РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ им. А.Ф. ИОФФЕ

Байко Денис Алексеевич

Кинетические явления в остывающих нейтронных звёздах

(специальность 01.03.02 — астрофизика, радиоастрономия)

Диссертация на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель д.ф.-м.н. Яковлев Д.Г.

Санкт-Петербург

2000

Оглавление

Введение

Результаты, полученные в данной работе, в основном, относятся к внутреннему строению и эволюции нейтронных звёзд. Поэтому естественно начать с описания основных представлений об этих астрофизических объектах (например, [91]). Важность исследований нейтронных звёзд сразу следует из оценки средней плотности их вещества $\bar{\rho}$: при массе типичной нейтронной звезды $M \sim 1.4 M_\odot$ и радиусе $R \sim 10$ км имеем $\bar{\rho} \sim 10^{15}$ г см$^{-3}$. Это примерно в 3 раза превышает плотность в атомных ядрах $\rho_0 = 2.8 \cdot 10^{14}$ г см$^{-3}$. Свойства вещества при плотностях $\rho \gtrsim \rho_0$ дают ключ к построению теории сильных взаимодействий, ещё очень далёкому от завершения. Возможности изучения вещества в столь экстремальных условиях на Земле достаточно ограничены. Поэтому астрофизическая информация о нейтронных звёздах и, тем самым, о свойствах составляющего их сверхплотного вещества практически незаменима. Основной проблемой становится интерпретация этой информации, которая подразумевает её сопоставление с предсказаниями теоретических моделей. Некоторым аспектам этой обширной проблемы и посвящена настоящая диссертация.

В строении нейтронной звезды принято выделять 2 области: ядро ($\rho \gtrsim 0.5\rho_0$, радиус ~ 10 км) и кору ($\rho \lesssim 0.5\rho_0$, толщина $\lesssim 1$ км). Кору нейтронной звезды, в свою очередь, подразделяют на внутреннюю ($0.5\rho_0 \gtrsim \rho > \rho_d \approx 4 \cdot 10^{11}$ г см$^{-3}$, толщина $\lesssim 1$ км) и внешнюю ($\rho < \rho_d$, толщина $\lesssim 100$ м). Во внутренней коре вещество состоит из атомных ядер, переобогащённых нейтронами, нейтронной жидкости вне ядер (возможно сверхтекучей) и сильно вырожденного, ультрарелятивистского, почти идеального электронного газа. При плотностях $\rho \sim 10^{14}$ г см$^{-3}$, вблизи дна внутренней коры, атомные ядра возможно становятся несферическими, образуют одно- или двумерные структуры [63] и, в конце концов, сливаются в однородную материю ядра нейтронной звезды. При плотностях ниже плотности нейтронизации ρ_d все нейтроны связаны в атомных ядрах. Состояние ионов в коре нейтронной звезды (внутренней и внешней) зависит от температуры T. В основном ионы образуют кристалл или сильно неидеальную жидкость. С понижением плотности уменьшается энергия Ферми электронного газа. Состав ядер становится более симметричным. Растёт поляризуемость электронного газа. При плотности 10^6 г см$^{-3}$ электроны перестают быть релятивистскими. При дальнейшем уменьшении плотности происходит рекомбинация электронов и ионов.

Здесь уместно отметить, что к теории внешней коры нейтронной звезды тесно примыкает теория внутреннего строения ещё одного класса компактных астрофизических объектов — белых карликов (например, [91]). Эти звёзды обладают массой $M \sim 0.6 M_\odot$ и радиусом $R \sim 5000$ км; средняя плотность $\bar{\rho} \sim 10^4 - 10^7$ г см$^{-3}$. Многие утверждения, относящиеся к строению внешней коры нейтронной звезды, применимы и к внутреннему строению белых карликов. Поэтому, в принципе, имеется возможность тестировать элементы теории внешних слоёв нейтронной звезды непосредственно, сравнивая теоретические предсказания с наблюдательными данными о белых карликах, при моделировании которых знание физики сильных взаимодействий не требуется.

В главах 1 и 2 основное внимание уделено свойствам ионов в коре нейтронной звезды при температуре ниже температуры плавления (т.е. в кристаллическом состоянии). При этом сделано несколько упрощающих предположений. Считается, что система является чисто кулоновской, т.е. нейтронная жидкость во внутренней коре нейтронной звезды не влияет на динамику ионов. Кроме того, предполагается, что все ионы полностью ионизованы и при каждом значении T и ρ имеется лишь один сорт атомных ядер. При рассмотрении движения ионов электронный газ считается однородным (модель однокомпонентной плазмы ионов). В главе 1 изучены термодинамические и корреляционные свойства системы ионов ниже точки плавления (кулоновский кристалл), а в главе 2 рассмотрены термодинамические свойства кулоновских кристаллов и вопросы, связанные с условиями их плавления в сильных магнитных полях. Кроме того, в главе 1 рассчитаны кинетические коэффициенты (тепло- и электропроводность) сильно вырожденных электронов, обусловленные их рассеянием на ионах в кулоновских кристаллах и жидкостях в коре нейтронной звезды.

Приложение идеализированных представлений о кулоновском кристалле к реальным кристаллам в коре нейтронной звезды ограничивается, главным образом, неоднородностью реального электронного фона. В частности, поляризуемость фона приводит к модификации дисперсионной кривой оптической фононной моды при больших длинах волн (например, [80]). Аналогичных эффектов можно ожидать и при наличии магнитного поля. Однако, эти эффекты в данной работе не рассматриваются. Для описания кристаллов ионов в состоянии частичной ионизации с помощью модели кулоновского кристалла можно применять метод эффективного заряда иона (что может быть особенно полезно при использовании результатов главы 2).

Перейдём к описанию теоретических представлений о ядре нейтронной звезды. Внешние области ядра состоят из нейтронов, протонов, электронов и мюонов. Состав внутренних областей ($\rho \gtrsim 10^{15}$ г см$^{-3}$) фактически неизвестен. Там возможно рождение гиперонов или образование экзотических фаз вещества (кварковая плазма, каонный конденсат, протонная локализация и др.). Несмотря на высокую температуру $T \sim 10^8 - 10^{10}$ K (на не слишком поздних стадиях эволюции), вещество в ядре нейтронной звезды является сильно вырожденным из-за очень высокой плотности: фермиевские температуры нейтронов, электронов и протонов составляют $T_{\mathrm{F}n,e} > 10^{12}$ K, $T_{\mathrm{F}p} \sim 10^{11}$ K. Нуклоны в ядре нейтронной звезды могут быть сверхтекучими. Теоретические оценки критических температур сверхтекучести нуклонов модельно зависимы и лежат в интервале $10^8 - 10^{10}$ K.

Касаясь эволюции нейтронных звёзд, отметим, что они рождаются горячими, с начальной температурой $\sim 3 \cdot 10^{11}$ K, но быстро охлаждаются до $T \lesssim 10^9$ K. В течение $\sim 10^5 - 10^6$ лет основным механизмом потерь тепловой энергии являются реакции с излучением нейтрино, идущие в ядре звезды (при $T \lesssim 10^{10}$ К нейтронная звезда прозрачна по нейтрино). На более поздних стадиях остывание, в основном, определяется излучением фотонов с поверхности звезды. Для тепловой эволюции нейтронной звезды принципиальное значение имеет вопрос о том, разрешён ли в ядре нейтронной звезды прямой урка-процесс:

$$n \to p + e + \bar{\nu} \ , \qquad p + e \to n + \nu \ ,$$

служащий очень мощным источником нейтрино. Если процесс разрешён, то звезда при $T \lesssim 10^9$ К остывает быстро. В противном случае остывание идёт, в основном, за счёт гораздо менее эффективного модифицированного урка-процесса. Условием включения прямого урка-процесса для *npe*-вещества служит неравенство $n_p > n_n/8$, где n_p и n_n — концентрации протонов и нейтронов (например, [56]). Для большинства модельных уравнений состояния вещества данное условие трудно выполнимо, поскольку вещество ядра нейтронной звезды нейтронноизбыточно ($n_n \gg n_p$). Любые эффекты, приводящие к облегчению этого условия, немедленно сказываются на тепловой эволюции нейтронной звезды.

Моделирование остывания нейтронных звёзд и сравнение результатов с наблюдательными данными об их тепловом излучении — один из важнейших источников информации о внутреннем строении нейтронной звезды. Для такого моделирования нужно знать теплоёмкость, теплопроводность и скорость нейтринного энерговыделения в веществе нейтронной звезды. Именно для этой цели в главах 1 и 2 исследованы термодинамические и кинетические свойства коры нейтронной звезды. В главах 3 и 4 основное внимание уделено реакциям с излучением нейтрино в ядре звезды. Так, в главе 3 исследована возможность облегчения условия включения прямого урка-процесса в сильных магнитных полях. Ещё одна возможность увеличения нейтринных потерь энергии рассмотрена в главе 4. Здесь рассчитаны кинетические коэффициенты и нейтринное энерговыделение в гипотетической модели вещества ядра нейтронной звезды, в которой протоны локализованы неоднородностями плотности нейтронов. Возможность такой локализации при плотности $\rho > 10^{15}$ г см$^{-3}$ предсказана некоторыми теоретическими расчётами сверхплотного вещества [51]. Нейтринное энерговыделение в этой модели оказывается более слабым, чем при наличии прямого урка-процесса, но более сильным, чем в случае модифицированного урка-процесса.

Глава 1

Кулоновские кристаллы

1.1 Введение

Модель кулоновского кристалла точечных зарядов на однородном нейтрализующем фоне зарядов противоположного знака широко используется в различных отраслях физики. Модель была предложена Вигнером [100], который показал, что электронный газ, погружённый в однородный фон положительного заряда, кристаллизуется с образованием объёмноцентрированной решётки при нулевой температуре и достаточно низкой концентрации. С тех пор модель использовалась в теории плазменных колебаний в твёрдых телах (модель “желе”, например, Пайнс [79]), для описания электронно-дырочной плазмы (например, Рахманов [89]), в физике плазмы для описания пылевой плазмы и ионной плазмы с нескомпенсированным зарядом в пеннинговских ловушках (например, Итано и др. [41], Дубин и О'Нил [27]). Наконец, кулоновские кристаллы ионов на почти однородном фоне вырожденного газа электронов образуются в ядрах белых карликов и оболочках нейтронных звёзд. Соответственно, свойства кулоновских кристаллов важны для изучения структуры и эволюции этих объектов (например, Шабрие и др. [21], Шабрие [22]).

Будучи классическим примером сильно неидеальной системы, кулоновские кристаллы подробно изучались различными численными методами, в частности, методом Монте-Карло (например, Стрингфеллоу и др. [94], Слэттери и др. [93] и ссылки там), методом молекулярной динамики (например, Фароуки и Хамагучи [28]), методом монте-карловского интегрирования по траекториям (например, Огата [71]). Однако, хотя результаты этих исследований впечатляют, они требуют больших вычислительных ресурсов.

В этой главе кулоновские кристаллы изучаются с помощью простой аналитической модели гармонической решётки. Кулоновские кристаллы описываются этой моделью с высокой точностью. Мы покажем, что модель оказывается очень полезной для изучения статических и динамических свойств кулоновского кристалла, его термодинамики, а также для исследования кинетических свойств электронов, рассеивающихся на фононах в кулоновских кристаллах. В некоторых случаях гармоническая модель позволит получить результаты, едва ли достижимые с применением численных методов.

Данная глава построена следующим образом. В разделе 2 описана гармоническая модель кулоновского кристалла и выведено дисперсионное уравнение для частот элементарных коллективных возбуждений кристалла. В разделе 3 получены аналитические выражения, позволяющие эффективным образом рассчитать динамическую матрицу кулоновского кристалла для произвольной решётки. В разделе 4 исследованы особенности спектра фононов кулоновского кристалла с простой решёткой. В разделе 5 рассчитаны термодинамические функции для кубических объёмноцентрированной и гранецентрированной решёток, а также для гексагональной плотно упакованной решётки. Обсуждаются эффективные схемы интегрирования по зоне Бриллюэна. В разделе 6 изучены основные свойства парной корреляционной функции, кулоновская энергия и динамический структурный фактор кулоновского кристалла. Рассчитан фактор Дебая-Уоллера для объёмноцентрированной и гранецентрированной кубических решёток. Одно- и многофононные процессы рассеяния электрона на кулоновском кристалле изучены в разделе 7. Наконец, в разделе 8 получены общие формулы для кинетических коэффициентов электронов, рассеивающихся на ионах в кулоновском кристалле или жидкости, с учётом многофононных процессов в кристаллической фазе и подавления квазиупругого рассеяния в жидкой фазе. По этим формулам произведён численный расчёт электро- и теплопроводности электронов в широком диапазоне физических параметров, характерных для ядер белых карликов и оболочек нейтронных звёзд. Модификации кинетической теории, предложенные в работах, которые легли в основу данной диссертации, приводят к исчезновению скачков транспортных коэффициентов в точке плавления. Приведены аппроксимационные формулы для эффективных структурных факторов и кинетических коэффициентов, полезные при практическом использовании полученных результатов.

1.2 Дисперсионное уравнение

Система точечных зарядов величины $Z|e|$ (ионов), где e — заряд электрона, и однородного фона зарядов противоположного знака (электронов), обеспечивающего электронейтральность, называется однокомпонентной плазмой (ионов). Потенциальная энергия этой системы (без учёта статистики ионов) даётся выражением

$$U_{\rm ex} = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{i-1}\Phi(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j) - n\sum_{i=1}^{N}\int_V \mathrm{d}\mathbf{r}\,\Phi(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}) + n^2\int_V\int_V \mathrm{d}\mathbf{r}\,\mathrm{d}\mathbf{r}'\,\Phi(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \qquad (1)$$

где $\Phi(\mathbf{r}) = Z^2e^2/r$, а V, N и n — объем системы, полное число ионов и концентрация ионов; $\mathbf{r}_i$ — радиус-вектор i-го иона. Первый член представляет собой энергию взаимодействия ионов друг с другом, второй — энергию взаимодействия ионов с фоном, плотность заряда которого равна Zen, а третий — потенциальную энергию фона.

В такой форме уравнение (1) пригодно не только для кристалла, но и для ионной жидкости, однако, в случае кристалла возникает важное упрощение. Ионы кристалла совершают малые колебания относительно положений равновесия (узлов решётки) $\mathbf{X}_i$, так что $\mathbf{r}_i = \mathbf{X}_i + \mathbf{u}_i$, и $|\mathbf{u}_i| \ll |\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j|\ \ \forall j \neq i$. Ввиду малости величины смещений потенциальную энергию можно разлагать в ряд Тейлора. Линейный по смещениям член в этом разложении отсутствует, поскольку конфигурация $\mathbf{r}_i = \mathbf{X}_i$ соответствует минимуму энергии.

