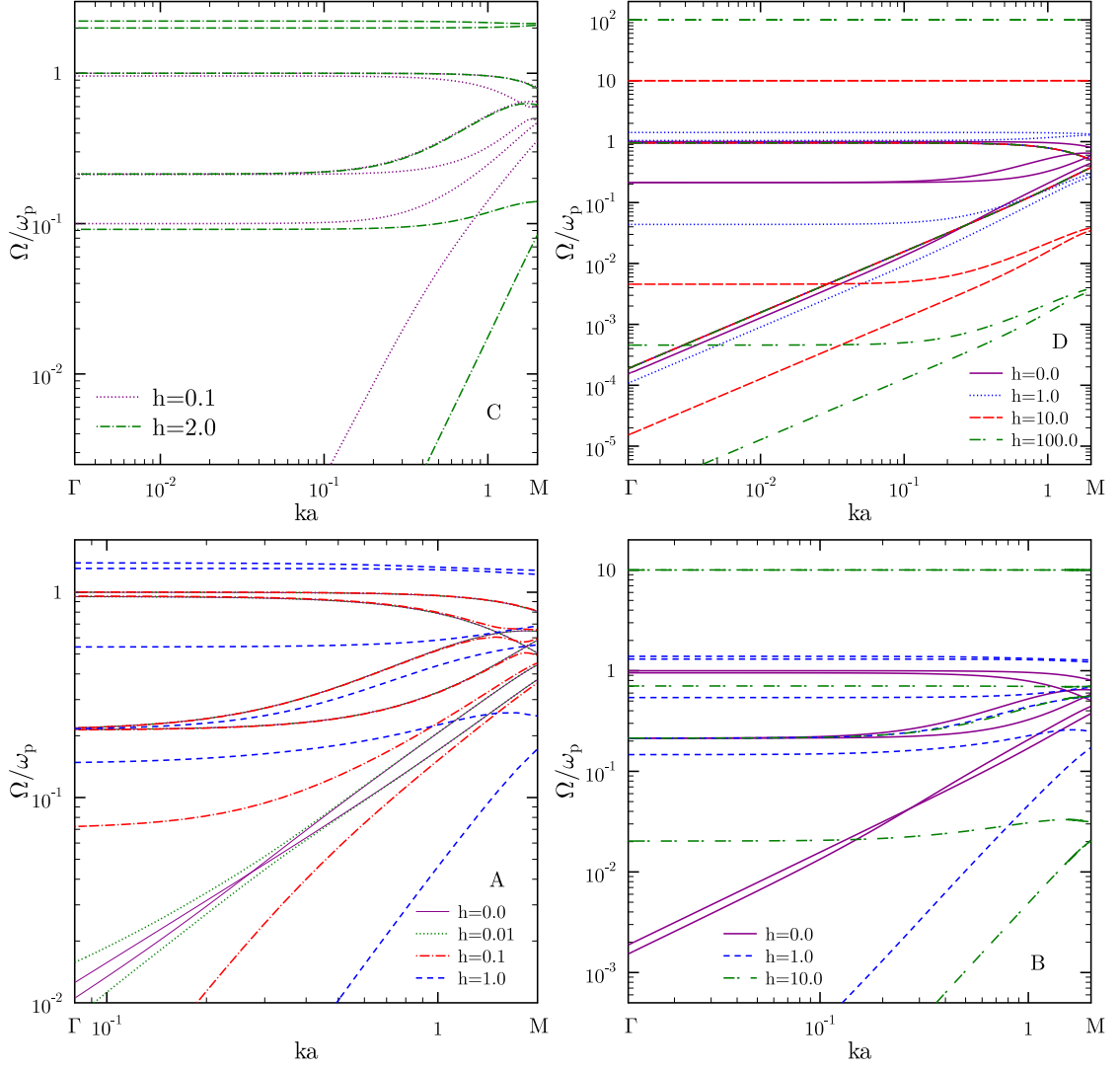


Рис. 2.36: Фононный спектр ГПУ решетки в магнитном поле.

рис. 2.36 показан фононный спектр ГПУ решетки в направлении ГМ ($\hat{\mathbf{k}} = (1, 0, 0)$). На рис. 2.36А и В $\mathbf{n} = (1, 1, 0)/\sqrt{2}$, на рис. А показано поведение мод при малых h , на рис. В — при больших h . На рис. 2.36С волновой вектор и вектор магнитного поля сонаправлены, а на рис. 2.36D ортогональны, $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$.

Энергия нулевых колебаний ГПУ решетки минимальна, когда вектор магнитного поля направлен на четвертого ближайшего соседа, например, $\mathbf{n}_{\min} = (0, 1, 0)$. Тогда разница между первым моментом ОЦК и ГПУ решеток, равная $\Delta u_1(h, \mathbf{n}_{\min}) \equiv u_1^{\text{bcc}}(h, \mathbf{n}_{\min}) - u_1^{\text{hcp}}(h, \mathbf{n}_{\min})$, всегда меньше 0. Если магнитное поле ориентировано по-другому, эта разница может стать знакопеременной, например, если $\mathbf{n} = \mathbf{n}_{\text{NF}} = (0, 0, 1)$ $\Delta u_1(h, \mathbf{n}_{\text{NF}}) \equiv u_1^{\text{bcc}}(h, \mathbf{n}_{\text{NF}}) - u_1^{\text{hcp}}(h, \mathbf{n}_{\text{NF}}) > 0$ при $h \gtrsim 1.293$ (рис. 2.37), как и было найдено в работе [42].

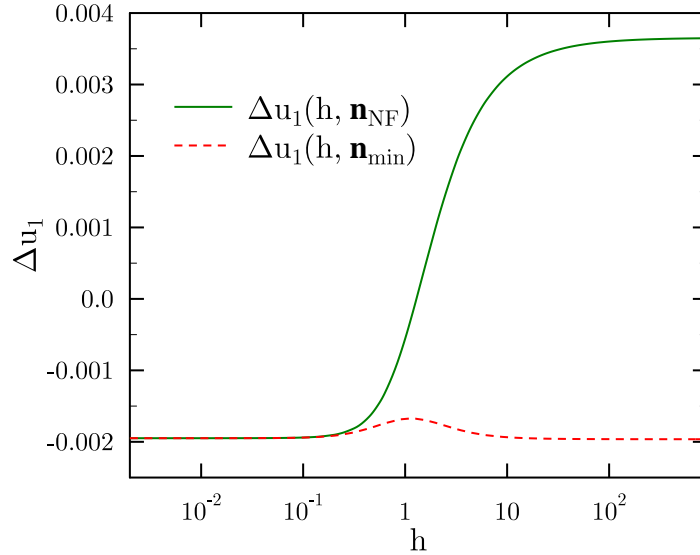


Рис. 2.37: Разница между первым моментом ОЦК и ГПУ решеток в магнитном поле.

2.7 Фононный спектр и моменты кулоновских кристаллов с учетом поляризации электронного фона

Первые исследования кулоновских кристаллов с учетом поляризации электронного фона были проведены в работе [40], фононный спектр ОЦК решетки детально исследовался в работах [50] и [107].

2.7.1 Фононный спектр кулоновских кристаллов с учетом поляризации электронного фона

Рассмотрим влияние поляризации электронного фона на фононный спектр однокомпонентного кулоновского кристалла, при этом ограничимся приближением Томаса-Ферми $\epsilon(\mathbf{q}) = 1 + \kappa_{\text{TF}}^2/q^2$.

В отсутствие поляризации электронного фона ($\epsilon(\mathbf{q}) = 1$) уравнение описывающее колебание i -ого иона относительно положения равновесия можно записать как

$$M\ddot{\mathbf{u}}_i = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi Z^2 e^2}{q^2} \left[\sum_j' e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} - n \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r})} \right], \quad (2.39)$$

где \mathbf{q} — волновой вектор, а штрих означает отсутствие слагаемого с $j = i$. Поляризация электронного фона за счет присутствия i -ого иона влияет только на сам ион. Тогда при произвольном $\epsilon(\mathbf{q})$:

$$M\ddot{\mathbf{u}}_i = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi Z^2 e^2}{q^2 \epsilon(\mathbf{q})} \left[\sum_j' e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} - n \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r})} \right], \quad (2.40)$$

дифференцируя и разлагая в ряд по \mathbf{u} получим:

$$M\ddot{\mathbf{u}}_{lp} = - \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi Z^2 e^2}{q^2 \epsilon(\mathbf{q})} i\mathbf{q} \sum_{l'p'}' i\mathbf{q}(\mathbf{u}_{lp} - \mathbf{u}_{l'p'}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_l + \mathbf{x}_p - \mathbf{R}_{l'} - \mathbf{x}_{p'})}. \quad (2.41)$$

Далее, производя те же замены переменных, что и в параграфе 2.1 имеем систему линейных уравнений, аналогичную выражению (2.14): $\omega^2(\mathbf{k})A_{\mathbf{k}p}^\mu = \sum_{p'} D_{pp'}^{\mu\nu}(\mathbf{k})A_{\mathbf{k}p'}^\nu$, где

$$D_{pp'}^{\mu\nu}(\mathbf{k}) = \frac{\omega_p^2}{n(2\pi)^3} \frac{\partial^2}{\partial X^\mu \partial X^\nu} \sum_{l \neq 0} (1 - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_l}) \int \frac{d\mathbf{q}}{q^2 \epsilon(\mathbf{q})} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'} - \mathbf{x})} \Big|_{\mathbf{x}=0}. \quad (2.42)$$

В приближении Томаса-Ферми это выражение для динамической матрицы с помощью все того же преобразования Эвальда можно привести к удобному для практического использования виду. При любом N_{cell} нормированная на $M/(Z^2 e^2)$ динамическая матрица равна [107]:

$$\begin{aligned} D_{pp'}^{\mu\nu}(\mathbf{k}) &= \frac{4\pi n}{N_{\text{cell}}} \left\{ \sum_m \frac{(G_m^\mu + k^\mu)(G_m^\nu + k^\nu)}{(\mathbf{G} + \mathbf{k})^2 + \kappa_{\text{TF}}^2} \exp \left[-\frac{(\mathbf{G}_m + \mathbf{k})^2 + \kappa_{\text{TF}}^2}{4A^2} + i(\mathbf{G}_m + \mathbf{k})(\boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'}) \right] \right. \\ &- \delta_{pp'} \sum_{mp''} \frac{G_m^\mu G_m^\nu}{G_m^2 + \kappa_{\text{TF}}^2} \exp \left[-\frac{G_m^2 + \kappa_{\text{TF}}^2}{4A^2} + i\mathbf{G}_m(\boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p''}) \right] \left. \right\} \\ &- \sum_l' \left\{ \left(\frac{\delta^{\mu\nu}}{Y_{p'}^3} - \frac{3Y_{p'}^\mu Y_{p'}^\nu}{Y_{p'}^5} \right) \left[(\kappa_{\text{TF}} Y_{p'} - 1) E_{p'}^+ - (\kappa_{\text{TF}} Y_{p'} + 1) E_{p'}^- - \frac{4AY_{p'}}{\sqrt{\pi}} F_{p'} \right] \right. \\ &+ \frac{Y_{p'}^\mu Y_{p'}^\nu}{Y_{p'}^2} \left(\kappa_{\text{TF}}^2 E_{p'}^+ + \kappa_{\text{TF}}^2 E_{p'}^- - \frac{8A^3 Y_{p'}}{\sqrt{\pi}} F_{p'} \right) \left. \right\} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} \\ &+ \delta_{pp'} \sum_{lp''} \left\{ \left(\frac{\delta^{\mu\nu}}{Y_{p''}^3} - \frac{3Y_{p''}^\mu Y_{p''}^\nu}{Y_{p''}^5} \right) \left[(\kappa_{\text{TF}} Y_{p''} - 1) E_{p''}^+ - (\kappa_{\text{TF}} Y_{p''} + 1) E_{p''}^- - \frac{4AY_{p''}}{\sqrt{\pi}} F_{p''} \right] \right. \\ &+ \frac{Y_{p''}^\mu Y_{p''}^\nu}{Y_{p''}^2} \left(\kappa_{\text{TF}}^2 E_{p''}^+ + \kappa_{\text{TF}}^2 E_{p''}^- - \frac{8A^3 Y_{p''}}{\sqrt{\pi}} F_{p''} \right) \left. \right\}, \quad (2.43) \end{aligned}$$

где $p, p', p'' = 1, \dots, N_{\text{cell}}$ нумеруют ионы в элементарной ячейке, $\mathbf{Y}_{p', p''} = \mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p', p''}$, штрих в суммах означает отсутствие слагаемых с $Y_{p'} = 0$ и $Y_{p''} = 0$,

$$\begin{aligned} E_{p', p''}^\pm &= e^{\pm \kappa_{\text{TF}} R_l} \operatorname{erfc} \left(AY_{p', p''} \pm \frac{\kappa_{\text{TF}}}{2A} \right), \\ F_{p', p''} &= \exp \left(-\frac{\kappa_{\text{TF}}^2}{4A^2} - A^2 Y_{p', p''}^2 \right). \quad (2.44) \end{aligned}$$

При $N_{\text{cell}} = 1$, малых ka и $\kappa_{\text{TF}a}$ выражение для динамической матрицы можно записать в приближенном виде с точностью до членов четвертого порядка (ka и $\kappa_{\text{TF}a}$ считаются малыми одного порядка) как

$$\frac{D^{\mu\lambda}(\mathbf{k})}{\omega_p^2} = \frac{k^\mu k^\lambda}{k^2 + \kappa_{\text{TF}}^2} - \frac{(ka_1)^2}{16\pi} \left(\alpha_0 \frac{k^\mu k^\lambda}{k^2} + \beta_0 \delta^{\mu\lambda} + \gamma^{\mu\lambda\rho\sigma} \frac{k^\rho k^\sigma}{k^2} \right), \quad (2.45)$$

коэффициент при κ_{TF}^2 равен 0, а коэффициенты α_0 , β_0 и $\gamma^{\mu\lambda\rho\sigma}$ те же, что и в (2.19). Дисперсионное уравнение в этом случае примет вид

$$-\frac{\omega^6}{\omega_p^6} + \frac{k^2}{k^2 + \kappa_{\text{TF}}^2} \left(\frac{\omega^4}{\omega_p^4} + E_0 \frac{\omega^2}{\omega_p^2} + F_0 \right) = 0, \quad (2.46)$$

где E_0 и F_0 определены в (2.23).

Из выражения (2.46) следует, что в любой решетке с $N_{\text{cell}} = 1$ при $\kappa_{\text{TF}} \gg k$ две акустические моды не изменяются, тогда как оптическая мода становится акустической $\omega_3/\omega_p \approx k/\kappa_{\text{TF}}$, а правило сумм — зависимым от k . С точностью до членов четвертого порядка оно равно $\sum_{i=1}^3 \omega_i^2(\mathbf{k}) = k^2 \omega_p^2 / (k^2 + \kappa_{\text{TF}}^2)$. Описанные выше особенности хорошо прослеживаются на рис. 2.38А, где показан фононный спектр ОЦК решетки при $\hat{\mathbf{k}} = (1, 1, 0)/\sqrt{2}$ при слабой ($\kappa_{\text{TF}}a = 0.05$) и умеренной ($\kappa_{\text{TF}}a = 0.5$) поляризации электронного фона.

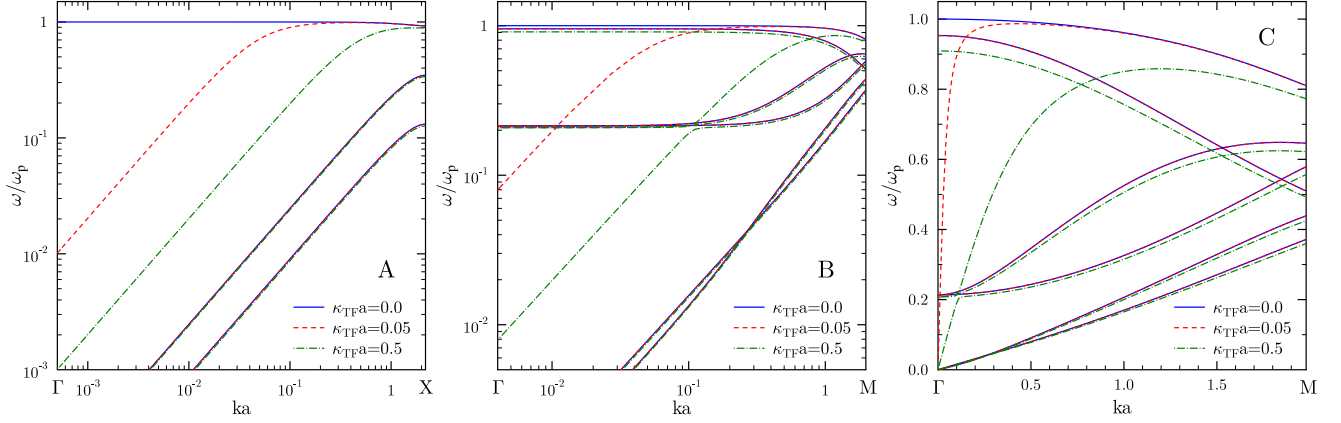


Рис. 2.38: Фононный спектр ОЦК и ГПУ решеток с учетом поляризации электронного фона.

Фононный спектр ГПУ решетки состоит шести мод, но при $\kappa_{\text{TF}}a > 0$ существенно изменяется только одна из оптических мод равная ω_p вблизи центра зоны Бриллюэна при $\kappa_{\text{TF}}a = 0$, как и в ОЦК решетке при $\kappa_{\text{TF}}a > 0$ она становится акустической. “Новая” акустическая мода не пересекается с другими при малых k и вместо пересечений имеют место антипересечения. На рис. 2.38В изображен фононный спектр ГПУ решетки в $\log - \log$ масштабе, а на рис. 2.38С в линейном, в том и в другом случае $\hat{\mathbf{k}} = (1, 0, 0)$.

При $N_{\text{cell}} = 1$ все алгебраические дополнения отличаются от случая с жестким фоном множителем $k^2/(k^2 + \kappa_{\text{TF}}^2)$, таким образом при малых k вектора поляризации $\mathbf{e}_{1,2,3}$ будут описываться выражением (2.38).

2.7.2 Моменты кулоновских кристаллов с учетом поляризации электронного фона

Приближение Томаса-Ферми

Изменение фононного спектра приводит к изменению моментов решеток. На рис. 2.39А показаны зависимости u_1 , u_{-1} и u_{-2} от $\kappa_{\text{TF}}a$ в $\log - \log$ масштабе. Небольшой загиб кривых вверх при малых $\kappa_{\text{TF}}a$ не является реальным и связан с недостаточной точностью вычислений. За счет появления новой акустической моды при $\kappa_{\text{TF}}a \ll 1$ u_1 убывает $\propto (\kappa_{\text{TF}}a)^{-2}$, u_{-1} и u_{-2} растут с той же пропорциональностью, а поведение u_{in} схоже с поведением $1/u_1$. Аналогичная ситуация обстоит с моментами ГПУ решетки, изображенными на рис. 2.39В.

Зависимость моментов ОЦК решетки была исследована и аппроксимирована в работе [50]. Полученные в представляемой работе результаты с хорошей точностью согласуются с резуль-

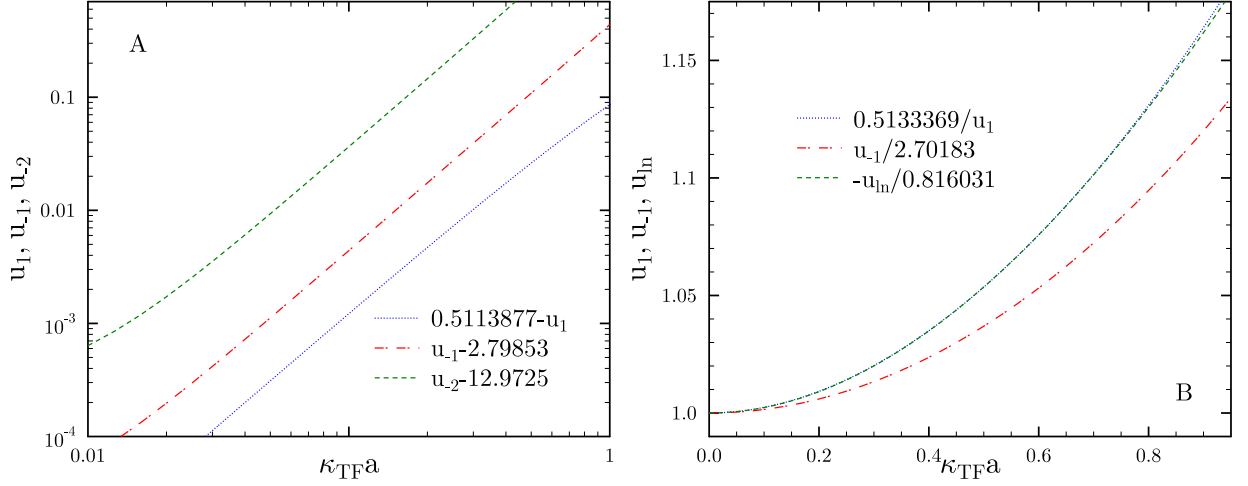


Рис. 2.39: Моменты ОЦК и ГПУ решеток с учетом поляризации электронного фона.

татами работы [50]. С максимальной погрешностью меньше 0.03% отношения $u_1(0)/u_1(\kappa_{\text{TFA}})$ ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток можно аппроксимировать как $1 + c_1(\kappa_{\text{TFA}})^2 + c_2(\kappa_{\text{TFA}})^4 + c_3(\kappa_{\text{TFA}})^6$, параметры аппроксимации даны в таблице 2.3.

	$u_1(0)$	c_1	c_2	c_3
ОЦК	0.5113877	0.227788	-0.0541677	0.0304477
ГЦК	0.513194	0.22751	-0.0595801	0.0365541
ГПУ	0.5133369	0.225865	-0.05115	0.0271926

Таблица 2.3: Параметры аппроксимации зависимости u_1 от κ_{TFA} .

Разница между u_1 ГЦК и ГПУ решеток имеет тот же порядок, что и погрешность аппроксимации, поэтому для сравнения этих решеток между собой были использованы точные расчеты. Зависимость отношений $u_1^{\text{hcp}}/u_1^{\text{bcc}} - 1$ и $u_1^{\text{fcc}}/u_1^{\text{bcc}} - 1$ от κ_{TFA} показана на рис. 2.40А. Оба отношения всегда больше 0 и растут с ростом κ_{TFA} . То есть при любом κ_{TFA} энергия нулевых колебаний ОЦК решетки меньше, чем энергия нулевых колебаний ГЦК и ГПУ решеток, кроме этого, энергия нулевых колебаний ГЦК решетки всегда меньше, чем ГПУ решетки. Аналогичная ситуация с моментом u_{ln} , при любом κ_{TFA} : $u_{\text{ln}}^{\text{bcc}} < u_{\text{ln}}^{\text{fcc}} < u_{\text{ln}}^{\text{hcp}}$, соответственно, $u_{\text{ln}}^{\text{hcp}}/u_1^{\text{bcc}} - 1$ и $u_{\text{ln}}^{\text{fcc}}/u_1^{\text{bcc}} - 1$ меньше нуля (так как $u_{\text{ln}} < 0$), причем зависимость этих отношений от κ_{TFA} гораздо слабее, чем в ситуации с первым моментом. При $\kappa_{\text{TFA}} < 0.5$ изменения не превосходят 0.8%.

Приближение Янковичи

Кроме приближения Томаса-Ферми для вычисления мод кристалла с поляризованным электронным фоном можно воспользоваться приближением Янковичи (выражение (1.69)). В этом приближении фонанный спектр зависит не только от κ_{TFA} , но и от x_{r} . В работе [50] замечено, что при любых q фонанный спектр ОЦК решетки в приближении Янковичи при любом x_{r} практически не отличается от фононного спектра ОЦК решетки в приближении

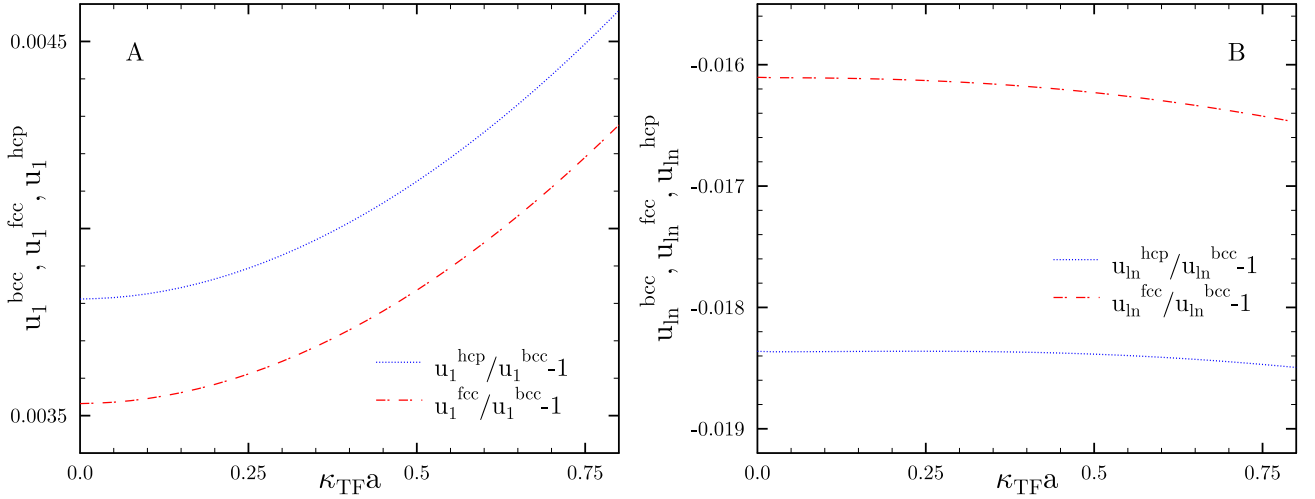


Рис. 2.40: Моменты u_1 и u_{ln} ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток с учетом поляризации электронного фона.

x_r	u_1	u_{-1}
Приближение Томаса-Ферми		
	0.4852393	2.90710
Приближение Янковичи		
10	0.4864944	2.89936
3	0.4861845	2.90118
1	0.4858736	2.90313
0.3	0.4861221	2.90100
0.1	0.4876263	2.88325

Таблица 2.4: Моменты ОЦК решетки u_1 и u_{-1} , рассчитанные в приближении Янковичи и Томаса-Ферми.

Томаса-Ферми. Однако, в представляемой работе было проведено численное интегрирование по спектру для двух этих приближений, и отличие все-таки проявляется. В таблице 2.4 это проиллюстрировано на примере моментов u_1 и u_{-1} при $\kappa_{TF}a = 0.5$. Сетка интегрирования для обоих случаев одинаковая.

Зависимость u_1 и u_{-1} от x_r в приближении Янковичи немонотонна (поведение электростатической энергии также немонотонно). Из таблицы 2.4 видно, что моменты, рассчитанные в двух приближениях, отличаются друг от друга на доли процента [119]. С абсолютной точки зрения отличие между двумя подходами к вычислению $\epsilon(q)$ можно считать незначительным. Тем не менее, его было бы полезно учесть при сравнении полных энергий в приближении Янковичи (рис. 1.22).

2.7.3 Устойчивость кристаллов Юкавы

Устойчивость кристаллов Юкавы (кристаллов с произвольным $\kappa_D a$, не ограниченным 1) систематически не рассматривалась. Известно только, что ОЦК решетка при $\kappa_D a > 4.76$ неустойчива. Это значение впервые найдено в работе [101], а в представляемой работе подтверждено независимо. ГЦК и ГПУ решетки устойчивы при $\kappa_D a = 5$, а при бóльших $\kappa_D a$ они не исследовались.

Среди всех деформированных решеток, рассматривалась лишь деформация ОЦК решетки из работы [9]. Она подробно описана в параграфе 2.3.3. и определяется параметром ϵ . Для разных ϵ в таблице 2.5 приведены значения $\kappa_D^M a$, при которых ОЦК решетка становится неустойчивой. То есть, с учетом используемой точности, решетка остается устойчивой при всех $\kappa_D a \leq \kappa_D^M a - 0.01$. Из таблицы видно, что зависимость $\kappa_D^M a$ от ϵ имеет монотонный, но нелинейный характер.

ϵ	0.11	0.1089	0.108	0.106	0.104	0.102	0.1
$\kappa_D^M a$	0.4	0.571	0.71	0.87	1.04	1.19	1.3
σ^{\max}	0.0197465	0.019379	0.019039	0.018440	0.017784	0.017137	0.0165615
ϵ	0.098	0.096	0.094	0.092	0.09	0.088	0.086
$\kappa_D^M a$	1.42	1.53	1.62	1.73	1.81	1.89	1.99
σ^{\max}	0.015954	0.015365	0.014824	0.014231	0.013719	0.013209	0.012651

Таблица 2.5: Зависимость $\kappa_D^M a$ и σ^{\max} от ϵ .

По аналогии с параграфом 2.3.3 в таблице 2.5 также приведены значения σ^{\max} — максимального напряжения, которое может выдержать кристалл при данной деформации ϵ :

$$\sigma^{\max} \equiv \left. \frac{\partial U_{\text{YUK}}}{\partial \epsilon} \right|_{\kappa_D^M a - 0.01}, \quad (2.47)$$

где U_{YUK} — энергия статического кристалла Юкавы (см. параграф 1.6.2). Значения σ^{\max} уменьшаются с увеличением $\kappa_D^M a$.

Кристалл Юкавы с $\kappa_D a \approx 1/1.75$ теряет свою устойчивость при $\epsilon \approx 0.1089$. Тогда для этого кристалла получим $\sigma^{\max} = 0.019349nZ^2e^2/a$, что еще лучше согласуется с результатами численного моделирования [9]: $\sigma_b^{\max} = 0.0195nZ^2e^2/a$.

