

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКАЯ ЭНЕРГИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СМЕСЕЙ В НЕДРАХ ВЫРОЖДЕННЫХ ЗВЕЗД

© 2024 г. А. А. Кожберов^{1*}¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 23.05.2024 г.

После доработки 05.09.2024 г.; принята к публикации 11.09.2024 г.

Разработан новый подход для расчета электростатической энергии затвердевших недр вырожденных звезд, применимый для систем с любым ионным составом. Предложенный метод использован для исследования упорядоченных кулоновских кристаллов, образованных ионами двух типов с зарядовыми числами Z_1 и Z_2 . Рассмотрены восемь различных объемно-центрированных кубических решеток при $x_1 \geq 1/2$, где x_1 — относительная концентрация ионов с зарядовым числом Z_1 . Шесть из них — впервые, тогда как при $x_1 = 1/2$ и $1/4$ результаты для электростатической энергии совпадают с известными ранее. Полученные результаты аппроксимированы удобным для практического применения выражением.

Ключевые слова: нейтронные звезды, белые карлики, кулоновские кристаллы.

DOI: 10.31857/S0320010824080042, EDN: LXVXHP

ВВЕДЕНИЕ

Вещество в недрах белых карликов и нейтронных звезд при плотностях порядка 10^4 – 10^{11} г/см³ состоит из полностью ионизированных атомов и вырожденного электронного газа (Шапино и Тьюколски, 1985; Хенсел и др., 2007). Согласно новейшим моделям, ионы представлены несколькими типами. Так, внутренние слои большинства белых карликов — это углеродно-кислородная плазма с примесями неона и железа (см., например, Сумон и др., 2022), а внешняя кора нейтронной звезды — это смесь из более чем десятка элементов (см., например, Фантина и др., 2020; Кау и др., 2020; Щечилин и др., 2023).

На начальных этапах тепловой эволюции вырожденных звезд ионы находятся в жидком состоянии, но по мере остывания кристаллизуются. Образовавшийся кристалл обычно описывается с помощью модели кулоновского кристалла (Хенсел и др., 2007).

Кулоновские кристаллы, образованные ионами с одинаковыми зарядами и массами, достаточно подробно исследованы (см., например, Борн и Кунь, 1954; Байко и др., 2001; Хенсел и др., 2007). Изучению физических свойств многокомпонентных кристаллов посвящено гораздо меньше работ (Огата и др., 1993; Шамель и Фантина, 2016). Зачастую при описании их свойств прибегают к теории линейного смешивания. Это достаточно грубое приближение, которое требует уточнений, путем сравнения с точными расчетами (например, Шамель и Фантина, 2016).

Ранее нами были исследованы электростатические и термодинамические свойства нескольких многокомпонентных кристаллов (Кожберов и Байко, 2012; Кожберов и Байко, 2015; Кожберов, 2020), но полной картины они не сформировали. Поэтому предлагается новый подход к расчету электростатической энергии кулоновских кристаллов, который можно использовать как для упорядоченных, так и для “неупорядоченных” смесей (под выражением “неупорядоченный кристалл” имеется в виду, что новый способ позволяет рассмотреть элементарную ячейку сколько угодно больших размеров, но со строгими периодическими граничными условиями).

В настоящей работе с помощью нового подхода исследовано несколько новых кристаллических систем. Получено аппроксимационное выражение, описывающее электростатическую энергию любого двухкомпонентного кулоновского кристалла.

ЭНЕРГИЯ МАДЕЛУНГА

Положения равновесия ионов в кристалле описываются векторами прямой решетки $\mathbf{R}_l = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3$, где l_1, l_2, l_3 — целые числа, $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ — векторы основных трансляций решетки. Вектора $\mathbf{G}_p = p_1 \mathbf{g}_1 + p_2 \mathbf{g}_2 + p_3 \mathbf{g}_3$ образуют обратную решетку, где p_1, p_2, p_3 — целые числа, $\mathbf{g}_i \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$.