Приближение, в котором отбрасываются все члены разложения, старше квадратичного, называется *гармоническим* и широко используется в физике. Чем меньше отношение величины смещений к минимальному межузловому расстоянию, тем выше точность этого приближения. В гармоническом приближении имеем

$$U_{\rm ex} \approx U = U_0 + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N} u_i^\alpha u_j^\beta \frac{\partial^2 U_{\rm ex}}{\partial u_i^\alpha \partial u_j^\beta}\Bigg|_{\substack{u_i^\alpha=0\\ u_j^\beta=0}} \equiv U_0 + \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^{N} u_i^\alpha u_j^\beta \mathcal{V}_{ij}^{\alpha\beta} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} u_i^\alpha u_i^\beta \mathcal{W}_i^{\alpha\beta} \qquad (2)$$

(по повторяющимся греческим индексам подразумевается суммирование; мы не различаем декартовы ко- и контравариантные компоненты трёхмерных векторов; последнее равенство следует считать определением силовых матриц $\mathcal{V}$ и $\mathcal{W}$). Величина U_0, называемая энергией Маделунга, представляет собой электростатическую энергию конфигурации зарядов, закрепленных в равновесных положениях $\mathbf{X}_i$,

$$U_0 = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{i-1}\Phi(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j) - n\sum_{i=1}^{N}\int_V \mathrm{d}\mathbf{r}\,\Phi(\mathbf{X}_i - \mathbf{r}) + n^2\int_V \mathrm{d}\mathbf{r}\,\mathrm{d}\mathbf{r}'\,\Phi(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \equiv N\zeta\frac{Z^2e^2}{a}\ , \qquad (3)$$

где ζ — постоянная Маделунга (по порядку величины $\zeta \approx -0.9$, точные значения для некоторых типов решёток приведены в разделе 5), а $a = (3/4\pi n)^{1/3}$ — радиус ионной сферы.

Положения равновесия ионов $\mathbf{X}_i$ могут быть заданы следующим образом. Фиксируя начало отсчёта декартовой системы координат в одном из положений равновесия, мы можем задать положения всех узлов кристалла выражением $\mathbf{X}_i = \mathbf{R}_{\rm l} + \boldsymbol{\chi}_p$. Здесь, $i = ({\rm l}p)$, ${\rm l} = (n_1, n_2, n_3)$, n_1, n_2, n_3 пробегают всевозможные целые значения. Векторы $\mathbf{R}_{\rm l} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ называются векторами решётки, линейно независимые векторы $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ называются векторами основных трансляций решётки, векторы $\boldsymbol{\chi}_p$, принадлежащие параллелепипеду, который образован векторами основных трансляций решётки (называемому примитивной ячейкой решётки), называются базисом решётки, причём $p = 0, 1, ..., N_{\rm cell}-1$, $\boldsymbol{\chi}_0 = 0$, а $N_{\rm cell}$ — число векторов, принадлежащих этому параллелепипеду, т.е. число векторов в базисе решётки. Векторы $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ следует выбирать с таким расчётом, чтобы минимизировать $N_{\rm cell}$. Решётки с $N_{\rm cell} = 1$ называются простыми. Примерами простых решёток служат объёмно- и гранецентрированные кубические решётки (ОЦК и ГЦК, что эквивалентно bcc и fcc — body-centered cubic и face-centered cubic); гексагональная плотно упакованная решётка (ГПУ или hcp — hexagonal close-packed) характеризуется $N_{\rm cell} = 2$. Эти три типа решёток будут рассматриваться в дальнейшем.

Для определённости будем считать что векторы решётки $\mathbf{R}_{\rm l}$ определяются числами n_m, пробегающими значения $-[N_m/2], ..., 0, ..., N_m - [N_m/2] - 1$, $m = 1, 2, 3$, так что $N_1N_2N_3 = N/N_{\rm cell}$. Соответствующее множество индексов ${\rm l}$ обозначим через Ξ_N. Зависимость рассматриваемых в дальнейшем величин от конкретного выбора формы кристалла является несущественной, т.к. во всех формулах мы будем переходить к термодинамическому пределу $N, V \to \infty$ при постоянной концентрации n. Множество Ξ_N при этом превращается в множество всевозможных троек целых чисел Ξ.

Решение задачи о поведении системы в потенциале (2) достигается переходом к фурье-образам, а на физическом языке — введением коллективных координат $\mathcal{A}$:

$$u^\alpha_{\mathrm{l}p} = \sqrt{\frac{N_{\mathrm{cell}}}{MN}}\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_\mathrm{l}}\mathcal{A}^\alpha_{\mathbf{k}p} \tag{4}$$

$$\mathcal{A}^\alpha_{\mathbf{k}p} = \sqrt{\frac{MN_{\mathrm{cell}}}{N}}\sum_{\mathrm{l}\in\Xi_N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_\mathrm{l}}u^\alpha_{\mathrm{l}p}\ , \tag{5}$$

где M — масса иона. Область значений $\mathbf{k}$ определяется из следующих соображений. Прежде всего, любую функцию точки кристалла можно формально считать периодичной с периодами $N_1\mathbf{a}_1$, $N_2\mathbf{a}_2$, $N_3\mathbf{a}_3$, т.е. $\forall\mathbf{k}$ должно выполняться

$$\mathbf{k}\mathbf{a}_m = \frac{2\pi j_{m\mathbf{k}}}{N_m}\ , \tag{6}$$

где $j_{m\mathbf{k}}$ — произвольное целое число, $m = 1, 2, 3$. Таким образом, векторы $\mathbf{k}$ принимают значения на бесконечном дискретном множестве точек вида (6). Если бы функции координат были заданы во всех точках вида $\nu_1\mathbf{a}_1 + \nu_2\mathbf{a}_2 + \nu_3\mathbf{a}_3$, где $-[N_m/2] \le \nu_m < N_m - [N_m/2]$, то все фурье-гармоники были бы существенны. Однако, поскольку все функции заданы только в узлах решётки, т.е. при целых ν, то $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ такие, что $j_{m\mathbf{k}} - j_{m\mathbf{k}'}$ делится на N_m $\forall m = 1, 2, 3$, являются эквивалентными. Таким образом, область определения векторов $\mathbf{k}$ может быть ограничена множеством (6) при $j_{m\mathbf{k}} = 0, 1, ..., N_m - 1$. Это множество мы назовём Π_N.

При подстановке (5) в (4) получаем

$$\begin{aligned} u^\alpha_{\mathrm{l}p} &= \frac{1}{N_1N_2N_3}\sum_{\mathbf{k}\in\Pi_N}\sum_{\mathrm{l}'\in\Xi_N} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_\mathrm{l}-\mathbf{R}_{\mathrm{l}'})}u^\alpha_{\mathrm{l}'p} \\ &= \frac{1}{N_1N_2N_3}\sum_{\mathrm{l}'\in\Xi_N}\prod_{m=1}^{3}\sum_{j_m=0}^{N_m-1}\exp\left[i\frac{2\pi j_m(n_m - n'_m)}{N_m}\right]u^\alpha_{\mathrm{l}'p} = u^\alpha_{\mathrm{l}p}\ , \end{aligned} \tag{7}$$

что доказывает факт взаимной обратности преобразований (4) и (5).

По поводу области определения векторов $\mathbf{k}$ нужно заметить следующее. Согласно формуле (6) эти величины имеют размерность волнового вектора и могут быть записаны в виде $j_1\mathbf{g}_1/N_1 + j_2\mathbf{g}_2/N_2 + j_3\mathbf{g}_3/N_3$, где $\mathbf{g}_i\mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Векторы вида $n_1\mathbf{g}_1 + n_2\mathbf{g}_2 + n_3\mathbf{g}_3$ образуют так называемую обратную решётку относительно решётки, состоящей из векторов $\mathbf{R}_\mathrm{l}$, и будут обозначаться как $\mathbf{G}_\mathrm{m}$, где $\mathrm{m} = (n_1, n_2, n_3)$ — тройки целых чисел. В силу эквивалентности векторов $\mathbf{k}$, отличающихся вектором обратной решётки, в качестве области определения фурье-компонент можно рассматривать как параллелепипед Π_N, определяемый условиями $0 \le j_i \le N_i - 1$ (фактически, примитивную ячейку обратной решётки), так и более симметричный многогранник в обратном пространстве, содержащий 0 и ограниченный плоскостями, проходящими через середины векторов обратной решётки перпендикулярно последним. Этот многогранник называется 1-ой зоной Бриллюэна. Будем обозначать его B_1.

В термодинамическом пределе размер кристалла увеличивается, но расстояния между отдельными ионами остаются неизменными. Векторы $\mathbf{k}$ полностью заполняют 1-ую зону

Бриллюэна или параллелепипед Π, построенный на векторах $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$. Объем каждой из этих областей равен $V_\Pi = (2\pi)^3 n/N_{\rm cell}$.

Перейдём к исследованию (нерелятивистской) динамики системы в этих коллективных координатах. Лагранжиан системы есть $L = K - U_{\rm ex} \approx K - U$, где кинетическая энергия

$$K = \frac{M}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\mathrm{d}u_i^\alpha}{\mathrm{d}t}\right)^2 \equiv \frac{M}{2}\sum_{i=1}^{N}(\dot{u}_i^\alpha)^2 \ . \tag{8}$$

Переходя к пространственным фурье-компонентам и выбирая в качестве области изменения $\mathbf{k}$ параллелепипед, как в (4), получим

$$L = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\in\Pi_N,p}\dot{\mathcal{A}}^\alpha_{\mathbf{k}p}\dot{\mathcal{A}}^\alpha_{\tilde{\mathbf{k}}p} - U_0 - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\in\Pi_N,pp'} D^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\mathcal{A}^\alpha_{\mathbf{k}p}\mathcal{A}^\beta_{\mathbf{k}'p'} \ , \tag{9}$$

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

$$D^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{N_{\rm cell}}{MN}\sum_{\mathrm{l}\mathrm{l}'\in\Xi_N} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{R}_\mathrm{l}+\mathbf{k}'\mathbf{R}_{\mathrm{l}'})}\left[(1-\delta_{\mathrm{l}\mathrm{l}'}\delta_{pp'})\mathcal{V}^{\alpha\beta}_{\mathrm{l}p\,\mathrm{l}'p'} + \delta_{\mathrm{l}\mathrm{l}'}\delta_{pp'}\mathcal{W}^{\alpha\beta}_{\mathrm{l}p}\right]. \tag{10}$$

Дальнейшее упрощение связано с тем, что $\mathcal{V}$ зависит только от разности $\mathbf{R}_\mathrm{l} - \mathbf{R}_{\mathrm{l}'}$ (и даже от модуля разности), а не от каждого из векторов по-отдельности. Тогда мы можем написать

$$\frac{1}{M}\mathcal{V}^{\alpha\beta}_{\mathrm{l}p\,\mathrm{l}'p'} = \int_\Pi \frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{V_\Pi}\mathcal{B}^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_\mathrm{l}-\mathbf{R}_{\mathrm{l}'})} \ , \tag{11}$$

$$\frac{1}{M}\mathcal{W}^{\alpha\beta}_{\mathrm{l}p} = \int_\Pi \frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{V_\Pi}\mathcal{C}^{\alpha\beta}_{p}(\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_\mathrm{l}} \ , \tag{12}$$

где

$$\mathcal{B}^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{q}) = \frac{\delta_{pp'}}{M}\sum_{\mathrm{l}''\in\Xi}{}' \mathcal{V}^{\alpha\beta}_{\mathrm{l}''p\,0p}e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{\mathrm{l}''}} + \frac{(1-\delta_{pp'})}{M}\sum_{\mathrm{l}''\in\Xi}\mathcal{V}^{\alpha\beta}_{\mathrm{l}''p\,0p'}e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{\mathrm{l}''}} \ , \tag{13}$$

$$\mathcal{C}^{\alpha\beta}_{p}(\mathbf{q}) = \frac{1}{M}\sum_{\mathrm{l}''\in\Xi}\mathcal{W}^{\alpha\beta}_{\mathrm{l}''p}e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{\mathrm{l}''}} \tag{14}$$

(штрих над знаком суммы означает отсутствие члена $\mathbf{R}_{\mathrm{l}''} = 0$). При этом полезно иметь ввиду соотношения

$$\begin{aligned}\sum_{\mathrm{l}\in\Xi} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_\mathrm{l}} &= V_\Pi\sum_{\mathrm{m}\in\Xi}\delta(\mathbf{q}-\mathbf{G}_\mathrm{m}) \ , \\ \int\frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{V_\Pi}e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_\mathrm{l}} &= \delta_{\mathbf{R}_\mathrm{l}0} \ .\end{aligned} \tag{15}$$

Введём обозначение $\mathbf{O}_N = -\sum_{m=1}^{3}[N_m/2]\mathbf{a}_m$. Тогда

$$\sum_{\mathrm{l}\in\Xi_N} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_\mathrm{l}} = e^{i\mathbf{q}\mathbf{O}_N}\prod_{m=1}^{3}\frac{1-e^{iN_m\mathbf{q}\mathbf{a}_m}}{1-e^{i\mathbf{q}\mathbf{a}_m}} \ , \tag{16}$$

и

$$
\begin{aligned}
D^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{k},\mathbf{k}') &= \delta_{pp'}\int_\Pi \frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{V_\Pi}\mathcal{C}^{\alpha\beta}_p(\mathbf{q})e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{q})\mathbf{O}_N}\prod_{j=m}^{3}\frac{1}{N_m}\frac{1-e^{iN_m(\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{q})\mathbf{a}_m}}{1-e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{q})\mathbf{a}_m}} \\
&+ \int_\Pi \frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{V_\Pi}\mathcal{B}^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{q})e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{O}_N}\left\{\prod_{m=1}^{3}\frac{1}{N_m}\frac{\left[1-e^{iN_m(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{a}_m}\right]}{\left[1-e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{a}_m}\right]}\frac{\left[1-e^{iN_m(\mathbf{k}'-\mathbf{q})\mathbf{a}_m}\right]}{\left[1-e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{q})\mathbf{a}_m}\right]}\right. \\
&- \left.\delta_{pp'}\prod_{m=1}^{3}\frac{1}{N_m}\frac{1-e^{iN_m(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{a}_m}}{1-e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{a}_m}}\right\} . \qquad (17)
\end{aligned}
$$

В силу (6) второе слагаемое в фигурных скобках равно $\delta_{pp'}\delta_{\mathbf{k}'\tilde{\mathbf{k}}}$. Более того, поскольку в первой сумме в (13) отсутствует член $\mathbf{R}_{\mathrm{l}''} = 0$, то $\int_\Pi \mathrm{d}\mathbf{q}\ \mathcal{B}_{pp,\alpha\beta}(\mathbf{q}) = 0$. Таким образом,

$$
\begin{aligned}
D^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{k},\mathbf{k}') &= \delta_{pp'}\int_\Pi \frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{V_\Pi}\mathcal{C}^{\alpha\beta}_p(\mathbf{q})e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{q})\mathbf{O}_N}\prod_{m=1}^{3}\frac{1}{N_m}\frac{1-e^{iN_m\mathbf{q}\mathbf{a}_j}}{1-e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{q})\mathbf{a}_m}} \\
&+ \int_\Pi \frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{V_\Pi}\mathcal{B}^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{q})e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{O}_N}\prod_{m=1}^{3}\frac{1}{N_m}\frac{1-e^{iN_m\mathbf{q}\mathbf{a}_m}}{1-e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{a}_m}}\frac{1-e^{-iN_m\mathbf{q}\mathbf{a}_m}}{1-e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{q})\mathbf{a}_m}} . \qquad (18)
\end{aligned}
$$