2.8 Фононный спектр кулоновских кристаллов во внешнем магнитном поле с учетом поляризации электронного фона

Используя выражение для динамической матрицы (2.43), можно найти фононный спектр кулоновских кристаллов во внешнем магнитном поле с учетом поляризации электронного

фона. По сравнению со случаем с жестким фоном (параграф 2.6.1) изменится динамическая матрица, но общий вид дисперсионного уравнения останется прежним:

$$\det\{D_{pp'}^{\mu\lambda}(\mathbf{k}) - \Omega_\nu^2(\mathbf{k}, \mathbf{B})\delta^{\mu\lambda}\delta_{pp'} - i\Omega_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{B})\omega_B\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}n^\gamma\delta_{pp'}\} = 0. \quad (2.48)$$

Также в магнитном поле изменится концентрация электронов, а следовательно и κ_{TF} . При $T = 0$ обратная длина экранирования равна

$$\kappa_{\text{TF}}^2 = \frac{2Be^3\mu_e}{\pi c^2\hbar^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} \frac{2 - \delta_{l,0}}{\sqrt{\mu_e^2 - (m_e c^2)^2 - 2\hbar c e B l}}, \quad (2.49)$$

где l — номер уровня Ландау, l_{max} определяется из условия положительности подкоренного выражения. На рис. 2.41 показано поведение $\kappa_{\text{TF}}a_e$ от $m_u n_e = \rho Z/A$ для двух магнитных полей $B = 10^{13.5}$ Гаусс и $B = 10^{15}$ Гаусс, где $a_e \equiv (4\pi n_e/3)^{-1/3} = aZ^{-1/3}$, $m_u = 1.6605 \times 10^{-24}$ г — атомная единица массы. Пунктирной кривой показано поведение $\kappa_{\text{TF}}a_e = 0.185(1 + x_T^2)^{1/4}/\sqrt{x_T}$ в отсутствие магнитного поля. В магнитном поле κ_{TF} осциллирует около своего значения при $B = 0$. При $\mu_e^2 = (m_e c^2)^2 - 2\hbar c e B l + 0$ значение $\kappa_{\text{TF}}a_e \rightarrow +\infty$, пики в окрестности этих точек показаны не аккуратно.

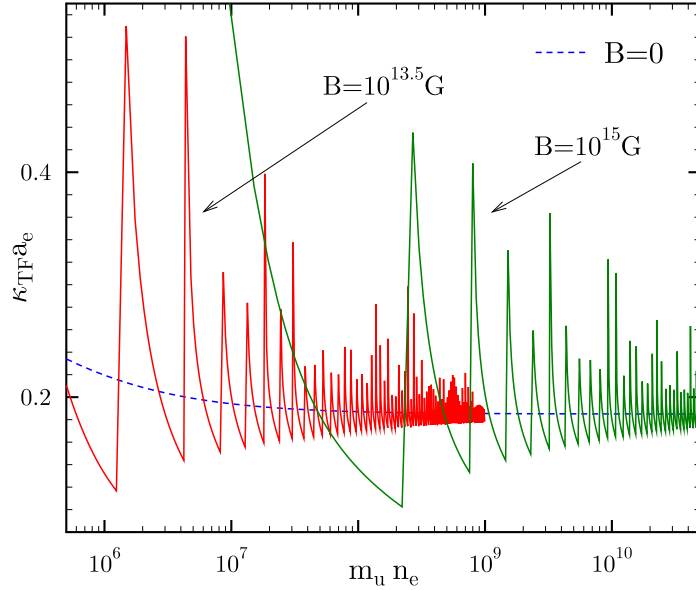


Рис. 2.41: Зависимость $\kappa_{\text{TF}}a_e$ от $m_u n_e$ в магнитном поле.

С помощью уравнения (2.48) исследуем фоновый спектр ОЦК и ГПУ решеток во внешнем магнитном поле с учетом поляризации электронного фона. Далее будем следовать работе [107], где это было проведено впервые.

При малых ka , $\kappa_{\text{TF}}^2 a$ и $N_{\text{cell}} = 1$ дисперсионное уравнение примет вид:

$$-\frac{\Omega^6}{\omega_p^6} + \left(\frac{k^2}{k^2 + \kappa_{\text{TF}}^2} + h^2 \right) \frac{\Omega^4}{\omega_p^4} + E_B^{\text{KF}} \frac{\Omega^2}{\omega_p^2} + \frac{k^2}{k^2 + \kappa_{\text{TF}}^2} F_0 = 0, \quad (2.50)$$

где

$$E_B^{\text{KF}} = \left(\frac{k^2}{k^2 + \kappa_{\text{TF}}^2} \right) E_0 - \frac{(\mathbf{kn})^2}{k^2 + \kappa_{\text{TF}}^2} h^2 + E_2 h^2, \quad (2.51)$$

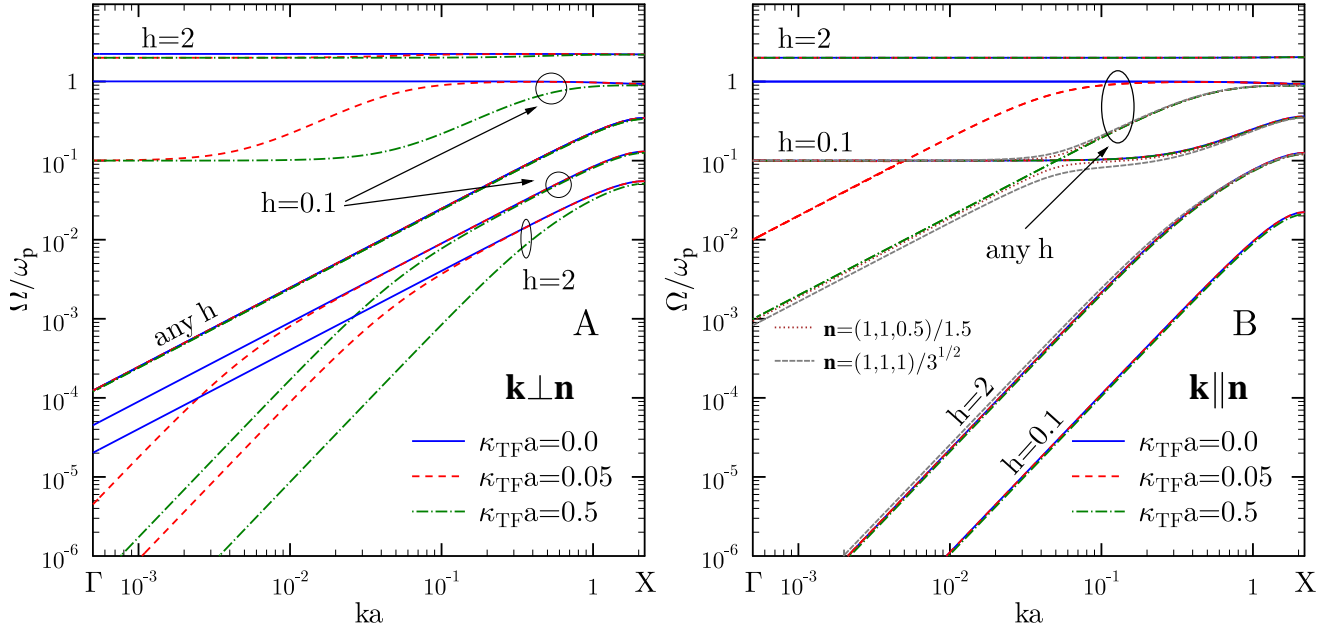


Рис. 2.42: Фононный спектр ОЦК решетки во внешнем магнитном поле с учетом поляризации электронного фона, вектор $\hat{\mathbf{k}} = (1, 1, 0)/\sqrt{2}$.

а коэффициенты E_0 , E_2 и F_0 те же что и в (2.34).

При $k \ll \kappa_{\text{TF}}$ дисперсионное уравнение можно записать как

$$-\frac{\Omega^6}{\omega_p^6} + h^2 \frac{\Omega^4}{\omega_p^4} + \frac{(hk)^2}{\kappa_{\text{TF}}^2} \left[\frac{\kappa_{\text{TF}}^2}{k^2} E_2 - (\hat{\mathbf{kn}})^2 \right] \frac{\Omega^2}{\omega_p^2} + \frac{k^2}{\kappa_{\text{TF}}^2} F_0 = 0, \quad (2.52)$$

где выражение в квадратных скобках не зависит от k и h . Из уравнения (2.52) видно, что одна из мод в кристалле — циклотронная $\Omega_3 \approx \omega_B$ (рис. 2.42), какова бы ни была ориентация векторов \mathbf{k} и \mathbf{n} относительно друг друга. Наименьшая из мод квадратично зависит от волнового вектора, причем если волновой вектор сонаправлен с вектором магнитного поля, то $\Omega_1 \propto k^2/h$ (рис. 2.42B), а если волновой вектор ортогонален направлению магнитного поля, то $\Omega_1 \propto k^2/(h\kappa_{\text{TF}})$ (рис. 2.42A). В общем случае она равна:

$$\Omega_1^2 \approx \frac{F_0 k^2 \omega_p^2}{h^2 [\kappa_{\text{TF}}^2 E_2 - (\mathbf{kn})^2]}. \quad (2.53)$$

Оставшаяся мода — акустическая

$$\Omega_2^2 \approx \omega_p^2 \left[E_2 - \frac{(\mathbf{kn})^2}{\kappa_{\text{TF}}^2} \right]. \quad (2.54)$$

При $\hat{\mathbf{kn}} = 1$ $\Omega_2 \propto k/\kappa_{\text{TF}}$ (рис. 2.42B), а при $\hat{\mathbf{kn}} = 0$ она не зависит ни от κ_{TF} , ни от h : $\Omega_2 \propto k$ (рис. 2.42A).

В более частном случае, когда $\mathbf{n} = \mathbf{e}_1$ или $\mathbf{n} = \mathbf{e}_2$ (\mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 — вектора поляризации кристалла в отсутствие магнитного поля), акустическая мода равна соответственно ω_1 или ω_2 (одной из акустических мод в отсутствие магнитного поля), а мода, квадратично зависящая от k — $\omega_2 k / \sqrt{k^2 + h^2(k^2 + \kappa_{\text{TF}}^2)}$ или $\omega_1 k / \sqrt{k^2 + h^2(k^2 + \kappa_{\text{TF}}^2)}$. На рис. 2.42B помимо мод при $\mathbf{kn} = k$,

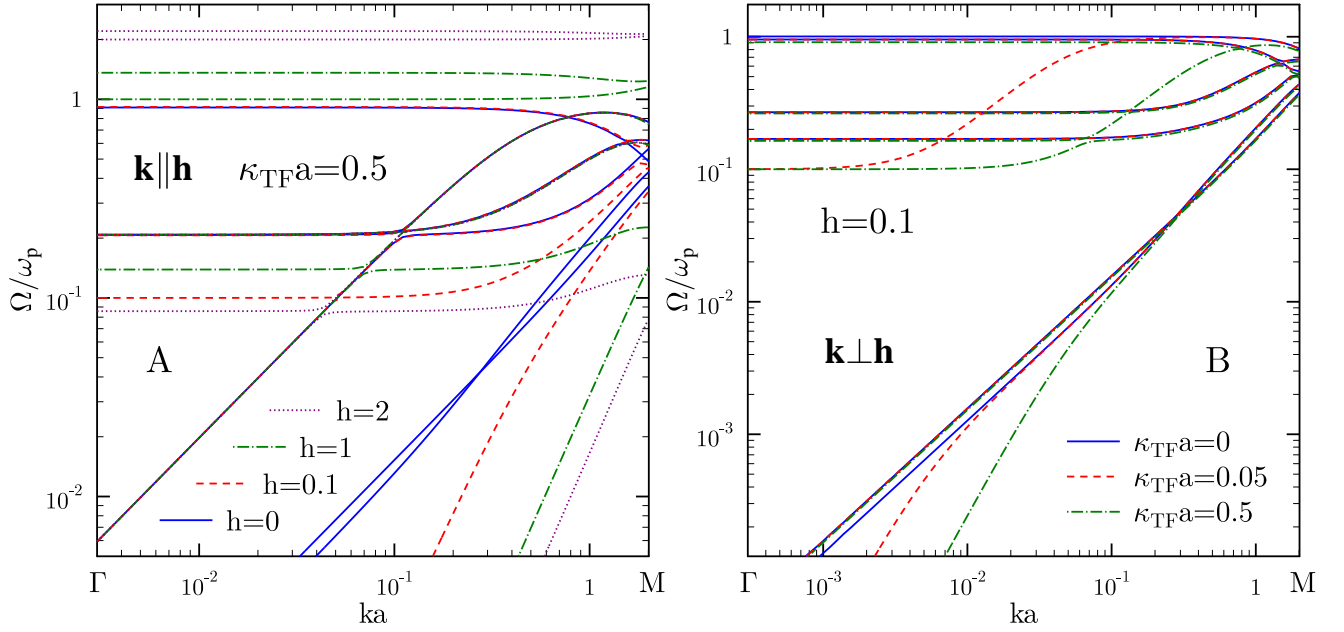


Рис. 2.43: Фононный спектр ГПУ решетки во внешнем магнитном поле с учетом поляризации электронного фона, вектор $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$.

показан фононный спектр ОЦК решетки при $h = 0.1$ $\mathbf{n} = (1, 1, 0.5)/1.5$ и $\mathbf{n} = (1, 1, 1)/\sqrt{3}$. На месте пересечения оптической и акустической мод возникают антипересечения.

На рис. 2.43 изображен фононный спектр ГПУ решетки во внешнем магнитном поле с учетом поляризации электронного фона. На рис. 2.43А волновой вектор и вектор магнитного поля сонаправлены, в этом случае при изменении $\kappa_{TF}a$ изменится только оптическая мода с частотой $\approx \omega_p$ вблизи центра зоны Бриллюэна, при $\kappa_{TF}a > 0$ она становится акустической. Если $\mathbf{kn} = 0$ (рис. 2.43В), эта же оптическая мода становится циклотронной, кроме нее изменяется и одна из акустических мод. Она становится квадратично зависящей от k . Остальные моды остаются без изменений, а в целом поведение мод ГПУ решетки аналогично поведению мод ОЦК решетки.

Поведение векторов поляризации ОЦК решетки в магнитном поле с учетом поляризации электронного фона описано в работе [107].

Для ОЦК решетки направление магнитного поля при котором энергия нулевых колебаний минимальна не зависит от поляризации электронного фона, при любом $\kappa_{TF}a$ $\mathbf{n}_{\min} = (1, 1, 1)/\sqrt{3}$. В этом направлении зависимость u_1 ОЦК решетки от магнитного поля и $\kappa_{TF}a$ показана на рис. 2.44. Влияние поляризации электронного фона на моменты сказывается только при $\kappa_{TF}a > 0.1$. Так, на выбранном масштабе графики при $\kappa_{TF}a = 0.1$ и 0.0 неотличимы. При $h > 10$ основной вклад в u_1 вносит циклотронная мода, которая от $\kappa_{TF}a$ не зависит, соответственно, при столь больших магнитных полях энергия нулевых колебаний от поляризации электронного фона не зависит.

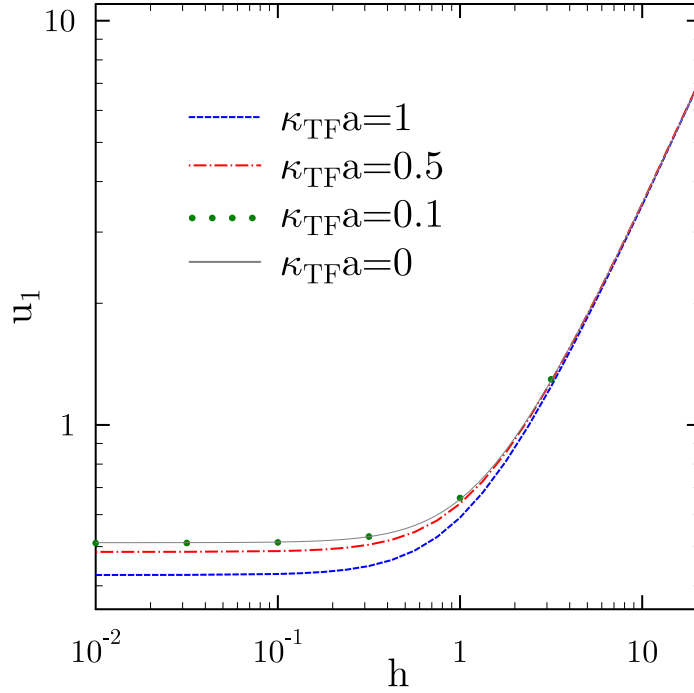


Рис. 2.44: Зависимость u_1 ОЦК решетки от h при разных $\kappa_{\text{TF}a}$.

2.9 Выводы ко второй главе

Вторая глава посвящена описанию фононных мод различных кулоновских кристаллов.

В параграфе 2.1 приводится вывод дисперсионного уравнения, позволяющего рассчитать фононный спектр любой многокомпонентной упорядоченной кристаллической решетки. Ранее дисперсионное уравнение было известно только для однокомпонентных кулоновских систем.

Параграф 2.2 посвящен описанию свойств фононных спектров однокомпонентных решеток: ПК, ОЦК, ГЦК, гексагональной и ГПУ. Для ОЦК решетки был детально исследован фононный спектр, состоящий одной оптической и двух акустических мод, вблизи центра зоны Бриллюэна, моменты, а также впервые рассчитана плотность фононных состояний. Она также была рассчитана и для ГПУ решетки. Обнаружено, что плотность фононных состояний имеет те же особенности, что и у обычных кристаллов: при малых ω она пропорциональна ω^2 , а при частотах достигаемых в точках высокой симметрии наблюдаются особенности ван Хова. Было подтверждено, что однокомпонентные простая кубическая и гексагональная решетки неустойчивы: при некоторых \mathbf{k} частота одной из фононных мод комплекснозначна ($\omega_i^2(\mathbf{k}) < 0$).

В параграфе 2.3 впервые была рассмотрена устойчивость различных деформированных однокомпонентных решеток. Показано, что границы устойчивости кристаллов существенно зависят от направления деформации. Так устойчивость ОЦК и ГЦК решеток, растянутых вдоль граней куба их элементарных ячеек (они названы ОЦР и ГЦР решетками, соответственно) зависит от параметров c_1 и c_2 : относительных размеров их элементарных ячеек. В некоторых направлениях эти решетки сохраняют свою устойчивость в достаточно большом

диапазоне параметров, так при $c_1 = 1.0$ в ОЦР решетке моды с $\omega_i^2(\mathbf{k}) < 0$ появляются только при $c_2 = 1.5$, с другой стороны при $c_1 = c_2$ это происходит уже при $c_1 = 1.08$. Кроме ОЦР и ГЦР решеток были рассмотрены растянутая вдоль главной диагонали ОЦК решетка, растянутая вдоль диагонали основания ОЦК решетка и ГУ решетка (как деформированная ГЦК решетка). Было найдено, что простые ромбическая и тетрагональная, а также базоцентрированные ромбическая и моноклинная неустойчивы.

На основании информации о границах устойчивости, в параграфе 2.3.3 было показано, что максимальное напряжение, которое может выдержать кора нейтронной звезды и ее поведение при деформации существенно зависят от взаимной ориентации направления деформации и кристаллографических осей, а также от типа кристаллической решетки.

В параграфе 2.4 были исследованы фононные свойства бинарных кулоновских кристаллов и их устойчивость относительно изменения размеров их элементарных ячеек и ионного состава. Фононный спектр бинарной ОЦК решетки (ПК2 решетка) состоит из шести мод. Его свойства были описаны в параграфе 2.4.1, где также была приведена плотность фононных состояний при различном ионном составе. ПК2 решетка становится неустойчивой, когда отношение зарядов ионов ее образующих α превосходит 3.6. Устойчивость бинарной ОЦР решетки исследована только для случая $c_2 = 1$. Показано, что при изменении c_1 диапазон по α изменяется, но всегда остается в пределах от 1 до 3.6. Бинарная ГПУ решетка (Г2 решетка) остается устойчивой только при $\alpha < 1.25$. Отношение масс ионов β на устойчивость решеток не влияет.

В рассмотренной в параграфе 2.4.4 бинарной ГЦК решетке концентрация ионов первого типа в три раза больше концентрации ионов второго типа. Такая решетка устойчива при $0.66 \leq \alpha \leq 1.38$. Однокомпонентная решетка кристалла диборида магния неустойчива, однако, бинарная решетка устойчива, когда заряд ионов с большей концентрацией существенно меньше заряда других, а высота решетки примерно равна длине основания. Кроме этого в параграфе 2.4.4 были рассмотрены бинарная решетка NaCl и четырехкомпонентная решетка Дайсона.

Параграф 2.5 посвящен анализу поведения моментов u_1 , u_{1n} , u_{-1} и u_{-2} фононного спектра бинарных ПК2 и Г2 решеток при изменении ионного состава. Для ПК2 решетки получена удобная аппроксимационная формула, позволяющая вычислить первый момент фононного спектра этой решетки.

В параграфе 2.6 проведено исследование влияния внешнего магнитного поля на свойства ОЦК, ГЦК, ОЦР, ГЦР и ГПУ решеток (для последних трех решеток впервые). Детально изучено поведение фононного спектра ОЦК решетки вблизи центра зоны Бриллюэна. Показано, что фононный спектр всех рассмотренных решеток существенно зависит от угла между волновым вектором \mathbf{k} и вектором магнитного поля \mathbf{n} . Если $\mathbf{kn} = 0$, то одна из оптических мод становится квадратично зависимой от k , в противоположном случае она остается оптической. Изменяются и другие моды колебаний. В связи с этим появляется зависимость энергии нулевых колебаний (она определяется моментом u_1) от направления магнитного поля. Для ОЦК и ГЦК решеток минимум энергии достигается, когда магнитное поле направлено на

“ближайшего соседа” (как и для ОЦР и ГЦР решеток, причем при изменении c_1 и c_2 “ближайший сосед” изменяется), тогда как в ГПУ решетке это направление — на четвертого “ближайшего соседа”. Минимальная энергия нулевых колебаний ОЦК решетки меньше, чем минимальная энергия нулевых колебаний ГЦК и ГПУ решеток. Внешнее магнитное поле на устойчивость ОЦР и ГЦР решеток не влияет.

Характерные особенности фононного спектра кулоновского кристалла с учетом поляризации электронного фона, описываемом в приближении Томаса-Ферми, рассмотрены на примере ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток в параграфе 2.7. Учет поляризации приводит к тому, что оптическая мода (единственная, как для ОЦК и ГЦК решеток, и одна из, как для ГПУ) становится акустической вблизи центра зоны Бриллюэна. Следовательно изменятся и моменты этих решеток. Так u_1 при малых $\kappa_{TF}a$ убывает пропорционально κ_{TF}^2 . Также была исследована устойчивость различных решеток. ОЦК решетка теряет устойчивость при $\kappa_{TF}a > 4.76$, тогда как ГЦК и ГПУ решетки устойчивы при $\kappa_{TF}a = 5$. Для деформированной ОЦК решетки найдена зависимость максимальной деформации, которую способен выдержать кристалл, от $\kappa_{TF}a$. Кроме приближения Томаса-Ферми для вычисления мод кристалла с поляризованным электронным фоном было использовано приближение Янковичи. Обнаружено, что моменты, рассчитанные в этих двух приближениях, отличаются друг от друга на доли процента.

Фононный спектр кулоновского кристалла во внешнем магнитном поле и с учетом поляризации электронного фона имеет довольно сложную структуру и был исследован только у ОЦК и ГПУ решеток в параграфе 2.8. Для ОЦК решетки было получено дисперсионное уравнение позволяющее, найти фононные моды при $k \ll \kappa_{TF}$. Было показано, что направление магнитного поля, при котором энергия нулевых колебаний минимальна, не зависит от поляризации электронного фона.

Результаты полученные впервые:

- Получено дисперсионное уравнение позволяющее рассчитать фононный спектр любого упорядоченного многокомпонентного кулоновского кристалла.
- Рассчитаны плотности фононных состояний различных однокомпонентных и бинарных решеток.
- Исследованы устойчивости различных деформированных и многокомпонентных решеток относительно малых колебаний ионов около положения равновесия. Показано, что границы устойчивости существенно зависят от направления деформации, а максимальное разрушающее напряжение анизотропно. В недеформированных многокомпонентных кристаллах устойчивость зависит только от отношения зарядов ионов, образующих решетку, массы ионов на устойчивость не влияют. Внешнее магнитное поле на устойчивость кулоновских кристаллов также не влияет.
- Рассмотрено влияние поляризации электронного фона на максимальную деформацию, которую может выдержать ОЦК решетка.

- Рассчитаны фононные спектры и их моменты различных кулоновских кристаллов.
- Показано, что энергия нулевых колебаний ОЦР и ГЦР решеток минимальна, когда магнитное поле направлено на “ближайшего соседа”, тогда как в ГПУ решетке это направление — на четвертого “ближайшего соседа”.
- Показано, что моменты фононного спектра ОЦК решетки с поляризованным электронным фоном, рассчитанные в приближении Янковичи и Томаса-Ферми, отличаются друг от друга на доли процента. Это отличие может сыграть роль при сравнении полных энергий различных решеток.

Глава 3

Термодинамические функции кулоновских кристаллов

Информация о фоновом спектре позволяет рассчитать фоновый вклад в термодинамику кулоновского кристалла. Например, свободную энергию Гельмгольца F , внутреннюю энергию E и теплоемкость C [121]:

$$\begin{aligned} F &= 3NT \langle \ln(1 - e^{-w}) \rangle, \\ E &= F - T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{\mu, V} = 3NT \left\langle \frac{w}{e^w - 1} \right\rangle, \\ C &= -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_{\mu, V} = 3N \left\langle \frac{w^2}{4 \sinh^2(w/2)} \right\rangle, \end{aligned} \quad (3.1)$$

где $w \equiv \hbar\omega_i(\mathbf{k})/T$, а химический потенциал равен нулю. Здесь так же как и при вычислении моментов $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по всем фоновым модам в первой зоне Бриллюэна.

Исследование термодинамических свойств кулоновских кристаллов несомненно важно для физики вырожденных звезд. Например, фоновая теплоемкость определяет характер и скорость остывания белых карликов и нейтронных звезд (например, [2]), а свободная энергия Гельмгольца — тип кристаллической решетки в их недрах. Об этих и других астрофизических приложениях будет подробнее сказано в главе 4.

3.1 Термодинамические свойства однокомпонентных кулоновских кристаллов

Ранее фоновый вклад в термодинамику однокомпонентных кулоновских кристаллов неоднократно рассматривался (например, [120, 2, 36, 45, 46]). Наиболее точно давление, энтропия и теплоемкость ОЦК и ГЦК решеток была рассчитана в работе [45]. Результаты представляемой работы с ними хорошо согласуются (о ГПУ решетке сказано отдельно). Все приведенные ниже графики построены по оригинальным расчетам.

Зависимость свободной энергии Гельмгольца, внутренней энергии и теплоемкости от температуры для однокомпонентной ОЦК решетки показана на рис. 3.1, где $t \equiv T/T_p$, $T_p \equiv \hbar\omega_p$

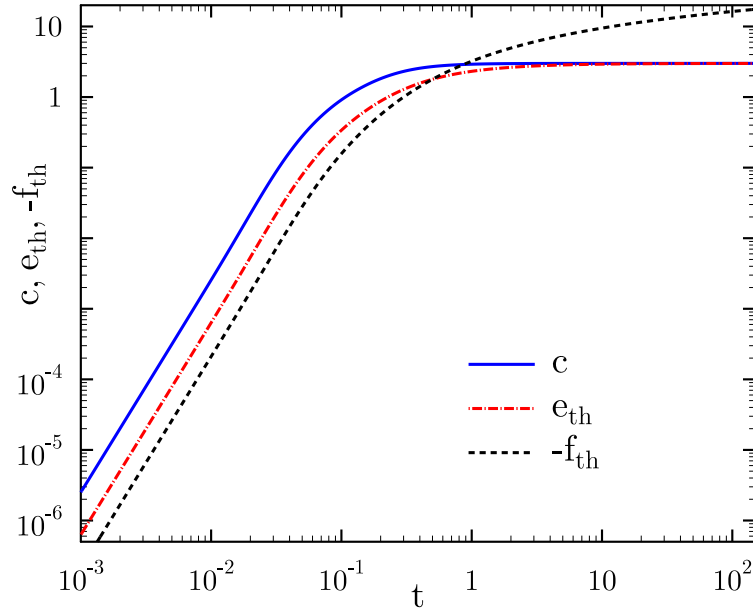


Рис. 3.1: Свободная энергия Гельмгольца, внутренняя энергия и теплоемкость ОЦК решетки.

— плазменная температура, $f_{\text{th}} \equiv F/(NT)$, $e_{\text{th}} \equiv E/(NT)$ и $c \equiv C/N$. На рис. 3.1 хорошо видны известные асимптотики. При высоких температурах $t \gg 1$, когда все моды вносят вклад в термодинамические величины, выполняется закон Дюлонга-Пти: $C \approx 3N$, $E \approx 3NT$ и $F \approx 3NT(u_{\text{ln}} - \ln t) - 1.5N\omega_p u_1$. При низких температурах $t \ll 1$, когда возбуждены и вносят вклад в термодинамику только оптические моды вблизи центра зоны Бриллюэна, имеет место закон Дебая: $C \approx NH_0 (T/T_p)^3$, $E \approx NT H_0 (T/T_p)^3 / 4$ и $F \approx NT H_0 (T/T_p)^3 / 12$, где H_0 константа, не зависящая от температуры. Для ОЦК решетки $H_0 \approx 2512.0$, для ГЦК решетки $H_0 \approx 2744$, для ГПУ решетки $H_0 \approx 2988.2$.

На рис. 3.2 показано отношение свободных энергий, внутренних энергий и теплоемкостей ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток [111]. В квантовом пределе $F_{\text{hcp}}/F_{\text{bcc}} = E_{\text{hcp}}/E_{\text{bcc}} = C_{\text{hcp}}/C_{\text{bcc}} \approx 1.190$ и $F_{\text{hcp}}/F_{\text{fcc}} = E_{\text{hcp}}/E_{\text{fcc}} = C_{\text{hcp}}/C_{\text{fcc}} \approx 1.089$. Из рис. 3.2 видно, что отношение $C_{\text{hcp}}/C_{\text{bcc}}$ становится постоянным гораздо позднее, чем $C_{\text{fcc}}/C_{\text{bcc}}$. Для ОЦК и ГЦК решеток закон Дебая с погрешностью менее полпроцента выполняется уже при $T \approx 9 \times 10^{-3} T_p$, а для ГПУ решетки только при $T \approx 10^{-3} T_p$. Это связано с поведением двух наименьших мод в ГПУ решетке около центра зоны Бриллюэна: они становятся акустическими при заметно меньших ka , чем наименьшие моды в ОЦК и ГЦК решетках (рис. 2.8).