Энергия статической решетки, также называемой энергией Маделунга, описывается следующим выражением:

*Электронный адрес: kozhberov@gmail.com

$$U_M = \frac{1}{2} \sum_{l'l'}' \frac{Z_l Z_{l'} e^2}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}|} - n_e \sum_l Z_l e \int \frac{d\mathbf{r}}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{r}|} + \frac{n_e^2}{2} \int \int \frac{d\mathbf{r} d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (1)$$

где Z_l — зарядовое число иона, находящегося в l -ом узле кристаллической решетки, e — элементарный заряд электрона, векторы \mathbf{r} и \mathbf{r}' описывают положение электронного фона, n_e — концентрация электронов.

Представим электростатическое взаимодействие ионов в виде суммы двух слагаемых: энергии Маделунга однокомпонентной идеальной решетки из ионов со средним зарядом Z и остатка:

$$U_{ii} \equiv N \frac{Z^2 e^2}{a} \zeta + \Delta U_M = N \frac{Z^2 e^2}{a} \zeta + \frac{1}{2} \sum_{l'l'}' \frac{\Delta Z_l \Delta Z_{l'} e^2}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}|}, \quad (2)$$

где N — полное число ионов в кристалле, $a = (4\pi n/3)^{-1/3}$ — радиус ионной сферы, ζ — постоянная Маделунга, n — концентрация ионов, $n_e = Zn$. Средний заряд выбран таким образом, чтобы $\sum_l \Delta Z_l = 0$, где $\Delta Z_l = Z_l - Z$. Для кристаллов, образованных ионами двух разных типов, ΔZ_l принимает два значения: $\Delta Z_1 \equiv Z_1 - Z$ и $\Delta Z_2 = x_1/(x_1 - 1)\Delta Z_1$, где $x_1 = N_1/N$ — относительная концентрация ионов первого сорта, то есть $Z = x_1 Z_1 + (1 - x_1) Z_2$.

Для объемно-центрированной кубической (ОЦК или bcc) решетки $\zeta_{bcc} = -0.895929255682$. Это наименьшее значение среди всех однокомпонентных решеток, когда-либо рассмотренных в кулоновском приближении. Поэтому ОЦК решетка выбирается в качестве базовой, при рассмотрении свойств коры нейтронной звезды (см., например, Хенсел и др., 2007).

Выражение для ΔU_M можно переписать, сделав преобразование Фурье по ΔZ_l : $\Delta Z_l = \sum_{\mathbf{k}} Z_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l}$ и $Z_{\mathbf{k}} = 1/N \sum_l \Delta Z_l e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_l}$, где суммирование по \mathbf{k} это суммирование по всем волновым векторам кристалла \mathbf{k} в первой зоне Бриллюэна. Отметим, что строго говоря, коэффициенты преобразования Фурье должны записываться как интегралы по зоне Бриллюэна, но обычно, как и в данной работе, рассматриваются кристаллы конечного размера, поэтому число волновых векторов дискретно. Тогда

$$\Delta U_M = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} Z_{\mathbf{k}} Z_{\mathbf{k}'} e^2 \sum_{l'l'}' \frac{\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_l + i\mathbf{k}'\mathbf{R}_{l'})}{2|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}|} \equiv N \frac{e^2}{a} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}), \quad (3)$$

где $g(\mathbf{k}) \equiv Z_{\mathbf{k}} Z_{-\mathbf{k}} = Z_{\mathbf{k}} Z_{\mathbf{k}}^*$.

Используя преобразование Эвальда, для $f(\mathbf{k})$ получим следующее выражение:

$$f(\mathbf{k}) = \sum_l' \frac{\text{erfc}(i\mathbf{k}\mathbf{R}_l)}{R_l} = \frac{3}{2a^2} \sum_p \frac{1}{|\mathbf{G}_p - \mathbf{k}|^2} \exp\left(-\frac{|\mathbf{G}_p - \mathbf{k}|^2}{4A^2}\right) + \frac{a}{2} \sum_l' \frac{\text{erfc}(AR_l)}{R_l} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} - \frac{Aa}{\sqrt{\pi}}, \quad (4)$$

где $Aa = 2$. Выражение (4) применимо для любой конфигурации ионов и зависит только от типа исследуемой кристаллической решетки. Для произвольного распределения ионов функцию $g(\mathbf{k})$ аналитически вычислить невозможно, для каждой конфигурации она своя. Для упорядоченных систем $g(\mathbf{k})$ — набор нескольких дельта-функций. Следовательно, новый метод расчета электростатической энергии особенно полезен, когда нужно рассмотреть большое число систем, различных по ионному составу, но имеющих одинаковую кристаллическую решетку. Ранее для этого требовалось вычислять громоздкие суммы, а в данном случае достаточно нескольких значений $f(\mathbf{k})$.