В термодинамическом пределе $N_m \to \infty$ происходят важные упрощения. Суммы по $\mathbf{k}$ превращаются в интегралы по правилу $\sum_{\mathbf{k}} \to V/(2\pi)^3\int \mathrm{d}\mathbf{k}$. При этом подразумевается переход к плотностям экстенсивных величин, например, к функции Лагранжа единицы объёма $\mathcal{L} = L/V$ и т. п. Из формулы (2) ясно, что при $N \to \infty$ величина $\mathcal{W}^{\alpha\beta}_i$ может зависеть только от p, но не от l, поскольку в бесконечной решётке узлы ничем не выделены. Наконец,

$$
\lim_{N\to\infty}\sum_{\mathrm{l}\mathrm{l}'\in\Xi_N} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{R}_\mathrm{l}+\mathbf{k}'\mathbf{R}_{\mathrm{l}'})}e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_\mathrm{l}-\mathbf{R}_{\mathrm{l}'})} = V_\Pi^2\sum_{\mathrm{m}\mathrm{m}'\in\Xi}\delta(\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{G}_\mathrm{m})\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{q}-\mathbf{G}_{\mathrm{m}'}) . \qquad (19)
$$

Тогда D становится функцией одного импульса $\mathbf{k}$:

$$
\begin{aligned}
\frac{V}{(2\pi)^3}D^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{k},\mathbf{k}') &\to \mathcal{D}^{\alpha\beta}_{pp'}(\tilde{\mathbf{k}})\delta(\mathbf{k}'-\tilde{\mathbf{k}}) , \\
\mathcal{D}^{\alpha\beta}_{pp'}(\tilde{\mathbf{k}}) &= \mathcal{B}^{\alpha\beta}_{pp'}(\tilde{\mathbf{k}}) + \delta_{pp'}\frac{\mathcal{W}^{\alpha\beta}_p}{M} . \qquad (20)
\end{aligned}
$$

Функция Лагранжа принимает вид

$$
\mathcal{L} = \frac{1}{2}\sum_p\int_\Pi\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\dot{\mathcal{A}}^\alpha_{\mathbf{k}p}\dot{\mathcal{A}}^\alpha_{\tilde{\mathbf{k}}p} - U_0 - \frac{1}{2}\sum_{pp'}\int_\Pi\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\mathcal{D}^{\alpha\beta}_{pp'}(\tilde{\mathbf{k}})\mathcal{A}^\alpha_{\mathbf{k}p}\mathcal{A}^\beta_{\tilde{\mathbf{k}}p'} . \qquad (21)
$$

Рассматривая $\mathcal{A}^\alpha_{\mathbf{k}p}$ как обобщенные координаты кристалла, имеем уравнение Эйлера:

$$
\ddot{\mathcal{A}}^\alpha_{\mathbf{k}p} + \frac{1}{2}\sum_{p'}\left[\mathcal{D}^{\beta\alpha}_{p'p}(\tilde{\mathbf{k}}) + \mathcal{D}^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{k})\right]\mathcal{A}^\beta_{\mathbf{k}p'} = 0 . \qquad (22)
$$

Если наложить на потенциал дополнительное условие $\mathcal{V}_{ij} = \mathcal{V}_{ji}$, вытекающее из того, что $\Phi(\mathbf{r}) = \Phi(-\mathbf{r})$, то уравнение (22) ещё несколько упрощается:

$$
\ddot{\mathcal{A}}^\alpha_{\mathbf{k}p} + \sum_{p'}\mathcal{D}^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{k})\mathcal{A}^\beta_{\mathbf{k}p'} = 0 . \qquad (23)
$$

Производя преобразование Фурье по временной переменной

$$\mathcal{A}^{\alpha}_{\mathbf{k}p}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega e^{-i\omega t} A^{\alpha}_{\mathbf{k}p}(\omega) \ , \tag{24}$$

$$A^{\alpha}_{\mathbf{k}p}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t e^{i\omega t} \mathcal{A}^{\alpha}_{\mathbf{k}p}(t) \ , \tag{25}$$

получаем систему линейных однородных уравнений

$$-\omega^2 A^{\alpha}_{\mathbf{k}p} + \sum_{p'} \mathcal{D}^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{k}) A^{\beta}_{\mathbf{k}p'} = 0 \ , \tag{26}$$

разрешимую при $\omega^2 = \lambda_\nu$, где λ_ν удовлетворяют секулярному (дисперсионному) уравнению

$$\det \left\{ \mathcal{D}^{\alpha\beta}_{pp'} - \lambda \delta_{pp'} \delta^{\alpha\beta} \right\} = 0 \ . \tag{27}$$

Условие минимальности энергии в положении равновесия решётки приводит к положительной определённости матриц $\mathcal{V}$ и $\mathcal{W}$. Это, в свою очередь, означает, что матрица $\mathcal{D}$ также положительно определена, а потому имеет $3N_{\text{cell}}$ неотрицательных собственных значений, которые можно обозначить через $\omega^2_{\mathbf{k}\nu}$. Тогда

$$A^{\alpha}_{\mathbf{k}p}(\omega) = \sum_{\nu=1}^{3N_{\text{cell}}} \mathfrak{A}^{\alpha}_{\mathbf{k}\nu,p}\delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}\nu}) + \mathfrak{B}^{\alpha}_{\mathbf{k}\nu,p}\delta(\omega + \omega_{\mathbf{k}\nu}) \ , \tag{28}$$

где коэффициенты $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{B}$ при фиксированных $\mathbf{k}$ и ν определяются уравнением (26) с точностью до общих для всех комбинаций α и p множителей, которые, в свою очередь, определяются начальными условиями к уравнению (23). Удобно выделить эти общие множители, введя для каждой моды $(\mathbf{k}\nu)$ единичный вектор $\mathbf{e}$ в $3N_{\text{cell}}$-мерном пространстве, фиксирующий отношения компонент с разными α и p: $\mathfrak{A}^{\alpha}_{\mathbf{k}\nu,p} = \mathfrak{A}_{\mathbf{k}\nu} e^{\alpha}_{\mathbf{k}\nu,p}$, $\mathfrak{B}^{\alpha}_{\mathbf{k}\nu,p} = \mathfrak{B}_{\mathbf{k}\nu} e^{\alpha}_{\mathbf{k}\nu,p}$. Векторы $\mathbf{e}$ называются векторами поляризации колебаний решётки. В силу свойств матрицы $\mathcal{D}$ векторы $\mathbf{e}$ удовлетворяют соотношению ортогональности: $\sum_p e^{\alpha}_{\mathbf{k}\nu,p} e^{\alpha}_{\mathbf{k}\nu',p} = \delta_{\nu\nu'}$.

Мы видим, что

$$\mathcal{A}^{\alpha}_{\mathbf{k}p} = \sum_{\nu=1}^{3N_{\text{cell}}} e^{\alpha}_{\mathbf{k}\nu,p} [\mathfrak{A}_{\mathbf{k}\nu} e^{-i\omega_{\mathbf{k}\nu} t} + \mathfrak{B}_{\mathbf{k}\nu} e^{i\omega_{\mathbf{k}\nu} t}] \ . \tag{29}$$

Если выражение в квадратных скобках обозначить через $\mathcal{A}_{\mathbf{k}\nu}$, то выражения, содержащие суммирование по α и p от $\mathcal{A}^{\alpha}_{\mathbf{k}p}$ (как в кинетическом члене лагранжиана) преобразуются в суммы по ν от $\mathcal{A}_{\mathbf{k}\nu}$.

1.3 Динамическая матрица кулоновского кристалла в термодинамическом пределе

Перейдём к вычислению динамической матрицы в соответствии с формулами (2), (13) и (14). Имеем

$$\frac{\partial^2 U_{\text{ex}}}{\partial u^{\alpha}_i \partial u^{\beta}_j} = (1 - \delta_{ij}) \frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{\partial u^{\alpha}_i \partial u^{\beta}_j} + \delta_{ij} \sum_{k \neq i} \frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k)}{\partial u^{\alpha}_i \partial u^{\beta}_i} - n\delta_{ij} \int_V \mathrm{d}\mathbf{r} \, \frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r})}{\partial u^{\alpha}_i \partial u^{\beta}_i} \ . \tag{30}$$

Таким образом, первое слагаемое представляет собой $\mathcal{V}_{ij}^{\alpha\beta}$, а сумма второго и третьего даёт $\mathcal{W}_i^{\alpha\beta}$. В случае кулоновского взаимодействия, оба члена в правой части (20) наиболее естественно вычислять методом Эвальда (например, Борн и Хуанг [18]). Мы проиллюстрируем соответствующее вычисление на примере $\mathcal{W}$. Расчёт $\mathcal{B}$ проводится по той же схеме, поэтому мы приведём лишь конечный результат.

Для простоты примем $N_{\rm cell} = 1$ и будем опускать индекс p. Тогда

$$\mathcal{W}^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2}{\partial R^\alpha \partial R^\beta}\left[\sum_{\rm k\neq l}\Phi(\mathbf{R}-\mathbf{R}_{\rm k}) - n\int {\rm d}\mathbf{r}\Phi(\mathbf{R}-\mathbf{r})\right]_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_{\rm l}} . \tag{31}$$

Вычислим сперва выражение в квадратных скобках, которое представляет собой потенциальную энергию иона l в точке $\mathbf{R}$. Опуская несущественную постоянную Z^2e^2 и следуя Эвальду, мы можем написать

$$\Phi(\mathbf{R}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\int_0^A + \int_A^\infty\right){\rm d}\rho\, e^{-\rho^2R^2}. \tag{32}$$

Первый из этих интегралов удобнее вычислять, используя представление Фурье функции $\exp(-\rho^2R^2)$:

$$e^{-\rho^2R^2} = \int \frac{{\rm d}\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\frac{\pi\sqrt{\pi}}{\rho^3}e^{i\mathbf{qR}-q^2/4\rho^2}. \tag{33}$$

Тогда получим

$$\begin{aligned}
&\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^A {\rm d}\rho \int \frac{{\rm d}\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\frac{\pi\sqrt{\pi}}{\rho^3}e^{i\mathbf{qR}-q^2/4\rho^2}\left(\sum_{\rm k\neq l} e^{-i\mathbf{qR}_{\rm k}} - n\int {\rm d}\mathbf{r}e^{-i\mathbf{qr}}\right)\\
&= \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^A {\rm d}\rho \int \frac{{\rm d}\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\frac{\pi\sqrt{\pi}}{\rho^3}e^{i\mathbf{qR}-q^2/4\rho^2}\left[(2\pi)^3 n{\sum_{\rm m\in\Xi}}'\delta(\mathbf{q}-\mathbf{G}_{\rm m}) - e^{-i\mathbf{qR}_{\rm l}}\right]\\
&= {\sum_{\rm m\in\Xi}}'\frac{4\pi n}{G_{\rm m}^2}\,e^{i\mathbf{G}_{\rm m}\mathbf{R}-G_{\rm m}^2/4A^2} - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^A {\rm d}\rho\int\frac{{\rm d}\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\frac{\pi\sqrt{\pi}}{\rho^3}e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}-\mathbf{R}_{\rm l})-q^2/4\rho^2} .
\end{aligned}\tag{34}$$

Интегралы $\int_A^\infty$ вычисляются непосредственно

$$\begin{aligned}
&\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_A^\infty {\rm d}\rho\left(\sum_{\rm k\neq l} e^{-\rho^2|\mathbf{R}-\mathbf{R}_{\rm k}|^2} - n\int{\rm d}\mathbf{r}e^{-\rho^2|\mathbf{R}-\mathbf{r}|^2}\right)\\
&= \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_A^\infty {\rm d}\rho\sum_{\rm k\neq l} e^{-\rho^2|\mathbf{R}-\mathbf{R}_{\rm k}|^2} - \frac{n\pi}{A^2} .
\end{aligned}\tag{35}$$

Объединяя (34) и (35) и дифференцируя в соответствии с (31), получим

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}^{\alpha\beta} &= -{\sum_{\rm m\in\Xi}}' 4\pi n\frac{G_{\rm m}^\alpha G_{\rm m}^\beta}{G_{\rm m}^2}e^{-G_{\rm m}^2/4A^2} + \frac{4A^3}{\sqrt{\pi}}{\sum_{\rm k\in\Xi}}'\frac{R_{\rm k}^\alpha R_{\rm k}^\beta}{R_{\rm k}^2}e^{-A^2R_{\rm k}^2} + \delta^{\alpha\beta}\frac{4A^3}{3\sqrt{\pi}}\\
&+ {\sum_{\rm k\in\Xi}}'\left(\frac{3R_{\rm k}^\alpha R_{\rm k}^\beta}{R_{\rm k}^2} - \delta^{\alpha\beta}\right)\left\{\frac{1}{R_{\rm k}^3}[1-{\rm erf}(AR_{\rm k})] + \frac{2A}{\sqrt{\pi}R_{\rm k}^2}e^{-A^2R_{\rm k}^2}\right\} .
\end{aligned}\tag{36}$$

Безразмерный параметр Эвальда Aa выбирается с таким расчётом, чтобы сходимость сумм по прямой и обратной решёткам была одинаково быстрой. Оптимальное значение $Aa \approx 2$.

Отметим, что $\mathcal{W}^{\alpha\beta}$ оказывается равным $\delta^{\alpha\beta}/a^3$ (тот же результат получается и при $N_{\rm cell} > 1$); выкладка была приведена для иллюстрации метода Эвальда. Совершенно аналогично производится вычисление нетривиальной матрицы $\mathcal{B}^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{q})$. Результат имеет вид

$$\begin{aligned} M\mathcal{B}^{\alpha\beta}_{pp'}(\mathbf{q}) &= \frac{4\pi n}{N_{\rm cell}} \sum_{\rm m\in\Xi} \frac{(G^\alpha_{\rm m} - q^\alpha)\,(G^\beta_{\rm m} - q^\beta)}{|\mathbf{G}_{\rm m} - \mathbf{q}|^2} \exp\left[-\frac{|\mathbf{G}_{\rm m} - \mathbf{q}|^2}{4A^2} - i(\mathbf{G}_{\rm m} - \mathbf{q})(\boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'})\right] \\ &- \sum_{\rm l\in\Xi} (1 - \delta_{pp'}\delta_{\mathbf{R}_{\rm l}0}) \left[\left(\frac{3Y^\alpha_{\rm l} Y^\beta_{\rm l}}{Y^2_{\rm l}} - \delta^{\alpha\beta}\right)\left(\frac{1}{Y^3_{\rm l}}[1 - \operatorname{erf}(AY_{\rm l})] + \frac{2A}{\sqrt{\pi}Y^2_{\rm l}} e^{-A^2Y^2_{\rm l}}\right)\right. \\ &+ \left.\frac{4A^3}{\sqrt{\pi}} \frac{Y^\alpha_{\rm l} Y^\beta_{\rm l}}{Y^2_{\rm l}} e^{-A^2Y^2_{\rm l}}\right] e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{\rm l}} - \frac{4A^3}{3\sqrt{\pi}} \delta^{\alpha\beta}\delta_{pp'}\ , \end{aligned} \tag{37}$$

где $\mathbf{Y}_{\rm l} = \mathbf{R}_{\rm l} + \boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'}$.