При умеренных температурах все отношения имеют минимум. Минимумы отношений $F_{\text{hcp}}/F_{\text{bcc}}$, $E_{\text{hcp}}/E_{\text{bcc}}$ и $C_{\text{hcp}}/C_{\text{bcc}}$ равные ≈ 0.789 , 0.765 и 0.75 достигаются при $t \approx 0.042$, 0.03 и 0.025 . У отношений термодинамических функций ГПУ и ГЦК решеток минимумы, соответственно, равны 0.912 , 0.904 и 0.9 при $t \approx 0.031$, 0.022 и 0.018 . При высоких температурах все отношения стремятся к 1 в согласии с законом Дюлонга-Пти. За счет логарифмической зависимости от t свободная энергия выходит на высокотемпературный режим позднее, чем энергия и теплоемкость. Для ГПУ решетки асимптотика $F_{\text{hcp}} = 3NT[\ln(1/t) + u_{\text{ln}}] - 1.5N\hbar\omega_p u_1$ выполняется с погрешностью менее, чем полпроцента при $t > 1.43$.

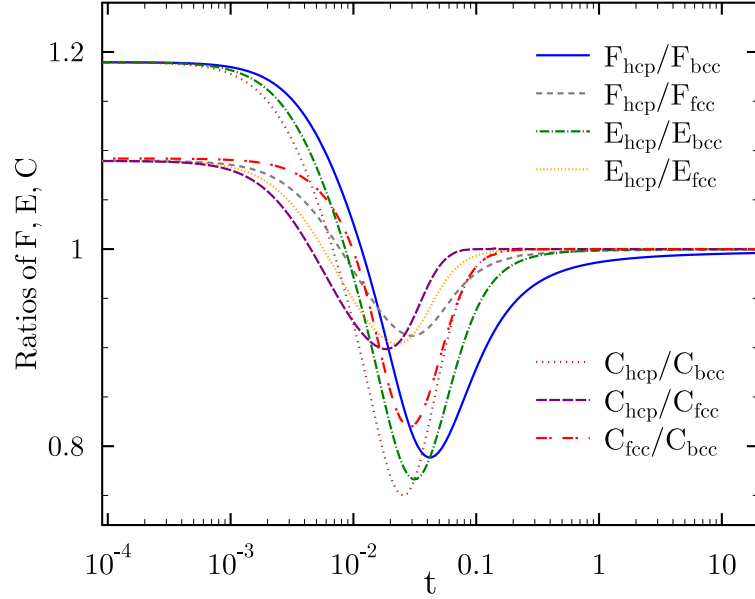


Рис. 3.2: Отношение свободных энергий, внутренних энергий и теплоемкостей ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток.

Ранее наиболее точно термодинамические функции ОЦК и ГЦК решеток были рассчитаны в работе [45] и аппроксимированы в работе [46]. Однако, расчеты для ГПУ решетки в работе [45] оказались не совсем верными, это связано с неправильным вычислением матрицы $W_p^{\mu\lambda}$ (см. параграф 2.2.4) [111]. С результатами, приведенными в таблице 4 работы [45] для ОЦК решетки, расчет, проведенный в представляемой работе, совпадает с хорошей точностью (при некоторых t есть расхождение на единицу в 4 значащей цифре), а для ГПУ решетки — нет: для теплоемкости расхождение превышает 3% при $t \approx 10^{-2}$. Это расхождение существенно: разница между теплоемкостями ОЦК и ГПУ решеток при этой температуре составляет $\sim 8\%$.

Отношения $F_{\text{hcp}}/F_{\text{bcc}}$, $E_{\text{hcp}}/E_{\text{bcc}}$ и $C_{\text{hcp}}/C_{\text{bcc}}$ в представляемой работе были аппроксимированы выражениями:

$$\frac{F_{\text{hcp}}}{F_{\text{bcc}}} = \frac{a_1 + a_2 t^{a_3} + a_4 (1 + a_5 \exp(-a_6 t)) t^{a_7}}{a_8 + a_9 t^{a_{10}} + a_4 (1 + a_{11} \exp(-a_{12} t)) t^{a_7}}, \quad (3.2)$$

$$\frac{E_{\text{hcp}}}{E_{\text{bcc}}} = \frac{b_1 + b_2 t^{b_3} + b_4 (1 + b_5 \exp(-b_6 t)) t^{b_7}}{b_8 + b_9 t^{b_{10}} + b_4 (1 + b_{11} \exp(-b_{12} t)) t^{b_7}}, \quad (3.3)$$

$$\frac{C_{\text{hcp}}}{C_{\text{bcc}}} = \frac{c_1 + c_2 t^{c_3} + c_4 (1 + c_5 \exp(-c_6 t)) t^{c_7}}{c_8 + c_9 t^{c_{10}} + c_4 (1 + c_{11} \exp(-c_{12} t)) t^{c_7}}. \quad (3.4)$$

Параметры аппроксимации a_i , b_i и c_i приведены в таблице 3.1. Относительная погрешность не превосходит 10^{-4} , точность вычислений, по которым проводилась аппроксимация, пять значащих цифр, диапазон температур t от 10^{-5} до 10^3 .

Кроме аппроксимаций из работы [46] в расчетах термодинамических свойств используется основанная на Монте-Карло симуляциях, гармоническая модель Шабрие [36]. Она не привязана к конкретному типу кристаллической решетки и предполагает, что спектр куло-

i	a_i	b_i	c_i
1	0.00011896	1.1896×10^{-6}	1.1896×10^{-6}
2	-0.25073	0.0013725	0.003519
3	2.946	1.471	1.5812
4	34.409	0.71255	1575
5	3.1134	-3.17712	-0.085359
6	87.731	38.823	22.897
7	3.1488	3.2672	5.0573
8	0.0001	10^{-6}	10^{-6}
9	0.20664	0.00224	0.0053389
10	1.8819	1.5457	1.6404
11	0.10895	-3.233	1.5672
12	19.352	43.925	53.545

Таблица 3.1: Параметры аппроксимации a_i , b_i и c_i .

новского кристалла состоит из трех мод¹: двух акустических $\omega_{\perp} = p_1 \omega_p k/k_D$ и одной оптической $\omega_{\parallel} = p_2 \omega_p$, где $k_D = (6\pi^2 n)^{1/3}$ — волновое число Дебая, константа $p_1 = \sqrt{2/u_{-2}} \approx 0.4$ следует из классического предела критерия Линдемана, а константа $p_2 \approx 0.9$ (в работе [36] она определялась из правила сумм Кона, в дальнейшем [44] из u_{-1} и u_{-2}). Тогда:

$$f_{\text{th}} = 2 \ln \left(1 - \exp \left(-\frac{p_1}{t} \right) \right) + \ln \left(1 - \exp \left(-\frac{p_2}{t} \right) \right) - \frac{2}{3} D_3 \left(-\frac{p_1}{t} \right), \quad (3.5)$$

$$D_3(z) \equiv \frac{3}{z^3} \int_0^z \frac{t^3}{e^t - 1} dt,$$

где $D_3(z)$ — функция Дебая. Отношение теплоемкости, вычисленной по этой модели (C_{fit}), к теплоемкости ОЦК решетки (C_{bcc}) показано на рис. 3.3 сплошной черной кривой. Видно, что отношение изменяется от 0.86 до 1.12 и имеет тот же порядок, что и разница между различными решетками, которая также показана на рис. 3.3. При низких температурах $C_{\text{fit}}/C_{\text{bcc}} \approx 0.977$. В целом следует отметить, что модель Шабрие при своей простоте (всего два параметра без учета необходимости аппроксимировать функцию Дебая) сносно описывает термодинамические свойства кулоновских кристаллов.

Как и моменты, термодинамические функции кулоновских кристаллов можно рассчитать используя плотность фононных состояний. Например, теплоемкость равна:

$$C = 3N \int_0^{\infty} dx \nu(x) \varphi(x, t) = 3N \int_0^{\infty} dx \nu(x) \frac{x^2 \exp(x/t)}{t^2 [\exp(x/t) - 1]^2}. \quad (3.6)$$

При низких температурах в интеграл вносят вклад только малые $x \sim T/T_p$. Для ОЦК решетки при $\omega/\omega_p \ll 1$ $\nu(x) \approx 32.3x^2$, тогда, подставляя это приближенное выражение в (3.6) и интегрируя, получим: $C \approx 3N \times 32.3 \times 4 \times (2\pi)^4 t^3 / 240 = 2517Nt^3$, что согласуется с точным значением $H_0 = 2512$.

¹Модель Шабрие схожа с моделью Мочковича-Хасена [120], однако, необходимые константы p_1 и p_2 в работе [120] не были определены.

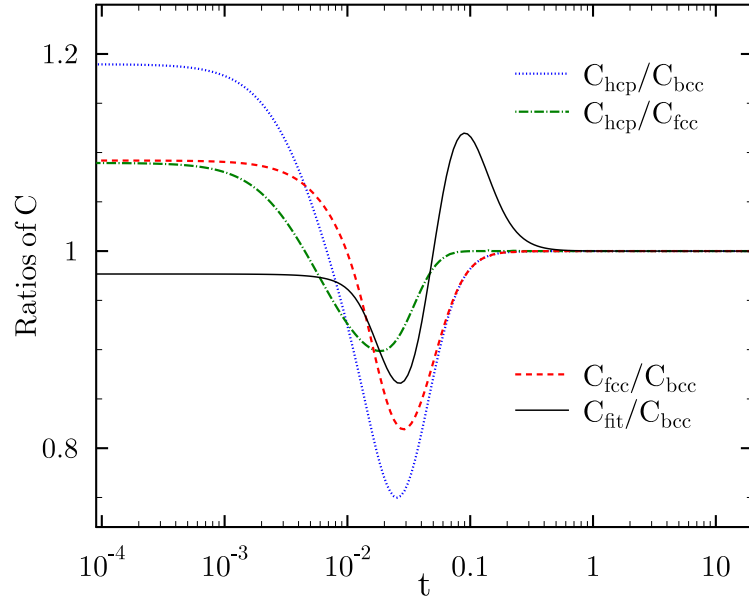


Рис. 3.3: Отношение теплоемкости, вычисленной по модели Шабрие, к теплоемкости ОЦК решетки и отношение теплоемкостей ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток.

Кроме ионов в теплоемкость вносят вклад и электроны. Теплоемкость электронов равна [121]

$$C_{\text{el}} = N \frac{\pi^2 Z k_B T}{m_e c^2} \frac{\sqrt{1+x^2}}{x^2}, \quad (3.7)$$

где $x = p_F/(m_e c^2)$, $p_F = \hbar(3\pi^2 n_e)^{1/3}$ — импульс Ферми, постоянная Больцмана k_B указана явно. Различные вклады в теплоемкость для ОЦК решетки для ионов ^{12}C (справа) и ^{56}Fe (слева) изображены на рис. 3.4. Черными точками показаны точки плавления кристалла, когда $\Gamma = \Gamma_m$ (слева точка плавления при $T = 10^6$ лежит вне рисунка), при меньших давлениях для ^{56}Fe и при больших температурах для ^{12}C кристалла нет. Рис. 3.4 свидетельствует о том, что фоновая теплоемкость доминирует в широком диапазоне плотностей и температур, превышая электронную на несколько порядков. При фиксированной плотности электронный вклад существенен при низких температурах, когда фоновая теплоемкость выходит на квантовый режим. В отличие от теплоемкости электронное давление существенно больше ионного, как электростатического (1.14), так и фоновонного (см. например, [121, 122]).

3.1.1 Теплоемкость ОЦР и ГЦР решеток

Отдельно выделим термодинамические свойства деформированных ОЦК и ГЦК решеток. Как и фоновый спектр, термодинамические свойства таких решеток могут существенно зависеть от параметров деформации. Так теплоемкость ОЦР и ГЦР решеток зависит от t , c_1 и c_2 . На рис. 3.5 показано отношение теплоемкостей ОЦР и ГЦР решеток к теплоемкостям ОЦК и ГЦК решеток, соответственно, при разных c_1 и c_2 . В ОЦР решетке с $c_1 = 1.125$ и $c_2 = 1.45$ даже при $t = 10^{-3}$ еще не выполняется закон Дебая. Это связано с тем, что такая решетка близка к границе неустойчивости и ее наименьшая мода при малых ka быстро перестает

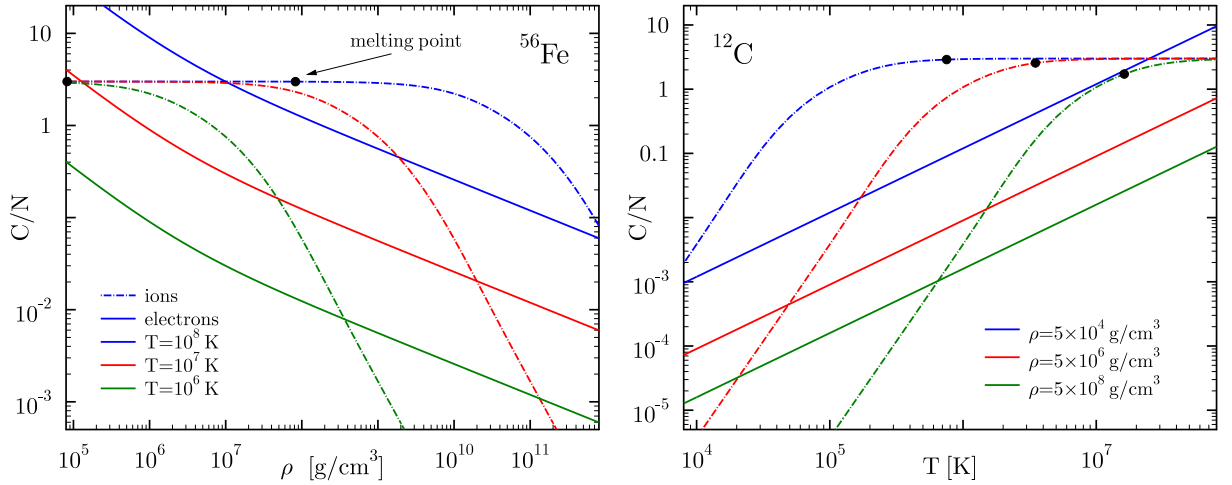


Рис. 3.4: Различные вклады в теплоемкость для ОЦК решетки при различных температурах и плотностях.

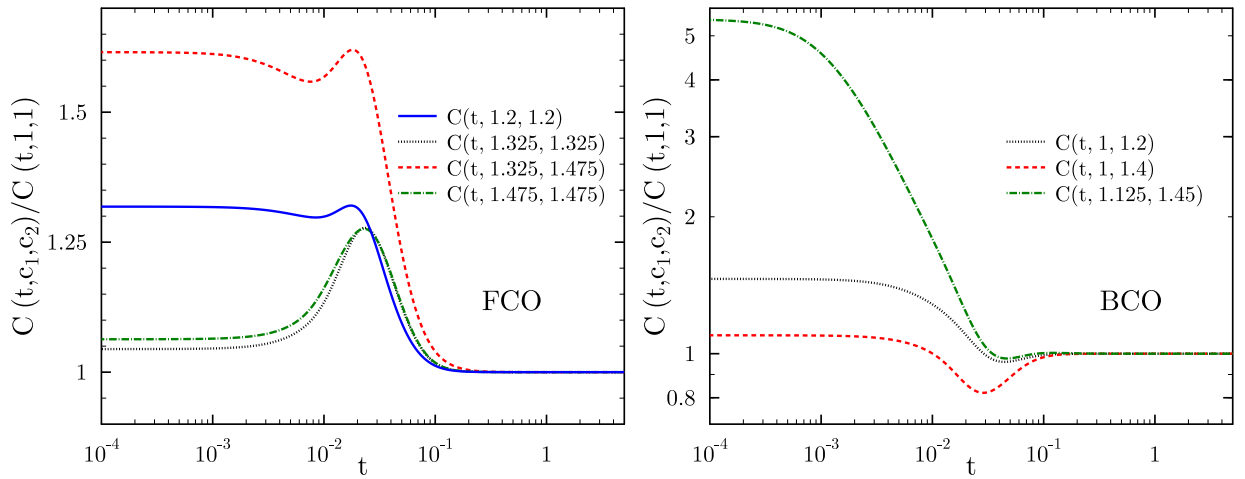


Рис. 3.5: Теплоемкость ГЦР (слева) и ОЦР (справа) решеток.

быть линейной, как показано на рис. 2.34. В других случаях закон Дебая выполняется, но рассматриваемые отношения теплоемкостей при низких температурах превосходят 1.5. Это может сказаться на эволюции нейтронных звезд, например, привести к изменению скорости их остывания.

3.2 Термодинамические свойства бинарных кулоновских кристаллов

В этом параграфе исследуем термодинамические свойства бинарных кулоновских ПК2 и Г2 решеток, следуя работе [93]. Эти исследования прежде всего важны для изучения белых карликов, недра которых состоят из углеродно-кислородной смеси.

Кроме температуры термодинамические функции ПК2 и Г2 решеток зависят от α и β . При высоких температурах ($T > T_s \equiv \hbar\omega_s$) $C \approx 3N$ и $F_{\text{bin}} = 3NT[\ln(T_s/T) + u_{\text{ln}}(\alpha, \beta)] -$

$1.5N\hbar\omega_s u_1(\alpha, \beta)$. При низких температурах $C = H(\alpha, \beta)N(T/T_s)^3$, где параметр $H(\alpha, \beta)$ зависит от α и β .

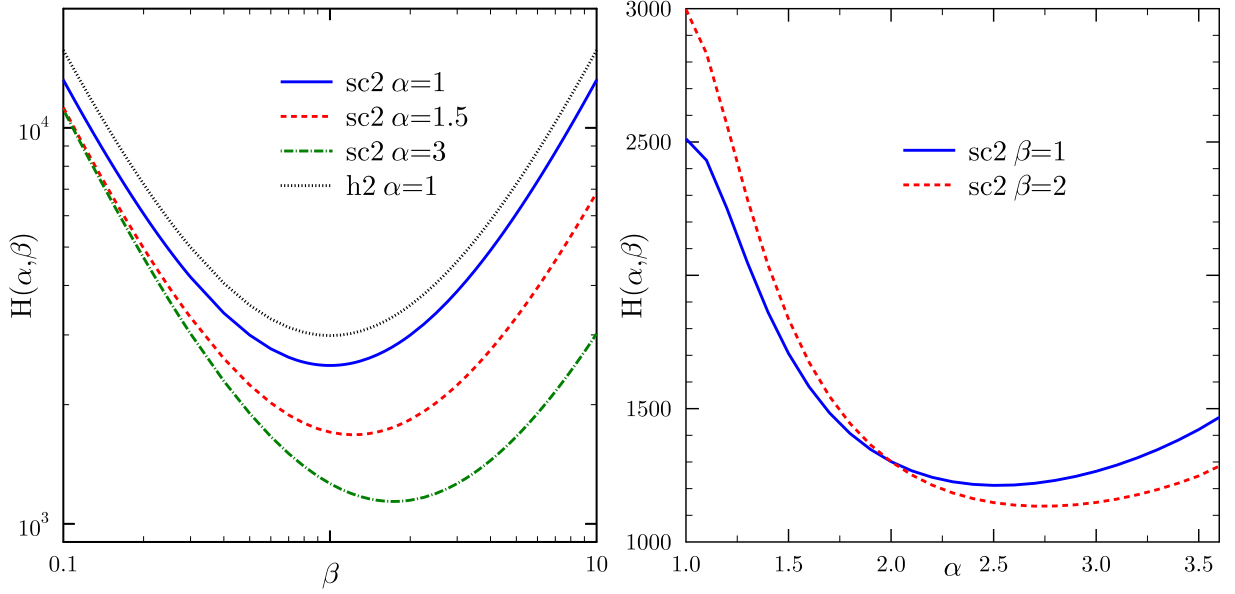


Рис. 3.6: Зависимость коэффициента $H(\alpha, \beta)$ от α и β для ПК2 и Г2 решеток.

Зависимость $H(\alpha, \beta)$ от α и β для ПК2 и Г2 решеток показана на рис. 3.6. При $\alpha = 1$ $H(1, \beta) = H(1, 1/\beta)$. При фиксированном β $H(\alpha, \beta)$ имеет минимум при $\alpha = \beta^2$. Также $H(\alpha, \beta) = H(\alpha, \alpha/\beta)$. Рост $H(\alpha, \beta)$ при больших и малых β объясняется тем, что величина $H/T_s^3 \propto \nu^{-3}$, где ν — средняя фазовая скорость наиболее низкой акустической моды, $\nu \propto M_{\max}^{-1/2}$, а $T_s \propto M_{\min}^{-1/2}$ (при $\alpha \sim 1$), где M_{\max} — масса иона с большей массой, аналогично, M_{\min} — масса иона с меньшей массой. В итоге $H(\alpha, \beta)$ ведет себя как $(M_{\max}/M_{\min})^{3/2}$, то есть как $\beta^{-3/2}$ при $\beta \ll 1$ и как $\beta^{3/2}$ при $\beta \gg 1$ ($H(\alpha, \beta)/T_s^3 \propto (1+\beta)^{3/2}$). Причем зависимость $H(\alpha, \beta)$ от β имеет универсальный характер и от типа решетки не зависит.

Функция $H(\alpha, \beta)$ может быть аппроксимирована с точностью $\sim 0.2\%$ следующим выражением:

$$H(\alpha, \beta) = H_0 \frac{a_0 + a_1\alpha + a_2\alpha^2 + a_3\alpha^3}{16\sqrt{2}\alpha^{2.5}(1 + b_1\alpha + b_2\alpha^2 + b_3\alpha^3)} (1 + \beta)^{3/2} (1 + \alpha)^{3/2} \left(1 + \frac{\alpha}{\beta}\right)^{3/2}, \quad (3.8)$$

где значения a_i и b_i приведены в таблице 3.2, $H(1, 1) = H_0$.

	i	0	1	2	3
ПК2 решетка	a_i	0.1236	-0.22915	0.2297	0.03881
	b_i		-2.024	1.354	-0.1671
Г2 решетка	a_i	0.0610816	0.236187	-0.0393898	-0.0357678
	b_i		-1.78839	1.41519	-0.404688

Таблица 3.2: Параметры аппроксимации a_i и b_i .

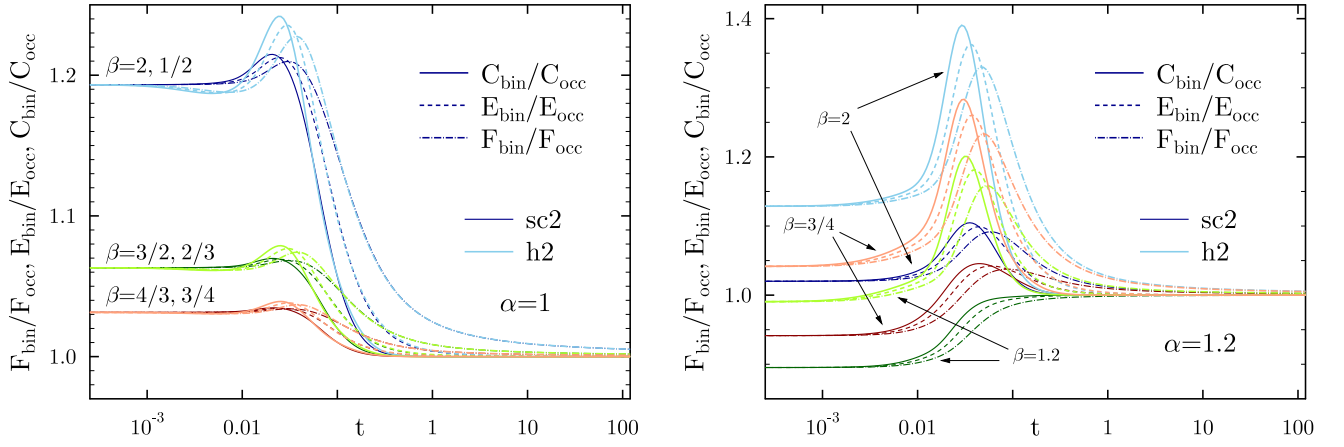


Рис. 3.7: Отношения термодинамических величин бинарных кристаллов (ПК2 и Г2) к однокомпонентным (ОЦК и ГПУ) для разных α и β .

На рис. 3.7 показана зависимость $F_{\text{bin}}(t)/F_{\text{occ}}(t)$, $E_{\text{bin}}(t)/E_{\text{occ}}(t)$ и $C_{\text{bin}}(t)/C_{\text{occ}}(t)$ от t , где $F_{\text{bin}}(t)$, $E_{\text{bin}}(t)$ и $C_{\text{bin}}(t)$ — свободная энергия, энергия и теплоемкость бинарного кристалла (ПК2 и Г2), а $F_{\text{occ}}(t)$, $E_{\text{occ}}(t)$ и $C_{\text{occ}}(t)$ — свободная энергия, энергия и теплоемкость однокомпонентного кристалла (ОЦК и ГПУ, соответственно). Отношения для обеих решеток показаны при одинаковом значении t , а не температуре. Для однокомпонентных кристаллов $t = T/T_p$, а для бинарных $t = T/T_s$, эти величины отличаются друг от друга в $\sqrt{0.25(1+\alpha)(1+\alpha/\beta)}$ раз, если предположить, что однокомпонентный кристалл состоит из ионов с зарядом Z_1 и массой M_1 , а бинарный из ионов с Z_1, M_1 и Z_2, M_2 .

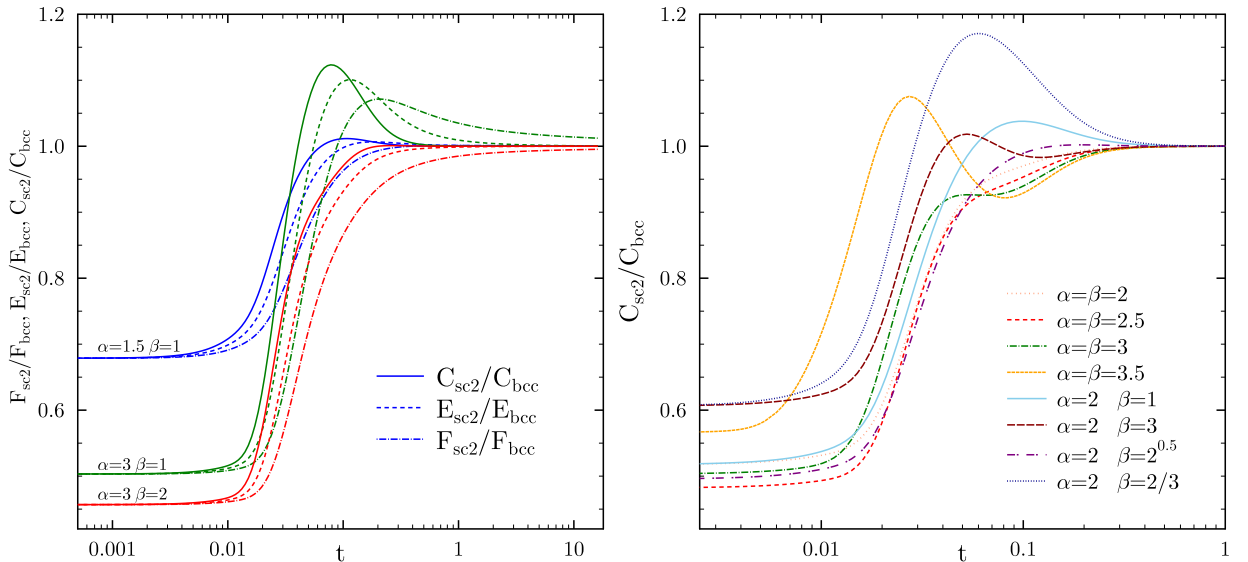


Рис. 3.8: Отношения термодинамических величин ПК2 решетки к термодинамическим величинам ОЦК решетки для разных α и β .

При $\alpha = 1$ (левая часть рис. 3.7) обе решетки имеют схожее поведение. При низких температурах и фиксированном β все отношения термодинамических функций стремятся к константе большей 1, что можно объяснить смягчением акустических мод вблизи центра

зоны Бриллюэна. Уже при $\alpha = 1.2$ различия между решетками существенны. Наибольшие изменения теплоемкость (как и другие термодинамические функции) претерпевает при $t \sim 0.01 - 0.1$. Как видно из правой части рис. 3.7 в Г2 решетке при этих t разница может существенно превышать изменения при низких температурах. Это можно объяснить сильным уменьшением частот фононных мод вблизи точки Н зоны Бриллюэна, в которой начинается “плавление” решетки (см. рис. 2.23).

При $\alpha > 1.25$ Г2 решетка становится неустойчивой, но ПК2 решетка устойчива при $\alpha < 3.6$. Зависимости отношений $F_{\text{sc2}}(t)/F_{\text{bcc}}(t)$, $E_{\text{sc2}}(t)/E_{\text{bcc}}(t)$ и $C_{\text{sc2}}(t)/C_{\text{bcc}}(t)$ от t при $\alpha > 1.5$ показаны на рис. 3.8. С увеличением α скорость звука увеличивается в некоторых направлениях волнового вектора и уменьшается в некоторых других² (см. рис. 2.15), в итоге это приводит к уменьшению термодинамических функций смесей в квантовом пределе. При $\alpha = 3.5$ ПК2 решетка близка к границе неустойчивости, поэтому закон Дебая для смеси с $\alpha = \beta = 3.5$ выполняется при более низких температурах, чем для ОЦК решетки (по аналогии с ОЦР решеткой, см. рис. 2.16). Для некоторых комбинаций параметров (в первую очередь $\alpha = 2$, $\beta = 3$ и $\alpha = 3.5$, $\beta = 3.5$) при промежуточных t наблюдается “структура с горбом”. Это связано с постепенно возникающим разрывом между верхними и нижними модами с увеличением β , так уже при $\beta = 10$ плотность фононных состояний равна 0 при $\omega \approx 0.4\omega_s$ (см. рис. 2.20). При дальнейшем увеличении β (или уменьшении) верхние три моды спектра $\sim \omega_s$, а нижние три уменьшаются $\propto \sqrt{\beta}$ (рис. 2.19). Из-за этой особенности зависимость теплоемкости от температуры имеет горизонтальный участок при $C/N = 1.5$. Подобное происходит при температурах, когда все нижние моды полностью возбуждены, а верхние все еще экспоненциально подавлены и вклад в теплоемкость не вносят. На рис. 3.9 синей сплошной показана зависимость полной теплоемкости ПК2 решетки с $\alpha = 1$ и $\beta = 10^5$ от температуры, а красной пунктирной — вклад только трех нижних мод.