Заметим, что функция $g(\mathbf{k})$ связана с корреляционной функцией кристалла так, что $\sum_{\mathbf{R}} \Delta Z(\mathbf{R}) \Delta Z(\mathbf{R} + \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$.

МНОГОКОМПОНЕНТНАЯ ОЦК РЕШЕТКА

Используем предложенный способ для расчета энергий нескольких многокомпонентных ОЦК решеток. На рис. 1 показано, какие значения может принимать $f(\mathbf{k})$ при разных k , лежащих в первой зоне Бриллюэна этой решетки. Несмотря на то, что при $k \ll 1$ функция $f(\mathbf{k}) \propto k^{-2}$, произведение $f(0)g(0)$ равно нулю.

Рассмотрим простейший многокомпонентный кристалл: двухкомпонентную упорядоченную ОЦК (CsCl) решетку с $Z = 0.5(Z_1 + Z_2)$ и $\Delta Z_2 = -\Delta Z_1$. Представим ее, как совокупность двух однокомпонентных простых кубических (ПК) решеток, сдвинутых относительно друг друга на вектор $\boldsymbol{\chi} = 0.5a_1(1, 1, 1)$, где a_1 — постоянная решетки. Тогда

$$Z_{\mathbf{k}} = \Delta Z_1 (1 - e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\chi}}) \sum_p \delta(\mathbf{k} + \mathbf{G}_p), \quad (5)$$

где $\mathbf{G}_p = 2\pi/a_1(p_1, p_2, p_3)$ — векторы обратной ПК решетки. Вектор \mathbf{k} принадлежит первой зоне Бриллюэна ОЦК решетки, поэтому из всей суммы по p останутся два типа слагаемых: $\mathbf{G}_0 = 0$ и $\mathbf{G}_1 = 2\pi/a_1(1, 0, 0)$. Так как $f(0)g(0) = 0$, то $\sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) = g(\mathbf{G}_1) f(\mathbf{G}_1)$ и

$$\Delta U_M^{bcc} = N \frac{e^2}{a} f(\mathbf{G}_1) g(\mathbf{G}_1) = -0.5010780286N \frac{\Delta Z_1^2 e^2}{a}. \quad (6)$$

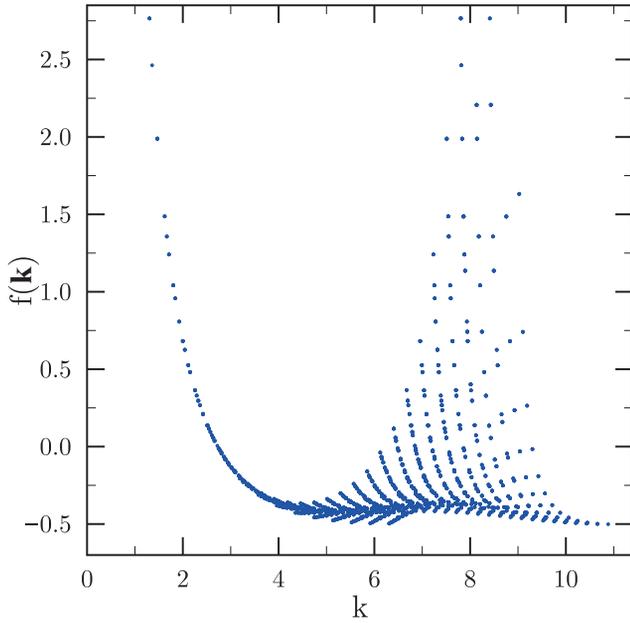


Рис. 1. Зависимость $f(\mathbf{k})$ от k .

Этот результат в точности совпадает с полученным ранее в работе Кожберов и Байко (2015).

