4.3. КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ И ТЕМПЕРАТУРА ПЛАВЛЕНИЯ

Ионная решетка кристаллизуется, когда безразмерный параметр

$$\Gamma \equiv \frac{(Ze)^2}{r_i kT} = \frac{\text{кулоновская энергия}}{\text{тепловая энергия}} \tag{4.3.1}$$

становится достаточно большим. Здесь r_i определяется уравнением

$$\frac{n_i 4\pi r_i^3}{3} = 1, \tag{4.3.2}$$

где n_i — концентрация ионов. При $\Gamma \ll 1$ отклонение плазмы за счет электростатических поправок от идеальной картины Максвелла—Больцмана незначительно. При $\Gamma \gg 1$ кулоновские силы преобладают и плазма кристаллизуется, образуя периодическую решетку, которая минимизирует кулоновскую энергию.

Можно оценить критическое значение Γ и соответствующую температуру плавления T_m, пользуясь эмпирическим правилом Линдеманна [369]: ионная решетка плавится, когда средний квадрат тепловых флуктуаций положения иона $\langle(\delta r_i)^2\rangle$ удовлетворяет условию

$$\frac{\langle(\delta r_i)^2\rangle}{r_i^2} \sim \frac{1}{16}. \tag{4.3.3}$$

Упражнение 4.2. Рассмотрим малое смещение иона от положения равновесия в решетке Вигнера—Зейтца. Считая, что окружающее ион электронное облако однородно распределено в пространстве, покажите, что возвращающая сила, которая возникает от взаимодействия с этим облаком, представляет собой силу трехмерного гармонического осциллятора. Вычислите величину коэффициента упругости K и покажите, что частота колебаний равна

$$\omega_0 = \left(\frac{K}{m_i}\right)^{1/2} = \frac{\Omega_p}{3^{1/2}}, \tag{4.3.4}$$

где Ω_p — плазменная частота ионов:

$$\Omega_p = \left(\frac{4\pi n_i Z^2 e^2}{m_i}\right)^{1/2}. \tag{4.3.5}$$

Заметим, что для одномерной модели решетки, использованной в разделе (3.7), также справедливо соотношение (4.3.4) (ср. с упр. 3.9).

Упражнение 4.3. (основано на работе Солпитера [496]). Пусть $r_e a_0$ — радиус сферы, внутри которой в среднем находится один электрон; здесь $a_0 = \hbar/\alpha m_e c$ — боровский радиус, $\alpha \approx 1/137$. Таким образом, $r_i = Z^{1/3} r_e a_0$.

а) Покажите, что полная кулоновская энергия ячейки решетки Вигнера—Зейтца [равенство (2.4.8)] может быть записана в виде

$$E_c = -\frac{9}{5}\frac{Z^{5/3}}{r_e}\,\mathrm{Ry}$$

а энергия нулевых колебаний — в виде

$$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0 = 3\left(\frac{Zm_e}{m_i}\right)^{1/2} r_e^{-3/2}\,\mathrm{Ry}.$$

Сравните эти величины с аналогичными величинами для объемноцентрированной кубической (ОЦК) решетки.

Ответ: Для ОЦК решетки коэффициент в выражении E_c вместо 9/5 становится равным 1,804, а коэффициент 3 в выражении E_0 превращается в 2,66.

б) Покажите, что отношение $f \equiv |E_0/E_c|$ в решетке Вигнера-Зейтца удовлетворяет условию

$$f \sim \frac{5}{3}\left(\frac{m_e}{m_i}\frac{x}{1{,}92\alpha}\right)^{1/2} Z^{-7/6} \sim 0{,}33\left(\frac{x}{A}\right)^{1/2} Z^{-7/6},$$

где x — безразмерный параметр, введенный в равенстве (2.3.3), который определяет, насколько релятивистскими являются электроны. Очевидно, чтобы ионы оставались в решетке при нулевой температуре, необходимо условие $f \ll 1$ (почему?). Какой величины достигает f для устойчивых карликов, состоящих из ^{12}C с плотностью $\rho \lesssim 1 \cdot 10^{10}$ г/см^3?

Ответ: $f \sim 0{,}05$.