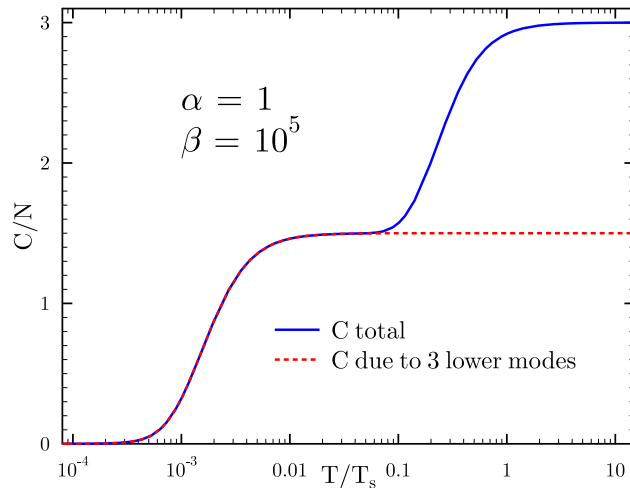


Рис. 3.9: Теплоемкость ПК2 решетки при $\alpha = 1$ и $\beta = 10^5$.

²Без учета выбранной нормировки фононного спектра.

3.3 Точность выполнения правила линейного смешивания для теплоемкости ПК2 решетки

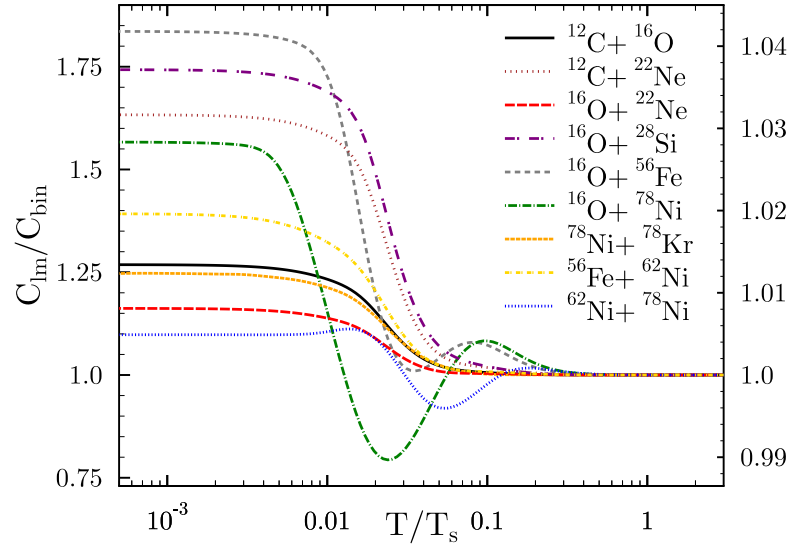


Рис. 3.10: Зависимость C_{lm}/C_{bin} от T/T_s для некоторых смесей.

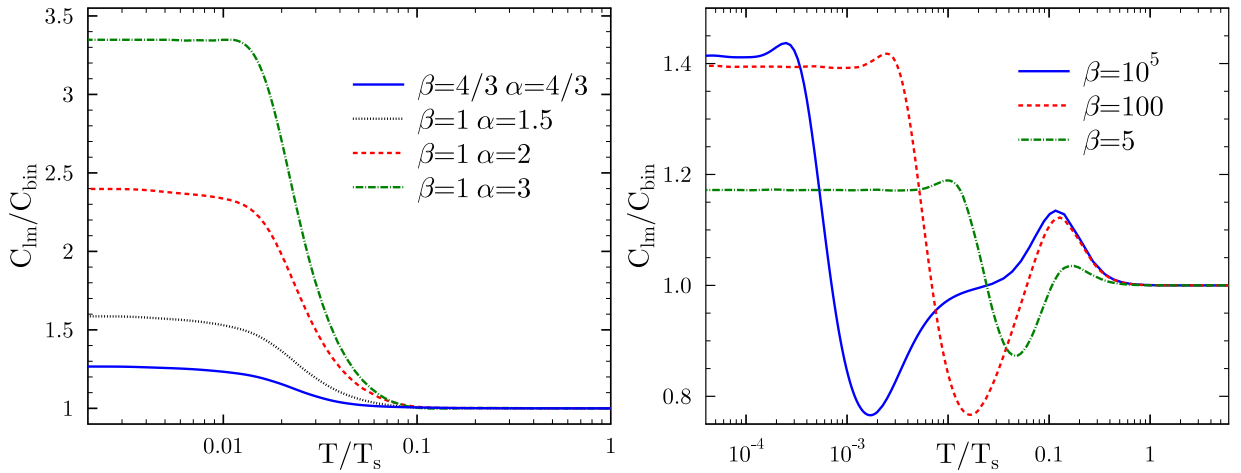


Рис. 3.11: Зависимость C_{lm}/C_{bin} от T/T_s для различных α и β .

Аналогично энергии Маделунга можно исследовать выполнение правила линейного смешивания и для термодинамических функций, например, для фоновой теплоемкости [93]. Согласно ему теплоемкость бинарного кристалла $C_{lm} = N_1 C_1(Z_1, M_1) + N_2 C_2(Z_2, M_2)$, где $C_i(Z_i, M_i)$ — теплоемкость однокомпонентного кристалла, состоящего из ионов i -ого типа при той же температуре и концентрации электронов, что и в смеси, N_1 и N_2 — число ионов первого и второго сорта (для ПК2 решетки $N_1 = N_2 = N/2$). Полученные результаты демонстрируют значительное отклонение поведения теплоемкости смеси от правила линейного смешивания в квантовом режиме для ПК2 решетки. Например, отношение C_{lm}/C_{bin} для углеродно-кислородной смеси ($^{12}\text{C}+^{16}\text{O}$) изменяется в пределах от 1 при $T/T_s \sim 1$ до 1.268

при $T/T_s \ll 1$ (рис. 3.10), а для кислородно-железной смеси ($^{16}\text{O} + ^{56}\text{Fe}$) — от 1 до 1.836, где C_{bin} — теплоемкость кристалла, рассчитанная по формуле (3.1).

На рис. 3.10 приведены зависимости $C_{\text{lm}}/C_{\text{bin}}$ от T/T_s для разных смесей. Для смесей $^{62}\text{Ni} + ^{78}\text{Ni}$ и $^{56}\text{Fe} + ^{62}\text{Ni}$ шкала изменений по оси ординат приведена справа, для остальных — слева. Смесью, образованная изобарами (ядрам с одинаковым M , но разным Z), имеет большее отклонение от правила линейного смешивания, чем смесь, образованная изотопами. Так, при $\alpha = 2$ и $\beta = 1$ отклонение от правила линейного смешивания при низких температурах достигает 2.4, тогда как при $\alpha = 1$ и $\beta = 2$ оно равно 1.015, а при $\alpha = 1$ и $\beta = 10^5$ — 1.41 (рис. 3.11).

На рис. 3.11 показана зависимость отношений $C_{\text{lm}}/C_{\text{bin}}$ от T/T_s для различных α и β без привязки к конкретным элементам. При низких температурах:

$$\frac{C_{\text{lm}}}{C_{\text{bin}}} = \frac{H_0}{H(\alpha, \beta)} \left[\frac{1}{2^{5/2}} \left(1 + \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} \right) \left(1 + \frac{\alpha}{\beta} \right)^{3/2} \right]. \quad (3.9)$$

Выражение в квадратных скобках больше 1. Как видно из рис. 3.10 и 3.11, при низких температурах отклонения от правила линейного смешивания имеют тот же порядок, что и разница между бинарным и однокомпонентным кристаллом с Z_1 и M_1 , по этому при описании бинарных кулоновских кристаллов оказывается ничуть не лучше пользоваться приближением однокомпонентного кристалла с усредненными Z и M .

Зависимость отношения $C_{\text{lm}}/C_{\text{bin}}$ от $\tau \equiv T/T_s$ для кулоновских кристаллов, состоящих из смесей $^{12}\text{C} + ^{16}\text{O}$ и $^{16}\text{O} + ^{56}\text{Fe}$, можно аппроксимировать следующим выражением:

$$\frac{C_{\text{lm}}}{C_{\text{bin}}} = \frac{a_1 + a_2\tau^{a_3} + a_4(1 + a_5 \exp(-a_6\tau))\tau^{a_7}}{b_1 + b_2\tau^{b_3} + a_4(1 + b_5 \exp(-b_6\tau))\tau^{a_7}} \quad (3.10)$$

где значения a_i и b_i приведены в таблице 3.3. Для CO смеси погрешность не превышает 0.02%, для FeO смеси — 0.05%.

		1	2	3	4	5	6	7
$^{12}\text{C} + ^{16}\text{O}$	a_i	1.26846(-8)	3.53925(-5)	2.25456	1.71012	0.0281624	15.446	4.716431
	b_i	1(-8)	3.41556(-5)	2.21453		-0.745541	84.113	
$^{16}\text{O} + ^{56}\text{Fe}$	a_i	1.83604(-8)	6.22269(-3)	3.05857	48.1182	0.324548	15.9364	5.474
	b_i	1(-8)	4.4697(-4)	2.64216		2.78318	49.745	

Таблица 3.3: Параметры аппроксимации a_i и b_i смесей $^{12}\text{C} + ^{16}\text{O}$ и $^{16}\text{O} + ^{56}\text{Fe}$ (в скобках даны степени 10).

Уместно сравнить, насколько важна поправка к правилу линейного смешивания по отношению к полной теплоемкости. На рис. 3.12 для углеродно-кислородного кристалла показаны отношение $C_{\text{lm}}/C_{\text{bin}}$, (сплошная синяя кривая) и отношения электронной теплоемкости C_{el} к C_{bin} при разных плотностях (электронная теплоемкость рассчитывалась по формуле (3.7) с усредненными Z и A). Отношения C_{el} к C_{bin} пропорциональны T^2 и на выбранном масштабе представляют собой почти вертикальные линии. Как видно из рис. 3.12, для CO смеси

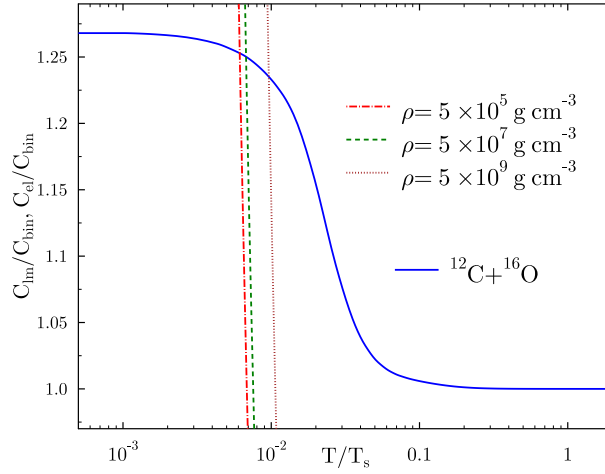


Рис. 3.12: Зависимость $C_{\text{lm}}/C_{\text{bin}}$ и $C_{\text{el}}/C_{\text{bin}}$ от T/T_s для углеродно-кислородного бинарного кристалла.

Фононная теплоемкость вносит вклад в полную теплоемкость при $T \gtrsim 5 \times 10^{-3} T_s$ (граница от плотности существенно не зависит), то есть поправка к правилу линейного смешивания существенна, но только в небольшом диапазоне температур от $0.01 T_s$ до $0.1 T_s$ (для других бинарных кристаллов ситуация аналогична). Тем не менее этот температурный диапазон принципиально важен, так как именно в нем находятся остывающие кристаллизовавшиеся белые карлики.

3.4 Термодинамические свойства однокомпонентных кулоновских кристаллов во внешнем магнитном поле

Как и энергия нулевых колебаний, термодинамические функции кулоновских кристаллов во внешнем магнитном поле зависят от величины магнитного поля B , а также от его направления относительно кристаллографических осей \mathbf{n} . Сами функции, зная фононный спектр, можно рассчитать используя те же формулы (3.1), что и раньше. Ограничимся рассмотрением только однокомпонентных кулоновских кристаллов. Термодинамические свойства ОЦК решетки в магнитном поле более чем детально были исследованы в работах [45, 116, 117], поэтому подробно остановимся на ГПУ решетке [118].

На рис. 3.13 показан график зависимости свободной энергии Гельмгольца ГПУ решетки от t при разных h . Магнитное поле направлено так, что энергия нулевых колебаний минимальна. Согласно теореме Бора - ван Левена в классическом пределе термодинамические величины не зависят от магнитного поля. В полном согласии с этим при $T \gg T_p \sqrt{1 + h^2}$ все кривые на рис. 3.13 стремятся к одному пределу: $F \approx 3NT(u_{\text{ln}} - \ln t)$ ³. С увеличением h наибольшая частота растет пропорционально $\sqrt{1 + h^2}$, следовательно, растет и температура, при которой достигается классический предел.

³Раньше использовалась асимптотика $F \approx 3NT(u_{\text{ln}} - \ln t) - 1.5N\hbar\omega_p u_1(h, \mathbf{n})$, но при высоких t достаточно ограничиться лишь членами старшего порядка разложения.

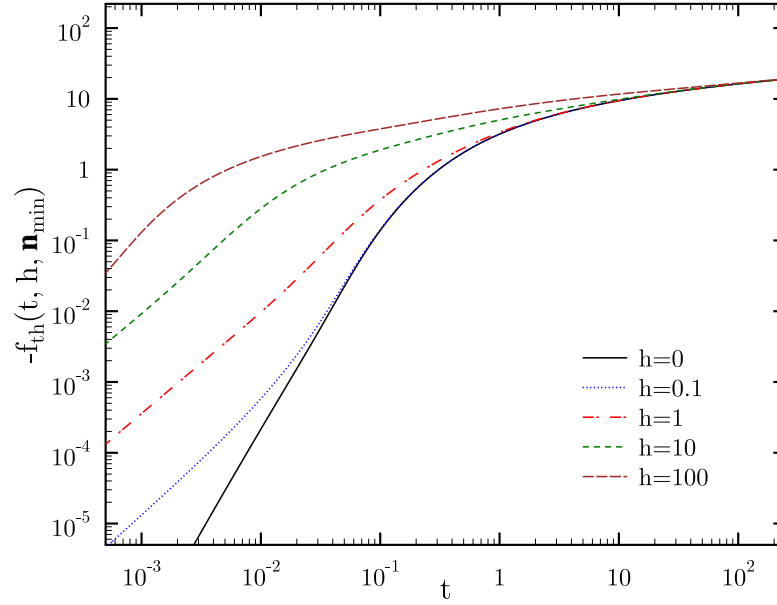


Рис. 3.13: Свободная энергия Гельмгольца и энергия нулевых колебаний ГПУ решетки в магнитном поле.

При больших магнитных полях $h \gg 1$ частоты в ОЦК кристалле отличаются друг от друга на порядки и моды возбуждаются постепенно, это приводит к появлению плато на зависимости теплоемкости от температуры: $C/N = 1$, когда во всей зоне Бриллюэна полностью возбуждена только наименьшая мода, и $C/N = 2$, когда полностью возбужденных мод две [45]. Аналогичная картина наблюдается в ГПУ решетке при $h \gtrsim 10$, так как в ней моды группируются парами (рис. 3.14). Несмотря на то, что одна из наименьших мод оптическая Ω_2 , а другая $\Omega_1 \propto k^2$ (при $\mathbf{k}\mathbf{n} \neq 0$, вклад при $\mathbf{k}\mathbf{n} = 0$ пренебрежимо мал) “полного” возбуждения они достигают при схожих температурах, и плато при $C/N = 0.5$ не образуется. Частота Ω_2 “насыщает” термодинамику очень быстро, за счет этого на графике теплоемкости при $t \sim 10^{-3}$ и $h = 100$ наблюдается укрупнение.

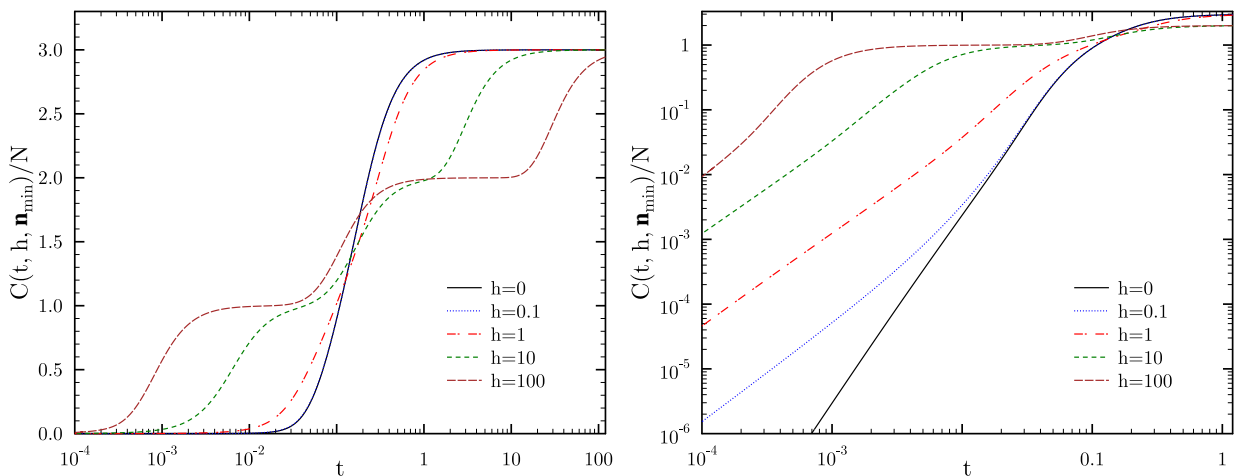


Рис. 3.14: Теплоемкость ГПУ решетки в магнитном поле в log-линейном (левая часть) и log – log (правая часть) масштабе.

При низких температурах термодинамические свойства определяются поведением наименьшей моды вблизи центра зоны Бриллюэна, которая пропорциональна k^2 . Следовательно, при $T \ll T_p/\sqrt{1+h^2}$ $F \propto T^{5/2}$ и $C \propto T^{3/2}$ (рис. 3.14). При больших магнитных полях $\Omega_1 \propto 1/B$, а значит $f_{\text{th}} \propto (BT)^{3/2}$ и $C \propto (BT)^{3/2}$. Это видно на рис. 3.15А, где показано отношение свободных энергий Гельмгольца для ОЦК решетки при разных направлениях магнитного поля. При низких температурах кривые на рис. 3.15А при $h = 10$ и $h = 100$ отличаются друг от друга только сдвигом в 10 раз по температуре. В отличие от ОЦК решетки в ГПУ решетке есть оптическая мода, которая при $h \gg 1$ тоже убывает пропорционально $1/B$, и поэтому низкотемпературный предел достигается при более низких температурах. Это можно заметить из рис. 3.15А и В, если отношение $f_{\text{th}}^{\text{bcc}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}})/f_{\text{th}}^{\text{bcc}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{min}})$ при $h = 1$ достигает низкотемпературного предела при $t = 10^{-3}$, то отношение $f_{\text{th}}^{\text{hcp}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}})/f_{\text{th}}^{\text{bcc}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}})$ при тех же h и t еще нет.

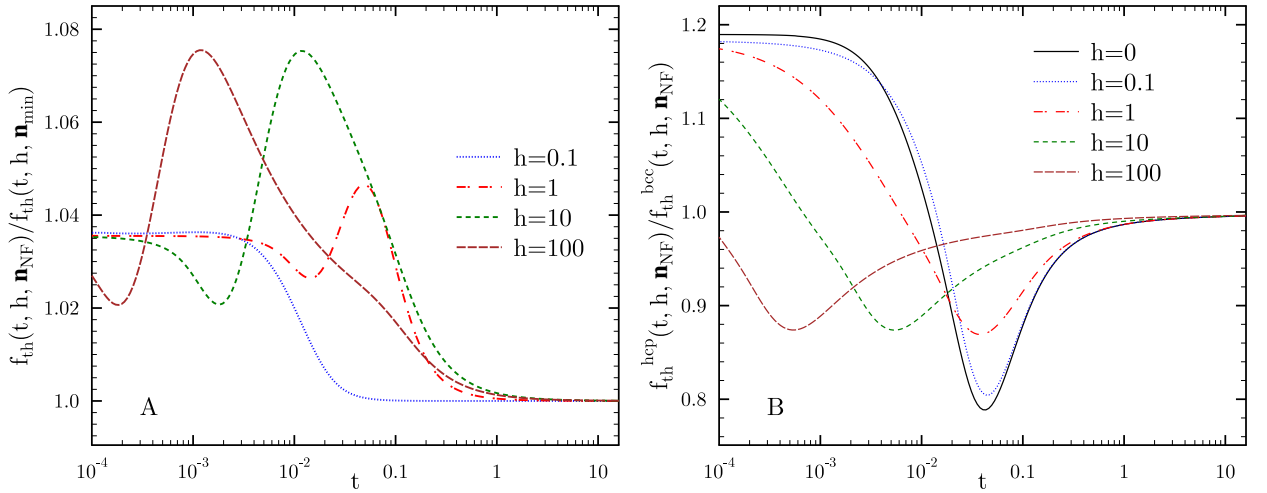


Рис. 3.15: А. Отношение свободных энергий Гельмгольца для ОЦК решетки при разных направлениях магнитного поля. В. Отношение свободных энергий Гельмгольца для ОЦК и ГПУ решеток.

Как уже было сказано, на рис. 3.15А показано отношение свободных энергий Гельмгольца для ОЦК решетки при разных направлениях магнитного поля: \mathbf{n}_{NF} и \mathbf{n}_{min} (обозначения те же, что и в гл. 2). Отношение $f_{\text{th}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}})/f_{\text{th}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{min}})$ всегда больше 1, а при низких температурах равно 1.036 при любом h . При $h = 10$ это отношение достигает максимума, равного 1.075 при $t \approx 0.012$, при $h = 100$ это же максимальное значение достигается при $t \approx 0.0012$. Таким образом при изменении направлении магнитного поля термодинамические функции изменяются, но это изменение не превышает 10%.

График зависимости $f_{\text{th}}^{\text{hcp}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}})/f_{\text{th}}^{\text{bcc}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}})$ от t при разных h изображен на рис. 3.15В. При $T \gg T_p/\sqrt{1+h^2}$ отношение $f_{\text{th}}^{\text{hcp}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}})/f_{\text{th}}^{\text{bcc}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}}) \approx (u_{\text{ln}}^{\text{hcp}} - \ln t)/(u_{\text{ln}}^{\text{bcc}} - \ln t)$. Следовательно при высоких температурах это отношение всегда меньше 1 и не зависит от h . Только при $T \lesssim T_p/\sqrt{1+h^2}$ $f_{\text{th}}^{\text{hcp}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}}) < f_{\text{th}}^{\text{bcc}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}})$. Причем с ростом h разница между $f_{\text{th}}^{\text{hcp}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}})$ и $f_{\text{th}}^{\text{bcc}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}})$ только уменьшается: отношение этих свободных энергий всегда лежит в пределах от 0.789 до 1.19. Для других направлений магнитного поля, например, для

$\mathbf{n} = \mathbf{n}_{\min}$, картина аналогичная: масштаб отличий термодинамических функций различных решеток в магнитном поле такой же, что и без поля.

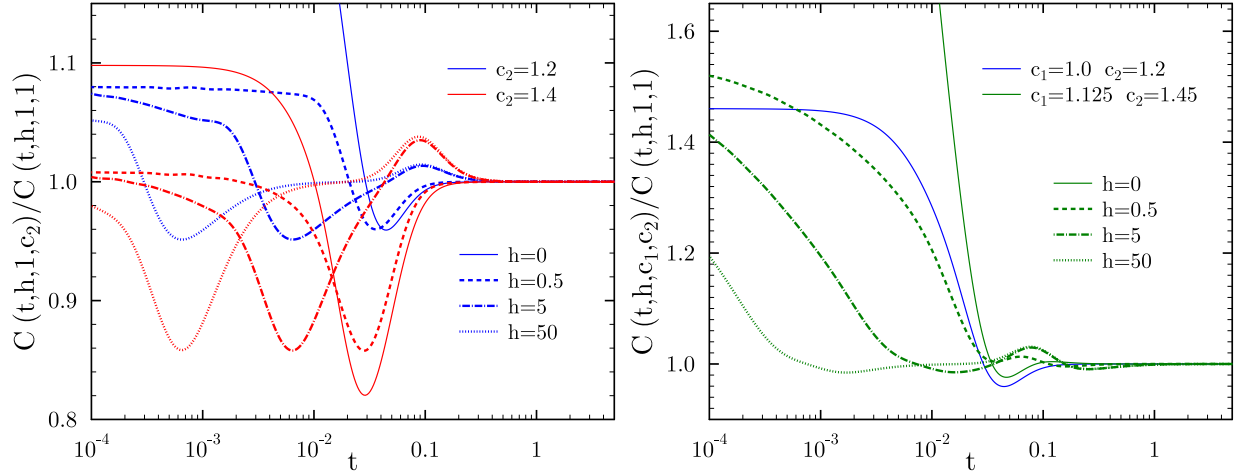


Рис. 3.16: Теплоемкость ОЦР решетки в магнитном поле.

Поведение теплоемкости деформированных решеток в магнитном поле исследовано достаточно поверхностно. Так поведение теплоемкости ОЦР решетки в магнитном поле, показано на рис. 3.16, где изображена зависимость отношения $C(t, h, c_1, c_2)/C(t, h, 1, 1)$ для трех пар c_1 и c_2 : $c_1 = 1.0, c_2 = 1.2$; $c_1 = 1.0, c_2 = 1.4$ и $c_1 = 1.125, c_2 = 1.45$. Магнитное поле направлено вдоль оси OX (вдоль той стороны параллелепипеда элементарной ячейки, длина которой остается равной a_1). В общем, отношение теплоемкостей ОЦР решетки имеет те же особенности, что и $f_{\text{th}}^{\text{hcp}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}})/f_{\text{th}}^{\text{bcc}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{NF}})$. При высоких температурах $C(t, h, c_1, c_2)/C(t, h, 1, 1) \approx 1$, а при низких температурах и $h \gg 1$ $C(t, h, c_1, c_2)/C(t, h, 1, 1)$ зависит от произведения ht , а не от h и t по отдельности.

3.5 Термодинамические свойства однокомпонентных кулоновских кристаллов с поляризованным электронным фоном

3.5.1 Термодинамические свойства кулоновских кристаллов с поляризованным электронным фоном в отсутствие магнитного поля

Рассмотрим влияние поляризации электронного фона на термодинамические свойства однокомпонентных кристаллов. Ограничимся рассмотрением приближения Томаса-Ферми. В этом приближении подробное исследование для ОЦК решетки было проведено в работе [50], другие решетки ранее не рассматривались.

Для ОЦК решетки на рис. 3.17 показана зависимость $C(t, \kappa_{\text{TF}}a)/C(t, 0) - 1$ от температуры при разных $\kappa_{\text{TF}}a$, где $C(t, 0)$ — теплоемкость ОЦК решетки с жестким электронным фоном.

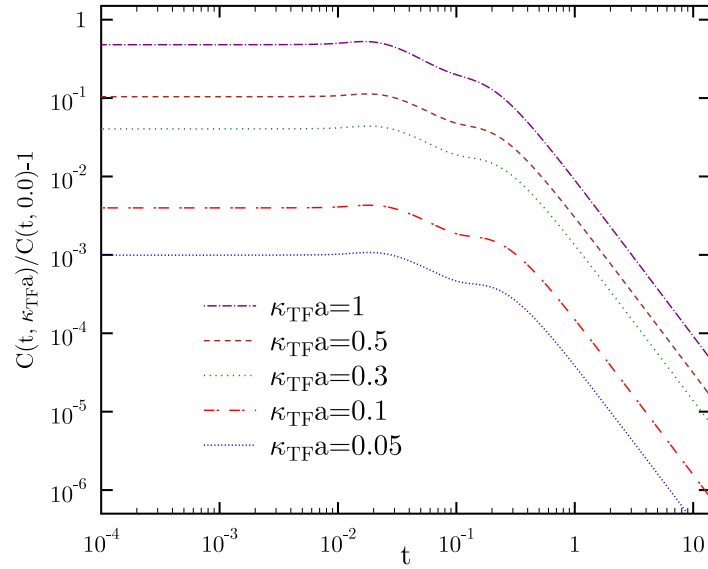


Рис. 3.17: Теплоемкость ОЦК решетки с учетом поляризации электронного фона ($h = 0$).

За счет появления новой акустической моды теплоемкость кулоновского кристалла существенно возрастает при низких температурах. При $T \ll T_p$ отношение $C(t, \kappa_{\text{TFA}})/C(t, 0) - 1$ растет $\propto (\kappa_{\text{TFA}})^2$ и при $\kappa_{\text{TFA}} = 1$ достигает 0.48. При высоких температурах отношение $C(t, \kappa_{\text{TFA}})/C(t, 0) - 1 \propto (\kappa_{\text{TFA}}/t)^2$. Поведение других термодинамических функций схоже с поведением теплоемкости, некоторые рисунки, иллюстрирующие это утверждение, можно найти в работе [50].

