

Термодинамические свойства бинарных кулоновских кристаллов.

А.А.Кожберов^{1,2}, Д. А. Байко^{1,2}

¹Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, С-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, С-Петербург, Россия
kozherov@gmail.com

В данной работе изучается модель бинарной кулоновской кристаллической смеси. Предполагается, что вещество представляет собой кристалл, образованный атомными ядрами с двумя различными зарядовыми и массовыми числами (Z_1, M_1 и Z_2, M_2 , причём $Z_1 \leq Z_2$), и пространственно-однородный фон электронов, компенсирующий заряд ядер. В гармоническом приближении были исследованы свойства нескольких типов решеток: простая кубическая с двумя ионами в элементарной ячейке (ПКБ), объемно-центрированная (ОЦК), гексагональная плотно упакованная (ГПУ). Фононный спектр таких систем зависит от масс и зарядов, образующих их ядер. Условие вещественности частот фононов определяет границы устойчивости кулоновских кристаллов. Показано, что у устойчивой ПКБ решётки $\alpha \in [1, 3.6]$, у устойчивой ГПУ решётки $\alpha \in [1, 1.27]$, где $\alpha = Z_2/Z_1$; значения же масс ионов M_1 и M_2 на устойчивость не влияют.

Также были исследованы зависимости фононных вкладов в термодинамические величины (теплоёмкость, энтропия, давление и т.п.) от отношения зарядов, масс и температуры, проанализированы классические и квантовые асимптотики. В частности оказалось, что фононная теплоёмкость ГПУ решётки воспроизводит закон T^3 Дебая с заданной точностью при существенно более низких температурах, чем фононная теплоёмкость ОЦК решётки (при $T \approx 5 \times 10^{-4} T_p$ и $T \approx 10^{-2} T_p$ соответственно, где $T_p = \hbar \omega_p = \hbar \sqrt{4\pi n e^2 Z^2 / M}$ — плазменная температура ядер, n — концентрация ядер).