Согласно классическим представлениям, каждая степень свободы гармонического осциллятора вносит в среднюю энергию вклад $kT/2$:

$$\tfrac{1}{2}K\left\langle(\delta r_i)^2\right\rangle \sim \tfrac{1}{2}kT. \tag{4.3.6}$$

Соотношения (4.3.4) и (4.3.6) теперь дают

$$\left\langle(\delta r_i)^2\right\rangle \sim \frac{3kT}{m_i\Omega_p^2}. \tag{4.3.7}$$

Более точную оценку числового коэффициента в (4.3.7) можно получить следующим образом [401]. Каждая нормальная мода колебаний иона в решетке описывается волновым числом κ и состоянием поляризации λ. Двум поперечным состояниям поляризации припишем $\lambda = 1, 2$, а продольной моде — $\lambda = 3$. В области применимости классической теории

$$\left\langle(\delta r_i)^2\right\rangle_{\kappa,\lambda} = \frac{kT}{K(\kappa,\lambda)} = \frac{kT}{m_i\omega_\lambda^2(\kappa)}, \tag{4.3.8}$$

где $K(\kappa, \lambda)$ — коэффициент упругости для данной моды, а $\omega_\lambda(\kappa)$ — соответствующая частота. Чтобы определить $\langle(\delta r_i)^2\rangle$, нужно просуммировать равенство (4.3.8) по нормальным модам колебаний иона. Вспоминая, что плотность в фазовом пространстве для каждого поляризованного состояния равна $1/h^3$, получим, что число мод в элементе фазового объема $d^3x\, d^3p$ равно

$$\frac{d^3x\, d^3p}{h^3} = d^3x \frac{\kappa^2\, d\kappa}{2\pi^2}, \tag{4.3.9}$$

так как $p = \hbar\kappa$. Поскольку объем, приходящийся на один ион, равен $d^3x = 1/n_i$, то

$$\left\langle(\delta r_i)^2\right\rangle = \frac{1}{n_i}\int \frac{\kappa^2\, d\kappa}{2\pi^2} \sum_{\lambda=1}^{3} \left\langle(\delta r_i)^2\right\rangle_{\kappa,\lambda}$$

$$= \frac{kT}{m_i n_i}\int_0^{\kappa_D} \frac{\kappa^2\, d\kappa}{2\pi^2} \sum_{\lambda=1}^{3} \frac{1}{\omega_\lambda^2(\kappa)}. \tag{4.3.10}$$

Интеграл обрезается на дебаевской моде κ_D, величину которой можно найти, принимая полное число нормальных мод N ионов в объеме V равным $3N$:

$$3N = \sum_{\lambda=1}^{3} \int d^3x \frac{\kappa^2\, d\kappa}{2\pi^2} = \frac{3V\kappa_D^3}{6\pi^2}, \tag{4.3.11}$$

или

$$\kappa_D = \left(6\pi^2 n_i\right)^{1/3}. \tag{4.3.12}$$

Чтобы дальше использовать уравнение (4.3.10), нам понадобится дисперсионное соотношение для $\omega_\lambda(\kappa)$. Спектр возбуждения решетки мы обсудим более подробно в разд. 4.4, а здесь заметим только, что с хорошей точностью можно принять

$$\omega_{1,2} \simeq 0{,}7\frac{\kappa}{\kappa_D}\Omega_p,$$

$$\omega_3 \simeq 0{,}7\Omega_p. \tag{4.3.13}$$

Подставляя эти результаты в равенство (4.3.10), получим

$$\left\langle(\delta r_i)^2\right\rangle \simeq \frac{14kT}{m_i\Omega_p^2}, \tag{4.3.14}$$

что можно сравнить с первоначальным выражением (4.3.7).

Равенство (4.3.14) и правило Линдеманна (4.3.3) в точке плавления дают

$$\Gamma \simeq 75, \tag{4.3.15}$$

что в предположении $\mu_e \approx 2$ соответствует *температуре плавления*

$$T_m \simeq \frac{Z^2 e^2}{\Gamma k}\left(\frac{4\pi}{3}\frac{\rho}{2Zm_u}\right)^{1/3} \simeq 2 \times 10^3 \rho^{1/3} Z^{5/3}\ \mathrm{K}. \tag{4.3.16}$$

Эти значения находятся в разумном согласии с результатами, полученными при расчетах методом Монте—Карло для однокомпонентной кулоновской «жидкости» ($\Gamma = 126$) [91], а также при учете квантовых эффектов для ионов ($\Gamma = 160$) [331]. Недавно в работе [543] было найдено значение $\Gamma = 171 \pm 3$.