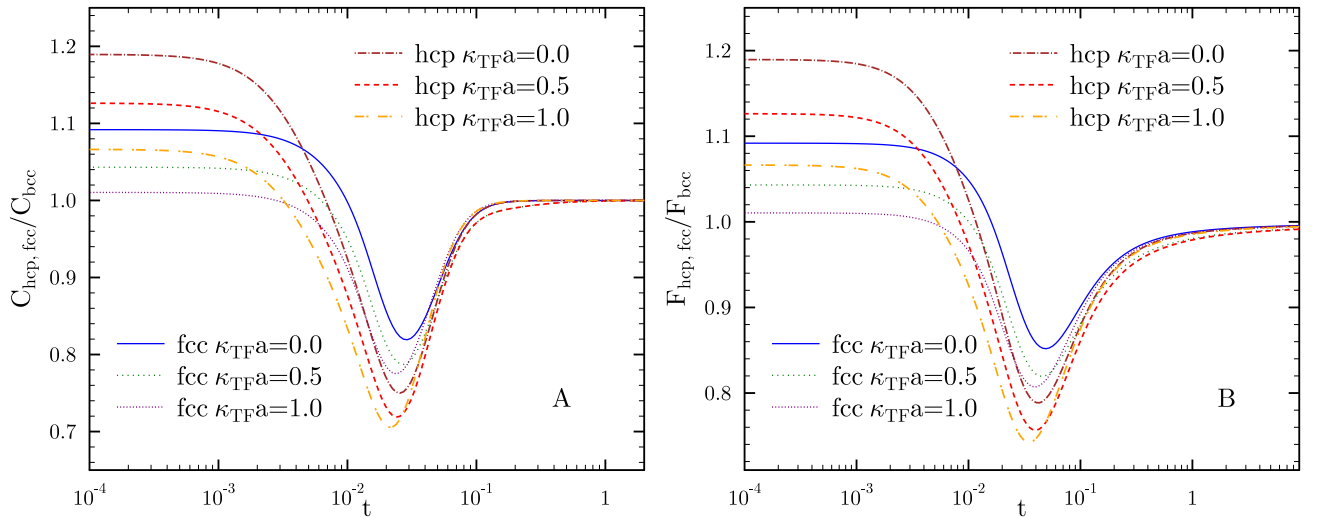


Рис. 3.18: Теплоемкость и свободная энергия ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток с учетом поляризации электронного фона ($h = 0$).

Отношения теплоемкостей (рис. 3.18A) и свободных энергий Гельмгольца (рис. 3.18B) разных решеток при $\kappa_{\text{TFA}} = 1$ и $\kappa_{\text{TFA}} = 0.5$ имеют те же особенности, что и отношения при $\kappa_{\text{TFA}} = 0$. Так, например, при высоких и средних температурах и любом κ_{TFA} F_{hcp} и F_{fcc} больше, чем F_{bcc} (свободная энергия Гельмгольца отрицательна). При $\kappa_{\text{TFA}} = 1$ отношение

$F_{\text{hcp}}/F_{\text{bcc}}$ достигает минимума, равного 0.7425 при $t \approx 0.03483$, а минимум $F_{\text{fcc}}/F_{\text{bcc}}$ равен 0.8072 при $t \approx 0.03926$. В квантовом пределе $F_{\text{hcp}} < F_{\text{fcc}} < F_{\text{bcc}}$ при любом κ_{TFA} (однако, при столь низких температурах тепловой вклад в свободную энергию не играет роли). При $T \ll T_p$ отношения $F_{\text{hcp}}/F_{\text{bcc}}$ и $F_{\text{hcp}}/F_{\text{fcc}}$ уменьшаются с ростом κ_{TFA} , достигая при $\kappa_{\text{TFA}} = 1$ значений 1.066 и 1.0104, соответственно. Таким образом, из рис. 3.18 видно, термодинамические функции различных решеток при одинаковых κ_{TFA} и t могут отличаться друг от друга на десятки процентов.

3.5.2 Термодинамические свойства кулоновских кристаллов с поляризованным электронным фоном во внешнем магнитном поле

Рассмотрим теплоемкость ОЦК решетки во внешнем магнитном поле с учетом поляризации электронного фона. Ранее термодинамические свойства таких систем нигде не рассматривались [119].

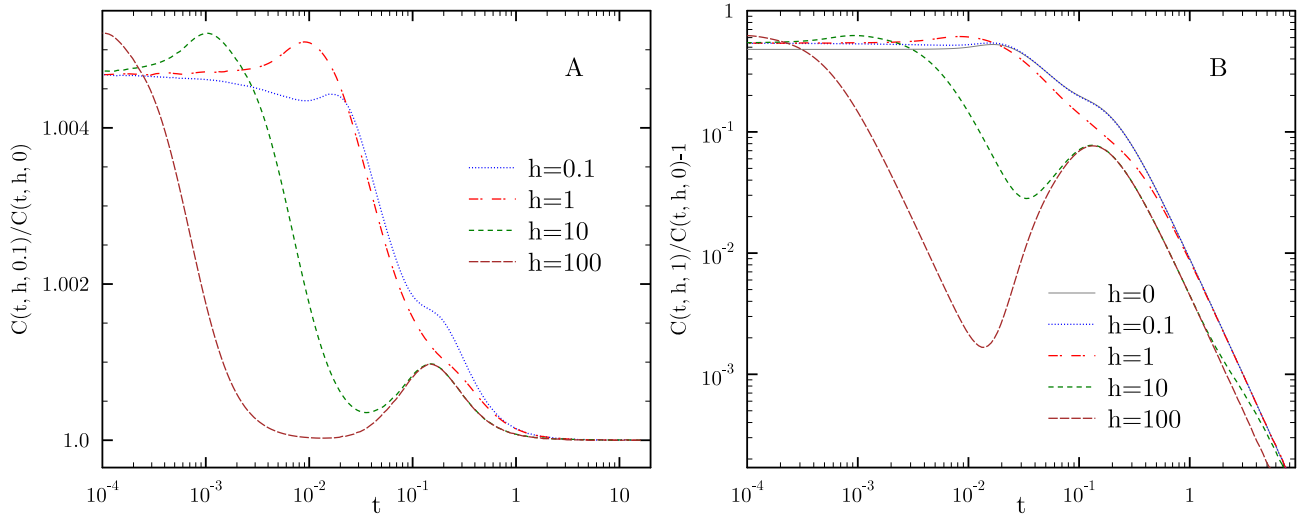


Рис. 3.19: Отношение теплоемкости ОЦК решетки с учетом поляризации электронного фона к теплоемкости ОЦК решетки с жестким электронным фоном для разных h .

Теплоемкость такого ОЦК кристалла зависит не только от температуры t и магнитного поля h и \mathbf{n} , но и от κ_{TFA} : $C(t, h, \mathbf{n}, \kappa_{\text{TFA}})$. Зависимость теплоемкости от направления магнитного поля \mathbf{n} исследована не была, везде далее $\mathbf{n} = \mathbf{n}_{\text{min}}$ и поэтому опущено. Как показано в параграфе 3.4, при $\kappa_{\text{TFA}} = 0$ изменения теплоемкости за счет изменения \mathbf{n} не превышают одного процента, по всей видимости, при $\kappa_{\text{TFA}} > 0$ они имеют тот же масштаб.

При $\kappa_{\text{TFA}} = 0.1$ влияние поляризации электронного фона незначительно, при любом t и h отношение $C(t, h, \kappa_{\text{TFA}})/C(t, h, 0)$ не превышает 1.0055 и всегда больше 1 (рис. 3.19A). При $\kappa_{\text{TFA}} = 1$ эффект существеннее (рис. 3.19B), но имеет тот же порядок что и в случае отсутствия внешнего магнитного поля. Как и при $h = 0$ в квантовом пределе при $T \ll T_p/\sqrt{1+h^2}$ отношение $C(t, h, \kappa_{\text{TFA}})/C(t, h, 0)$ становится постоянным, слабо зависящим от κ_{TFA} , так $C(t, 1, 1)/C(t, 1, 0) \approx 1.54$ при $t \ll 1$. При $T \sim 10^{-2}T_p$ и $h \gg 1$ у отношения

$C(t, h, \kappa_{\text{TF}a})/C(t, h, 0)$ появляется локальный минимум (при любом $\kappa_{\text{TF}a} > 0$). По всей видимости, он связан с тем, что поляризация электронного фона изменяет моды только вблизи центра зоны Бриллюэна, а в сильных магнитных полях моды сильно отличаются друг от друга по величине, и, следовательно, существует диапазон частот, плотность фононного спектра в котором не изменяется при изменении $\kappa_{\text{TF}a}$.

3.6 Изотопные примеси

Рассмотрим двухкомпонентный кулоновский кристалл, в котором концентрация ионов одного типа (*основных*) существенно больше, чем концентрация ионов другого типа (*примесей*). Простейшим случаем примеси в кристаллах является случай изотопной примеси, когда примесные ионы отличаются от основных только массой (масса примесных ионов M' , основных — M). Этот случай имеет значение для астрофизики: ядра во внутренней коре нейтронной звезды нейтронно-избыточны, и не исключено, что при заданной плотности одновременно могут присутствовать несколько разных изотопов одного и того же химического элемента. Данная проблема гораздо проще общего случая, так как наличие примеси-изотопа непосредственно влияет на движение только самой примеси, что позволяет решить проблему аналитически при любых массах. Влияние данного типа примесей на термодинамику кристаллов можно исследовать, используя теорию возмущения спектра неупорядоченного кристалла, разработанную И.М. Лифшицем [123] на основе математической теории следов М.Г. Крейна [124]. Для реальных кристаллов влияние примесей было широко изучено в работах [125, 126]. На модель кулоновского кристалла эта теория распространена в работе [106].

Идея Лифшица состоит в следующем. Так как квадраты частот являются собственными значениями оператора взаимодействия, то изменение любой функции частот, например, теплоемкости, имеет вид:

$$C_{\text{imp}} - C = \text{Sp}\{\varphi(\widehat{L} + \widehat{\Lambda}, T) - \varphi(\widehat{L}, T)\} = N \int \varphi(z, T) \{g(z) - g_0(z)\} dz,$$

где $g(z)$ и $g_0(z)$ — плотность квадратов частот возмущенного и невозмущенного спектра, $g(\omega^2) = 0.5\nu(\omega)/\omega$, $\varphi(\omega, T) = 3w^2 e^w (e^w - 1)^{-2}$, $w = \hbar\omega/T$. Чтобы рассчитать другую термодинамическую величину достаточно заменить функцию $\varphi(x, t)$ необходимой.

Для бесконечного кристалла спектр оператора \widehat{L} непрерывен и $\text{Sp}\varphi(\widehat{L})$ не существует, однако, так как оператор возмущения является конечномерным с числом измерений, равным числу внедренных атомов, искомая разность конечна. В первом приближении при малых концентрациях примесей можно считать, что примесные ионы между собой не взаимодействуют, тогда изменение теплоемкости ($\Delta C \equiv C_{\text{imp}} - C$) имеет вид:

$$\Delta C \approx n' (\partial C_{\text{imp}} / \partial n') |_{n'=0} = N n' (\overline{C}_1 - C), \quad (3.11)$$

где $n' = N'/N$ — относительное число примесей, N' — число ионов примеси, \overline{C}_1 — теплоемкость решетки, в которой имеется один атом примеси. Тогда

$$\Delta C = N n' \text{Sp}\{\varphi(\widehat{L} + \widehat{\Lambda}_1, T) - \varphi(\widehat{L}, T)\}, \quad (\widehat{\Lambda}_1)_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \frac{M_1 - M_2}{M_2} \omega(\mathbf{k}) \omega(\mathbf{k}'). \quad (3.12)$$

Эту задачу уже можно решить методом Крейна [124]. В результате получим:

$$\Delta C = Nn' \int_0^{x_g} \frac{\partial \varphi(x, T)}{\partial x} \zeta(x) dx + n' [\varphi(x_d, T) - \varphi(x_g, T)], \quad (3.13)$$

$$\zeta(x) = -\frac{3}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{\pi \nu(x) \varepsilon x}{2 + 2\varepsilon x^2 f(x^2)} \right), \quad f(x^2) \equiv \int_0^{x_g} \frac{\nu(x') dx'}{x^2 - x'^2} \quad (3.14)$$

где $\varepsilon = (M' - M)/M \geq -1$. Первое слагаемое — вклад от непрерывной части фононного спектра, второе — от дискретной (x_d), x_g — граничная частота непрерывной части спектра, в нашем случае $x_g = 1$. В определении $f(x^2)$ интегрирование понимается в смысле главного значения, если $\nu(x) \neq 0$, и в регулярном смысле, если $\nu(x) = 0$.

Дискретные значения фононного спектра с $x_d > x_g$ появляются лишь тогда, когда примесной атом значительно легче основных атомов (для ОЦК решетки при $\varepsilon \lesssim -0.323$ [106]), и определяются уравнением: $1 + \varepsilon f(x_d^2) = 0$. Их наличие приводит к появлению в фононной плотности положительной δ -функции на частоте моды и отрицательной δ -функции на краю непрерывного спектра (т.е., при $x = 1$). Амплитуды колебаний ионов в этой моде экспоненциально затухают с расстоянием от примеси. Зависимость x_d от ε для ОЦК решетки представлена на рис. 3.20. Очевидно, что при $M' \rightarrow 0$ частота локализованной моды стремится к бесконечности.

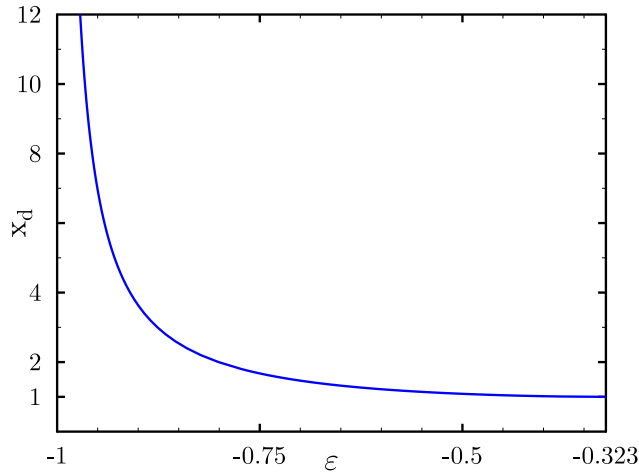


Рис. 3.20: Зависимость x_d от ε для ОЦК решетки.

Зависимость $\zeta(x)$ от x была рассчитана с помощью выражения (3.14) и приведена на рис. 3.21. В отсутствие локализованных мод $\zeta(0) = \zeta(1) = 0$, в обратном случае $\zeta(0) = 0$ и $\zeta(1) = 1$. Функция $[-\zeta'(x) + \delta(x - x_d)]/N$ — изменение фононной плотности за счет одного примесного иона. Как видно из рис. 3.21, при некоторых x некоторых точках $\zeta'(x)$ терпит разрыв.

Теплоемкость кристалла с N' примесями равна: $C = Nc + N'\Delta c$, где c — теплоемкость кристалла без примесей на один ион, Δc — изменение теплоемкости кристалла на один примесной ион. Температурная зависимость отношения $\Delta c/c$ имеет две предельные асимптотики: $\Delta c/c \approx \varepsilon'/(36t^2)$ при высоких температурах, где $\varepsilon' \equiv \varepsilon/(\varepsilon + 1)$, так как при $T > T_p$ $c \rightarrow 3$

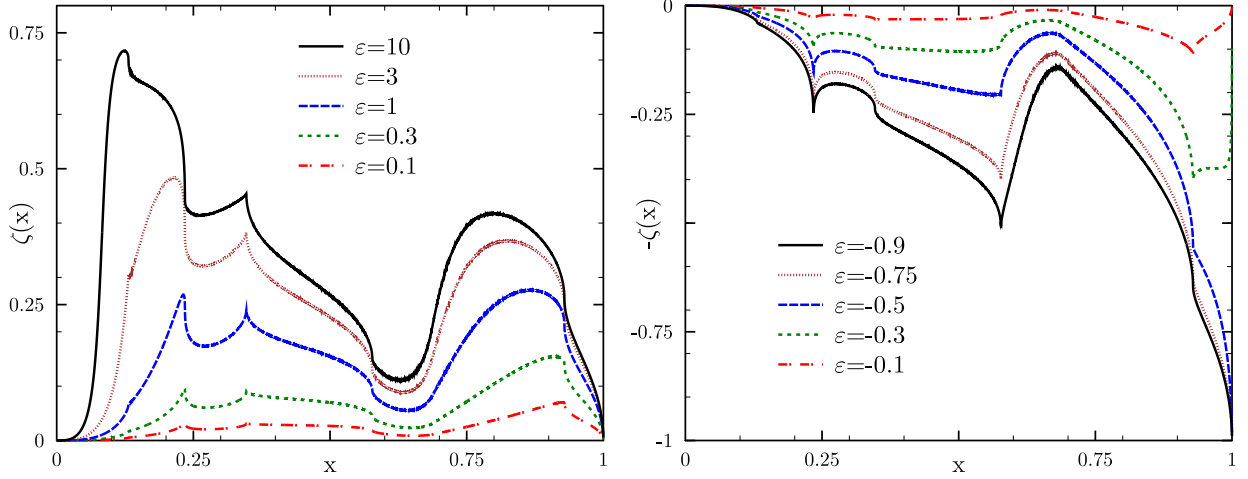


Рис. 3.21: Зависимость $\zeta(x)$ от x для ОЦК решетки.

тогда как $\varphi(x, t) \approx 1 - x^2/(12t^2)$; при низких температурах $\Delta c/c = 1.5\epsilon$. Обе асимптотики хорошо воспроизводятся при численном расчете (рис. 3.22).

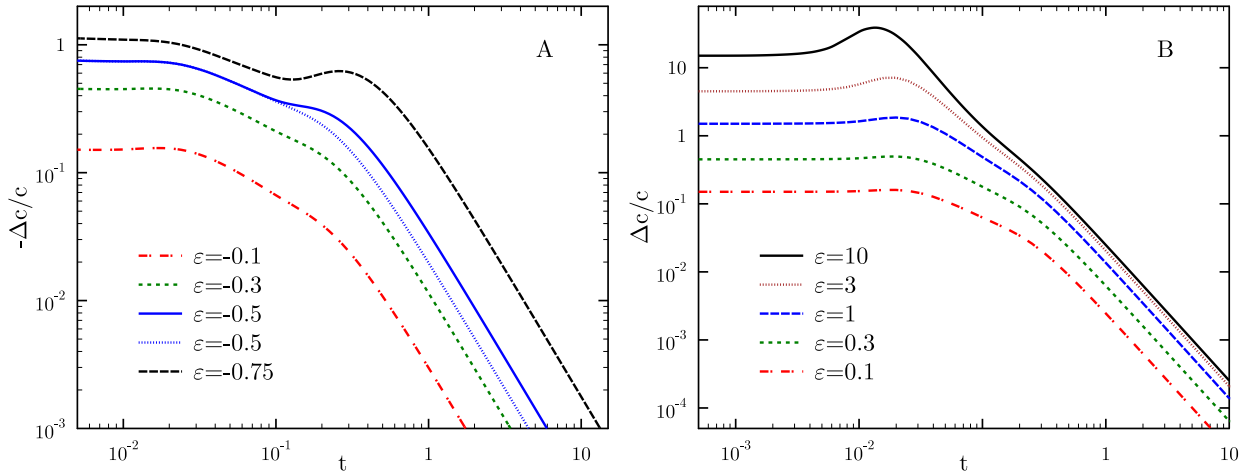


Рис. 3.22: Температурная зависимость отношения $\Delta c/c$ для ОЦК решетки.

Из рис. 3.22B видно, что при $\epsilon \gg 1$ даже небольшая концентрация примесей при температурах $0.01T_p \lesssim T \lesssim 0.1T_p$ может привести к значительному изменению теплоемкости. Например, при $\epsilon = 10$ максимальное значение $\Delta c/c \approx 40$. Это значит: 1% примесей с $M' = 11M$ увеличивает фоновую теплоемкость кристалла на 40%. Эта особенность связана с резким возрастанием функции $\zeta(x)$ при $x \approx 0.1$ (рис. 3.21). На рис. 3.22A приведены температурные зависимости отношения $-\Delta c/c$ для ОЦК решетки при $\epsilon < 0$. Наличие примесей легче, чем основные ионы, приводит к уменьшению теплоемкости кристалла, а появление дискретных мод колебаний значительно изменяет теплоемкость в классическом режиме. На рис. 3.22A это показано для $\epsilon = -0.5$: непрерывная кривая соответствует полному изменению теплоемкости, пунктирная — изменению, вызванному изменением только непрерывной части спектра.

Как уже было сказано раньше, термодинамику многокомпонентного кулоновского кри-

сталла можно рассмотреть с помощью правила линейного смешивания. Согласно ему теплоемкость кристалла с изотопной примесью равна: $C_{\text{lm}} = (N - N')c_1 + N'c_2$, где c_1 и c_2 — теплоемкости однокомпонентных кристаллов (на один ион), состоящих из ионов с массами M и M' , соответственно, при той же температуре и концентрации электронов, что и в смеси. Тогда изменение теплоемкости, вычисленное по правилу линейного смешивания, имеет вид: $\Delta C_{\text{lm}} = N'\Delta c_{\text{lm}} = Nn'(c_2 - c_1)$.

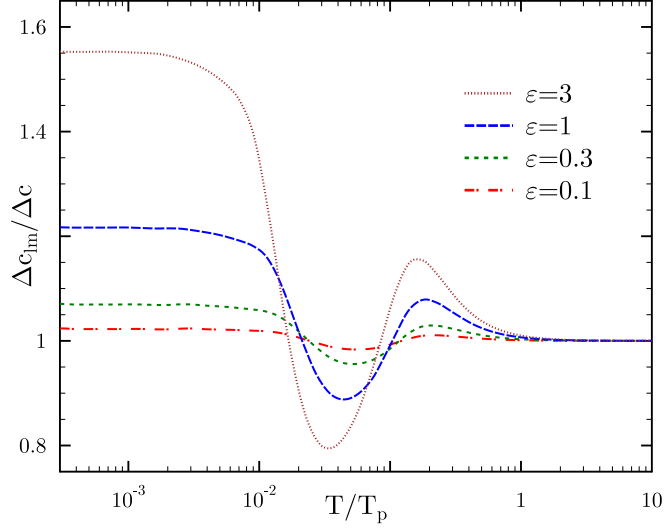


Рис. 3.23: Температурная зависимость отношения $\Delta c_{\text{lm}}/\Delta c$ для разных ε .

На рисунке 3.23 приведены температурные зависимости отношения $\Delta c_{\text{lm}}/\Delta c$ для разных ε для ОЦК решетки. При $T \ll T_p$ $\Delta c_{\text{lm}} \approx c(T_{p1}^3/T_{p2}^3 - 1) = c[(\varepsilon + 1)^{3/2} - 1]$, где T_{pi} — плазменная температура кристалла, состоящего из ионов i ого типа, тогда $\Delta c_{\text{lm}}/\Delta c \approx [(\varepsilon + 1)^{3/2} - 1]/(1.5\varepsilon)$. Это отношение стремится к 1 при $|\varepsilon| \ll 1$, и обе теории хорошо согласуются друг с другом. Однако, при $\varepsilon \gg 1$ в квантовой области согласования не наблюдается, а $\Delta c_{\text{lm}}/\Delta c$ стремится к $2\sqrt{\varepsilon}/3$. При высоких температурах

$$\Delta c_{\text{lm}} = \frac{3(T_{p1}^2 - T_{p2}^2)}{12T^2} \int_0^1 dx x^2 \nu(x) = \frac{\varepsilon' T_{p1}^2}{12T^2} \quad (3.15)$$

в полном согласии с предсказаниями теории Лифшица, и все кривые на рис. 3.23 стремятся к 1 при больших T .

Обычно масса изотопных примесей не сильно отличается от массы основного иона. Согласно [123] при $|\varepsilon| \ll 1$ изменение теплоемкости с точностью до ε^2 можно записать как:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta C_{\text{eps}}}{N} = & -\frac{\varepsilon n'}{2} \int_0^1 dx \varphi'(x, t) \nu(x) + \\ & \frac{\varepsilon^2}{2} \left[n'^2 \int_0^1 dx x \left\{ \varphi'(x, t) + \frac{\varphi''(x, t)x}{4} \right\} \nu(x) + n'(1 - n') \int_0^1 dx x^3 \varphi'(x, t) \nu(x) f(x^2) \right]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

На рис. 3.24 изображено отношение $\Delta C_{\text{eps}}/C$ для разных n' при $\varepsilon = 0.1$. Как и в предыдущем случае: при $T > T_p$ $\Delta C_{\text{eps}}/C \propto T^{-2}$, а при $T \ll T_p$ $\Delta C_{\text{eps}}/C \approx 1.5n'\varepsilon + 0.375n'^2\varepsilon^2$. При $n' = 0.5$ теорию Лифшица можно сравнить с точным расчетом для бинарного кристалла из

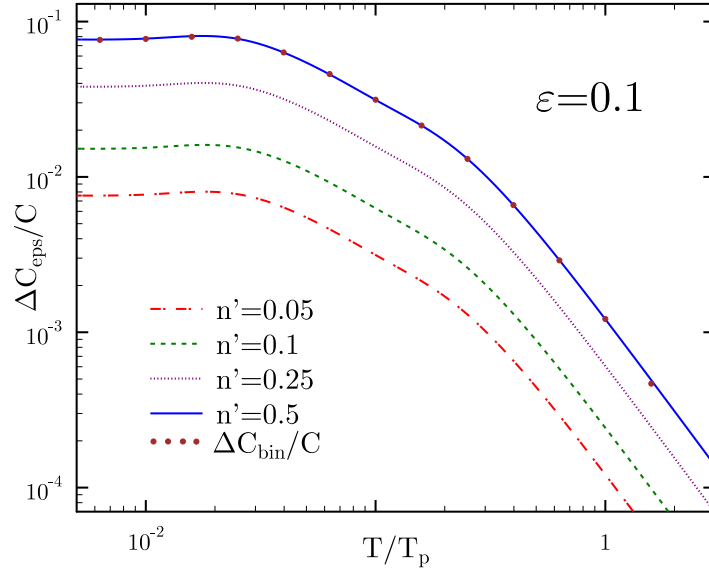


Рис. 3.24: Температурная зависимость отношения $\Delta C/C$ для ОЦК решетки при $\varepsilon = 0.1$.

параграфа 3.2. На рис. 3.24 коричневыми точками показано отношение $\Delta C_{\text{bin}}/C$, где $\Delta C_{\text{bin}} \equiv C_{\text{bin}} - C$, C – теплоемкость однокомпонентного кристалла состоящего из ионов массой M . Видно, что оба расчета совпадают с хорошей точностью. При $\varepsilon = 0.1$ отношение $(\Delta C_{\text{bin}} - \Delta C_{\text{εps}})/\Delta C_{\text{εps}}$ не превосходит 0.01.

Таким образом результаты данного параграфа наглядно демонстрируют то, что теория Лифшица позволяет с хорошей точностью рассчитать термодинамические функции кулоновских кристаллов с изотопными примесями, а так же то, что даже небольшое количество массивных изотопных примесей может заметно изменить фононную теплоемкость кристалла.

3.7 Выводы к третьей главе

Третья глава посвящена описанию термодинамических свойств различных кулоновских кристаллов, их свободной энергии Гельмгольца F , внутренней энергии E и теплоемкости C .

В параграфе 3.1 были рассмотрены термодинамические свойства различных однокомпонентных кулоновских кристаллов (ранее подобный анализ был проведен только для ОЦК и ГЦК решеток). Как известно в поведении термодинамических функций кулоновских кристаллов в отсутствие магнитного поля наблюдаются две асимптотики: при высоких температурах ($T \gg T_p$) – закон Дюлонга-Пти (например, $C \approx 3N$), а при низких температурах ($T \ll T_p$) – закон Дебая (например, $C \propto T^3$). Однако, было показано, что для ГПУ решетки закон Дебая начинает выполняться при более низких температурах, чем для ОЦК и ГЦК решеток. Теплоемкость ОЦР и ГЦР решеток может существенно превосходить теплоемкость ОЦК и ГЦК решеток при низких температурах. Для некоторых параметров c_1 и c_2 , близких к границе неустойчивости, отличие может составлять более 50 процентов. Отношения термодинамических функций ГПУ, ГЦК и ОЦК решеток были аппроксимированы

простыми формулами. Также в параграфе 3.1 был рассмотрен вклад электронов в полную теплоемкость и проведено сравнение точных расчетов с моделью Шабрие [36].

Параграф 3.2 посвящен термодинамическим свойствам бинарных кулоновских кристаллов: ПК2 и Г2. В этих решетках также наблюдается асимптотическое поведение термодинамических величин. В отличие от однокомпонентного кристалла низкотемпературная асимптотика бинарного кристалла зависит от α и β . Для ПК2 решетки она была аппроксимирована для большого диапазона параметров. При $\beta \gg 1$ зависимость теплоемкости от температуры имеет горизонтальный участок при $C = 1.5N$. В параграфе 3.3 для теплоемкости бинарной ПК2 решетки была проверена точность выполнения правила линейного смешивания. Показано, что для смеси ^{12}C и ^{16}O отклонение от правила линейного смешивания при низких температурах может составлять более 25 процентов, а для кислородно-железной смеси ($^{16}\text{O} + ^{56}\text{Fe}$) — более 83 процентов.

Влияние внешнего магнитного поля на термодинамические свойства однокомпонентных кристаллов (ОЦК, ОЦР и ГПУ) было рассмотрено в параграфе 3.4. Так как во внешнем магнитном поле поведение оптической моды вблизи центра зоны Бриллюэна изменяется, по сравнению со случаем, когда поле отсутствует, изменится и поведение термодинамических функций кулоновского кристалла при низких температурах. Например, теплоемкость во внешнем магнитном поле пропорциональна $T^{3/2}$. В сильных магнитных полях частоты в кристалле отличаются друг от друга на порядки, это приводит к появлению двух горизонтальных участков в зависимости теплоемкости от температуры: $C = N$ и $C = 2N$.