Отметим, что $f(\mathbf{G}_1) = -0.5010780286$ — минимальное значение, которое достигает функция $f(\mathbf{k})$ для ОЦК решетки. Следовательно энергия двухкомпонентной упорядоченной ОЦК решетки минимальна среди всех энергий двухкомпонентных ОЦК решеток с $x_1 = 1/2$.

Рассмотрим более сложную структуру: пятикомпонентную ОЦК (ПК16) решетку. Ее элементарная ячейка изображена на рис. 2 и представляет собой 8 элементарных ячеек “стандартной” ОЦК решетки составленных в один большой куб. Разными цветами показаны ионы с разными зарядами. ПК16 решетка может быть описана как простая кубическая решетка с 16 векторами базиса. Эти векторы и зарядовые числа соответствующих им ионов приведены в табл. 1. Тогда

$$Z_{\mathbf{k}} = \left\{ \Delta Z_a + \Delta Z_b e^{i\mathbf{k}\chi_2} + \Delta Z_c \sum_{j=3}^5 e^{i\mathbf{k}\chi_j} + \Delta Z_d \sum_{j=6}^8 e^{i\mathbf{k}\chi_j} \right\} \sum_p \delta(\mathbf{k} + \widetilde{\mathbf{G}}_p) + \Delta Z_f e^{i\mathbf{k}\chi_9} \sum_p \delta(\mathbf{k} + \mathbf{G}_p), \quad (7)$$

где $\Delta Z_a \equiv Z_a - Z$ (для других зарядов аналогично), $\widetilde{\mathbf{G}}_p = \pi/a_1(p_1, p_2, p_3)$ — векторы обратной ПК решетки с постоянной решетки, равной $2a_1$. В данном случае из всех слагаемых по p останется 5 различных типов: $\mathbf{G}_0, \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2 = \pi/a_1(1, 0, 0), \mathbf{G}_3 = \pi/a_1(1, 1, 0)$ и $\mathbf{G}_4 = \pi/a_1(1, 1, 1)$. При этом $f(\mathbf{G}_2) = -0.1906432265$,

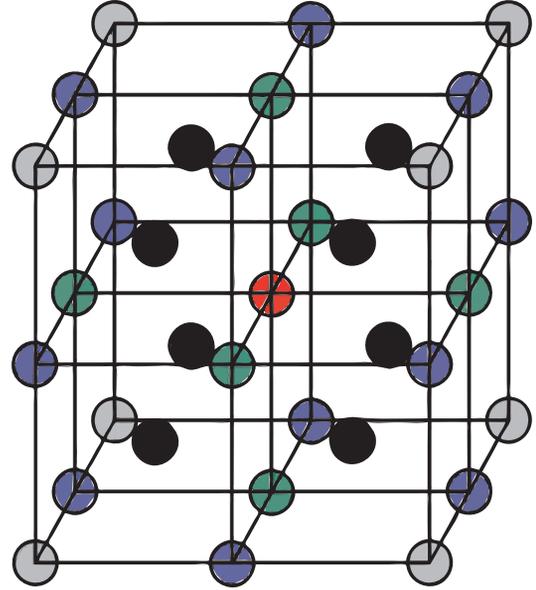


Рис. 2. Элементарная ячейка пятикомпонентной ОЦК решетки. Ионы с зарядовым числом Z_a серые, Z_b — красные, Z_c — синие, Z_d — зеленые, Z_f — черные.

Таблица 1. Векторы базиса ПК16 решетки

зарядовое число иона	вектор базиса χ_j
Z_a	$\chi_1 = 0$
Z_b	$\chi_2 = 0.5a_1(1, 1, 1)$
Z_c	$\chi_3 = 0.5a_1(1, 0, 0)$
Z_c	$\chi_4 = 0.5a_1(0, 1, 0)$
Z_c	$\chi_5 = 0.5a_1(0, 0, 1)$
Z_d	$\chi_6 = 0.5a_1(1, 1, 0)$
Z_d	$\chi_7 = 0.5a_1(1, 0, 1)$
Z_d	$\chi_8 = 0.5a_1(0, 1, 1)$
Z_f	$\chi_9 = 0.25a_1(1, 1, 1)$
Z_f	$\chi_{10} = 0.25a_1(3, 1, 1)$
Z_f	$\chi_{11} = 0.25a_1(1, 3, 1)$
Z_f	$\chi_{12} = 0.25a_1(1, 1, 3)$
Z_f	$\chi_{13} = 0.25a_1(3, 3, 1)$
Z_f	$\chi_{14} = 0.25a_1(3, 1, 3)$
Z_f	$\chi_{15} = 0.25a_1(1, 3, 3)$
Z_f	$\chi_{16} = 0.25a_1(3, 3, 3)$