При проведении конкретных расчётов удобно обезразмерить (разделить) квадраты всех частот и саму динамическую матрицу на квадрат плазменной ионной частоты

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi n Z^2 e^2}{M}}\ . \tag{38}$$

Именно эта безразмерная динамическая матрица в дальнейшем обозначается через $\mathcal{D}$.

1.4 Основные свойства спектра колебаний кристалла

При рассмотрении свойств колебаний решётки удобно считать, что неэквивалентные волновые векторы мод принимают значения в 1-ой зоне Бриллюэна B_1, а не в параллелепипеде Π. Это связано с тем, что в спектре возникают особенности при волновых векторах, равных вектору обратной решётки. При сведении векторов в 1-ую зону Бриллюэна эти особенности концентрируются в единственной точке $\mathbf{k} = 0$. Спектр колебаний кристалла (зависимость частоты моды от её волнового вектора) определяется в результате решения дисперсионного уравнения (27). При данном $\mathbf{k}$ имеется $3N_{\rm cell}$ мод, из которых для двух (акустических мод) вблизи центра зоны $\omega \propto k$, а для остальных (оптических мод) вблизи центра $\omega \approx \text{const}$. При любом $\mathbf{k}$ частоты колебаний решётки удовлетворяют так называемому правилу сумм Кона: $\sum_\nu \omega^2_{\mathbf{k}\nu} = N_{\rm cell}\omega^2_p$. При $N_{\rm cell} = 1$ из этого правила вытекает, что частота оптической моды $\omega \to \omega_p$ в пределе $k \to 0$.

Точное асимптотическое поведение частот вблизи центра зоны может быть определено, если известно разложение динамической матрицы при малых k. При $N_{\rm cell} > 1$ (в частности, для ГПУ решётки) эта задача является слишком громоздкой и, по сведениям автора, до сих пор не решена. При $N_{\rm cell} = 1$ простое выражение для динамической матрицы вблизи центра зоны Бриллюэна было указано Коэном и Кеффером [23]

$$\mathcal{D}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \frac{k^\alpha k^\beta}{k^2} - \frac{(ka_{\rm l})^2}{4\pi}\left(\alpha_0 \frac{k^\alpha k^\beta}{k^2} + \beta_0\delta^{\alpha\beta} + \gamma^{\alpha\beta\rho\sigma}\frac{k^\rho k^\sigma}{k^2}\right)\ . \tag{39}$$

Таблица 1: Коэффициенты, определяющие асимптотическое поведение динамической матрицы при $k \to 0$. $^{a)}\gamma_1 = \gamma^{xxxx} = \gamma^{yyyy} = \gamma^{zzzz}$; $^{b)}\gamma_2 = \gamma^{xxyy} = \gamma^{xyxy} = \gamma^{xyyx} = \gamma^{xzxz} = \dots$

	α_0	β_0	$\gamma_1^{a)}$	$\gamma_2^{b)}$
ОЦК	4.1243864	0.84911538	−3.4886939	−1.5915193
ГЦК	4.0036483	1.2376805	−4.2930041	−1.71184285

Значения коэффициентов для ОЦК и ГЦК, рассчитанные нами, приведены в таблице 1 [a_l — длина стороны куба ОЦК и ГЦК решёток (постоянная решётки), так что $na_l^3 = 2$ для ОЦК и 4 для ГЦК]. Дисперсионное уравнение (27) с динамической матрицей (39) принимает следующий вид

$$-\frac{\omega^6}{\omega_p^6} + \frac{\omega^4}{\omega_p^4} + B\frac{\omega^2}{\omega_p^2} + C = 0\ , \tag{40}$$

где

$$\begin{aligned} 16\pi Bk^4 &= (ka_l)^2[2(\beta_0+\gamma_2)k^4 + 2(\gamma_1-3\gamma_2)(k_x^2k_y^2+k_y^2k_z^2+k_z^2k_x^2)]\ , \\ 256\pi^2Ck^6 &= (ka_l)^4[(\beta_0+\gamma_2)^2k^6 + 2(\beta_0+\gamma_2)(\gamma_1-3\gamma_2)(k_x^2k_y^2+k_y^2k_z^2+k_z^2k_x^2)k^2 \\ &+ 3(\gamma_1-3\gamma_2)^2k_x^2k_y^2k_z^2]\ . \end{aligned} \tag{41}$$

Для нахождения акустических частот в уравнении (40) следует отбросить член, содержащий ω^6. Решение получившегося биквадратного уравнения даёт

$$\begin{aligned} \frac{16\pi\omega_{1,2}^2}{(ka_l)^2\omega_p^2} &= -(\beta_0+\gamma_2) - \frac{(\gamma_1-3\gamma_2)}{k^4}(k_x^2k_y^2+k_y^2k_z^2+k_z^2k_x^2) \\ &\pm \frac{\gamma_1-3\gamma_2}{k^4}\sqrt{k_x^4k_y^4+k_y^4k_z^4+k_z^4k_x^4-k^2k_x^2k_y^2k_z^2}\ . \end{aligned} \tag{42}$$

Оптическая мода определяется из правила сумм.

С ростом k частоты акустических мод увеличиваются, а оптических — уменьшаются, так что вблизи границы зоны все частоты оказываются сравнимыми по величине. Для примера на рис. 1 изображены дисперсионные кривые для ОЦК и ГЦК решёток в направлении $\mathbf{k}_e$, определяемом следующим образом. Ориентируем декартову систему координат относительно решётки так, чтобы оси x, y, z совпадали с рёбрами куба решётки, а начало координат приходилось на один из ионов. Тогда направление $\mathbf{k}_e$ задаётся полярными углами $\theta = 1.3\,\mathrm{arctg}\sqrt{2}$, $\phi = 0.9\pi/4$. (Отметим, что направление на ближайшего соседа для ОЦК задаётся углами $\theta = \mathrm{arctg}\sqrt{2}$, $\phi = \pi/4$, а для ГЦК — $\theta = \pi/4$, $\phi = 0$.)

Полезно также определить асимптотики векторов поляризации в центре зоны Бриллюэна. Для определения этих асимптотик достаточно найти собственные векторы матрицы (39) с относительной точностью (ka_l^2) при частотах, описываемых формулой (42). Получаются следующие результаты:

$$\begin{aligned} \tilde{e}_{1,2}^x &= (k_y^2+k_z^2)\left[k_x^2k_y^2+k_y^2k_z^2+k_z^2k_x^2 \mp \sqrt{k_x^4k_y^4+k_y^4k_z^4+k_z^4k_x^4-k^2k_x^2k_y^2k_z^2}\right] - 2k^2k_y^2k_z^2\ , \\ \tilde{e}_{1,2}^{y,z} &= k_xk_{y,z}\left[-k_x^2k_y^2-k_y^2k_z^2-k_z^2k_x^2 \pm \sqrt{k_x^4k_y^4+k_y^4k_z^4+k_z^4k_x^4-k^2k_x^2k_y^2k_z^2}\right] + k^2k_xk_{y,z}k_{z,y}^2 . \end{aligned} \tag{43}$$

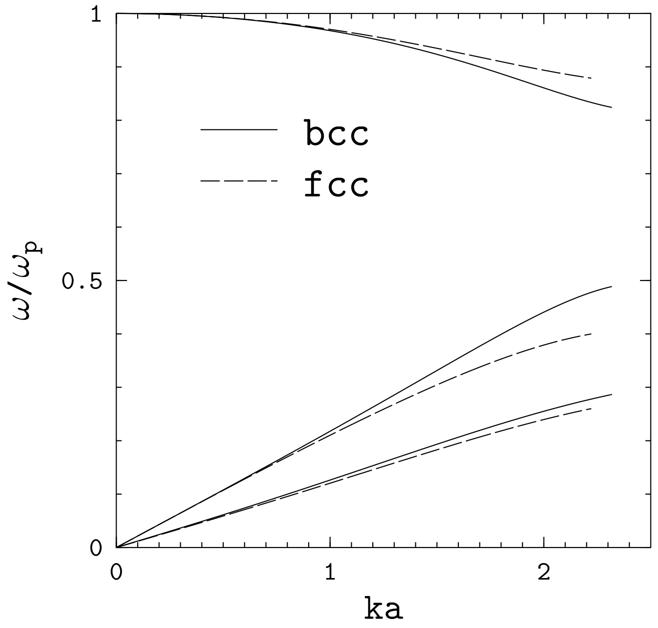

Рис. 1: Дисперсионные кривые для ОЦК и ГЦК решёток (направление волнового вектора определено в тексте). Справа кривые оборваны на границах зон Бриллюэна.

Очевидно, что векторы $\tilde{\mathbf{e}}_{1,2}$ перпендикулярны $\mathbf{k}$. Можно убедиться в том, что они, как и положено, ортогональны друг другу. Поэтому вектор $\mathbf{e}_3$ параллелен $\mathbf{k}$. Векторы $\mathbf{e}_{1,2}$ пропорциональны векторам $\tilde{\mathbf{e}}_{1,2}$, но нормированы на единицу.

1.5 Термодинамические функции фононов и интегрирование по зоне Бриллюэна

Прежде чем исследовать термодинамику кристаллической решётки, сформулируем квантовое решение задачи о колебаниях. За исходный пункт примем выражение для функции Лагранжа (21) и развернём координатные оси $3N_{\rm cell}$-мерной системы координат таким образом, чтобы диагонализовать матрицу $\mathcal{D}^{\alpha\beta}_{pp'}$. Тогда функция Лагранжа примет вид (см. конец раздела 2)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\sum_{\nu}\int_{\rm B_1}\frac{{\rm d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\dot{\mathcal{A}}_{\mathbf{k}\nu}\dot{\mathcal{A}}_{\tilde{\mathbf{k}}\nu} - U_0 - \frac{1}{2}\sum_{\nu}\int_{\rm B_1}\frac{{\rm d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\omega^2_{\mathbf{k}\nu}\mathcal{A}_{\mathbf{k}\nu}\mathcal{A}_{\tilde{\mathbf{k}}\nu}\ . \tag{44}$$

Для перехода к формализму Гамильтона введем обобщенные импульсы

$$\mathcal{P}_{\mathbf{k}\nu} = \frac{\partial L}{\partial\dot{\mathcal{A}}_{\mathbf{k}\nu}} = \dot{\mathcal{A}}_{\tilde{\mathbf{k}}\nu} \tag{45}$$

и запишем функцию Гамильтона

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0 &= \sum_{\nu}\int_{\rm B_1}\frac{{\rm d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\mathcal{P}_{\mathbf{k}\nu}\dot{\mathcal{A}}_{\mathbf{k}\nu} - L \\ &= \frac{1}{2}\sum_{\nu}\int_{\rm B_1}\frac{{\rm d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\mathcal{P}_{\mathbf{k}\nu}\mathcal{P}_{\tilde{\mathbf{k}}\nu} + U_0 + \frac{1}{2}\sum_{\nu}\int_{\rm B_1}\frac{{\rm d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\omega^2_{\mathbf{k}\nu}\mathcal{A}_{\mathbf{k}\nu}\mathcal{A}_{\tilde{\mathbf{k}}\nu}\ . \end{aligned} \tag{46}$$

(Индекс 0 у гамильтониана символизирует гармоническое приближение.) При квантовании колебаний $\mathcal{A}$ и $\mathcal{P}$ следует считать операторами с каноническими соотношениями коммутации

$$\begin{aligned}[][\mathcal{P}_{\mathbf{k}\nu}, \mathcal{A}_{\mathbf{k}'\nu'}] &= -i\hbar\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\nu\nu'} \ , \\ [\mathcal{P}_{\mathbf{k}\nu}, \mathcal{P}_{\mathbf{k}'\nu'}] &= [\mathcal{A}_{\mathbf{k}\nu}, \mathcal{A}_{\mathbf{k}'\nu'}] = 0 \ . \end{aligned} \tag{47}$$

Поскольку полученный гамильтониан равен сумме гамильтонианов независимых гармонических осцилляторов, то его квантование может быть проведено по известной для гармонического осциллятора схеме. Введём новые операторы

$$\begin{aligned} \sqrt{2}a_{\mathbf{k}\nu} &= \frac{i}{\sqrt{\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}}}\mathcal{P}_{\tilde{\mathbf{k}}\nu} + \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}\nu}}{\hbar}}\mathcal{A}_{\mathbf{k}\nu} \ , \\ \sqrt{2}a^{\dagger}_{\mathbf{k}\nu} &= -\frac{i}{\sqrt{\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}}}\mathcal{P}^{\dagger}_{\tilde{\mathbf{k}}\nu} + \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}\nu}}{\hbar}}\mathcal{A}^{\dagger}_{\mathbf{k}\nu} = -\frac{i}{\sqrt{\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}}}\mathcal{P}_{\mathbf{k}\nu} + \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}\nu}}{\hbar}}\mathcal{A}_{\tilde{\mathbf{k}}\nu} \ . \end{aligned} \tag{48}$$

Тогда, как несложно проверить (учитывая, что $\omega_{\mathbf{k}\nu} = \omega_{\tilde{\mathbf{k}}\nu}$), гамильтониан может быть записан в виде

$$\mathcal{H}_0 = U_0 + \sum_{\nu}\int_{\mathrm{B}_1}\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}}{2}(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\nu}a_{\mathbf{k}\nu} + a_{\mathbf{k}\nu}a^{\dagger}_{\mathbf{k}\nu}) \ , \tag{49}$$

$$\mathcal{P}_{\mathbf{k}\nu} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}}{2}}(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\nu} - a_{\tilde{\mathbf{k}}\nu}) \ , \quad \mathcal{A}_{\mathbf{k}\nu} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}\nu}}}(a^{\dagger}_{\tilde{\mathbf{k}}\nu} + a_{\mathbf{k}\nu}) \tag{50}$$

$$\left[a_{\mathbf{k}\nu}, a^{\dagger}_{\mathbf{k}'\nu'}\right] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\nu\nu'} \ , \quad \left[a^{\dagger}_{\mathbf{k}\nu}, a^{\dagger}_{\mathbf{k}'\nu'}\right] = \left[a_{\mathbf{k}\nu}, a_{\mathbf{k}'\nu'}\right] = 0 \ . \tag{51}$$

Соотношения коммутации (51) для операторов $a^{\dagger}_{\mathbf{k}\nu}$ и $a_{\mathbf{k}\nu}$ показывают, что мы имеем дело с обычными бозонными операторами рождения и уничтожения квазичастиц в моде $\mathbf{k}\nu$. Эти квазичастицы называют *фононами.*

Форма гамильтониана (49) говорит о том, что фононы не взаимодействуют друг с другом, т.е. образуют идеальный газ. Термодинамику фононного газа удобно изучать в переменных T, V и μ, где T — температура, а μ — химический потенциал. Нас будет интересовать ситуация, когда $\mu = 0$, а объём V фиксирован. Таким образом, все термодинамические функции будут определяться единственным параметром — температурой, а точнее отношением $T/\hbar\omega_p = T/T_p$.