Термодинамические свойства кулоновских кристаллов с поляризованным электронным фоном были исследованы в параграфе 3.5. При учете поляризации электронного фона фонный спектр существенно изменяется только вблизи центра зоны Бриллюэна, следовательно и термодинамические функции существенно изменяются только при низких температурах. При $T \ll T_p$ отношение $C(t, \kappa_{\text{TFA}})/C(t, 0)$ не зависит от температуры и растет пропорционально $(\kappa_{\text{TFA}})^2$, достигая 1.48 при $\kappa_{\text{TFA}} = 1$. Во внешнем магнитном поле теплоемкость кристалла с учетом поляризации электронного фона рассмотрена только для ОЦК решетки в параграфе 3.5.2.

Для описания изотопных примесей в параграфе 3.6 была использована термодинамическая теория возмущений, разработанная И.М. Лифшицем [123]. Оказалось, что при высоких температурах примеси не вносят значительного вклада в теплоемкость, а максимальный эффект достигается при $T \sim T_p$. Рассмотрен также случай, когда мала не концентрация примесей, а мало отличие массы примесей от массы основных ионов. В этом случае при равной концентрации примесей и основных ионов теория Лифшица хорошо согласуется с точными расчетами для бинарного кристалла.

Результаты полученные впервые:

- Исследованы термодинамические свойства бинарных кристаллов.
- Показано, что правило линейного смешивания для теплоемкости ПК2 решетки при низких температурах не выполняется. Отличие от точного расчета может составлять десятки и сотни процентов.

- Рассчитано влияние внешнего магнитного поля, а так же поляризации электронного фона на термодинамические свойства ГПУ решетки.
- Изучено влияние изотопных примесей на термодинамику кулоновских кристаллов с помощью теории Лифшица.

Глава 4

Кулоновские кристаллы в недрах вырожденных звезд

Четвертая глава посвящена вопросам, непосредственно связанным с теорией вырожденных звезд: какой тип решетки образуется в недрах белого карлика и коре нейтронной звезды, и как неопределенность в типе кристаллической решетки может сказаться на тепловой эволюции белых карликов. Первый вопрос уже частично обсуждался в первой главе. Считается, что в недрах вырожденных звезд ионы упорядочиваются в однокомпонентную ОЦК решетку (например, [1]). Это мнение сформировалось на том основании, что ОЦК решетка обладает наименьшей энергией Маделунга. Однако, для более корректного анализа при конечных температурах нужно провести сравнение свободных энергий Гельмгольца различных решеток.

Кроме этого в данной главе обсуждается другой астрофизический вопрос, связанный с используемой моделью кулоновского кристалла, вопрос о структуре пылевой плазмы в космосе (параграф 4.3).

4.1 Энергия кулоновских кристаллов при $T = 0$

4.1.1 Полная энергия кулоновских кристаллов при $T = 0$ с однородным электронным фоном

В гармоническом приближении энергия кулоновского кристалла при нулевой температуре (E_0) равна сумме электростатической энергии и энергии нулевых колебаний. Для однокомпонентного кристалла

$$E_0 = N \frac{Z^2 e^2}{a} \zeta + N \frac{1.5\sqrt{3}Ze}{a^{1.5}} u_1, \quad \frac{E_0}{NT_p} = \Gamma_p \zeta + 1.5u_1, \quad (4.1)$$

где $\Gamma_p \equiv Z^2 e^2 / (a \hbar \omega_p) = Ze \sqrt{M} (36\pi n)^{-1/6} / \hbar = Ze M^{2/3} (36\pi \rho)^{-1/6} / \hbar \approx 2.91714 Z^{7/6} \sqrt{A/x_T}$.

Для типичных плотностей в недрах нейтронных звезд и белых карликов $\Gamma_p > 10$, если плазма углеродная ^{12}C , и $\Gamma_p > 100$, если железная ^{56}Fe (рис. 1.3). Следовательно $|\zeta \Gamma_p| \gg 1.5u_1$. Однако, для ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток масштаб изменения энергии Маделунга гораздо меньше масштаба изменения энергии нулевых колебаний. Например, для ОЦК и ГЦК

решеток $|\Delta\zeta| \approx 0.00005564$, а $|\Delta u_1| \approx 0.00181$ и $|\Delta\zeta\Gamma_p| \approx |1.5\Delta u_1|$. Следовательно, для того, чтобы выяснить, какая из этих решеток обладает минимальным E_0 и ее образование энергетически более выгодно, необходимо учитывать не только электростатическую энергию, но и энергию нулевых колебаний.

Среди всех однокомпонентных решеток с изотропным давлением наименьшая энергия нулевых колебаний у ОЦК решетки. Рассмотрение новых решеток, таких как MgB_2 , не привело к положительным результатам. ОЦК решетка также обладает наименьшей полной энергией при нулевой температуре¹.

Сравнение многокомпонентных решеток возможно только, когда их ионный состав одинаков. Например, можно провести сравнение бинарных ПК2 и Г2 решеток, так как в этих решетках концентрация ионов с зарядом Z_1 равна концентрации ионов с зарядом Z_2 . Разница между энергиями ΔE_0 ПК2 решеткой и Г2 решеткой с h_{h20} равна:

$$\begin{aligned} \Delta E_0 = N \frac{Z_1^2 e^2}{a} \Delta\zeta(\alpha) + 1.5 N \omega_s \hbar \Delta u_1(\alpha, \beta) = \\ N \frac{Z_1^2 e^2}{a_1} \left(\frac{2}{1+\beta} \right)^{1/3} \Delta\zeta(\alpha) + 1.5 N \omega_{p1} \hbar \sqrt{\frac{(1+\alpha)(\alpha+\beta)}{2\beta(1+\beta)}} \Delta u_1(\alpha, \beta), \end{aligned} \quad (4.2)$$

где $\Delta\zeta(\alpha) \equiv \zeta_{sc2}(\alpha) - \zeta_{h20}(\alpha)$ — разница между их постоянными Маделунга, $\Delta u_1(\alpha, \beta)$ — разница между первыми моментами этих решеток, $a_1 \equiv (4\pi n_1/3)^{-1/3}$, $\omega_{p1} = \sqrt{4\pi n_1 Z_1^2 e^2 / M_1}$ и n_1 — концентрация ионов с зарядом Z_1 . Тогда вводя $\Gamma_{p1} \equiv Z_1^2 e^2 / (a_1 \hbar \omega_{p1})$ получим:

$$\frac{\Delta E_0}{N T_{p1}} = \Gamma_{p1} \left(\frac{2}{1+\beta} \right)^{1/3} \Delta\zeta(\alpha) + 1.5 \sqrt{\frac{(1+\alpha)(\alpha+\beta)}{2\beta(1+\beta)}} \Delta u_1(\alpha, \beta). \quad (4.3)$$

На рис. 4.1 показаны зависимости Γ_{p1} , соответствующего $\Delta E_0 = 0$, от β при фиксированном α . Для Γ_{p1} , лежащих выше этих кривых более выгодна ПК2 решетка ($\Delta E_0 < 0$), ниже — Г2 ($\Delta E_0 > 0$). Отметим, что параметр Γ_{p1} определяется только ионами первого типа (с массой M_1) и их концентрацией n_1 , а при изменении β будет изменяться плотность кристалла.

Согласно модели из работы [68] в недрах нейтронных звезд 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 Г2 решетки невозможно. Во втором случае $\alpha \approx 1.077$, а $\beta \approx 1.107$ и ПК2 решетка для такой смеси является энергетически предпочтительнее при любом Γ_{p1} , как видно из рис. 4.1. Для нейтронных звезд и белых карликов характерные значения Γ_p и Γ_{p1} превышают 10, и, по всей видимости, при нулевой температуре любые возможные типы ионов в их недрах образуют ОЦК (если все ионы одинаковы) или ПК2 решетку (если ионы двух типов и одинаковой концентрации).

¹Как было показано в главе 2, наименьшей энергией нулевых колебаний обладает ГЦР решетка. Для рассматриваемого набора параметров этот минимум равен $u_1(1.3, 1.475) = 0.5081936$, но не исключено, что деформированная каким-то другим способом ГЦК или ОЦК решетка будет обладать еще меньшим значением u_1 . Однако, электростатическое давление в ОЦР и ГЦР решетках в общем случае не изотропно, и проводить сравнение ГЦР и ОЦР решеток с решетками с изотропным давлением некорректно. В любом случае, если это сравнение произвести, окажется, что при $\Gamma_p > 3.5$ наименьшей полной энергией при $T = 0$ обладает ОЦК решетка.

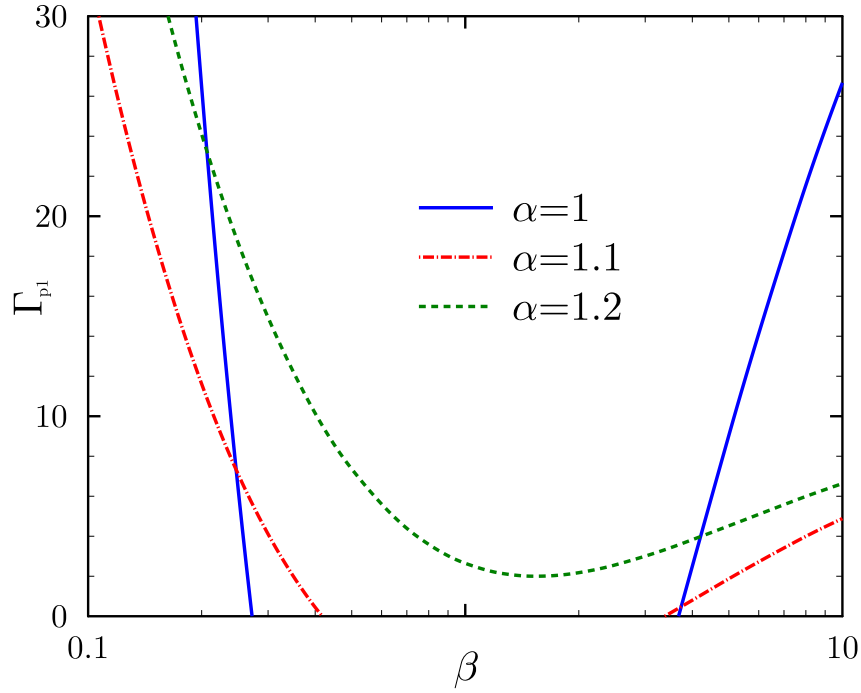


Рис. 4.1: Зависимость Γ_{p1} от α и β .

4.1.2 Полная энергия кристалла Юкавы при $T = 0$

Зная первый момент $u_1(\kappa_D a)$ фононного спектра кристалла Юкавы можно определить влияние энергии нулевых колебаний на его полную энергию при нулевой температуре равную

$$\frac{E_0}{NT_p} = \Gamma_p \zeta_{\text{YUK}} + 1.5u_1(\kappa_D a), \quad (4.4)$$

где ζ_{YUK} определяется выражением (1.68), а аппроксимации $u_1(\kappa_D a)$ приведены в параграфе 2.7.2.

В рассматриваемом приближении $E_0/(NT_p)$ зависит от типа решетки, Γ_p и $\kappa_D a$. При $\kappa_D a > 4.76$ ОЦК решетка неустойчива, поэтому при больших $\kappa_D a$ кристаллы Юкавы не рассматривались (хотя ГЦК и ГПУ решетки остаются устойчивыми).

На рис. 4.2 показано при каких Γ_p и $\kappa_D a$ полная энергия ОЦК решетки равна полной энергии ГЦК решетки. Соответственно для значений Γ_p и $\kappa_D a$, лежащих выше этой кривой, минимальной энергией будет обладать ГЦК решетка. При $\Gamma_p \rightarrow \infty$ энергией нулевых колебаний можно пренебречь и $\kappa_D a \rightarrow 1.066$. При $T = 0$ полная энергия ГПУ решетки с поляризованным фоном всегда больше полной энергии одной из двух других решеток.

Таким образом структурный переход от ОЦК к ГЦК решетке имеет место только при $\kappa_D a > 1$, а при малых $\kappa_D a$ наименьшей полной энергией обладает ОЦК решетка при любых Γ_p . Это можно воспринимать как указание на то, что структура ионного кристалла в областях с сильным экранированием в недрах вырожденных звезд возможно будет отличаться от ОЦК решетки, однако, модель кристалла Юкавы не является реалистичной и не позволяет сделать более конкретных предсказаний.

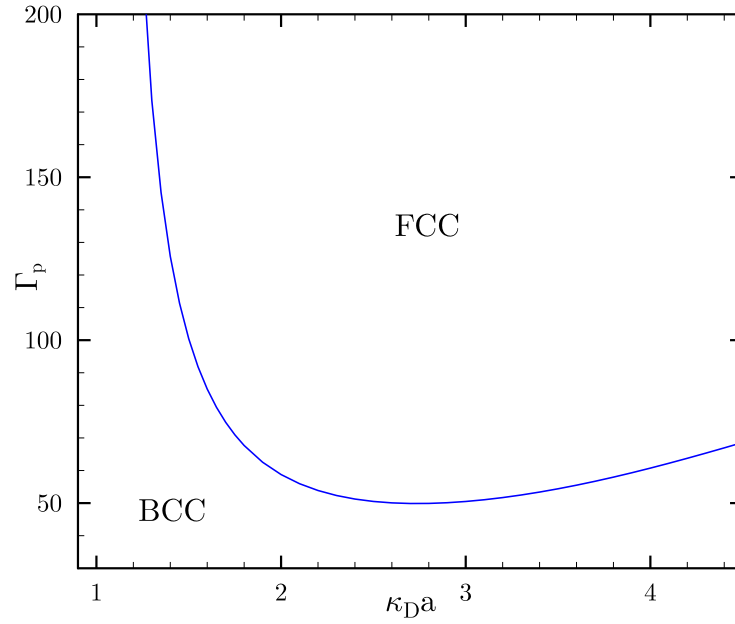


Рис. 4.2: График зависимости Γ_p от $\kappa_D a$ при котором, полная энергия ОЦК решетки равна полной энергии ГЦК решетки.

4.2 Полная энергия кулоновских кристаллов при $T > 0$ с однородным электронным фоном

Рассмотрим влияние температурных эффектов на полную свободную энергию Гельмгольца на примере трех решеток, обладающих наименьшей электростатической энергией: ОЦК, ГЦК и ГПУ [111].

4.2.1 Полная энергия однокомпонентных кулоновских кристаллов при $T > 0$

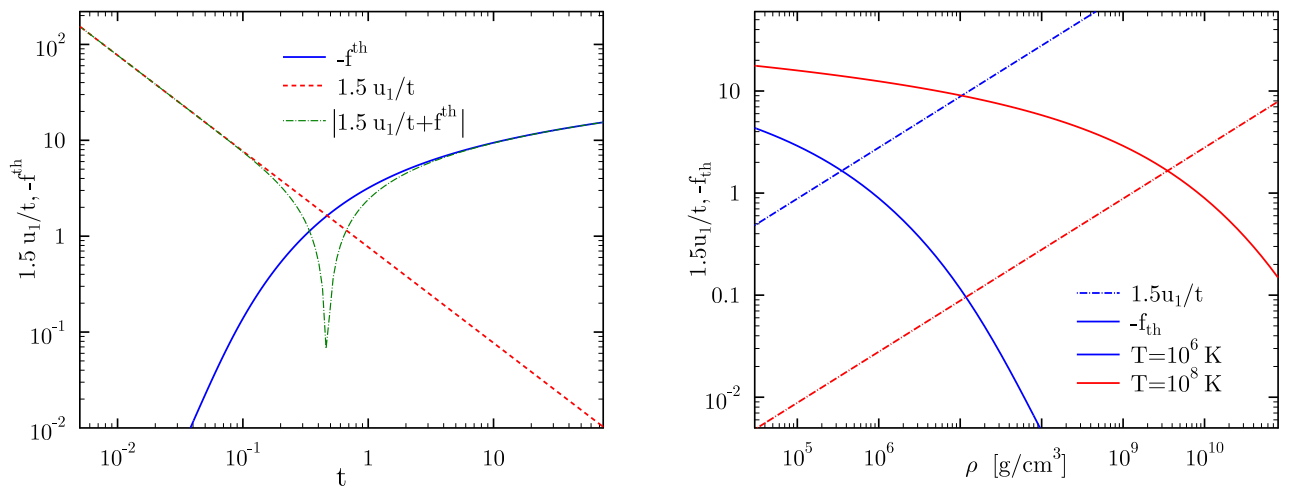


Рис. 4.3: Свободная энергия Гельмгольца и энергия нулевых колебаний ГПУ решетки.

Полная свободная энергия Гельмгольца (далее эта энергия также обозначена как “полная свободная энергия”) при $T > 0$ в гармоническом приближении состоит из 3 слагаемых: электростатической энергии, энергии нулевых колебаний и теплового вклада (f^{th} , см. параграф 3.1):

$$\frac{F^{\text{tot}}}{NT} = \zeta\Gamma + 1.5\frac{u_1}{t} + f^{\text{th}}, \quad (4.5)$$

где параметр неидеальности $\Gamma = Z^2e^2/(aT) = \Gamma_p/t$.

На рис. 4.3 для ГПУ решетки² показана зависимость $1.5u_1/t$, $-f^{\text{th}}$ и $|1.5u_1/t + f^{\text{th}}|$ от t в безразмерных единицах и зависимость $1.5u_1/t$, $-f^{\text{th}}$ как функция плотности при $T = 10^6$ и $T = 10^8$ для кристалла, состоящего из ионов железа ^{56}Fe . Величина $1.5u_1/t + f^{\text{th}}$ знакопеременная, при $t \lesssim 0.465$ она больше 0. До $t \approx 5 \times 10^{-2}$ $1.5u_1/t \gg f^{\text{th}}$ и уместно использовать приближение $T = 0$, при $t > 5 \times 10^2$ можно не учитывать вклад от энергии нулевых колебаний. То есть для железного кристалла приближение нулевой температуры хорошо работает при $T < 180\sqrt{\rho_1}$ К, где $\rho_1 = \rho/1$ г/см³.

Как можно видеть из предыдущего параграфа, при любом t и $\Gamma > \Gamma_m$ (считается, что кулоновская жидкость кристаллизуется при $\Gamma_m = 175$) ($\zeta_{\text{hcp}} - \zeta_{\text{fcc}})\Gamma + 1.5(u_{1\text{hcp}} - u_{1\text{fcc}})/t > 0$ и $(\zeta_{\text{fcc}} - \zeta_{\text{bcc}})\Gamma + 1.5(u_{1\text{fcc}} - u_{1\text{bcc}})/t > 0$. Однако, при низких температурах $f_{\text{hcp}}^{\text{th}} < f_{\text{fcc}}^{\text{th}} < f_{\text{bcc}}^{\text{th}}$ (рис. 3.2). Так, $f_{\text{hcp}}^{\text{th}} = f_{\text{fcc}}^{\text{th}}$ при $t \approx 0.0078$, при этом $t 1.5(u_{1\text{hcp}} - u_{1\text{fcc}})/t \approx 0.02748$, и при уменьшении температуры эта разность растет. В свою очередь разность $f_{\text{hcp}}^{\text{th}} - f_{\text{fcc}}^{\text{th}}$ достигает минимума равного -1.044×10^{-6} при $t = 0.0057$. Следовательно, при всех температурах, когда $f_{\text{hcp}}^{\text{th}} < f_{\text{fcc}}^{\text{th}}$, полная свободная энергия ОЦК решетки остается меньше, чем у ГПУ решетки. Аналогичное сравнение можно провести для ГЦК и ОЦК решеток. В итоге получим, что при любой температуре полная свободная энергия ОЦК решетки меньше у ГЦК и ГПУ решеток. При любых t и $\Gamma > \Gamma_m$ выполняется неравенство $F_{\text{bcc}}^{\text{tot}} < F_{\text{fcc}}^{\text{tot}} < F_{\text{hcp}}^{\text{tot}}$.

4.2.2 Полная энергия бинарных кулоновских кристаллов при $T > 0$

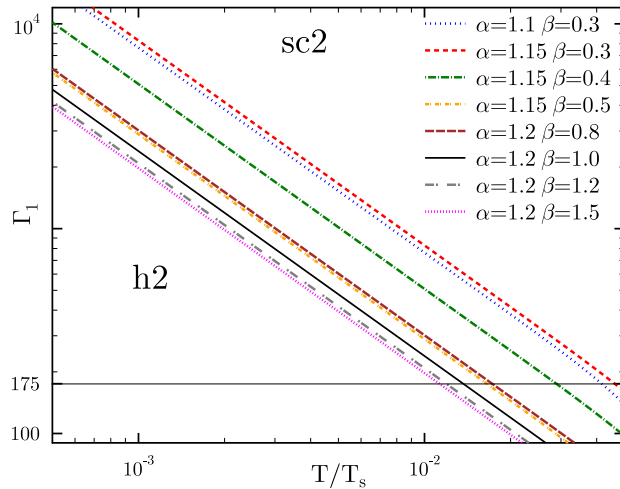


Рис. 4.4: Зависимость Γ_1 от T/T_s когда $F_{\text{h2}}^{\text{tot}} = F_{\text{sc2}}^{\text{tot}}$.

²В выбранном масштабе разница между решетками будет не видна.

Среди всех многокомпонентных решеток проведем сравнение бинарных ПК2 решетки и Г2 решетки с $h = h_{\text{нсп}}$.

Полная свободная энергия Гельмгольца ПК2 и Г2 решеток равна:

$$\frac{F^{\text{tot}}}{NT} = \Gamma_1 \left(\frac{(\alpha - 1)^2}{2^{4/3}} \zeta_1 + \alpha \zeta_2 \right) + 1.5 \frac{T_s u_1(\alpha, \beta)}{T} + f^{\text{th}}(T/T_s, \alpha, \beta), \quad (4.6)$$

где $\Gamma_1 \equiv Z_1^2 e^2 / (aT)$, для ПК2 решетки $\zeta_1 = \zeta_{\text{sc}}$ и $\zeta_2 = \zeta_{\text{bcc}}$, для Г2 решетки $\zeta_1 = \zeta_{\text{hex}}$ и $\zeta_2 = \zeta_{\text{нсп}}$. Она зависит от четырех параметров: $\alpha \geq 1$, β , T/T_s и $\Gamma_1 > \Gamma_m$. При $\alpha = 1.2$ и любом β первый момент фононного спектра Г2 решетки меньше, чем у ПК2 решетки, следовательно, при достаточно низких температурах полная свободная энергия Гельмгольца Г2 решетки меньше, чем ПК2 решетки. На рис. 4.4 для различных α и β показана зависимость Γ_1 от T/T_s , когда $F_{\text{h2}}^{\text{tot}} = F_{\text{sc2}}^{\text{tot}}$. При параметрах, лежащих ниже этих кривых, более энергетически выгодно образование Г2 решетки, а при параметрах, лежащих выше, — ПК2 решетки. При столь низких температурах тепловой вклад не играет существенной роли, поэтому зависимость Γ_1 от T_s/T практически линейна. Соответственно, при высоких температурах ($T \gtrsim T_s$) полная свободная энергия бинарной ПК2 решетки всегда меньше, чем бинарной Г2 решетки.

Следовательно в недрах горячих вырожденных звезд ее образование более вероятно, а переход к Г2 решетке в процессе остывания звезды возможен только лишь для небольшого числа ионных смесей.

4.2.3 Полная энергия кулоновского кристалла в магнитном поле при $T > 0$

Магнитное поле существенно изменяет фононные и термодинамические свойства кулоновских кристаллов, а значит и полную свободную энергию кулоновских кристаллов [115].

Полная свободная энергия кулоновского кристалла в магнитном поле равна (анализ поведения отдельных слагаемых был проведен в предыдущих главах)

$$f \equiv \frac{F}{NT} = \Gamma \zeta + 1.5 \frac{u_1(h, \mathbf{n})}{t} + f_{\text{th}}(t, h, \mathbf{n}). \quad (4.7)$$

Как было показано в гл. 2, $u_1(h, \mathbf{n}_{\text{min}})$ ОЦК решетки меньше $u_1(h, \mathbf{n}_{\text{min}})$, чем ГПУ решетки при любом h . На рис. 4.5 показана зависимость свободной энергии и $1.5u_1(h, \mathbf{n}_{\text{min}})/t$ от температуры при разных h для ГПУ решетки. Из этого рисунка видно, что тепловой вклад важен только при $T > 0.01T_p \sqrt{1 + h^2}$, но при таких температурах $f_{\text{th}}^{\text{нсп}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{min}}) > f_{\text{th}}^{\text{bcc}}(t, h, \mathbf{n}_{\text{min}})$, а значит и полная свободная энергия Гельмгольца ОЦК решетки меньше, чем полная свободная энергия Гельмгольца ГПУ решетки [118].

Аналогичное сравнение можно провести для ГЦК и ОЦК решеток. На рис. 4.6 изображена зависимость разности $f^{\text{fcc}}(\Gamma, t, h, \mathbf{n}_{\text{min}}) - f^{\text{bcc}}(\Gamma, t, h, \mathbf{n}_{\text{min}})$ от t при некоторых значениях h и Γ . При высоких температурах эта разность постоянна и равна $3(u_{\text{ln}}^{\text{fcc}} - u_{\text{ln}}^{\text{bcc}}) + \Gamma(\zeta^{\text{fcc}} - \zeta^{\text{bcc}})$, а при низких температурах важна только энергия нулевых колебаний и $f^{\text{fcc}}(\Gamma, t, h, \mathbf{n}_{\text{min}}) - f^{\text{bcc}}(\Gamma, t, h, \mathbf{n}_{\text{min}}) \approx 1.5(u_1^{\text{fcc}}(h, \mathbf{n}_{\text{min}}) - u_1^{\text{bcc}}(h, \mathbf{n}_{\text{min}}))/t$. При $\mathbf{n} = \mathbf{n}_{\text{min}}$ и любых Γ, t, h $f^{\text{fcc}} > f^{\text{bcc}}$. Это значит, что в рассматриваемом приближении ОЦК решетка во внешнем магнитном поле

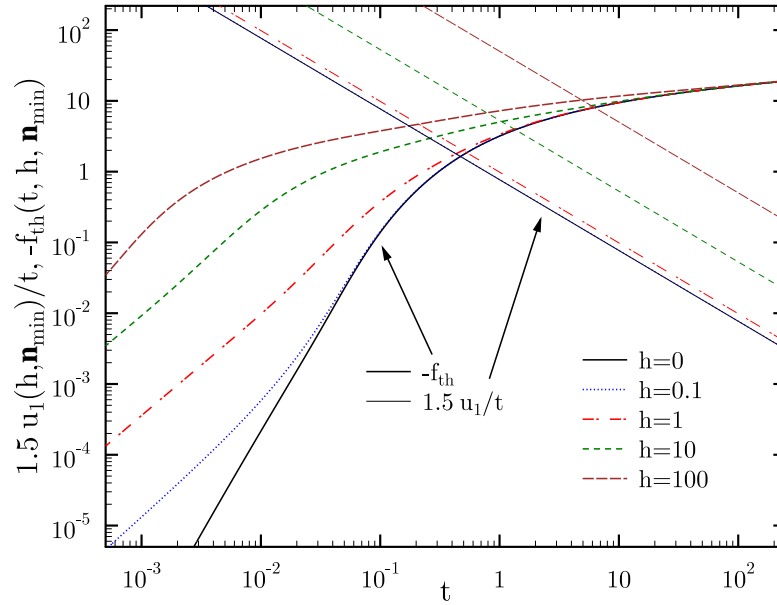


Рис. 4.5: Свободная энергия Гельмгольца и энергия нулевых колебаний ГПУ решетки в магнитном поле.

всегда термодинамически предпочтительнее, чем ГЦК и ГПУ решетки. Магнитное поле не изменяет кристаллическую структуру коры нейтронной звезды.

4.3 Полная энергия кристаллов Юкавы при $T > 0$

Как уже было упомянуто в параграфе 1.1, пылевые частицы нано и микро масштабов присутствуют в межпланетном пространстве и в окрестностях космических тел Солнечной системы (например, [30]). Они обладают большим электрическим зарядом $Z \sim 100 - 1000$, приобретенным в результате взаимодействия с окружающей средой и под действием солнечного излучения, и, соответственно, являются важной компонентой Солнечной системы (например, [15]). Заряженные наномасштабные частицы пыли — основной элемент структуры в планетообразовании. Существует гипотеза, что Солнечная система сформировалась из плазмы таких частицы [127].

Фазовая диаграмма пылевой плазмы, взятая из работы [28], приведена на рис. 1.1. Она уже обсуждалась в параграфе 1.6.2, где было отмечено, что энергия пылевого кристалла Юкавы из работы [28] совпадает с энергией кулоновского кристалла с электронным экранированием, описываемым в приближении Томаса-Ферми со сколь угодно сильным параметром экранирования. Отличие состоит в том, что в пылевой плазме кристаллическую решетку образуют частицы пыли, а невырожденные электроны и ионы — нейтрализующий фон, тогда как в кулоновских кристаллах ионы упорядочены в решетку, а сильно вырожденный электронный газ отвечает за нейтрализующий фон.

В параграфах 1.6.2 и 4.1.2 модель Томаса-Ферми со сколь угодно сильным экранированием (она же модель Юкавы) рассматривалась при нулевой температуре, в этом параграфе исследуется влияние конечных температур. Случай конечных температур при $\kappa_D a < 1$ для

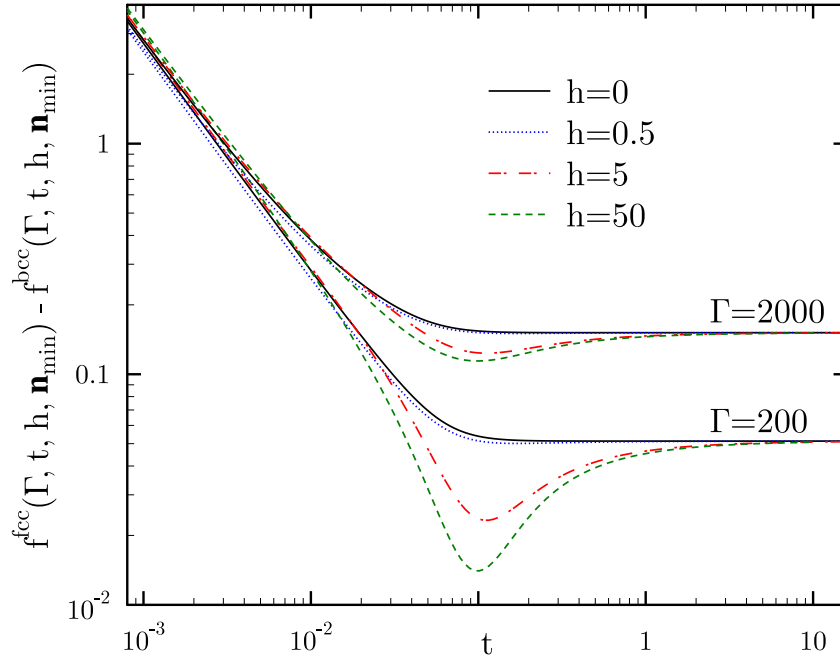


Рис. 4.6: Разность между полной свободной энергиями Гельмгольца ГЦК и ОЦК решеток в магнитном поле.