$f(\mathbf{G}_3) = -0.3644516210$ и $f(\mathbf{G}_4) = -0.4302263858$, причем $2f(\mathbf{G}_1) = 3f(\mathbf{G}_2) + f(\mathbf{G}_4)$. Заметим, что при суммировании необходимо учитывать относительный вклад разных векторов обратной решетки.

Используем выражение (7) для комплексного исследования двухкомпонентных решеток.

При $Z_a = Z_b = Z_c = Z_d = -Z_f$ ПК16 решетка становится двухкомпонентной упорядоченной ОЦК решеткой. При $\mathbf{k} = \mathbf{G}_2, \mathbf{G}_3$ и \mathbf{G}_4 сумма в фигурных скобках выражения (7) равна 0, дополнительных слагаемых в Z_k не появляется, и поправка ΔU_M определяется тем же выражением (6).

Двухкомпонентную упорядоченную ОЦК решетку можно получить из ПК16 решетки и другим способом, положив $\Delta Z_1 \equiv \Delta Z_a = -\Delta Z_b$ и $Z_c = Z_d = Z_f = 0$. Тогда концентрация ионов уменьшится в 8 раз, а

$$\begin{aligned} \Delta U_M^{\text{bcc}} &= N \frac{\Delta Z_1^2 e^2}{2a} (3f(\mathbf{G}_2) + f(\mathbf{G}_4)) = \\ &= -0.5010780286N \frac{\Delta Z_1^2 e^2}{a}. \end{aligned} \quad (8)$$

При $\Delta Z_1 = \Delta Z_a = -3\Delta Z_d$ и $Z_b = Z_c = Z_f = 0$ ПК16 решетка становится, двухкомпонентной гранцентрированной кубической (fccb) решеткой, исследованной ранее в работе Кожберов (2020). Для нее, с учетом уменьшения концентрации ионов, получим:

$$\begin{aligned} \Delta U_M^{\text{fcc}} &= N \frac{\Delta Z_1^2 e^2}{9 \times 2^{1/3} a} (3f(\mathbf{G}_2) + 3f(\mathbf{G}_3)) = \\ &= -0.1468596908N \frac{\Delta Z_1^2 e^2}{a}. \end{aligned} \quad (9)$$

У двухкомпонентной ГЦК решетки относительная концентрация ионов с Z_1 равна $1/4$, но она не единственная с данным x_1 . Из всех возможных конфигураций решетки с $x_1 = 1/4$ выберем ту, у которой энергия минимальна. Тогда $\Delta Z_1 = \Delta Z_a = \Delta Z_c = -3\Delta Z_b$ и $Z_b = Z_d = Z_f$, следовательно

$$\begin{aligned} \Delta U_M &= N \frac{\Delta Z_1^2 e^2}{9a} (3f(\mathbf{G}_1) - 3f(\mathbf{G}_2) + f(\mathbf{G}_4)) = \\ &= -0.1512811995N \frac{\Delta Z_1^2 e^2}{a}. \end{aligned} \quad (10)$$

Эта решетка рассматривалась в работах Огата и др., (1993); Игараши и др., (2001), где она названа $4\{fcc\}$. В работе Огата и др. (1993) из молекулярно-динамических расчетов была определена электростатическая энергия для некоторых Z_1 и Z_2 . Значения, приведенные в работе Огата и др. (1993) хорошо согласуются с тем, которое дает выражение (10). Для разных Z_2/Z_1 численный коэффициент изменяется от -0.15076 при $Z_2/Z_1 = 3/4$ до -0.15127 при $Z_2/Z_1 = 4$.