Термодинамический потенциал равен

$$\Omega = -T\ln\prod_{\mathbf{k}\nu}\sum_{n_{\mathbf{k}\nu}=0}^{\infty}e^{-\hbar n_{\mathbf{k}\nu}\omega_{\mathbf{k}\nu}/T} = -T\ln\prod_{\mathbf{k}\nu}\frac{1}{1-e^{-\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}/T}} = T\sum_{\mathbf{k}\nu}\ln\left(1-e^{-\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}/T}\right) \ , \tag{52}$$

где $n_{\mathbf{k}\nu}$ — число фононов в моде $\mathbf{k}\nu$. Термодинамический потенциал позволяет определить основные термодинамические функции, давление P, энтропию S и теплоемкость C как соответствующие производные:

$$\mathrm{d}\Omega = \mathrm{d}(F - \mu N) = -S\mathrm{d}T - P\mathrm{d}V - N\mathrm{d}\mu \ , \tag{53}$$

так что

$$P = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial V}\right)_{T,\mu} \ , \quad S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu} \ , \quad C = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,\mu} \ . \tag{54}$$

При дифференцировании по объёму следует учесть, что частоты $\omega_{\mathbf{k}\nu}$ имеют характерный масштаб ионной плазменной частоты ω_p, а последняя, в свою очередь, зависит от V через концентрацию ионов. Величина $\omega_{\mathbf{k}\nu}/\omega_p$ от объема уже не зависит. В термодинамическом пределе сумма в (52) заменяется интегралом по 1-ой зоне Бриллюэна. При этом экстенсивные величины, такие как Ω или S, становятся бесконечными и следует работать с соответствующими величинами на единицу объема. Тогда

$$\frac{\Omega}{V} = T \sum_{\nu} \int_{\mathrm{B}_1} \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \ln\left(1 - e^{-\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}/T}\right) , \tag{55}$$

и

$$P = \sum_{\nu} \int_{\mathrm{B}_1} \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{e^{-\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}/T}}{1 - e^{-\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}/T}} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}}{2} - T \ln\left(1 - e^{-\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}/T}\right) \right] \tag{56}$$

$$\frac{S}{V} = \sum_{\nu} \int_{\mathrm{B}_1} \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{e^{-\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}/T}}{1 - e^{-\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}/T}} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}}{T} - \ln\left(1 - e^{-\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}/T}\right) \right] \tag{57}$$

$$\frac{C}{V} = \sum_{\nu} \int_{\mathrm{B}_1} \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}/T}}{(e^{\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}/T} - 1)^2} \frac{\hbar^2\omega_{\mathbf{k}\nu}^2}{T^2} \tag{58}$$

В предельных случаях высоких и низких температур ($T \gg T_p$ и $T \ll T_p$), соответствующих классическому и квантовому режимам колебаний решётки, эти формулы могут быть существенно упрощены. При высоких температурах экспоненту $e^{\pm\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}/T}$ удобно разлагать в ряд Тейлора, что даёт

$$\begin{aligned} \frac{\Omega}{V} &\approx \frac{3N_{\mathrm{cell}}V_{\mathrm{B}_1}}{(2\pi)^3} T \ln\frac{\hbar\omega_p}{T} + T \sum_{\nu} \int_{\mathrm{B}_1} \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[\ln\frac{\omega_{\mathbf{k}\nu}}{\omega_p} - \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}\nu}}{2T} \right] \\ &= 3nT \ln\frac{\hbar\omega_p}{T} + 3nT \left\langle \ln\frac{\omega_{\mathbf{k}\nu}}{\omega_p} \right\rangle_{\mathrm{ph}} - \frac{3n\hbar\omega_p}{2} \left\langle \frac{\omega_{\mathbf{k}\nu}}{\omega_p} \right\rangle_{\mathrm{ph}} , \end{aligned} \tag{59}$$

где мы ввели усреднение по фононному спектру, которое потребуется в дальнейшем,

$$\langle f_{\mathbf{k}\nu} \rangle_{\mathrm{ph}} = \frac{1}{3N_{\mathrm{cell}}V_{\mathrm{B}_1}} \sum_{\nu=1}^{3N_{\mathrm{cell}}} \int_{\mathrm{B}_1} \mathrm{d}\mathbf{k} f_{\mathbf{k}\nu} , \tag{60}$$

и учли, что $V_{\mathrm{B}_1} = (2\pi)^3 n/N_{\mathrm{cell}}$. Появление усреднённого логарифма частоты в классическом пределе имеет интересные следствия при наличии магнитного поля (см. главу 2). Аналогичным образом при $T \gg T_p$ получим

$$\frac{P}{n} \approx \frac{3}{2}T - 3T \ln\frac{\hbar\omega_p}{T} - 3T \left\langle \ln\frac{\omega_{\mathbf{k}\nu}}{\omega_p} \right\rangle_{\mathrm{ph}} + \frac{3}{4}\hbar\omega_p \left\langle \frac{\omega_{\mathbf{k}\nu}}{\omega_p} \right\rangle_{\mathrm{ph}} , \tag{61}$$

$$\frac{S}{nV} \approx 3 - 3\ln\frac{\hbar\omega_p}{T} - 3\left\langle \ln\frac{\omega_{\mathbf{k}\nu}}{\omega_p} \right\rangle_{\mathrm{ph}} + \frac{\hbar^2\omega_p^2}{8T^2} , \tag{62}$$

$$\frac{C}{nV} \approx 3 - \frac{\hbar^2\omega_p^2}{4T^2} . \tag{63}$$

В квантовом режиме оптические моды практически не вносят вклад в термодинамические величины (поскольку средние числа заполнения этих мод $\ll 1$), а акустические моды вносят вклад только при тех $\mathbf{k}$, при которых их частоты минимальны, т.е. вблизи центра зоны Бриллюэна. В этой области акустические частоты $\omega \propto k$, что позволяет получить следующие асимптотики ($T \ll T_p$):

$$\begin{aligned}\frac{\Omega}{V} &\approx T\sum_\nu \int \frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3}\int_0^\infty \mathrm{d}k k^2 \ln\left(1-e^{-\hbar c_{\hat{\mathbf{k}}\nu}k/T}\right) = \frac{T^4}{\hbar^3}\int_0^\infty \mathrm{d}x x^2 \ln\left(1-e^{-x}\right)\sum_\nu\int\frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3}\frac{1}{c^3_{\hat{\mathbf{k}}\nu}} \\ &= -\frac{T^4}{3\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x x^3 e^{-x}}{1-e^{-x}}\sum_\nu\int\frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3}\frac{1}{c^3_{\hat{\mathbf{k}}\nu}} = -\frac{\pi^2 T^4}{45\hbar^3\bar{c}^3}\ ,\end{aligned} \tag{64}$$

где

$$\frac{1}{\bar{c}^3} = \frac{1}{2}\sum_\nu\int\frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}}}{4\pi}\frac{1}{c^3_{\hat{\mathbf{k}}\nu}} \qquad \text{и} \qquad c_{\hat{\mathbf{k}}\nu} = \lim_{k\to 0}\frac{\omega_{\mathbf{k}\nu}}{k} \tag{65}$$

— скорость звука в направлении $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$. Аналогичным образом выводятся асимптотики остальных термодинамических функций при $T \ll T_p$:

$$P \approx \frac{\pi^2 T^4}{18\hbar^3\bar{c}^3}\ , \qquad \frac{S}{V} \approx \frac{4\pi^2 T^3}{45\hbar^3\bar{c}^3}\ , \qquad \frac{C}{V} \approx \frac{4\pi^2 T^3}{15\hbar^3\bar{c}^3}\ . \tag{66}$$

Наши расчёты показывают, что

$$\frac{1}{\bar{c}^3_{\text{ОЦК}}} = \frac{227.86}{\omega_p^3 a^3}\ , \qquad \frac{1}{\bar{c}^3_{\text{ГЦК}}} = \frac{248.79}{\omega_p^3 a^3}\ . \tag{67}$$

Отметим также знаменитый закон Дебая $C \propto T^3$.

При промежуточных значениях температур $T \sim T_p$ термодинамические величины определяются точным интегрированием по зоне Бриллюэна. Из нескольких методов интегрирования перечислим 3 в порядке возрастания сложности.

В первую очередь следует отметить метод Монте-Карло. После нескольких сотен тысяч “бросаний” (т.е. выборов волнового вектора в 1-ой зоне Бриллюэна) можно получить приемлемую точность расчёта термодинамических величин при не слишком низких температурах $T \gtrsim \hbar\omega_p$. При более низких температурах интеграл по зоне Бриллюэна, в основном, набирается вблизи её центра (при $k \lesssim T/\hbar\bar{c}$), так что однородный метод Монте-Карло быстро становится неэффективным. Требуется модификация и усложнение алгоритма.

Другой метод интегрирования был предложен Мочковичем и Ансеном [66]. Эти авторы аппроксимировали зону Бриллюэна шаром радиуса $q_{\mathrm{B}} = (6\pi^2 n)^{1/3}$, выбранным с таким расчётом, чтобы объём шара равнялся объёму зоны Бриллюэна при $N_{\text{cell}} = 1$. Далее предполагалось наличие трёх эффективных фононных мод, двух акустических $\omega_{1,2}(k)/\omega_p = c_{1,2}k/q_{\mathrm{B}}$ во всей зоне, и одной оптической, частота которой определялась из правила сумм: $\omega_3^2(k) = \omega_p^2 - \omega_1^2(k) - \omega_2^2(k)$. После этого трёхмерный интеграл, определяющий среднее по зоне согласно (60), превращался в одномерный

$$\begin{aligned}&\frac{1}{3N_{\text{cell}}V_{\mathrm{B}_1}}\sum_{\nu=1}^{3N_{\text{cell}}}\int_{\mathrm{B}_1}\mathrm{d}\mathbf{k} f\left(\frac{\omega_{\mathbf{k}\nu}}{\omega_p}\right) \to \\ &\quad \frac{4\pi}{3}\frac{1}{(2\pi)^3 n}\sum_{\mu=1}^{3}\int_0^{q_{\mathrm{B}}}\mathrm{d}k k^2 f\left[\frac{\omega_\mu(k)}{\omega_p}\right] = \sum_{\mu=1}^{3}\int_0^1 \mathrm{d}x x^2 f\left[\frac{\omega_\mu(x)}{\omega_p}\right],\end{aligned} \tag{68}$$

Таблица 2: Значения усреднённых фазовых скоростей в единицах ω_p/q_B.

	ОЦК	ГЦК	ГПУ
c_1	0.58026	0.605776	0.622050
c_2	0.323789	0.334525	0.334456

где $x = k/q_\mathrm{B}$. Таким образом, схема задаётся двумя константами c_1 и c_2, разными для различных типов решёток. Эти константы, которые можно назвать усреднёнными фазовыми скоростями акустических мод, определяются по значениям моментов фононного спектра u_{-1} и u_{-2}, известным из точных расчётов. Здесь

$$u_n = \left\langle \left(\frac{\omega_{\mathbf{k}\nu}}{\omega_p} \right)^n \right\rangle_\mathrm{ph} . \tag{69}$$

Рассчитанные нами значения моментов для различных типов решёток приведены в конце раздела (табл. 3). Значения же скоростей c_1 и c_2 сведены в таблицу 2. Этим методом термодинамические функции можно рассчитать с приемлемой точностью при умеренно низких температурах $T \gtrsim 0.1\hbar\omega_p$. Продвижение в область малых температур связано с тем, что хотя мы и имеем здесь дело с усреднёнными фазовыми скоростями (отличающимися от точных фазовых скоростей вблизи центра зоны), тем не менее, момент u_{-2} чувствителен к поведению дисперсионных кривых вблизи центра зоны (отметим, что u_{-3} в центре расходится). Стало быть, вес центра зоны при вычислении этих усреднённых скоростей достаточно велик. При температурах $0.01\,\hbar\omega_p \lesssim T \lesssim 0.1\,\hbar\omega_p$ точность этого метода постепенно падает, и при температурах $T \lesssim 0.01\,\hbar\omega_p$ метод Мочковича и Ансена приводит к неточным результатам — становится важным отличие точных фазовых скоростей в центре зоны от эффективных скоростей, вычисленных по моментам спектра.

Наконец, рассмотрим метод интегрирования, позволяющий достичь наилучшей точности даже при очень низких значениях температуры $T \sim 10^{-4}\hbar\omega_p$ и использованный в этой работе. Речь идет о трёхмерном модифицированном методе Гаусса, предложенном Альберсом и Губернатисом для ОЦК [2]. В простейшем случае, когда подынтегральная функция определяется только спектром фононов (как, например, при расчёте термодинамических функций), можно интегрировать не по всей зоне Бриллюэна, а разделить её на некоторое число одинаковых подзон, интегралы по которым совпадают из-за симметрии решётки. Поскольку общих правил для произвольной решётки нет, перейдём к конкретным примерам и рассмотрим ОЦК, ГЦК и ГПУ решётки.

В случае ОЦК решётки зона Бриллюэна определяется неравенствами

$$\pm k_x \pm k_y \le \frac{2\pi}{a_\mathrm{l}} , \quad \pm k_y \pm k_z \le \frac{2\pi}{a_\mathrm{l}} , \quad \pm k_z \pm k_x \le \frac{2\pi}{a_\mathrm{l}} \tag{70}$$

(должны удовлетворяться все 12 неравенств), где a_l — постоянная ОЦК решётки, удовлетворяющая соотношению $na_\mathrm{l}^3 = 2$. Легко сообразить, что зону можно разбить на 48 эквивалентных подзон. Одна из подзон (по которой мы будем интегрировать и которую будем называть основной подзоной) может быть задана неравенствами

$$k_x \geq k_y \geq k_z \geq 0\ , \quad k_x + k_y \leq \frac{2\pi}{a_1}\ . \tag{71}$$

В случае ГЦК решётки зона Бриллюэна определяется неравенствами

$$\pm k_x \pm k_y \pm k_z \leq \frac{3\pi}{a_1}\ , \quad |k_x|, |k_y|, |k_z| \leq \frac{2\pi}{a_1}\ , \tag{72}$$

причём $na_1^3 = 4$. И в этом случае зону можно разбить на 48 эквивалентных подзон, а основная подзона задаётся неравенствами

$$k_x \geq k_y \geq k_z \geq 0\ , \quad k_x + k_y + k_z \leq \frac{3\pi}{a_1}\ , \quad k_x \leq \frac{2\pi}{a_1}\ . \tag{73}$$

Наконец, для ГПУ решётки зона Бриллюэна определяется соотношениями

$$\pm k_y\sqrt{3} \pm k_x \leq \frac{4\pi}{\sqrt{3}a_1}\ , \quad |k_x| \leq \frac{2\pi}{\sqrt{3}a_1}\ , \quad |k_z| \leq \frac{\pi}{\gamma a_1}\ , \tag{74}$$

плотной упаковке соответствует $\gamma = \sqrt{8/3}$, и $na_1^3 = \sqrt{2}$. Эта зона может быть разбита на 24 эквивалентные подзоны, основную из которых будем задавать неравенствами

$$0 \leq k_z \leq \frac{\pi}{\gamma a_1}\ , \quad 0 \leq k_x \leq \frac{2\pi}{\sqrt{3}a_1}\ , \quad 0 \leq k_y \leq \frac{k_x}{\sqrt{3}}\ . \tag{75}$$

Альберс и Губернатис показали, что интеграл по основной подзоне ($\int_{\mathrm{IR}}$) для ОЦК с помощью замены переменных может быть записан в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_{\mathrm{IR}}}\int_{\mathrm{IR}} \mathrm{d}\mathbf{k} f(\mathbf{k}) &= 6\int_0^1\int_0^1\int_0^1 \mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\zeta\,\eta\xi^2 f[\mathbf{q}(\xi,\eta,\zeta)]\ , \\ \mathbf{q} &= \frac{2\pi}{a_1}\xi(1-\eta/2, \eta/2, \eta\zeta/2)\ , \end{aligned} \tag{76}$$