ОЦК и ГЦК решеток изучался в работе [50]

4.3.1 Полная свободная энергия кристалла Юкавы при $T \gg T_p$

При высоких температурах $F \approx 3NT [u_{\ln} - \ln t] - 1.5N\omega_p u_1$, тогда полная свободная энергия Гельмгольца кристалла Юкавы при любом $\kappa_D a$ равна:

$$\frac{F^{\text{tot}}}{NT} = \Gamma \zeta_{\text{YUK}} + \frac{1.5u_1}{t} + \frac{F}{NT} = \Gamma \zeta_{\text{YUK}} + 3 [u_{\ln} - \ln t]. \quad (4.8)$$

Из выражения (4.8) видно, что полную свободную энергию любой решетки удобно рассмотреть как функцию от $\Gamma = \Gamma_p/t$, $\kappa_D a$ и t , в этом случае разница между F^{tot} различных решеток будет определяться только Γ и $\kappa_D a$ (эти же параметры были выбраны в работе [28]). Также в качестве параметров системы можно выбрать: n , Z и T , но их использование для сравнения энергий не удобно. На рис. 4.7 красной кривой показан график зависимости Γ от $\kappa_D a$ при котором, полная свободная энергия ОЦК решетки равна полной свободной энергии ГЦК решетки (это значение Γ обозначим как Γ_b). Для значений Γ и $\kappa_D a$, лежащих выше этой кривой, минимальной энергией будет обладать ГЦК решетка.

Как сказано ранее кулоновская жидкость кристаллизуется при $\Gamma = \Gamma_m = 175$, это значение было получено в приближении однородного фона электронов, то есть при $\kappa_D a = 0$. Как показано в работе [28] с ростом $\kappa_D a$ растет и Γ_m , что можно видеть на рис. 1.1, а для некоторых $\kappa_D a$ значения Γ_m приведены в таблице 4.1. Как известно гармоническое приближение хорошо работает при $\Gamma \gg \Gamma_m$ ³ и при таких Γ значения Γ_b , полученные в представляемой работе, хорошо согласуются с численными результатами работы [28], где исследовался

³ Γ_m растет с ростом $\kappa_D a$.

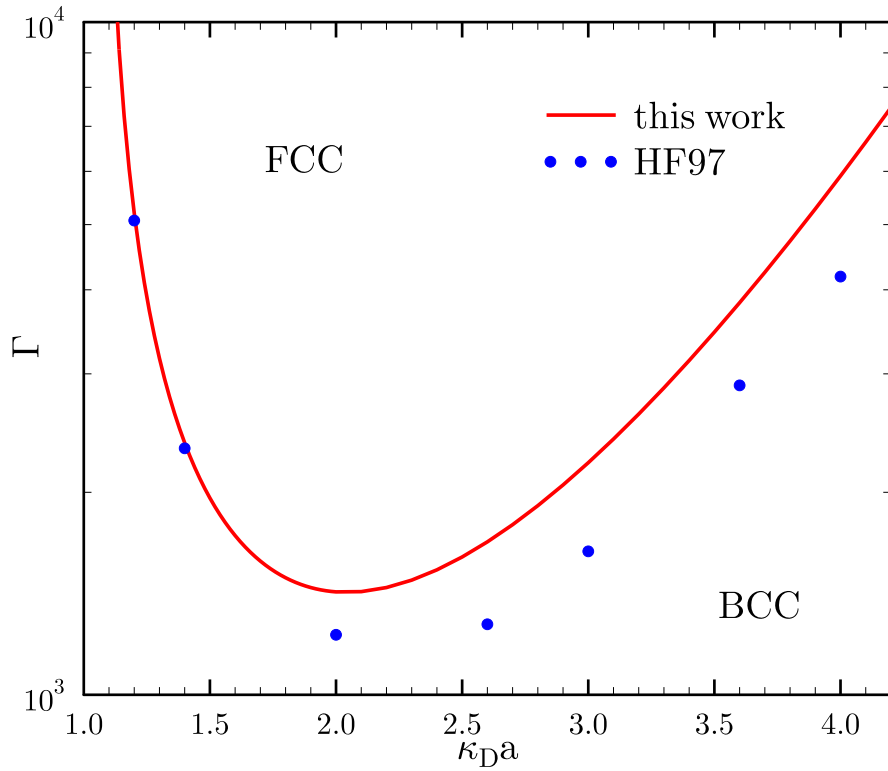


Рис. 4.7: График зависимости Γ от κ_{Da} при котором, полная свободная энергия Гельмгольца ОЦК решетки равна полной свободной энергии Гельмгольца ГЦК решетки при $T > T_p$.

структурный переход между ОЦК и ГЦК решетками Юкавы при $t \gg 1$ ⁴. Значения Γ при которых полные свободные энергии Гельмгольца ОЦК и ГЦК решеток равны, полученные в работе [28], приведены в таблице 4.1 и обозначены как Γ_b^{HF} , на рис. 1.1 они показаны синими точками.

κ_{Da}	Γ_m	Γ_b^{HF}	Γ_b	Γ_b^{an}
1.2	243.3	5070	5201	5094
1.4	268.8	2325	2369	2334
2.0	440.1	1228	1422	1232
2.6	758.9	1273	1688	1274
3.6	2378	2884	3827	2882

Таблица 4.1: Значения Γ_b^{D} и Γ_b для некоторых κ_{Da} .

Различие между Γ_b^{HF} и Γ_b можно объяснить тем, что ангармонические поправки в представляемой работе не рассматриваются. В работе [28] для некоторых κ_{Da} приведены значения ангармонических поправок к свободной энергии A_1/Γ и A_2/Γ^2 . К сожалению эти значения получены из аппроксимации численных результатов и не удобны для систематического использования (например, значения A_1 и A_2 нельзя использовать порознь, считая A_2 поправкой более старшего порядка). Однако, при тех κ_{Da} , при которых они приведены в работе [28],

⁴При $t \gg 1$ энергией нулевых колебаний можно пренебречь.

значения A_1/Γ и A_2/Γ^2 можно использовать, записав выражение (4.8) как

$$\frac{F^{\text{tot}}}{NT} = \Gamma \zeta_{\text{YUK}} + 3[u_{\text{ln}} - \ln t] + \frac{A_1}{\Gamma} + \frac{A_2}{\Gamma^2}. \quad (4.9)$$

Тогда изменится значение Γ_b , при котором полные свободные энергии ОЦК и ГЦК решеток равны. Новые значения, обозначенные как Γ_b^{an} приведены в таблице 4.1. Значения Γ_b^{HF} и Γ_b^{an} гораздо лучше согласуются друг с другом, нежели Γ_b^{HF} и Γ_b . Различие между Γ_b^{HF} и Γ_b^{an} при $\kappa_D a = 1.2$ и 1.4 можно объяснить точностью расчета F^{tot} . Чем ближе $\kappa_D a$ к предельному значению 1.066 , тем более резкая зависимость Γ_b от $\kappa_D a$ и тем более высокая точность расчета требуется.

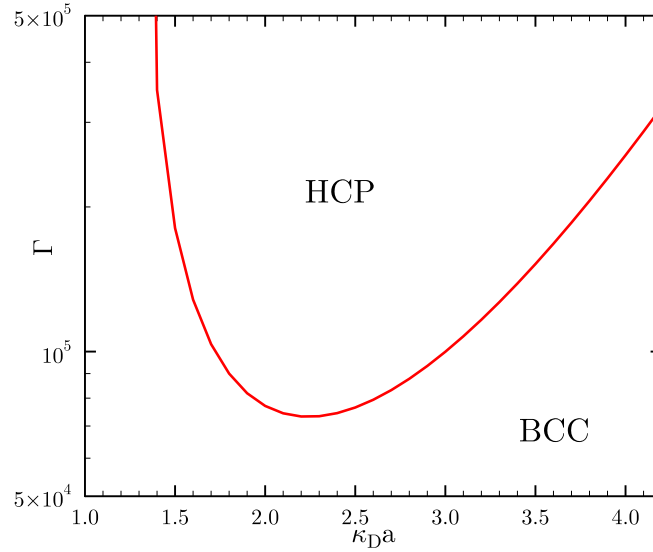


Рис. 4.8: График зависимости Γ от $\kappa_D a$ при котором, полная свободная энергия Гельмгольца ОЦК решетки равна полной свободной энергии Гельмгольца ГПУ решетки при $T > T_p$.

Среди трех рассматриваемых решеток ГПУ решетка никогда не обладает наименьшей полной свободной энергией при высоких температурах (см. параграф 4.1.3), но, например, сравнение только ОЦК и ГПУ решеток провести возможно. На рис. 4.8 приведен график зависимости Γ от $\kappa_D a$ при котором, полная свободная энергия Гельмгольца ОЦК решетки равна полной свободной энергии Гельмгольца ГПУ решетки при $T > T_p$. В этом случае $\Gamma_b \rightarrow \infty$ при $\kappa_D a \approx 1.30720$, а типичные значения Γ_b при которых происходит переход от одной решетки к другой на порядок выше, чем типичные значения Γ_b при которых происходит переход ОЦК-ГЦК.

Отметим, что статические энергии разных решеток отличаются друг от друга в 5-6 значащей цифре (см. таблицу 1.11) и поправки старшего порядка по $\kappa_D a$ к статической энергии могут сыграть важную роль при исследовании структурных переходов в кристаллах Юкавы.

4.3.2 Полная свободная энергия кристалла Юкавы при $T \lesssim T_p$

Гармоническое приближение позволяет рассчитать свободную энергию Гельмгольца F при любых температурах. В этом случае полная свободная энергия Гельмгольца кристалла Юка-

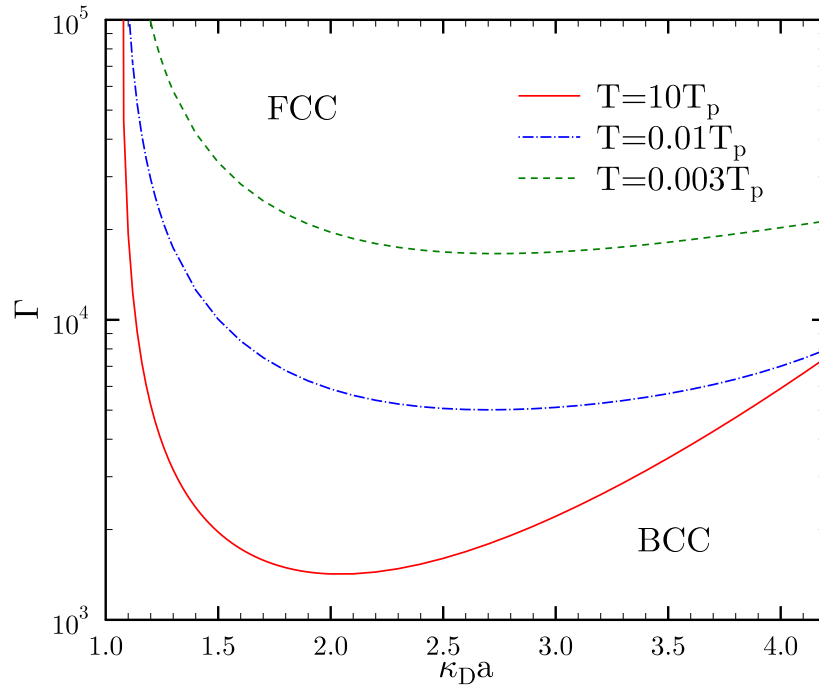


Рис. 4.9: График зависимости Γ от $\kappa_D a$ при котором, полная свободная энергия ОЦК решетки равна полной свободной энергии ГЦК решетки.

вы, равна:

$$\frac{F^{\text{tot}}}{NT} = \Gamma \zeta_{\text{YUK}} + \frac{1.5u_1}{t} + \frac{F}{NT} . \quad (4.10)$$

Тогда разница между полными свободными энергиями ОЦК и ГЦК решеток (как и между любыми другими решетками) зависит от трех параметров Γ , $\kappa_D a$ и t , а Γ_b является функцией $\kappa_D a$ и t . Графики зависимости Γ_p от $\kappa_D a$ для разных t показаны на рис. 4.9. Красная сплошная кривая на рис. 4.9 совпадает с красной сплошной кривой на рис. 4.7. При низких температурах тепловым вкладом можно пренебречь и $\Gamma_b \propto 1/t$.

4.4 Остывание белых карликов

Оценим, как рассмотренные в главе 3 эффекты влияют на поздние стадии тепловой эволюции белых карликов.

Белые карлики представляют собой заключительный этап звездной эволюции подавляющего большинства звезд. Их типичная масса составляет $0.6M_{\odot}$, и только масса нескольких из них превышает массу Солнца. Спектроскопические наблюдения показывают, что атмосфера многих белых карликов почти полностью состоит из водорода с большим количеством следов других элементов. Существуют также звезды с чисто гелиевой и гибридной атмосферой. Светимость наблюдаемых белых карликов лежит в пределах от 10^2 – 10^3 светимости Солнца до 10^{-5} .

Плотности характерные для внутренних слоев белых карликов (до 10^9 г/см³) недостижимы в земных условиях на данный момент. Однако, эти звезды важны не только, как уникальная лаборатория вещества с сверхвысокими плотностями, но, например, и для кос-

мологии, как предшественники сверхновых Ia. Считается, что сверхновые Ia — это взрывы белых карликов в двойных системах. В процессе аккреции звезда достигает своей предельной массы $1.38M_{\odot}$, при которой взрывным образом начинается горение углерода. Кроме того, наличие карлика в двойной системе с миллисекундным пульсаром дает возможность ограничить возраст пульсара и, следовательно, время распада его магнитного поля (например, [128]). Также с помощью исследования тепловой эволюции белых карликов можно оценить возраст галактик в которых они находятся.

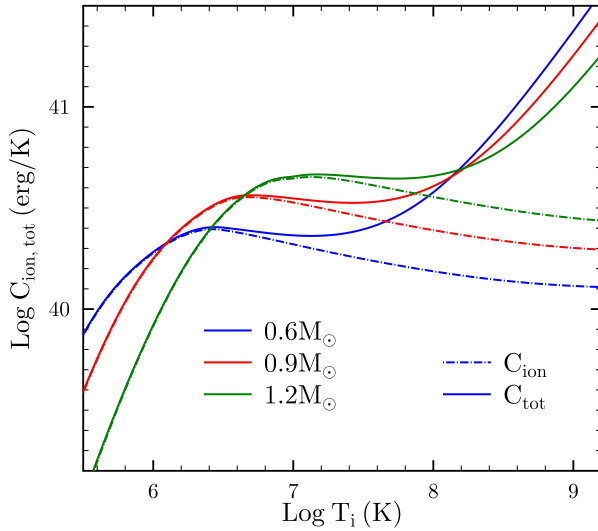


Рис. 4.10: Зависимость теплоемкости белого карлика от внутренней температуры.

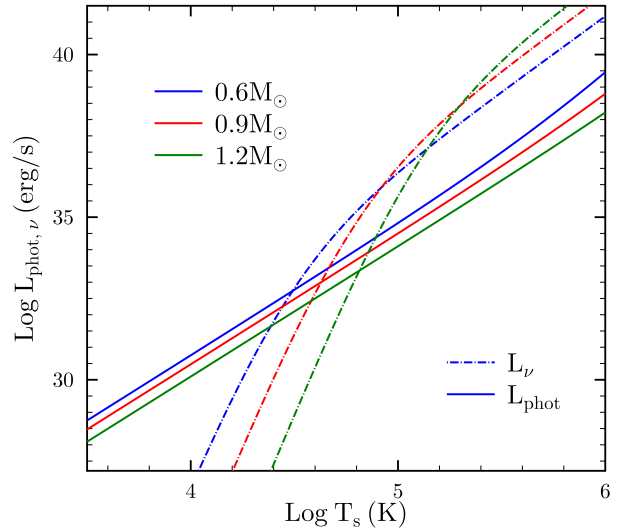


Рис. 4.11: Зависимость светимости от температуры поверхности белого карлика.

Согласно современным представлениям вещество в недрах белых карликов состоит из вырожденного релятивистского электронного газа и полностью ионизированных атомов углерода ^{12}C и кислорода ^{16}O (например, [2]). В зависимости от процессов, предшествующих образованию карлика⁵, в его внутренних слоях могут присутствовать небольшие примеси других элементов, таких как магний, неон и железо. Причем изотоп неона ^{22}Ne может играть заметную роль в процессе тепловой эволюции звезды (например, [129]). Также в реалистичных моделях предполагается, что относительная концентрация ионов изменяется с глубиной. Например, согласно модели из работы [129], в центре звезды массой $0.7M_{\odot}$ примерно 27% углерода и 73% кислорода. Очевидно, что о кристаллической структуре такой системы говорить достаточно сложно. Ее невозможно описать, используя только один тип решетки, и, скорее всего, при изменении относительной концентрации он будет меняться. В добавок, как показано в параграфе 3.3, при низких температурах отклонение от правила линейного смешивания для кислородно-углеродной смеси превышает 25%, следовательно, использовать это правило при детальных расчетах также не корректно.

Для избежания этих неопределенностей, а также для оценки их влияния на тепловую эволюцию звезды, в представляемой работе рассмотрена более простая модель: карлик, со-

⁵Считается, что в процессе тепловой эволюции ионный состав карлика не изменяется.

стоящий из электронов, полностью ионизированного углеродного ядра и внешней гелиевой оболочки. Вырожденный электронный газ определяет давление в звезде (например, [121]), а, зная давление и задав центральную плотность, можно построить модель звезды. Гелиевая оболочка квазистационарна (время термодиффузии через оболочку гораздо меньше времени изменения температуры звезды) и тонка. Она может быть аппроксимирована плоскопараллельным слоем с постоянным ускорением свободного падения g_s , а ее граница определяется плотностью вырождения электронов [130]: $\rho_d \equiv 150(A/Z)^{4/7} (G_{\text{ff}}(1+Z)T_{s6}^4)^{3/7} / g_{s14}^{3/7}$, где G_{ff} — фактор Гаунта, положенный равным 1, $T_{s6} \equiv T_s/10^6$ К — эффективная температура поверхности, $g_{s14} \equiv g_s/10^{14}$ см с $^{-2}$. В рассматриваемой модели Z и A соответствуют гелию.

Основное уравнение определяющее тепловую эволюцию белого карлика имеет вид:

$$C(T_i) \frac{dT_i}{dt} = -L_{\text{phot}}(T_s) - L(T_i), \quad (4.11)$$

где $C(T_i)$ — полная теплоемкость внутренних слоев звезды, T_i — внутренняя температура изотермического ядра. Помимо теплового излучения $L_{\text{phot}}(T_s) \equiv 4\pi\sigma T_s^4 R^2$, где σ — постоянная Стефана-Больцмана, R — радиус звезды, учитывается еще вклад от нейтрино $L_\nu(T_i)$, согласно работе [131]. Зависимости L_{phot} и L_ν от температуры поверхности были рассчитаны, используя результаты работ [131] и [130]. Они показаны на рис. 4.11 для белых карликов с массами $0.6M_\odot$, $0.9M_\odot$ и $1.2M_\odot$. Чем массивнее карлик, тем меньше его радиус, а значит и его фотонная светимость. Нейтрино уносят тепло из ядра звезды, делая его холоднее поверхности. Аппроксимации теплоемкости кулоновской жидкости взяты из работы [49], а аппроксимации теплоемкости ОЦК решетки C_{bcc} — из работы [46], также принимался во внимание вклад электронов (см. параграф 3.1). Используя эти данные была найдена зависимость полной теплоемкости (C_{tot}) белого карлика от внутренней температуры изотермического углеродного ядра. Она показана на рис. 4.10 сплошными кривыми, штрих-пунктирными кривыми показан вклад ионов (C_{ion}). Начальная температура центральных областей карлика T_i положена равной 10^9 К.

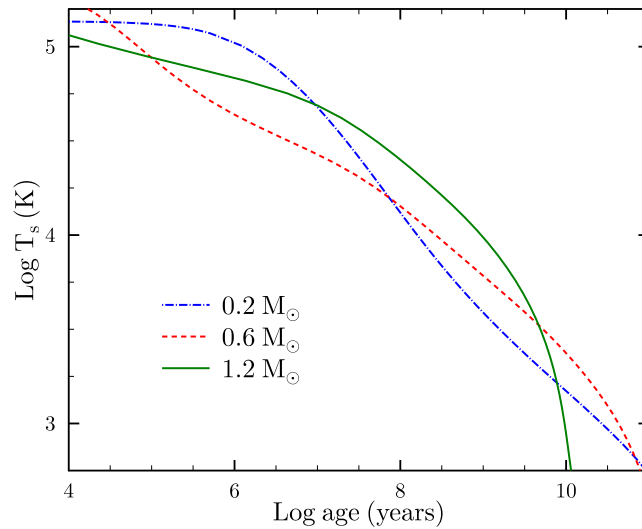


Рис. 4.12: Изменение температуры поверхности белого карлика со временем.

На рис. 4.12 представлена зависимость изменения температуры поверхности белого карлика со временем, рассчитанная с помощью описанной выше модели, кривые приведены для карликов трех разных масс: $0.2M_{\odot}$, $0.6M_{\odot}$ и $1.2M_{\odot}$ (центральные плотности равны, соответственно, 1.23×10^7 г/см³, 1.1×10^8 г/см³ и 9.1×10^8 г/см³). На начальных стадиях эволюции нейтринное излучение преобладает, а недра карлика представляют собой кулоновскую жидкость. По мере остывания звезды ионы кристаллизуются. На кривой, описывающей эволюцию звезды массой $1.2M_{\odot}$, отчетливо виден характерный излом при возрастах $\sim 10^7$ лет, связанный с кристаллизацией ионов и изменением теплоемкости звезды⁶. Полностью кристаллизовавшийся белый карлик лишен собственных источников термоядерной энергии и светит только за счет остывания (нейтринная светимость пренебрежимо мала). На этой стадии его светимость и тепловая эволюция определяются термодинамическими свойствами недр. С течением времени кристалл становится квантовым и скорость остывания опять возрастает, это приводит к появлению второго излома на графике (при возрастах $\sim 10^{10}$ лет). Чем легче карлик, тем медленнее его ионы кристаллизуются. Так для карликов с массой $0.6M_{\odot}$ это происходит, когда возраст карлика составляет порядка $10^{9.5}$ лет. Характерные изломы в кривых остывания, описанные выше, проявляются и в более детальных моделях (например, [33]).

Как видно из рис. 3.14, во внешнем магнитном поле теплоемкость кристалла может увеличиваться на несколько порядков, но это происходит только в сверх сильных полях, недостижимых в белых карликах. Поля $10^{13} - 10^{15}$ Гаусс характерны для некоторых нейтронных звезд⁷, а у белых карликов они не превышают 10^8 Гаусс. Таким образом, несмотря на возможный масштаб изменений, магнитные поля на поздние стадии тепловой эволюции белых карликов не влияют.

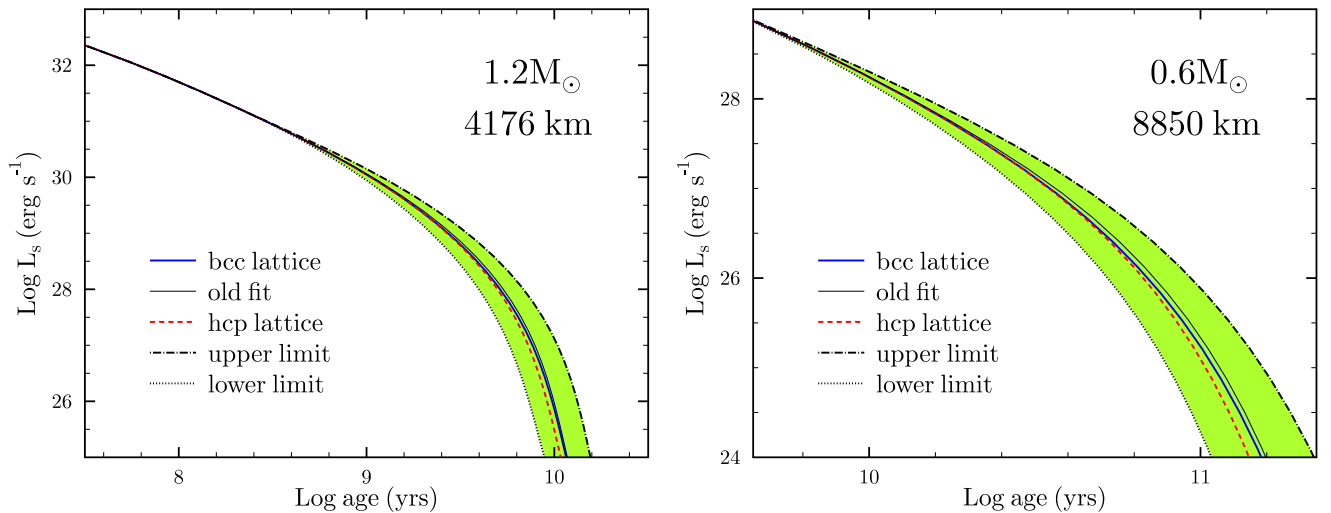


Рис. 4.13: Изменение светимости белого карлика со временем.

Проведенные расчеты показывают, что остальные эффекты (тип кристаллической решетки

⁶Также в процессе кристаллизации в звезде выделяется дополнительная энергия, теплота плавления, которая также уменьшает скорость остывания, однако, при расчетах это учтено не было

⁷Однако, влияние изменения теплоемкости на тепловую эволюцию нейтронных звезд не исследовалось.

ки, поправки к правилу линейного смешивания, изотопные примеси и поляризация электронного фона) в процессы эволюции белых карликов вносят неопределенности одного порядка. Так на рис. 4.13 показано, как будет меняться зависимость светимости белого карлика, если ионы в его недрах упорядочены в ОЦК (толстая сплошная синяя кривая) и ГПУ (красная пунктирная кривая) решетку. Увеличение теплоемкости приводит к уменьшению скорости остывания звезды и наоборот, и так как при высоких и умеренных температурах (по сравнению с плазменной температурой) $C_{\text{bcc}} > C_{\text{hcp}}$, то ГПУ решетка остывает немного быстрее, чем ОЦК, что и видно из рис. 4.13. Однако, полная разница между двумя кривыми остывания мала и не превышает нескольких процентов для массивных карликов возрастом 10^{10} лет, а для мало массивных карликов ($0.6M_{\odot}$) различие в типе кристаллической решетки существенно только при возрастах порядка 5×10^{10} лет, что превышает возраст Вселенной.

Тонкой серой кривой (“old fit”) показано, как будет эволюционировать звезда, если для описания теплоемкости ее недр использовать аппроксимацию, предложенную в работе [36] (см. параграф 3.1). Видно, что эта модель дает результат, отличающийся от точного расчета для звезды с ОЦК кристаллом. Масштаб этих отличий тот же, что и между звездами с ОЦК и ГПУ решеткой, только в данном случае теплоемкость переоценена и карлик остывает медленнее. Ангармонические поправки к теплоемкости кулоновского кристалла из работы [70] приводят к существенно меньшим изменениям кривой остывания. На выбранном масштабе на рис. 4.13 кривые остывания с учетом ангармонических поправок и без учета ангармонических поправок неотличимы.

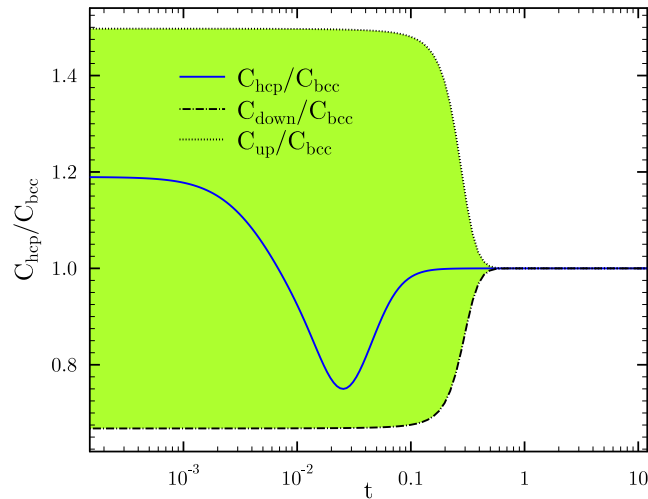


Рис. 4.14: Область изменений теплоемкости кулоновского кристалла по сравнению теплоемкостью ОЦК решетки с несжимаемым электронным фоном.

Как показано в параграфе 3.5, за счет поляризации электронного фона теплоемкость кулоновского кристалла может увеличиться до полутора раз при низких температурах (в рассматриваемом приближении, по сравнению с теплоемкостью ОЦК решетки с однородным электронным фоном, C_{bcc}), а при высоких температурах все теплоемкости стремятся к $3N$ и поправками можно пренебречь. Того же порядка изменения могут возникать из-за поправок к правилу линейного смешивания (для кислородно-углеродной смеси) или наличия примесей.