Таким образом, и при $x_1 = 1/2$, и при $x_1 = 1/4$ наименьшей электростатической энергией обладает такая кристаллическая решетка, которая при $Z_1 = Z_2$

Таблица 2. Зависимость ΔU_M от x_1

x_1	$u(x_1)$
1/16	0.0208537772
1/8	0.0548528116
3/16	0.0922150665
1/4	0.1512811995
5/16	0.1950545017
3/8	0.2678564798
7/16	0.3548622871
1/2	0.5010780286

становится ОЦК решеткой. Этот результат подтверждает правильность выбора решетки, изображенной на рис. 2, для исследования. Другие значения x_1 для нее ранее никогда не рассматривались.

Наименьшее значение x_1 равно $1/16$ достигается при $\Delta Z_1 = \Delta Z_a = -15\Delta Z_f$ и $Z_b = Z_c = Z_d = Z_f$. В этом случае

$$\begin{aligned} \Delta U_M &= N \frac{\Delta Z_1^2 e^2}{225a} \times \\ &\times (6f(\mathbf{G}_2) + 6f(\mathbf{G}_3) + 2f(\mathbf{G}_4) + f(\mathbf{G}_1)) = \\ &= -0.0208537772N \frac{\Delta Z_1^2 e^2}{a}. \end{aligned} \quad (11)$$

Если $\Delta Z_1 = \Delta Z_a = \Delta Z_b = -7\Delta Z_c$ и $Z_c = Z_d = Z_f$, то $x_1 = 1/8$, а

$$\begin{aligned} \Delta U_M &= N \frac{\Delta Z_1^2 e^2}{49a} (6f(\mathbf{G}_3) + f(\mathbf{G}_1)) = \\ &= -0.0548528116N \frac{\Delta Z_1^2 e^2}{a}. \end{aligned} \quad (12)$$

Аналогично можно поступить для других x_1 . Значения $u(x_1) \equiv -\Delta U_M a / (N \Delta Z_1^2 e^2)$ для всех двухкомпонентных решеток, которые можно получить из ПК16 решетки, приведены в табл. 2. При каждом заданном x_1 выбиралась конфигурация, обладающая минимальной энергией. Значения при $x_1 > 1/2$ не приведены, так как двухкомпонентные решетки не изменяются при одновременной замене $Z_1 \leftrightarrow Z_2$ и $x_1 \leftrightarrow 1 - x_1$.

Достоинство выбранной решетки в том, что она позволяет исследовать электростатические энергии восьми различных двухкомпонентных решеток при минимальном числе ионов в элементарной ячейке. Элементарную ячейку, изображенную на рис. 2, можно было бы сделать и более многокомпонентной, например, рассмотрев случай, при котором в узлах решетки с векторами базиса χ_{9-16} расположены ионы четырех различных типов, а не одного. Однако, такая восьмикомпонентная решетка не даст ничего нового