Мы определили *дебаевскую температуру* θ_D посредством равенства

$$k\theta_\mathrm{D} \equiv \hbar\Omega_p, \tag{4.3.17}$$

отсюда

$$\theta_\mathrm{D} \simeq 4 \times 10^3 \rho^{1/2}\ \mathrm{K}. \tag{4.3.18}$$

Для белых карликов с $Z > 2$, как правило, $T_m > \theta_\mathrm{D}$, так что применим классический вывод $\langle \delta r_i)^2 \rangle$. В противном случае при вычислении $\langle (\delta r_i)^2 \rangle$ следовало бы учесть нулевые колебания. Однако оказывается, что даже для He с $T_m \ll \theta_\mathrm{D}$ выражение (4.3.10) лучше согласуется с экспериментом, чем результаты некоторых попыток учесть нулевые колебания.

Когда жидкость кристаллизуется при $T \sim T_m$, выделяется скрытая теплота, количество которой в пересчете на один ион составляет

$$-q \sim kT_m. \tag{4.3.19}$$

Скрытую теплоту, выделяющуюся в процессе кристаллизации, следует включить в полный запас энергии звезды. Как обсуждается в разд. 4.5, это приводит к увеличению времени остывания.

Третья существенная температурная характеристика — это температура T_g, при которой кинетическая энергия ионов начинает превышать их колебательную энергию. При температурах выше T_g кристаллическая решетка разрушается, образуя плотный неидеальный газ.

Это происходит, когда

$$\left\langle (\delta r_i)^2 \right\rangle \sim r_i^2, \tag{4.3.20}$$

или $T \sim 16\ T_m$ [ср. с выражением (4.3.3)]. Отсюда

$$T_g \sim 3 \times 10^4 \rho^{1/3} Z^{5/3}\ \mathrm{K}. \tag{4.3.21}$$

Заметим, что для ^{12}C справедливо неравенство $\theta_D < T_m < T_g$ при условии, что $\rho \lesssim 10^6$ г/см.

4.4. ТЕПЛОЕМКОСТЬ КУЛОНОВСКОЙ РЕШЕТКИ

При $T \gg T_g$ ионы можно рассматривать как идеальный газ Максвелла—Больцмана и, следовательно, теплоемкость, приходящаяся на один ион, равна

$$c_v \sim \tfrac{3}{2}k, \qquad T \gg T_g. \tag{4.4.1}$$

Это значение было использовано в разд. 4.2 при элементарном обсуждении остывания белых карликов.

Когда температура опускается ниже T_g, начинается формирование решетки. При этом теплоемкость увеличивается вдвое из-за дополнительного вклада потенциальной энергии решетки, равного $kT/2$ на каждую моду колебаний. Таким образом,

$$c_v \sim 3k, \qquad \theta_D \ll T \ll T_g. \tag{4.4.2}$$

При дальнейшем охлаждении до $T \lesssim \theta_D$ становятся существенными квантовые эффекты и c_v падает много ниже значений (4.4.1) и (4.4.2). Когда $T \to 0$, то $c_v \sim T^3$. Поскольку этот режим может играть существенную роль при сопоставлении данных наблюдений с теоретическими оценками скорости остывания белых карликов и непосредственно свидетельствовать об их кристаллизации, мы обсудим его более подробно.

Средняя энергия иона в решетке при температуре T равна[1)]

$$\bar{\varepsilon} = \sum_{\kappa,\lambda} \hbar\omega_\lambda(\kappa)\left\{\frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega_\lambda(\kappa)] - 1} + \frac{1}{2}\right\}, \tag{4.4.3}$$

где $\beta = 1/kT$. Теплоемкость определяется выражением

$$c_v = \left(\frac{\partial\bar{\varepsilon}}{\partial T}\right)_V = k\sum_{\kappa,\lambda} \frac{\exp[\beta\hbar\omega_\lambda(\kappa)][\beta\hbar\omega_\lambda(\kappa)]^2}{\{\exp[\beta\hbar\omega_\lambda(\kappa)] - 1\}^2}. \tag{4.4.4}$$

Сумму по κ можно заменить интегралом, что дает

$$c_v = \frac{k}{n_i}\int_0^{\kappa_D} \frac{\kappa^2\,d\kappa}{2\pi^2} \sum_{\lambda=1}^{3} \frac{\exp[\beta\hbar\omega_\lambda(\kappa)][\beta\hbar\omega_\lambda(\kappa)]^2}{\{\exp[\beta\hbar\omega_\lambda(\kappa)] - 1\}^2}. \tag{4.4.5}$$

«Обычное» дебаевское приближение, которое здесь неприменимо, состоит в следующем[2)]:

---

1) Ср., например, с разд. 10.1 книги [479].

2) См., например, [479], разд. 10.2.