Для упрощения задачи не будем рассматривать отдельные примеры, а опишем предельные случаи с помощью функций, схожих с функцией Хевисайда, положив верхнее предельное значение равным $C_{\text{up}} = C_{\text{bcc}} / (1/3 / (1 + 100 \exp(-20t + 1)) + 2/3)$, а нижнее — $C_{\text{down}} = (1/3 / (1 + 100 \exp(-20t + 1)) + 2/3) C_{\text{bcc}}$. Отношения $C_{\text{up}}/C_{\text{bcc}}$ и $C_{\text{down}}/C_{\text{bcc}}$ показаны на рис. 4.14 точечной и штрих-пунктирной линией, соответственно. Нижняя кривая не связана напрямую с каким-либо процессом, но полностью покрывает все возможные случаи легких примесей. При $t \ll 1$ $C_{\text{down}}/C_{\text{bcc}} \approx 2/3$. Все реалистичные отношения C/C_{bcc} будут лежать между предельными случаями в зеленой закрашенной области как, например, отношение $C_{\text{hcp}}/C_{\text{bcc}}$, показанное на рис. 4.14 сплошной кривой.

В зеленой закрашенной области на рис. 4.13 будут лежать все кривые остывания, соответствующие изменениям теплоемкости в описанных выше пределах. Из рис. 4.13 видно, что поверхностная температура белого карлика массой $1.2M_{\odot}$ в возрасте 10^{10} лет может изменяться в 1.2 раза. Эта вариация прежде всего связана с “экзотическими” типами кристаллических решеток. В реалистичной ситуации влияние изотопных примесей на светимость звезды не превышает одного процента, а влияние на тепловую эволюцию менее массивных карликов еще менее заметно. Для звезды массой $0.6M_{\odot}$ требуется на порядок больше времени (10^{11} лет), чтобы рассматриваемые эффекты заметно сказались на ее остывании.

4.5 Выводы

Четвертая глава посвящена двум проблемам, связанными с теорией вырожденных звезд: какой тип решетки образуется в недрах белого карлика и коре нейтронной звезды, и как неопределенность в типе кристаллической решетки может сказаться на тепловой эволюции белых карликов. Кроме этого в данной главе обсуждается вопрос о структуре пылевой плазмы в космосе (параграф 4.3).

В параграфе 4.1 исследуется вопрос: какая решетка обладает минимальной энергией при $T = 0$ (учитывается вклад электростатической энергии и энергии нулевых колебаний). Показано, что среди всех однокомпонентных решеток с однородным электронным фоном в недрах вырожденных звезд энергетически предпочтительно образование ОЦК решетки. Аналогичная картина характерна для бинарных кристаллов. При плотностях и ионном составе характерном для вырожденных звезд полная энергия бинарной ПК2 решетки меньше полной энергии бинарной Г2 решетки, но в более экзотических ситуациях (например, при $\beta \sim 0.1$) возможен структурный переход между двумя этими решетками. В параграфе 4.1.2 рассмотрено влияние поляризации электронного фона на полную энергию кристаллов Юкавы при $T = 0$ на примере ОЦК и ГЦК решеток.

Параграф 4.2 посвящен сравнению полных энергий кулоновских кристаллов при $T > 0$. Среди всех однокомпонентных решеток были рассмотрены только ОЦК, ГЦК и ГПУ решетки. Обнаружено, что полная энергия первой из них меньше, чем двух других при любом Γ и t . Магнитное поле в рассматриваемом приближении не изменяет кристаллическую структуру коры нейтронной звезды. Полная энергия ОЦК решетки остается минимальной во внешнем

магнитном поле. Среди всех многокомпонентных решеток было проведено сравнение только двух решеток: бинарных ПК2 и Г2. Показано, при высоких температурах ($T > 0.1T_s$) наименьшей полной энергией обладает ПК2 решетка при любых α и β .

Сравнение полных энергий ОЦК, ГЦК и ГПУ решеток с учетом поляризации электронного фона, описываемом приближением Томаса-Ферми (кристалл Юкавы) проведено в параграфе 4.3. При $T \gg T_p$ для ОЦК и ГЦК решеток полученные в представляемой работе результаты хорошо согласуются с полученными ранее численно в работе [28]. Структурный переход между ОЦК и ГЦК решетками был также исследован при $T \lesssim T_p$. Показано, что полная энергия ГПУ решетки всегда больше, чем полная энергия ГЦК решетки.

Результаты в главы 3 для теплоемкости различных решеток были использованы в параграфе 4.4 для оценки влияния различных эффектов на тепловую эволюцию белых карликов. Для маломассивных карликов различие в типе кристаллической решетки существенно только при возрастах, превышающих возраст Вселенной. Для более массивных звезд ($M \approx M_\odot$) это происходит раньше. Однако, даже при возрасте карлика 10^{10} лет вариация светимости не превосходит 20 процентов. Влияние других эффектов менее значимо.

Результаты полученные впервые:

- Показано, что в недрах вырожденных звезд наиболее вероятно образование ОЦК решетки. В рассматриваемом приближении внешнее магнитное поле кристаллическую структуру не изменяет.
- Показано, что структурную диаграмму кристаллов Юкавы, полученную численно в работе [28], при $\Gamma \gg \Gamma_m$ можно описать аналитически с помощью гармонического приближения. В данном приближении имеет место только структурный переход между ОЦК и ГЦК решетками, структурных переходов между другими решетками не происходит.
- Выявлено, что рассмотренные в главе 3 эффекты (неопределенность в типе кристаллической решетки, поляризация электронного фона) существенно не влияют на тепловую эволюцию белых карликов.

Заключение

В работе проведен расчет и анализ электростатических, фононных и термодинамических свойств различных кулоновских кристаллов: однокомпонентных и бинарных; с однородным и поляризованным электронном фоном; во внешнем однородном магнитном поле и без него. Основные результаты, полученные в диссертации:

- 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 решетки и других факторов на тепловую эволюцию белых карликов.

Выражаю благодарность сотрудникам сектора теоретической астрофизики, лаборатории астрофизики высоких энергии и лаборатории прикладной математики и математической физики.

Список сокращений

Обозначение	Название
ПЛС (lm)	правило линейного смешивания
ОЦК (bcc) решетка	объемноцентрированная кубическая решетка
ГЦК (fcc) решетка	гранецентрированная кубическая решетка
ОЦР (bcc) решетка	объемно-центрированная ромбическая решетка
ГЦР (fcc) решетка	гранецентрированная ромбическая решетка
ГУ (hp) решетка	гексагональная упакованная решетка
ГПУ (hcp) решетка	гексагональная плотно упакованная решетка
ПК2 (sc2) решетка	простая кубическая решетка с базисом
Г2 (h2) решетка	гексагональная плотно упакованная решетка с двумя разными ионами в элементарной ячейке

Литература

- [1] Haensel P., Potekhin A.Y., Yakovlev D.G. Neutron Stars 1: Equation of State and Structure. New York: Springer, 2007. ISBN: 0387335439
- [2] Шапиро Л.С., Тьюкольски С.А. Черные дыры, белые карлики и нейтронные звезды. Москва: Мир, 1985. Том 2.
- [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] Haensel P., Zdunik J.L. Non-equilibrium processes in the crust of an accreting neutron star // A&A. 1990. — Vol. 227. P. 431–436.
- [5] Horowitz C.J., Berry D.K. Structure of accreted neutron star crust // Phys. Rev. C. 2009. — Vol. 79. id. 065803.
- [6] Chamel N., Haensel P. Physics of Neutron Star Crusts // Living Rev. Relativ. 2008. — Vol. 11. id. 10.
- [7] Duncan D.C. Global seismic oscillations in soft gama repeaters // Astrophys. J. 1998. — Vol. 498. P. L45-L49.
- [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] Wigner E.P. On the Interaction of Electrons in Metals // Phys. Rev. 1934. — Vol. 46. P. 1002–1011.
- [11] Fuchs K. A Quantum Mechanical Investigation of the Cohesive Forces of Metallic Copper // Proc. R. Soc. London, Ser. A. 1935. — Vol. 151. P. 585–602; Fuchs K. A Quantum Mechanical Calculation of the Elastic Constants of Monovalent Metals // Proc. R. Soc. London, Ser. A. 1936. — Vol. 153. P. 622–639
- [12] Fuchs K. The Elastic Constants and Specific Heats of the Alkali Metals // Proc. R. Soc. London, Ser. A. 1936. — Vol. 157. P. 444–450.

- [13] Born M. On the stability of crystal lattices. I // Proc. Cambr. Philos. Soc. 1940. — Vol. 36. P. 160–172; Born M., Misra R. D. On the stability of crystal lattices. IV // Proc. Cambr. Philos. Soc. 1940. — Vol. 36. P. 466–478; Born M. On the stability of crystal lattices. IX // Proc. Cambr. Philos. Soc. 1942. — Vol. 38. P. 82–99.
- [14] Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. Москва: Изд-во иностр. лит., 1958.
- [15] Fortov V.E., Ivlev A.V., Khrapak S.A., Khrapak A.G., Morfill G.E. Complex (dusty) plasmas: Current status, open issues, perspectives // Phys. Reports. 2005. — Vol. 421. P. 1–103.
- [16] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. Москва: Наука, 1978.
- [17] Gann R.C., Chakravarty S., Chester G.V. Monte Carlo simulation of the classical two-dimensional one-component plasma // Phys. Rev. B. — Solid State. 1979. — Vol. 20. P. 326–344.
- [18] Grimes C.C., Adams G. Evidence for a Liquid-to-Crystal Phase Transition in a Classical, Two-Dimensional Sheet of Electrons // Phys. Rev. Lett. 1979. — Vol. 42. P. 798–801.
- [19] Bollinger J.J., Mitchell T.B., Huang X.-P. et al. Crystalline order in laser-cooled, non-neutral ion plasmas // Phys. Plasmas. 2000. — Vol. 7. P. 7–13.
- [20] Gilbert S.L., Bollinger J.J., Wineland D.J. Shell-structure phase of magnetically confined strongly coupled plasmas // Phys. Rev. Lett. 1988. — Vol. 60. P. 2022–2025.
- [21] Фортов В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы. Москва: Физматлит, 2004.
- [22] Chu J.H., I Lin. Direct observation of Coulomb crystals and liquids in strongly coupled rf dusty plasmas // Phys. Rev. Lett. 1994. — Vol. 72. P. 4009–4012.
- [23] Thomas H., Morfill G.E., Demmel V., Goree J., Feuerbacher B., Mohlmann D. Plasma crystal: Coulomb crystallization in a dusty plasma // Phys. Rev. Lett. 1994. — Vol. 73. P. 652–655.
- [24] Hayashi Y., Tachibana K. Observation of Coulomb-Crystal Formation from Carbon Particles Grown in a Methane Plasma // Jpn. J. Appl. Phys. A. 1994. — Vol. 33. P. L804–L806.
- [25] Melzer A., Trottenberg T., Piel A. Experimental determination of the charge on dust particles forming Coulomb lattices // Phys. Lett. A. 1994. — Vol. 191. P. 301–308.
- [26] Morfill G.E., Thomas H. Plasma crystal // J. Vac. Sci. Technol. A. 1996. — Vol. 14. P. 490–495.
- [27] Кдумов Б.А. О критериях плавления комплексной плазмы // УФН 2010. — Т. 180. С. 1095–1108.

- [28] Hamaguchi S., Farouki R.T., Dubin D.H.E. Triple point of Yukawa systems // *Phys. Lett. E.* 1997. — Vol. 56. P. 4671–4682.
- [29] Williams R., Crandall R.S. The structure of crystallized suspensions of polystyrene spheres // *Phys. Lett.* 1974. — Vol. 48. P. 225–226.
- [30] 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.
- [31] Lamb D.Q., van Horn H.M. Evolution of crystallizing pure C-12 white dwarfs // *Astrophys. J.* 1975. — Vol. 200. P. 306–323.
- [32] Koester D., Chanmugam G. REVIEW: Physics of white dwarf stars // *Rep. Prog. Phys.* 1990. — Vol. 53. P. 837–915.
- [33] Althaus L.G., Corsico A.H., Isern J., Garcia-Berro E. Evolutionary and pulsational properties of white dwarf stars // *A&A Rev.* 2010. — Vol. 18. P. 471–556.
- [34] Negele J.W., Vautherin D. Neutron star matter at sub-nuclear densities // *Nucl. Phys. A.* 1973. — Vol. 207. P. 298–320.
- [35] Haensel P., Pichon B. Experimental nuclear masses and the ground state of cold dense matter // *Astron. Astrophys.* 1994. — Vol. 283. P. 313–318.
- [36] Chabrier G., Ashcroft N.W., DeWitt H.E. White dwarfs as quantum crystals // *Nature.* 1992. — Vol. 360. P. 48–50.
- [37] Ruderman M.A. Crystallization and Torsional Oscillations of Superdense Stars // *Nature.* 1968. — Vol. 218. P. 1128–1129.
- [38] Ruderman M.A. Solid Stars // *Sci. Amer.* 1971. — Vol. 224. P. 24–31.
- [39] Carr W.J. Energy, Specific Heat, and Magnetic Properties of the Low-Density Electron Gas // *Phys. Rev.* 1961. — Vol. 122. P. 1437–1446.
- [40] Pollock E.L., Hansen J.P. Statistical Mechanics of Dense Ionized Matter. II. Equilibrium Properties and Melting Transition of the Crystallized One-Component Plasma // *Phys. Rev. A.* 1973. — Vol. 8. P. 3110–3122.
- [41] Nagai T., Fukuyama H. Ground State of a Wigner Crystal in a Magnetic Field I. Cubic Structure // *J. Phys. Soc. Jpn.* 1982. — Vol. 51. P. 3431–3442.
- [42] Nagai T., Fukuyama H. Ground State of a Wigner Crystal in a Magnetic Field II. Hexagonal Close-Packed Structure // *J. Phys. Soc. Jpn.* 1983. — Vol. 52. P. 44–53.

- [43] Stringfellow G.S., DeWitt H.E., Slattery W.L. Equation of state of the one-component plasma derived from precision Monte Carlo calculations // *Phys. Rev. A*. 1990. — Vol. 41. P. 1105–1111.
- [44] Chabrier G. Quantum effects in dense Coulombic matter — Application to the cooling of white dwarfs // *Astrophys. J.* 1993. — Vol. 414. P. 695–700.
- [45] Байко Д.А. Кинетические явления в остывающих нейтронных звездах: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Санкт-Петербург, 2000.
- [46] Baiko D.A., Potekhin A.Y., Yakovlev D.G. Thermodynamic functions of harmonic Coulomb crystals // *Phys. Rev. E*. 2001. — Vol. 64. P. 057402-1–057402-6.
- [47] Chugunov A.I., Baiko D.A. Anharmonic corrections to the electrostatic energy of a Coulomb crystal // *Physica A*. 2005. — Vol. 352. P. 397–408.
- [48] Яковлев Д.Г., Шалыбков Д.А. Вырожденные ядра белых карликов и оболочки нейтронных звезд: термодинамика и плазменное экранирование в термоядерных реакциях // *Итоги науки и техн. Сер. Астрономия*. 1988. — Т. 19. С. 191–252.
- [49] Potekhin A.Y., Chabrier G. Equation of state of fully ionized electron-ion plasmas. II. Extension to relativistic densities and to the solid phase // *Phys. Rev. E*. 2000. — Vol. 62. P. 8554–8563.
- [50] Baiko D.A. Effect of the electron gas polarizability on the specific heat of phonons in Coulomb crystals // *Phys. Rev. E*. 2002. — Vol. 66. id. 056405.
- [51] Hansen J.P., Torrie G.M., Vieillefosse P. Statistical mechanics of dense ionized matter. VII. Equation of state and phase separation of ionic mixtures in a uniform background // *Phys. Rev. A*. 1977. — Vol. 16. P. 2153–2168.
- [52] Chabrier G., Ashcroft N.W. Linear mixing rule in screened binary ionic mixtures // *Phys. Rev. A*. 1990. — Vol. 42. P. 2284–2291.
- [53] Potekhin A.Y., Chabrier G., Rogers F.J. Equation of state of classical Coulomb plasma mixtures // *Phys. Rev. E*. 2009. — Vol. 79. P. 016411-1–016411-6.
- [54] Ogata S., Iyetomi H., Ichimaru S., van Horn H.M. Equations of state and phase diagrams for dense multi-ionic mixture plasmas // *Phys. Rev. E*. 1993. — Vol. 48. P. 1344–1358.
- [55] Rosenfeld Y. Comment on "Equation of state and phase diagrams for dense multi-ionic mixture plasmas" // *Phys. Rev. E*. 1995. — Vol. 52. P. 3292–3296; Equation of state and correlation functions of strongly coupled plasma mixtures: Density functional theory and analytic model // *Phys. Rev. E*. 1996. — Vol. 54. P. 2827–2838.

- [56] DeWitt H.E., Slattery W., Chabrier G. Numerical simulation of strongly coupled binary ionic plasmas // *Physica B*. 1996. — Vol. 228. P. 21–26.
- [57] DeWitt H.E., Slattery W. Validity of the linear mixing rule for strongly coupled ionic fluids // *Contr. Plasma Phys.* 2003. — Vol. 43. P. 279–281.
- [58] Ichimaru S., Iyetomi H., Ogata S. Freezing transition and phase diagram of dense carbon-oxygen mixtures in white dwarfs // *Astrophys. J.* 1988. — Vol. 334. P. L17–L20.
- [59] Iyetomi H., Ogata S., Ichimaru S. Quantum Monte Carlo simulation study of free energies and melting transitions in Coulomb solids // *Phys. Rev. B*. 1993. — Vol. 47. P. 11703–11711.
- [60] Segretain L. Three-body crystallization diagrams and the cooling of white dwarfs // *A&A*. 1996. — Vol. 310. P. 485–488.
- [61] Horowitz C.J., Berry D.K., Brown E.F. Phase separation in the crust of accreting neutron stars // *Phys. Rev. E*. 2007 — Vol. 75. id. 066101.
- [62] Schneider A.S., Hughto J., Horowitz C.J., Berry D.K. Direct molecular dynamics simulation of liquid-solid phase equilibria for two-component plasmas // *Phys. Rev. E*. 2012. — Vol. 85. id. 066405.
- [63] Hughto J., Horowitz C.J., Schneider A.S., Medin Z., Cumming A., Berry D.K. Direct molecular dynamics simulation of liquid-solid phase equilibria for a three-component plasma // *Phys. Rev. E*. 2012. — Vol. 86. id. 066413.
- [64] Medin Z., Cumming A. Crystallization of classical multicomponent plasmas // *Phys. Rev. E*. 2010. — Vol. 81. id. 036107.
- [65] Mckinven R., Cumming A., Medin Z., Schatz H. A Survey of Chemical Separation in Accreting Neutron Stars // *Astrophys. J.* 2016. — Vol. 823. id. 117.
- [66] Gupta S., Brown E.F., Schatz H., Moller P., Kratz K.-L. Heating in the Accreted Neutron Star Ocean: Implications for Superburst Ignition // *Astrophys. J.* 2007. — Vol. 662. P. 1188–1197.
- [67] Engstrom T.A., Yoder N.C., Crespi V.H. Crystal Chemistry of Three-component White Dwarfs and Neutron Star Crusts: Phase Stability, Phase Stratification, and Physical Properties // *Astrophys. J.* 2016. — Vol. 818. id. 183.
- [68] 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.
- [69] Dubin D.H.E. First-order anharmonic correction to the free energy of a Coulomb crystal in periodic boundary conditions // *Phys. Lett. A*. 1990. — Vol. 42. P. 4972–4982.
- [70] Farouki R.T., Hamaguchi S. Thermal energy of the crystalline one-component plasma from dynamical simulations // *Phys. Rev. E*. — Vol. 47. P. 4330–4336.

- [71] Kozhberov A.A., Baiko D.A. Physical features of binary Coulomb crystals. Madelung energy, collective modes and phonon heat capacity // *Contr. Plasma Ph.* 2012. — Vol. 52. P. 153–156.
- [72] Pollock E.L. Remarks on long range interactions in simulations // *AIP Conf. Proc.* 1999. — Vol. 492. P. 146–158.
- [73] Холопов Е.В. Проблемы сходимости кулоновских и мультипольных сумм в кристаллах // *УФН.* 2004. — Октябрь. Т. 174. С. 1033–1060.
- [74] Coldwell-Horsfall R.A., Maradudin A.A. Zero-Point Energy of an Electron Lattice // *J. Math. Phys.* 1960. — Vol. 1. P. 395–404.
- [75] Brush S.G., Sahlin H.L., Teller E. Monte Carlo Study of a One-Component Plasma. I // *J. Chem. Phys.* 1966. — Vol. 45. P. 2102–2118.
- [76] Foldy L.L. Electrostatic stability of Wigner and Wigner-Dyson lattices // *Phys. Rev. B.* 1978. — Vol. 17. P. 4889–4894.
- [77] Zucker I.J. Stability of the Wigner electron crystal on the perovskite lattice // *J. Phys: Cond. Mat.* 1991. — Vol. 3. P. 2595–2596.
- [78] Cockayne E. Comment on "Stability of the Wigner electron crystal on the perovskite lattice" // *J. Phys: Cond. Mat.* 1991. — Vol. 3. P. 8757–8758.
- [79] Lieb E.H., Narnhofer H. The thermodynamic limit for jellium // *J. Stat. Phys.* 1975. — Vol. 12. P. 291–310.
- [80] Borwein D., Borwein J.M., Shail R., Zucker I.J. Energy of static electron lattices // *J. Phys. A: Math Gen.* 1988. — Vol. 21. P. 1519–1531.
- [81] Baldereschi A., Senatore G., Oriani I. Madelung energy of the wigner crystal on lattices with non-equivalent sites // *Sol. St. Commun.* 1992. — Vol. 81. P. 21–22.
- [82] Kobayakov D., Pethick C.J. Towards a Metallurgy of Neutron Star Crusts // *Phys. Rev. Lett.* 2014. — Vol. 112. id. 112504.
- [83] Baiko D.A., Kozhberov A.A. Anisotropic crystal structure of magnetized neutron star crust // *MNRAS.* 2017. — Vol. 470. P. 517–521.
- [84] Igarashi T., Iyetomi H. Phase characteristics and elastic properties of binary Coulomb compounds // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2003. — Vol. 36. P. 6197–6206.
- [85] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. Москва: Наука, 1976.
- [86] Wallace D.C. Thermoelasticity of Stressed Materials and Comparison of Various Elastic Constants // *Phys. Rev.* 1967. — Vol. 162. P. 776–789.
- [87] Baiko D.A. Shear modulus of neutron star crust // *MNRAS.* 2011. — Vol. 416. P. 22–31.

- [88] Baiko D.A. Screening corrections to the Coulomb crystal elastic moduli // MNRAS. 2015. — Vol. 451. P. 3055–3060.
- [89] Ogata S., Ichimaru S. First-principles calculations of shear moduli for Monte Carlo-simulated Coulomb solids // Phys. Rev. A. 1990. — Vol. 42. P. 4867–4870.
- [90] Strohmayer T., van Horn H.M., Ogata S., Iyetomi H., Ichimaru S. The shear modulus of the neutron star crust and nonradial oscillations of neutron stars // Astrophys. J. 1991. — Vol. 375. P. 679–686.
- [91] Kobayakov D., Pethick C.J. Elastic properties of polycrystalline dense matter // MNRAS. 2015. — Vol. 449. P. L110–L112.
- [92] Ushomirsky G., Cutler C., Bildsten L. Deformations of accreting neutron star crusts and gravitational wave emission // MNRAS. 2000. — Vol. 319. P. 902–932.
- [93] Kozhberov A.A., Baiko D.A. Coulomb crystal mixtures in white dwarf cores and neutron star crusts // Phys. Plas. 2015. — Vol. 22. id. 092903.
- [94] Jog C.J., Smith R.A. Mixed lattice phases in cold dense matter // Astrophys. J. 1982. — Vol. 253. P. 839–841.
- [95] Dyson Fr.J. Chemical binding in classical Coulomb lattices // Annals of Physics. 1971. — Vol. 63. P. 1–11.
- [96] Igarashi T., Nakao N., Iyetomi H. Chemical Stability of Binary Coulomb Compounds // Contr. Plasma Ph. 2001. — Vol. 41. P. 319–322.
- [97] Hubbard W.B., Slattery W.L. Statistical Mechanics of Light Elements at High Pressure. I. Theory and Results for Metallic Hydrogen with Simple Screening // Astrophys. J. 1971. — Vol. 168. P. 131–140.
- [98] Hamaguchi S., Farouki, R.T. Thermodynamics of strongly-coupled Yukawa systems near the one-component-plasma limit. II. Molecular dynamics simulations // J. Chem. Phys. 1994. — Vol. 101. P. 9885–9893.
- [99] Hamaguchi S., Farouki R.T. Thermodynamics of strongly-coupled Yukawa systems near the one-component-plasma limit. I. Derivation of the excess energy // J. Chem. Phys. 1994. — Vol. 101. P. 9876–9884.
- [100] Mazars M. Yukawa potentials in systems with partial periodic boundary conditions. I. Ewald sums for quasi-two-dimensional systems // Molec. Phys. 2007. — Vol. 105. P. 1909–1925.
- [101] Robbins M.O., Kremer K., Grest G.S. Phase diagram and dynamics of Yukawa systems // J. Chem. Phys. 1988. — Vol. 88. P. 3286–3312.

- [102] Jancovici B. On the relativistic degenerate electron gas // *Nuovo Cim.* 1962 — Vol. 25. P. 428–455.
- [103] Witten T.A.Jr. Compounds in Neutron-Star Crusts // *Astrophys. J.* 1974. — Vol. 188. P. 615–626.
- [104] Кожберов А.А. Энергия и собственные моды бинарных кулоновских кристаллов в коре нейтронных звезд: бакалаврская диссертация. Санкт-Петербург, 2010.
- [105] Cohen M.H., Keffer F. Dipolar Sums in the Primitive Cubic Lattices // *Phys. Rev.* 1955. — Vol. 99. P. 1128–1134.
- [106] Kozhberov A.A., Baiko D.A. Coulomb Crystals with Isotopic Impurities // *Contr. Pl. Phys.* 2014. — Vol. 54. P. 859–867.
- [107] 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.
- [108] van Hove L. The Occurrence of Singularities in the Elastic Frequency Distribution of a Crystal // *Phys. Rev.* 1953. — Vol. 89. P. 1189–1193.
- [109] Albers R.C., Gubernatis J.E. Brillouin-Zone Integration Schemes: An Efficiency Study for the Phonon Frequency Moments of the Harmonic, Solid, One-Component Plasma // Los Alamos Scientific Laboratory Report. 1981. — No. LA-8674-MS.
- [110] Holas A. Numerical Integration over the Solid Angle and Volume of the Brillouin Zone // *J. Comput. Phys.* 1977. — Vol. 23. P. 150–166.
- [111] Kozhberov A.A., Baiko D.A. Thermodynamic functions of the hcp Coulomb crystal lattice // *Ap&SS.* 2015. — Vol. 359. id. 10.
- [112] Setyawan W., Curtarolo S. High-throughput electronic band structure calculations // *ArXiv e-prints.* 2004. — Cond-mat. arXiv:1004.2974.
- [113] Kalman G.J., Donko Z., Hartmann P., Golden K.I. Second plasmon and collective modes in binary Coulomb systems // *Europhys. Lett.* 2014. — Vol. 107. id. 35001.
- [114] Olausen S.A., Kaspi V.M. VizieR Online Data Catalog: The McGill magnetar catalog // *ApJS.* 2014. — Vol. 212. id. 6.
- [115] Усов Н.А., Гребенщиков Ю.Б., Улинич Ф.Р. Трехмерный вигнеровский кристалл в магнитном поле // *ЖЭТФ.* 1980. — Т. 78. С. 296–306.
- [116] Baiko D.A. Coulomb crystals in the magnetic field // *Phys. Rev. E.* 2009. — Vol. 80. id. 046405.
- [117] Baiko D.A., Yakovlev D.G. Thermodynamic functions of magnetized Coulomb crystals // *MNRAS.* 2013. — Vol. 433. P. 2018–2027.

- [118] Kozhberov A.A. Thermodynamic properties of the magnetized Coulomb crystal lattices // *Ap&SS*. 2016. — Vol. 361. id. 256.
- [119] Kozhberov A.A. Properties of magnetized Coulomb crystals of ions with polarizable electron background // *Phys. of Plasmas*. 2018. — Vol. 25. id. 062706.
- [120] Mochkovitch R., Hansen J.P. Fluid-solid coexistence curve of dense Coulombic matter // *Phys. Let.* 1979. — Vol. 73A. P. 35–38.
- [121] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Часть 1. Москва: Наука, 1976.
- [122] van Horn Н.М. The physics of white dwarfs // *Phys. Today* 1979. — Vol. 32. P. 23–30.
- [123] Лифшиц И.М., Степанова Г.И. О спектре колебаний неупорядоченных кристаллических решеток // *ЖЭТФ*. 1956. — Т. 30. С.938–946.
- [124] Крейн М.Г. О формуле следов в теории возмущений // *Мат. Сбор.* 1953. — Т. 33. С. 597–626.
- [125] Каган Ю., Иоселевский Я. Об аномальном поведении теплоемкости кристаллов с тяжелыми примесными атомами // *ЖЭТФ*. 1963. — Т. 45. С. 819–821.
- [126] Maradudin A.A. Some effects of point defects on the vibrations of crystal lattices // *Rep. Prog. Phys.* 1965. — Vol. 28. P. 331–380.
- [127] Альвен Х., Аррениус Г. Эволюция Солнечной системы. Москва: Мир, 1979.
- [128] van Kerkwijk М.Н., Bassa С.Г., Jacoby В.А., Jonker P.G. Optical Studies of Companions to Millisecond Pulsars // *ASP Conf. Ser.* 2005. — Vol. 328. P. 357–370.
- [129] Althaus L.G., Garcia-Berro E., Renedo I., Isern J., Corsico A.H., Rohrmann R.D. Evolution of White Dwarf Stars with High-metallicity Progenitors: The Role of ^{22}Ne Diffusion // *Astrophys. J.* 2010. — Vol. 719. P. 612–621.
- [130] Ventura J., Potekhin A. Neutron Star Envelopes and Thermal Radiation from the Magnetic Surface // *The Neutron Star — Black Hole Connection* / ed. by Kouveliotou C., Ventura J., Van den Heuvel E. Dordrecht: Kluwer Academic, 2001.
- [131] Kantor E.M., Gusakov M.E. The neutrino emission due to plasmon decay and neutrino luminosity of white dwarfs // *MNRAS*. 2007. — Vol. 381. P. 1702–1710.