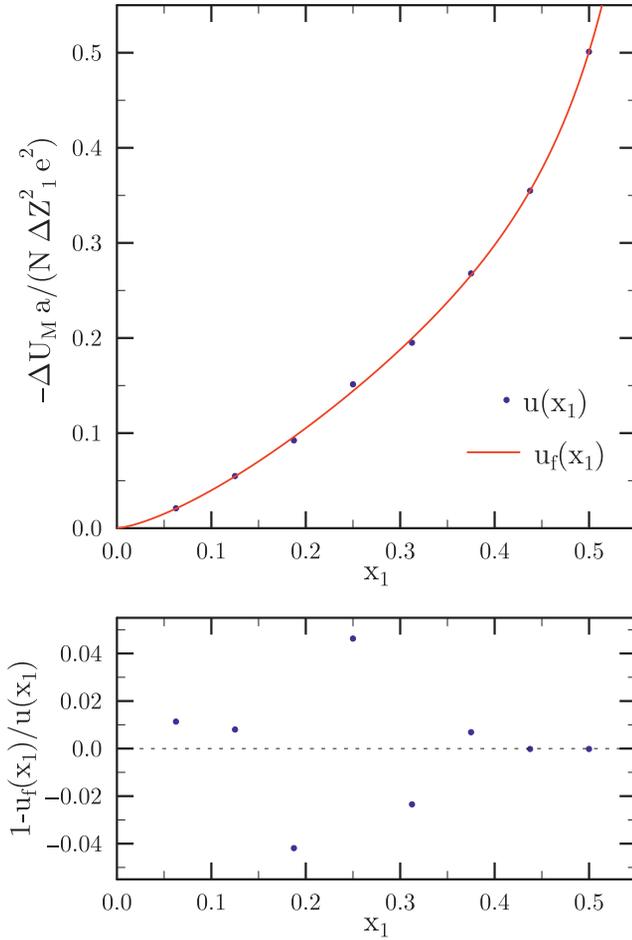


Рис. 3. Зависимость $u(x_1)$ от x_1 , ее аппроксимация $u_f(x_1)$ и относительная разница между точным значением и аппроксимационным $1 - u_f(x_1)/u(x_1)$.

для рассматриваемой задачи: новые двухкомпонентные конфигурации, которые можно было бы получить из нее, не являются энергетически предпочтительными.

В работе Кожберов (2020) было исследовано несколько многокомпонентных кристаллических структур. Из них можно получить множество двухкомпонентных решеток с десятью различными $x_1 \leq 1/2$, но при разных x_1 симметрии решеток разные (как кубические, так и гексагональные), и поэтому с помощью какого-то одного универсального выражения их электростатические энергии описать невозможно.

Все рассмотренные в данной работе двухкомпонентные решетки при $Z_1 = Z_2$ становятся ОЦК решеткой. Поэтому, используя результаты из табл. 2, за-

висимость ΔU_M от x_1 можно аппроксимировать как:

$$\begin{aligned} \Delta U_M &\equiv N \frac{\Delta Z_1^2 e^2}{a} u_f(x_1) = \\ &= -N \frac{\Delta Z_1^2 e^2}{a} \frac{x_1^{1.4}}{1 - 12.4x_1^{5.67}}. \end{aligned} \quad (13)$$

Зависимости $u(x_1)$ и $u_f(x_1)$ от x_1 , а также относительная разница между точным значением и аппроксимационным $1 - u_f(x_1)/u(x_1)$ показаны на рис. 3. Погрешность аппроксимации не превышает 5%. Результаты из работы Огаты и др. (1993) не приведены, так как для них погрешность на порядок меньше.

Обобщая выражения (2) и (13), получим что общий вид электростатической энергии двухкомпонентного кристалла следующий:

$$U_M = -N \frac{e^2}{a} \left(0.8959292 Z^2 + \frac{x_1^{1.4} \Delta Z_1^2}{1 - 12.4x_1^{5.67}} \right). \quad (14)$$

Заметим, что аппроксимационное выражение применимо только при $x_1 \leq 1/2$, в противном случае зарядовые числа рассматриваемых ионов стоит переназначить.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе реализован новый подход к расчету электростатической энергии многокомпонентных кулоновских кристаллов, как упорядоченных, так и нет. Он основан на преобразовании Фурье по зарядовым числам ионов и особенно эффективен, когда нужно рассмотреть множество систем с одинаковой кристаллической структурой, но различных по ионному составу. В этом случае достаточно единожды рассчитать громоздкие суммы по узлам кристаллической решетки, и уже после использовать их для конкретной композиции ионов.

Предложенный метод имеет большие практические перспективы. Он расширяет окно возможностей по исследованию свойств недр вырожденных звезд. С его помощью в настоящей работе получены энергии для шести новых двухкомпонентных решеток, а известные ранее результаты при $x_1 = 1/4$ и $x_1 = 1/2$ воспроизведены с должной точностью.

Ранее наиболее полно многокомпонентные кулоновские кристаллы рассматривались в работах Шамель и Фантина (2016), Кожберов (2020). Однако весь “пестрый зоопарк” кристаллических решеток, рассмотренный в работе Кожберов (2020), имел один практический недостаток. Он не позволял получить общее выражение для электростатической энергии двухкомпонентных кристаллов. Решетки, исследованные в данной работе, от этого недостатка избавлены. Следовательно, будет достаточно рационально использовать именно их для исследования точности выполнения правила линейного смешивания и построения фазовой диаграммы двухкомпо-

нентных кулоновских систем в недрах вырожденных звезд. О значительном влиянии электростатической энергии на фазовые переходы в различных ионных смесях подробно сказано в работе Байко (2022). В свою очередь, информация о фазовых переходах необходима для интерпретации различных наблюдательных данных (например, для решения проблемы природы “Q-ветви” в популяции белых карликов на диаграмме Герцшпрунга–Рассела). Кроме того, с электростатической энергией связаны модули упругости коры нейтронной звезды (см. Кожберов (2023)). С другой стороны, как показано в работе Шамель и Фантина (2016), рассмотренные изменения в электростатической энергии оказывают незначительное влияние непосредственно на уравнение состояния коры нейтронной звезды. Полученные результаты применимы и в других областях физики, в которых используется модель кулоновского кристалла.