где V_{IR} — объем основной подзоны, равный $V_{\mathrm{B}_1}/48$. Обобщим этот подход на случай ГЦК и ГПУ решёток. Для ГЦК основная подзона должна быть разбита на 3 элементарные области интегрирования, в каждой из которых делается особая замена переменных, а для ГПУ — на 2 элементарные области. Для ГЦК решётки имеем

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_{\mathrm{IR}}}\int_{\mathrm{IR}} \mathrm{d}\mathbf{k} f(\mathbf{k}) &= \frac{9}{4}\int_0^1\int_0^1\int_0^1 \mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\zeta\,\eta\xi^2 \left\{ f[\mathbf{q}_1(\xi,\eta,\zeta)] + f[\mathbf{q}_2(\xi,\eta,\zeta)] + \frac{2}{3} f[\mathbf{q}_3(\xi,\eta,\zeta)] \right\}, \\ \mathbf{q}_1 &= \frac{\pi\xi}{2a_1}\left(2+\eta+\eta\zeta, 2+\eta-\eta\zeta, 2-2\eta\right), \\ \mathbf{q}_2 &= \frac{\pi\xi}{2a_1}\left(2+2\eta, 2-\eta+\eta\zeta, 2-\eta-\eta\zeta\right), \\ \mathbf{q}_3 &= \frac{\pi\xi}{2a_1}\left(4, \eta+\eta\zeta, \eta-\eta\zeta\right)\ , \end{aligned} \tag{77}$$

и для ГПУ решётки

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_{\mathrm{IR}}}\int_{\mathrm{IR}} \mathrm{d}\mathbf{k} f(\mathbf{k}) &= 2\int_0^1\int_0^1\int_0^1 \mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\zeta\,\xi^2 \left\{ f[\mathbf{q}_1(\xi,\eta,\zeta)] + \eta f[\mathbf{q}_2(\xi,\eta,\zeta)] \right\}, \\ \mathbf{q}_1 &= \frac{\pi\xi}{a_1}\left(\frac{2}{\sqrt{3}}, \frac{2\zeta}{3}, \frac{\eta}{\gamma}\right), \\ \mathbf{q}_2 &= \frac{\pi\xi}{a_1}\left(\frac{2\eta}{\sqrt{3}}, \frac{2\eta\zeta}{3}, \frac{1}{\gamma}\right) \end{aligned} \tag{78}$$

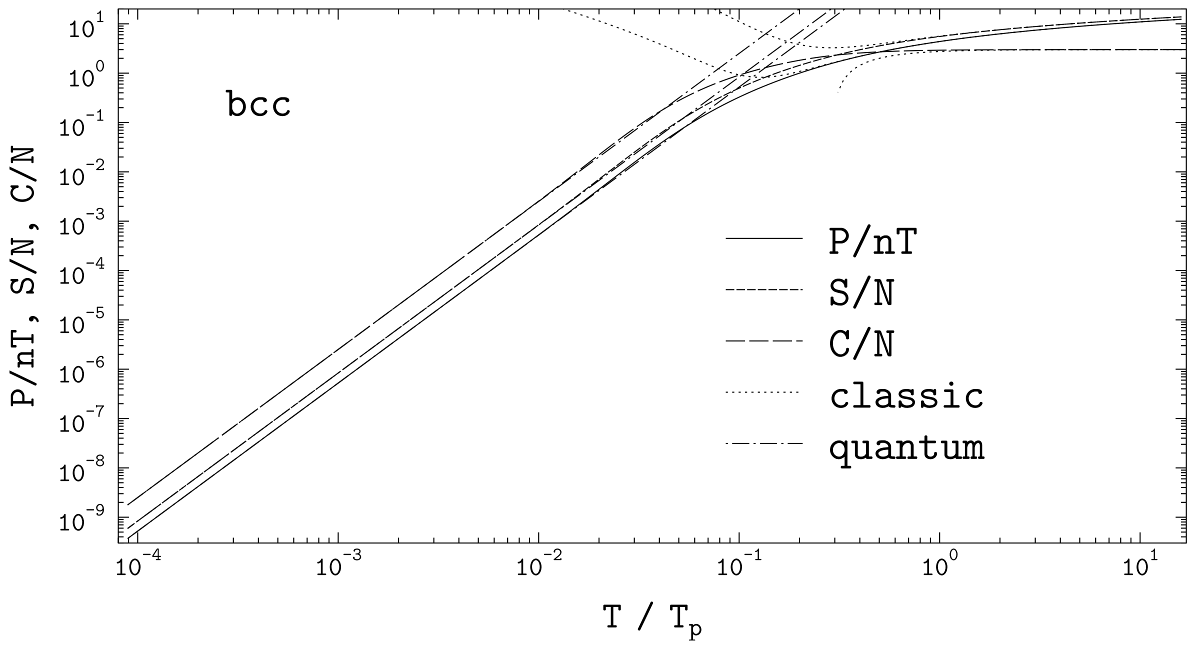

Рис. 2: Термодинамические функции для ОЦК решётки и их асимптотики при $T \ll T_p$ (quantum) и $T \gg T_p$ (classic).

(напомним, что для ГПУ решётки $V_{\rm IR} = V_{\rm B_1}/24$).

Интегралы по промежутку $[0, 1]$ удобнее всего вычислять методом Гаусса по узлам полиномов Якоби $P_n^{(0,0)}(x)$, где n — степень полинома или порядок метода Гаусса. Если основной вклад в интеграл набирается в непосредственной окрестности центра зоны Бриллюэна (как, например, при расчёте термодинамических функций в квантовом режиме $T \ll \hbar\omega_p$), промежуток интегрирования по ξ следует разбить на интервалы $[0, \lambda^{p/p}]$, $[\lambda^{p/p}, \lambda^{(p-1)/p}]$, ... , $[\lambda^{1/p}, 1]$. В каждом из интервалов следует интегрировать методом Гаусса, например, по 8 точкам. Число λ при этом выбирается с таким расчётом, чтобы интегрировать на нужном расстоянии от центра зоны. При вычислении термодинамических величин интегрирование проводилось с $\lambda = 10^{-5}$ и $p = 15$. Интегралы по η и ζ можно вычислять методом Гаусса по 8 точкам, либо разбить промежутки интегрирования по η и ζ на 2—4 равных промежутка и в каждом из них интегрировать методом Гаусса.

Число точек, в которых надо рассчитывать спектр, при этом составляет ≈ 8000 для ОЦК решётки и утраивается для ГЦК. Это гораздо меньше, чем число точек, необходимое для достижения той же точности методом Монте-Карло.

В таблице 3 приведены значения моментов спектра фононов, рассчитанных данным методом. Здесь уместно отметить значения моментов фононных спектров, полученных ранее другими авторами. Альберс и Губернатис [2] использовали свой метод для расчёта моментов ОЦК решётки. Они получили следующие оценки $u_{-2} = 12.973$, $u_{-1} = 2.79856$, $u_1 = 0.5113874$. Момент u_1 был рассчитан Нагаи и Фукуямой [67, 68]. Они нашли $u_1 = 0.5113869$ для ОЦК, 0.5131936 для ГЦК и 0.5133368 для ГПУ. Наконец, Дубин [26] рассчитал значения усреднённого логарифма $\langle \ln(\omega/\omega_p) \rangle = -0.831297$ для ОЦК и -0.817910 для ГЦК. В таблице 3 мы приводим значения моментов с 5-ю значащими цифрами, т.к.

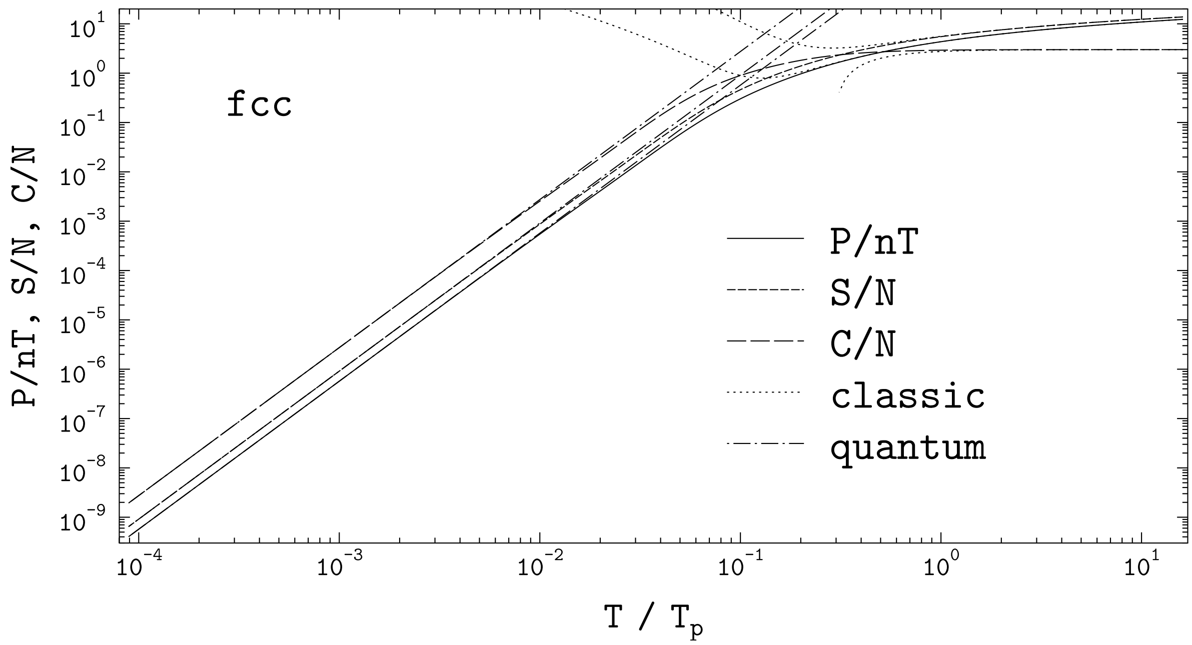

Рис. 3: Термодинамические функции и их асимптотики для ГЦК решётки.

такова точность расчёта момента u_{-2}. Остальные моменты для ОЦК и ГЦК решёток были рассчитаны с несколько лучшей точностью. Так, мы получили $u_1 = 0.5113875$ и 0.5131940, $u_{-1} = 2.79855$ и 2.71982, $\langle \ln(\omega/\omega_p) \rangle = -0.831298$ и -0.817908 для ОЦК и ГЦК соответственно.

Термодинамические функции изображены на рис. 2 и 3 для ОЦК и ГЦК решёток. Показаны точные функции, а также их классические (61) - (63) и квантовые (66) асимптотики. Кроме того, значения термодинамических функций в зависимости от T/T_p для ОЦК и ГЦК решёток приведены в таблице 4. Модифицированный метод Гаусса позволил рассчитать эти функции по меньшей мере с точностью до четырёх знаков. Отметим, что термодинамические функции (свободная энергия и теплоёмкость) для ОЦК решётки были рассчитаны Поллоком и Ансеном [80] в диапазоне $0.35 \leq T_p/T \leq 31$. При $T_p/T \leq 10$ эти результаты прекрасно согласуются с нашими, но с дальнейшем увеличением T_p/T отличие резко возрастает, достигая 0.05% при $T_p/T \approx 31$. В таблице 4 приведены также значения термодинамических функций для ГПУ решётки, рассчитанные методом Мочковича и Ансена. Точность этих расчётов хуже, чем расчётов методом Гаусса. При малых T/T_p эта схема интегрирования не позволяет рассчитать термодинамические функции, поэтому соответствующие результаты не приводятся.

В заключение раздела несколько слов о расчёте электростатической энергии U_0, описываемой формулой (3). Постоянная Маделунга ζ расчитывается по формуле

$$\begin{aligned}\zeta &= \frac{1}{2N_{\rm cell}} \sum_{\mathrm{l}\in\Xi;\ p'p} (1-\delta_{pp'}\delta_{\mathbf{R}_\mathrm{l}0})\,\frac{a}{Y_\mathrm{l}}\,\mathrm{erfc}(AY_\mathrm{l}) - \frac{3}{8A^2a^2} - \frac{Aa}{\sqrt{\pi}} \\ &+ \frac{3}{2N_{\rm cell}^2} \sum_{\mathrm{m}\in\Xi;\ p'p} (1-\delta_{\mathbf{G}_\mathrm{m}0})\,\frac{1}{\mathbf{G}_\mathrm{m}^2a^2}\,\exp\left\{-\frac{\mathbf{G}_\mathrm{m}^2}{4A^2} + i\mathbf{G}_\mathrm{m}[\boldsymbol{\chi}(p)-\boldsymbol{\chi}(p')]\right\}, \qquad (79)\end{aligned}$$

Таблица 3: Моменты фононного спектра для трёх решёток.

функция	ОЦК	ГЦК	ГПУ
$\langle(\omega/\omega_p)^{-2}\rangle$	12.973	12.143	12.015
$\langle(\omega/\omega_p)^{-1}\rangle$	2.7986	2.7198	2.7026
$\langle(\omega/\omega_p)\rangle$	0.51139	0.51319	0.51333
$\langle(\omega/\omega_p)^3\rangle$	0.25031	0.24984	0.24984
$\langle\ln{(\omega/\omega_p)}\rangle$	-0.83130	-0.81791	-0.81597

получающейся из общего выражения (3) методом Эвальда. Как и выше, здесь $\mathbf{Y}_l = \mathbf{R}_l + \boldsymbol{\chi}_p - \boldsymbol{\chi}_{p'}$. Значения этой постоянной для трёх рассматриваемых решёток таковы

$$\begin{aligned} \zeta_{\text{ОЦК}} &= -0.895\,929\,255\,682, \\ \zeta_{\text{ГЦК}} &= -0.895\,873\,615\,195, \\ \zeta_{\text{ГПУ}} &= -0.895\,838\,120\,459. \end{aligned} \tag{80}$$

Оригинальный результат Эвальда для постоянной Маделунга был получен в предположении о наличии в примитивной ячейке решётки нескольких *точечных* зарядов разного знака, сумма которых равна нулю. Формула типа (79), которая предполагает *однородный* нейтрализующий фон электронов, была получена Фуксом [33]. По меньшей мере с 6-ю значащими цифрами величины ζ для трёх указанных решёток известны давно (например, [67, 68] и ссылки там). Здесь мы приводим их из соображений полноты.

Таблица 4: Термодинамические функции фононов для ОЦК, ГЦК и ГПУ решёток (в скобках даны степени 10).