В заключение отметим, что использованная модель кулоновского кристалла — простейшая. Направлений для ее “усложнения” несколько. Во-первых, стоит учесть, что электронный фон неоднородный. Для однокомпонентного кристалла систематическое исследование влияния поляризации электронного фона на электростатическую энергию проведено в работе Кожберов и Потехин (2021), где было предсказано появление структурных переходов в недрах вырожденных звезд. Для многокомпонентных систем такого исследования нет. Во-вторых, стоит учесть конечный размер атомных ядер, образующих решетку. Например, как это сделано в статье Земляков и Чугунов (2022) при изучении упругости коры нейтронной звезды. Полученный в этой работе результат свидетельствует о том, что во внутренних слоях, где размеры ядер сравнимы с межъядерным расстоянием, эффективный модуль сдвига может уменьшиться на ~25%. Стоит ожидать изменения такого же порядка и для электростатической энергии.

БЛАГОДАРНОСТЬ

Автор выражает благодарность Байко Д.А. за помощь в решении данной задачи.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена в рамках темы Государственного задания ФТИ номер FFUG-2024-0002.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Байко (D.A. Baiko), MNRAS **517**, 3962 (2022).
2. Байко и др. (D.A. Baiko, A.Y. Potekhin, and D.G. Yakovlev), Phys. Rev. E **64**, 057402 (2001).
3. Борн М., Кунь Х., *Динамическая теория кристаллических решеток* (М.: Изд-во иностранной лит-ры, 1954).
4. Земляков, Чугунов (N.A. Zemlyakov and A.I. Chugunov), MNRAS **518**, 3813 (2022).
5. Игараша и др. (T. Igarashi, N. Nakao, and H. Iyetomi), Contrib. Plasm. Phys. **41**, 319 (2001).
6. Кау и др. (T. Carreau, A.F. Fantina, and F. Gulminelli), Astron. Astrophys. **640**, A77 (2020).
7. Кожберов (A.A. Kozhberov), Contrib. Plasm. Phys. **60**, e202000021 (2020).
8. Кожберов (A.A. Kozhberov), MNRAS **523**, 4855 (2023).
9. Кожберов, Байко (A.A. Kozhberov and D.A. Baiko), Contrib. Plasm. Phys. **52**, 153 (2012).
10. Кожберов, Байко (A.A. Kozhberov and D.A. Baiko), Phys. Plas. **22**, 153 (2015).
11. Кожберов, Потехин (A.A. Kozhberov and A.Y. Potekhin), Phys. Rev. E **103**, 043205 (2021).
12. Огата и др. (S. Ogata, H. Iyetomi, S. Ichimaru, and H.M. Van Horn), Phys. Rev. E **48**, 1344 (1993).
13. Сумон и др. (D. Saumon, S. Blouin, and P-E. Tremblay), Physics Reports **988**, 1 (2022).
14. Фантина и др. (A.F. Fantina, S. De Ridder, N. Chamel, and F. Gulminelli), Astron. Astrophys. **633**, A149 (2020).
15. Хенсел и др. (P. Haensel, A.Y. Potekhin, and D.G. Yakovlev), *Neutron Stars I: Equation of State and Structure* (New York: Springer, 2007).
16. Шамель, Фантина (N. Chamel and A.F. Fantina), Phys. Rev. C **94**, 065802 (2016).
17. Шапиро С., Тьюколски С., *Черные дыры, белые карлики и нейтронные звезды* (М.: Мир, 1985).
18. Щечилин и др. (N.N. Shchepochin, M.E. Gusakov, and A.I. Chugunov), MNRAS **523**, 4643 (2023).