$\frac{T}{T_p}$	$\frac{P_{\text{ОЦК}}}{nT}$	$\frac{P_{\text{ГЦК}}}{nT}$	$\frac{P_{\text{ГПУ}}}{nT}$	$\frac{S_{\text{ОЦК}}}{N}$	$\frac{S_{\text{ГЦК}}}{N}$	$\frac{S_{\text{ГПУ}}}{N}$	$\frac{C_{\text{ОЦК}}}{N}$	$\frac{C_{\text{ГЦК}}}{N}$	$\frac{C_{\text{ГПУ}}}{N}$
1.609(1)	1.235(1)	1.231(1)	1.228(1)	1.383(1)	1.379(1)	1.376(1)	3.000(0)	3.000(0)	3.000(0)
1.506(1)	1.216(1)	1.212(1)	1.209(1)	1.363(1)	1.359(1)	1.356(1)	3.000(0)	3.000(0)	3.000(0)
1.410(1)	1.196(1)	1.192(1)	1.189(1)	1.343(1)	1.339(1)	1.336(1)	3.000(0)	3.000(0)	3.000(0)
1.321(1)	1.177(1)	1.172(1)	1.169(1)	1.324(1)	1.320(1)	1.317(1)	3.000(0)	3.000(0)	3.000(0)
1.237(1)	1.157(1)	1.153(1)	1.150(1)	1.304(1)	1.300(1)	1.297(1)	2.999(0)	2.999(0)	2.999(0)
1.158(1)	1.137(1)	1.133(1)	1.130(1)	1.284(1)	1.280(1)	1.277(1)	2.999(0)	2.999(0)	2.999(0)
1.084(1)	1.118(1)	1.114(1)	1.111(1)	1.264(1)	1.260(1)	1.257(1)	2.999(0)	2.999(0)	2.999(0)
1.015(1)	1.098(1)	1.094(1)	1.091(1)	1.245(1)	1.241(1)	1.238(1)	2.999(0)	2.999(0)	2.999(0)
9.505(0)	1.079(1)	1.075(1)	1.072(1)	1.225(1)	1.221(1)	1.218(1)	2.999(0)	2.999(0)	2.999(0)
8.899(0)	1.059(1)	1.055(1)	1.052(1)	1.205(1)	1.201(1)	1.198(1)	2.999(0)	2.999(0)	2.999(0)
8.333(0)	1.040(1)	1.036(1)	1.033(1)	1.186(1)	1.181(1)	1.178(1)	2.999(0)	2.999(0)	2.999(0)
7.802(0)	1.021(1)	1.017(1)	1.014(1)	1.166(1)	1.162(1)	1.159(1)	2.999(0)	2.999(0)	2.999(0)
7.305(0)	1.001(1)	9.972(0)	9.942(0)	1.146(1)	1.142(1)	1.139(1)	2.998(0)	2.998(0)	2.998(0)
6.840(0)	9.818(0)	9.778(0)	9.748(0)	1.126(1)	1.122(1)	1.119(1)	2.998(0)	2.998(0)	2.998(0)
6.405(0)	9.625(0)	9.585(0)	9.555(0)	1.107(1)	1.103(1)	1.100(1)	2.998(0)	2.998(0)	2.998(0)
5.997(0)	9.432(0)	9.392(0)	9.362(0)	1.087(1)	1.083(1)	1.080(1)	2.998(0)	2.998(0)	2.998(0)
5.615(0)	9.239(0)	9.199(0)	9.169(0)	1.067(1)	1.063(1)	1.060(1)	2.997(0)	2.997(0)	2.997(0)
5.258(0)	9.046(0)	9.006(0)	8.976(0)	1.047(1)	1.043(1)	1.040(1)	2.997(0)	2.997(0)	2.997(0)
4.923(0)	8.853(0)	8.814(0)	8.784(0)	1.028(1)	1.024(1)	1.021(1)	2.997(0)	2.997(0)	2.997(0)
4.609(0)	8.661(0)	8.622(0)	8.592(0)	1.008(1)	1.004(1)	1.001(1)	2.996(0)	2.996(0)	2.996(0)
4.316(0)	8.470(0)	8.430(0)	8.400(0)	9.883(0)	9.843(0)	9.812(0)	2.996(0)	2.996(0)	2.996(0)
4.041(0)	8.278(0)	8.239(0)	8.209(0)	9.686(0)	9.646(0)	9.615(0)	2.995(0)	2.995(0)	2.995(0)
3.784(0)	8.087(0)	8.048(0)	8.018(0)	9.489(0)	9.449(0)	9.418(0)	2.994(0)	2.994(0)	2.994(0)
3.543(0)	7.897(0)	7.857(0)	7.827(0)	9.292(0)	9.252(0)	9.221(0)	2.993(0)	2.993(0)	2.993(0)
3.317(0)	7.707(0)	7.667(0)	7.637(0)	9.095(0)	9.055(0)	9.024(0)	2.992(0)	2.992(0)	2.992(0)
3.106(0)	7.518(0)	7.478(0)	7.448(0)	8.898(0)	8.858(0)	8.828(0)	2.991(0)	2.991(0)	2.991(0)
2.908(0)	7.329(0)	7.289(0)	7.259(0)	8.702(0)	8.661(0)	8.631(0)	2.990(0)	2.990(0)	2.990(0)

(продолжение на следующей стр.)

(продолжение)									
$\frac{T}{T_p}$	$\frac{P_{\text{ОЦК}}}{nT}$	$\frac{P_{\text{ГЦК}}}{nT}$	$\frac{P_{\text{ГПУ}}}{nT}$	$\frac{S_{\text{ОЦК}}}{N}$	$\frac{S_{\text{ГЦК}}}{N}$	$\frac{S_{\text{ГПУ}}}{N}$	$\frac{C_{\text{ОЦК}}}{N}$	$\frac{C_{\text{ГЦК}}}{N}$	$\frac{C_{\text{ГПУ}}}{N}$
2.723(0)	7.140(0)	7.100(0)	7.071(0)	8.505(0)	8.465(0)	8.434(0)	2.989(0)	2.989(0)	2.989(0)
2.550(0)	6.952(0)	6.913(0)	6.883(0)	8.308(0)	8.268(0)	8.238(0)	2.987(0)	2.987(0)	2.987(0)
2.387(0)	6.765(0)	6.726(0)	6.696(0)	8.112(0)	8.072(0)	8.041(0)	2.985(0)	2.985(0)	2.985(0)
2.235(0)	6.579(0)	6.539(0)	6.510(0)	7.916(0)	7.875(0)	7.845(0)	2.983(0)	2.983(0)	2.983(0)
2.093(0)	6.393(0)	6.354(0)	6.324(0)	7.719(0)	7.679(0)	7.649(0)	2.981(0)	2.981(0)	2.981(0)
1.960(0)	6.208(0)	6.169(0)	6.139(0)	7.523(0)	7.483(0)	7.452(0)	2.978(0)	2.978(0)	2.978(0)
1.835(0)	6.024(0)	5.985(0)	5.956(0)	7.327(0)	7.287(0)	7.257(0)	2.975(0)	2.975(0)	2.975(0)
1.718(0)	5.841(0)	5.802(0)	5.773(0)	7.132(0)	7.092(0)	7.061(0)	2.972(0)	2.972(0)	2.972(0)
1.609(0)	5.659(0)	5.619(0)	5.591(0)	6.936(0)	6.896(0)	6.866(0)	2.968(0)	2.968(0)	2.968(0)
1.506(0)	5.478(0)	5.438(0)	5.410(0)	6.741(0)	6.701(0)	6.670(0)	2.964(0)	2.964(0)	2.964(0)
1.410(0)	5.298(0)	5.258(0)	5.230(0)	6.546(0)	6.506(0)	6.476(0)	2.959(0)	2.959(0)	2.959(0)
1.321(0)	5.119(0)	5.080(0)	5.051(0)	6.352(0)	6.312(0)	6.281(0)	2.953(0)	2.953(0)	2.953(0)
1.237(0)	4.941(0)	4.902(0)	4.874(0)	6.158(0)	6.118(0)	6.087(0)	2.947(0)	2.947(0)	2.947(0)
1.158(0)	4.765(0)	4.726(0)	4.698(0)	5.964(0)	5.924(0)	5.894(0)	2.939(0)	2.939(0)	2.939(0)
1.084(0)	4.590(0)	4.551(0)	4.523(0)	5.771(0)	5.731(0)	5.700(0)	2.931(0)	2.931(0)	2.931(0)
1.015(0)	4.416(0)	4.378(0)	4.350(0)	5.579(0)	5.539(0)	5.508(0)	2.921(0)	2.921(0)	2.921(0)
9.505(-1)	4.245(0)	4.206(0)	4.178(0)	5.387(0)	5.347(0)	5.316(0)	2.911(0)	2.911(0)	2.911(0)
8.899(-1)	4.075(0)	4.036(0)	4.009(0)	5.196(0)	5.156(0)	5.125(0)	2.899(0)	2.899(0)	2.898(0)
8.333(-1)	3.907(0)	3.868(0)	3.841(0)	5.005(0)	4.965(0)	4.935(0)	2.885(0)	2.885(0)	2.885(0)
7.802(-1)	3.740(0)	3.702(0)	3.675(0)	4.816(0)	4.776(0)	4.745(0)	2.870(0)	2.870(0)	2.869(0)
7.306(-1)	3.576(0)	3.538(0)	3.511(0)	4.628(0)	4.588(0)	4.557(0)	2.852(0)	2.852(0)	2.852(0)
6.840(-1)	3.414(0)	3.376(0)	3.350(0)	4.441(0)	4.401(0)	4.370(0)	2.833(0)	2.833(0)	2.832(0)
6.405(-1)	3.255(0)	3.217(0)	3.191(0)	4.255(0)	4.215(0)	4.185(0)	2.811(0)	2.811(0)	2.810(0)
5.997(-1)	3.098(0)	3.060(0)	3.034(0)	4.071(0)	4.031(0)	4.001(0)	2.786(0)	2.786(0)	2.786(0)
5.615(-1)	2.944(0)	2.906(0)	2.880(0)	3.889(0)	3.849(0)	3.818(0)	2.759(0)	2.759(0)	2.758(0)
5.258(-1)	2.792(0)	2.755(0)	2.729(0)	3.708(0)	3.668(0)	3.638(0)	2.729(0)	2.729(0)	2.727(0)
4.923(-1)	2.644(0)	2.606(0)	2.581(0)	3.530(0)	3.490(0)	3.459(0)	2.695(0)	2.695(0)	2.693(0)
4.609(-1)	2.498(0)	2.461(0)	2.437(0)	3.354(0)	3.314(0)	3.284(0)	2.657(0)	2.657(0)	2.655(0)
4.316(-1)	2.356(0)	2.319(0)	2.295(0)	3.180(0)	3.140(0)	3.110(0)	2.616(0)	2.616(0)	2.613(0)
4.041(-1)	2.218(0)	2.181(0)	2.158(0)	3.010(0)	2.969(0)	2.940(0)	2.570(0)	2.570(0)	2.567(0)
3.784(-1)	2.083(0)	2.047(0)	2.024(0)	2.842(0)	2.802(0)	2.773(0)	2.521(0)	2.520(0)	2.516(0)
3.543(-1)	1.952(0)	1.916(0)	1.894(0)	2.678(0)	2.638(0)	2.609(0)	2.467(0)	2.466(0)	2.461(0)
3.317(-1)	1.825(0)	1.789(0)	1.768(0)	2.518(0)	2.478(0)	2.449(0)	2.408(0)	2.408(0)	2.401(0)
3.106(-1)	1.703(0)	1.667(0)	1.646(0)	2.361(0)	2.321(0)	2.293(0)	2.345(0)	2.344(0)	2.337(0)
2.908(-1)	1.585(0)	1.549(0)	1.529(0)	2.209(0)	2.169(0)	2.141(0)	2.278(0)	2.277(0)	2.268(0)
2.723(-1)	1.471(0)	1.436(0)	1.416(0)	2.062(0)	2.022(0)	1.995(0)	2.206(0)	2.205(0)	2.194(0)
2.550(-1)	1.362(0)	1.327(0)	1.309(0)	1.919(0)	1.879(0)	1.853(0)	2.130(0)	2.129(0)	2.116(0)
2.387(-1)	1.257(0)	1.223(0)	1.206(0)	1.782(0)	1.742(0)	1.716(0)	2.051(0)	2.050(0)	2.035(0)
2.235(-1)	1.158(0)	1.124(0)	1.108(0)	1.649(0)	1.610(0)	1.585(0)	1.969(0)	1.967(0)	1.950(0)
2.093(-1)	1.063(0)	1.030(0)	1.015(0)	1.523(0)	1.483(0)	1.460(0)	1.884(0)	1.882(0)	1.862(0)
1.960(-1)	9.735(-1)	9.405(-1)	9.266(-1)	1.402(0)	1.362(0)	1.340(0)	1.796(0)	1.794(0)	1.772(0)
1.835(-1)	8.888(-1)	8.562(-1)	8.436(-1)	1.286(0)	1.247(0)	1.227(0)	1.708(0)	1.705(0)	1.680(0)
1.718(-1)	8.089(-1)	7.769(-1)	7.656(-1)	1.177(0)	1.138(0)	1.119(0)	1.618(0)	1.615(0)	1.588(0)
1.609(-1)	7.339(-1)	7.025(-1)	6.926(-1)	1.073(0)	1.034(0)	1.018(0)	1.528(0)	1.524(0)	1.495(0)
1.506(-1)	6.636(-1)	6.329(-1)	6.245(-1)	9.758(-1)	9.372(-1)	9.225(-1)	1.439(0)	1.433(0)	1.403(0)
1.410(-1)	5.981(-1)	5.681(-1)	5.611(-1)	8.840(-1)	8.459(-1)	8.332(-1)	1.350(0)	1.344(0)	1.312(0)
1.321(-1)	5.372(-1)	5.080(-1)	5.023(-1)	7.981(-1)	7.604(-1)	7.499(-1)	1.262(0)	1.255(0)	1.223(0)
1.237(-1)	4.807(-1)	4.524(-1)	4.480(-1)	7.179(-1)	6.808(-1)	6.723(-1)	1.176(0)	1.167(0)	1.136(0)
1.158(-1)	4.285(-1)	4.011(-1)	3.980(-1)	6.433(-1)	6.068(-1)	6.004(-1)	1.092(0)	1.081(0)	1.051(0)
1.084(-1)	3.805(-1)	3.541(-1)	3.522(-1)	5.741(-1)	5.385(-1)	5.340(-1)	1.010(0)	9.969(-1)	9.690(-1)
1.015(-1)	3.365(-1)	3.112(-1)	3.103(-1)	5.103(-1)	4.756(-1)	4.728(-1)	9.307(-1)	9.149(-1)	8.898(-1)
9.505(-2)	2.964(-1)	2.722(-1)	2.722(-1)	4.516(-1)	4.180(-1)	4.168(-1)	8.537(-1)	8.355(-1)	8.137(-1)
8.900(-2)	2.599(-1)	2.370(-1)	2.377(-1)	3.979(-1)	3.656(-1)	3.657(-1)	7.794(-1)	7.587(-1)	7.406(-1)
8.333(-2)	2.269(-1)	2.053(-1)	2.066(-1)	3.490(-1)	3.182(-1)	3.193(-1)	7.082(-1)	6.850(-1)	6.708(-1)
7.802(-2)	1.971(-1)	1.770(-1)	1.787(-1)	3.046(-1)	2.754(-1)	2.774(-1)	6.402(-1)	6.145(-1)	6.043(-1)
7.306(-2)	1.705(-1)	1.519(-1)	1.538(-1)	2.647(-1)	2.372(-1)	2.397(-1)	5.757(-1)	5.478(-1)	5.412(-1)
6.840(-2)	1.468(-1)	1.297(-1)	1.317(-1)	2.288(-1)	2.033(-1)	2.061(-1)	5.148(-1)	4.850(-1)	4.817(-1)
6.405(-2)	1.258(-1)	1.102(-1)	1.122(-1)	1.969(-1)	1.733(-1)	1.762(-1)	4.576(-1)	4.265(-1)	4.260(-1)
5.997(-2)	1.073(-1)	9.328(-2)	9.515(-2)	1.685(-1)	1.470(-1)	1.500(-1)	4.045(-1)	3.724(-1)	3.741(-1)
5.615(-2)	9.107(-2)	7.859(-2)	8.031(-2)	1.435(-1)	1.242(-1)	1.269(-1)	3.553(-1)	3.230(-1)	3.262(-1)
5.258(-2)	7.694(-2)	6.596(-2)	6.749(-2)	1.217(-1)	1.045(-1)	1.069(-1)	3.102(-1)	2.782(-1)	2.824(-1)
4.923(-2)	6.471(-2)	5.515(-2)	5.648(-2)	1.026(-1)	8.750(-2)	8.969(-2)	2.691(-1)	2.380(-1)	2.427(-1)
4.610(-2)	5.418(-2)	4.597(-2)	4.709(-2)	8.618(-2)	7.304(-2)	7.491(-2)	2.320(-1)	2.023(-1)	2.072(-1)
4.316(-2)	4.518(-2)	3.822(-2)	3.913(-2)	7.203(-2)	6.078(-2)	6.234(-2)	1.988(-1)	1.710(-1)	1.757(-1)
4.041(-2)	3.752(-2)	3.170(-2)	3.242(-2)	5.994(-2)	5.045(-2)	5.171(-2)	1.692(-1)	1.437(-1)	1.480(-1)
3.784(-2)	3.104(-2)	2.624(-2)	2.679(-2)	4.968(-2)	4.179(-2)	4.278(-2)	1.432(-1)	1.202(-1)	1.241(-1)
3.543(-2)	2.559(-2)	2.169(-2)	2.210(-2)	4.103(-2)	3.455(-2)	3.532(-2)	1.204(-1)	1.001(-1)	1.035(-1)
3.317(-2)	2.104(-2)	1.792(-2)	1.821(-2)	3.377(-2)	2.854(-2)	2.910(-2)	1.007(-1)	8.311(-2)	8.592(-2)
3.106(-2)	1.725(-2)	1.479(-2)	1.498(-2)	2.772(-2)	2.356(-2)	2.395(-2)	8.379(-2)	6.879(-2)	7.111(-2)
2.908(-2)	1.412(-2)	1.220(-2)	1.231(-2)	2.269(-2)	1.944(-2)	1.969(-2)	6.936(-2)	5.682(-2)	5.870(-2)
2.723(-2)	1.153(-2)	1.007(-2)	1.012(-2)	1.854(-2)	1.604(-2)	1.618(-2)	5.716(-2)	4.687(-2)	4.836(-2)

(продолжение на следующей стр.)

(продолжение)

$\frac{T}{T_p}$	$\frac{P_{ОЦК}}{nT}$	$\frac{P_{ГЦК}}{nT}$	$\frac{P_{ГПУ}}{nT}$	$\frac{S_{ОЦК}}{N}$	$\frac{S_{ГЦК}}{N}$	$\frac{S_{ГПУ}}{N}$	$\frac{C_{ОЦК}}{N}$	$\frac{C_{ГЦК}}{N}$	$\frac{C_{ГПУ}}{N}$
2.550(-2)	9.405(-3)	8.311(-3)	8.308(-3)	1.513(-2)	1.324(-2)	1.329(-2)	4.693(-2)	3.863(-2)	3.979(-2)
2.388(-2)	7.665(-3)	6.861(-3)	6.822(-3)	1.233(-2)	1.092(-2)	1.091(-2)	3.840(-2)	3.184(-2)	3.271(-2)
2.236(-2)	6.245(-3)	5.665(-3)	5.601(-3)	1.004(-2)	9.021(-3)	8.961(-3)	3.135(-2)	2.624(-2)	2.687(-2)
2.093(-2)	5.087(-3)	4.679(-3)	4.598(-3)	8.176(-3)	7.450(-3)	7.357(-3)	2.553(-2)	2.164(-2)	2.206(-2)
1.960(-2)	4.144(-3)	3.866(-3)	3.775(-3)	6.658(-3)	6.155(-3)	6.039(-3)	2.077(-2)	1.786(-2)	1.812(-2)
1.835(-2)	3.377(-3)	3.194(-3)	3.099(-3)	5.424(-3)	5.086(-3)	4.958(-3)	1.688(-2)	1.475(-2)	1.487(-2)
1.718(-2)	2.754(-3)	2.639(-3)	2.544(-3)	4.421(-3)	4.203(-3)	4.070(-3)	1.372(-2)	1.218(-2)	1.221(-2)
1.609(-2)	2.247(-3)	2.181(-3)	2.088(-3)	3.606(-3)	3.473(-3)	3.341(-3)	1.115(-2)	1.007(-2)	1.002(-2)
1.506(-2)	1.835(-3)	1.801(-3)	1.714(-3)	2.943(-3)	2.870(-3)	2.743(-3)	9.067(-3)	8.327(-3)	8.227(-3)
1.411(-2)	1.500(-3)	1.488(-3)	1.407(-3)	2.404(-3)	2.371(-3)	2.252(-3)	7.378(-3)	6.886(-3)	6.754(-3)
1.321(-2)	1.226(-3)	1.229(-3)	1.155(-3)	1.965(-3)	1.959(-3)	1.848(-3)	6.010(-3)	5.695(-3)	5.544(-3)
1.237(-2)	1.004(-3)	1.014(-3)	9.484(-4)	1.608(-3)	1.617(-3)	1.517(-3)	4.900(-3)	4.710(-3)	4.551(-3)
1.158(-2)	8.217(-4)	8.372(-4)	7.786(-4)	1.316(-3)	1.335(-3)	1.246(-3)	3.999(-3)	3.894(-3)	3.736(-3)
1.084(-2)	6.731(-4)	6.908(-4)	6.391(-4)	1.078(-3)	1.102(-3)	1.023(-3)	3.268(-3)	3.219(-3)	3.067(-3)
1.015(-2)	5.517(-4)	5.697(-4)	5.247(-4)	8.833(-4)	9.090(-4)	8.394(-4)	2.672(-3)	2.660(-3)	2.518(-3)
9.505(-3)	4.522(-4)	4.698(-4)	4.308(-4)	7.240(-4)	7.497(-4)	6.891(-4)	2.187(-3)	2.198(-3)	2.067(-3)
8.900(-3)	3.708(-4)	3.872(-4)	3.537(-4)	5.936(-4)	6.181(-4)	5.657(-4)	1.790(-3)	1.815(-3)	1.696(-3)
8.333(-3)	3.042(-4)	3.191(-4)		4.868(-4)	5.094(-4)		1.467(-3)	1.498(-3)	
7.803(-3)	2.495(-4)	2.629(-4)		3.993(-4)	4.197(-4)		1.202(-3)	1.236(-3)	
7.306(-3)	2.047(-4)	2.165(-4)		3.276(-4)	3.457(-4)		9.856(-4)	1.020(-3)	
6.841(-3)	1.680(-4)	1.782(-4)		2.688(-4)	2.847(-4)		8.083(-4)	8.411(-4)	
6.405(-3)	1.378(-4)	1.467(-4)		2.205(-4)	2.344(-4)		6.629(-4)	6.934(-4)	
5.997(-3)	1.131(-4)	1.207(-4)		1.810(-4)	1.929(-4)		5.438(-4)	5.714(-4)	
5.615(-3)	9.281(-5)	9.932(-5)		1.485(-4)	1.587(-4)		4.462(-4)	4.707(-4)	
5.258(-3)	7.617(-5)	8.169(-5)		1.219(-4)	1.306(-4)		3.661(-4)	3.877(-4)	
4.923(-3)	6.252(-5)	6.718(-5)		1.000(-4)	1.074(-4)		3.004(-4)	3.192(-4)	
4.610(-3)	5.131(-5)	5.524(-5)		8.210(-5)	8.831(-5)		2.465(-4)	2.627(-4)	
4.316(-3)	4.212(-5)	4.541(-5)		6.739(-5)	7.260(-5)		2.023(-4)	2.162(-4)	
4.041(-3)	3.457(-5)	3.733(-5)		5.531(-5)	5.968(-5)		1.660(-4)	1.778(-4)	
3.784(-3)	2.837(-5)	3.068(-5)		4.540(-5)	4.906(-5)		1.363(-4)	1.463(-4)	
3.543(-3)	2.329(-5)	2.521(-5)		3.727(-5)	4.031(-5)		1.118(-4)	1.203(-4)	
3.317(-3)	1.912(-5)	2.071(-5)		3.059(-5)	3.313(-5)		9.180(-5)	9.891(-5)	
3.106(-3)	1.569(-5)	1.702(-5)		2.511(-5)	2.722(-5)		7.535(-5)	8.131(-5)	
2.908(-3)	1.288(-5)	1.398(-5)		2.061(-5)	2.236(-5)		6.185(-5)	6.683(-5)	
2.723(-3)	1.057(-5)	1.148(-5)		1.692(-5)	1.837(-5)		5.076(-5)	5.492(-5)	
2.550(-3)	8.679(-6)	9.433(-6)		1.389(-5)	1.509(-5)		4.167(-5)	4.513(-5)	
2.388(-3)	7.124(-6)	7.747(-6)		1.140(-5)	1.239(-5)		3.420(-5)	3.708(-5)	
2.236(-3)	5.848(-6)	6.363(-6)		9.357(-6)	1.018(-5)		2.808(-5)	3.046(-5)	
2.093(-3)	4.801(-6)	5.225(-6)		7.681(-6)	8.359(-6)		2.305(-5)	2.502(-5)	
1.960(-3)	3.941(-6)	4.291(-6)		6.305(-6)	6.864(-6)		1.892(-5)	2.055(-5)	
1.835(-3)	3.235(-6)	3.523(-6)		5.176(-6)	5.637(-6)		1.553(-5)	1.688(-5)	
1.718(-3)	2.655(-6)	2.893(-6)		4.249(-6)	4.628(-6)		1.275(-5)	1.387(-5)	
1.609(-3)	2.180(-6)	2.376(-6)		3.488(-6)	3.800(-6)		1.046(-5)	1.139(-5)	
1.506(-3)	1.789(-6)	1.950(-6)		2.863(-6)	3.120(-6)		8.589(-6)	9.351(-6)	
1.411(-3)	1.469(-6)	1.601(-6)		2.350(-6)	2.562(-6)		7.051(-6)	7.679(-6)	
1.321(-3)	1.206(-6)	1.315(-6)		1.929(-6)	2.104(-6)		5.788(-6)	6.305(-6)	
1.237(-3)	9.897(-7)	1.079(-6)		1.584(-6)	1.727(-6)		4.751(-6)	5.177(-6)	
1.158(-3)	8.125(-7)	8.863(-7)		1.300(-6)	1.418(-6)		3.900(-6)	4.251(-6)	
1.084(-3)	6.669(-7)	7.276(-7)		1.067(-6)	1.164(-6)		3.201(-6)	3.490(-6)	
1.015(-3)	5.475(-7)	5.973(-7)		8.760(-7)	9.557(-7)		2.628(-6)	2.866(-6)	
9.505(-4)	4.494(-7)	4.904(-7)		7.191(-7)	7.846(-7)		2.157(-6)	2.353(-6)	
8.900(-4)	3.689(-7)	4.026(-7)		5.903(-7)	6.441(-7)		1.771(-6)	1.932(-6)	
8.333(-4)	3.028(-7)	3.305(-7)		4.846(-7)	5.288(-7)		1.454(-6)	1.586(-6)	
7.803(-4)	2.486(-7)	2.713(-7)		3.978(-7)	4.341(-7)		1.193(-6)	1.302(-6)	
7.306(-4)	2.041(-7)	2.227(-7)		3.265(-7)	3.564(-7)		9.796(-7)	1.069(-6)	
6.841(-4)	1.675(-7)	1.829(-7)		2.680(-7)	2.926(-7)		8.041(-7)	8.775(-7)	
6.405(-4)	1.375(-7)	1.501(-7)		2.200(-7)	2.402(-7)		6.601(-7)	7.204(-7)	
5.997(-4)	1.129(-7)	1.232(-7)		1.806(-7)	1.972(-7)		5.419(-7)	5.914(-7)	
5.615(-4)	9.267(-8)	1.012(-7)		1.483(-7)	1.619(-7)		4.448(-7)	4.855(-7)	
5.258(-4)	7.607(-8)	8.304(-8)		1.217(-7)	1.329(-7)		3.651(-7)	3.986(-7)	
4.923(-4)	6.245(-8)	6.817(-8)		9.991(-8)	1.091(-7)		2.997(-7)	3.272(-7)	
4.610(-4)	5.126(-8)	5.596(-8)		8.202(-8)	8.954(-8)		2.461(-7)	2.686(-7)	
4.316(-4)	4.208(-8)	4.594(-8)		6.733(-8)	7.350(-8)		2.020(-7)	2.205(-7)	
4.041(-4)	3.454(-8)	3.771(-8)		5.527(-8)	6.034(-8)		1.658(-7)	1.810(-7)	
3.784(-4)	2.836(-8)	3.096(-8)		4.537(-8)	4.953(-8)		1.361(-7)	1.486(-7)	
3.543(-4)	2.328(-8)	2.541(-8)		3.724(-8)	4.066(-8)		1.117(-7)	1.220(-7)	
3.318(-4)	1.911(-8)	2.086(-8)		3.057(-8)	3.338(-8)		9.172(-8)	1.001(-7)	
3.106(-4)	1.569(-8)	1.713(-8)		2.510(-8)	2.740(-8)		7.529(-8)	8.220(-8)	
2.909(-4)	1.288(-8)	1.406(-8)		2.060(-8)	2.249(-8)		6.181(-8)	6.748(-8)	
2.723(-4)	1.057(-8)	1.154(-8)		1.691(-8)	1.847(-8)		5.074(-8)	5.539(-8)	
2.550(-4)	8.677(-9)	9.474(-9)		1.388(-8)	1.516(-8)		4.165(-8)	4.547(-8)	

(продолжение на следующей стр.)

(продолжение)

$\frac{T}{T_p}$	$\frac{P_{\text{ОЦК}}}{nT}$	$\frac{P_{\text{ГЦК}}}{nT}$	$\frac{P_{\text{ГПУ}}}{nT}$	$\frac{S_{\text{ОЦК}}}{N}$	$\frac{S_{\text{ГЦК}}}{N}$	$\frac{S_{\text{ГПУ}}}{N}$	$\frac{C_{\text{ОЦК}}}{N}$	$\frac{C_{\text{ГЦК}}}{N}$	$\frac{C_{\text{ГПУ}}}{N}$
2.388(-4)	7.123(-9)	7.777(-9)		1.140(-8)	1.244(-8)		3.419(-8)	3.733(-8)	
2.236(-4)	5.847(-9)	6.384(-9)		9.355(-9)	1.021(-8)		2.807(-8)	3.064(-8)	
2.093(-4)	4.800(-9)	5.241(-9)		7.680(-9)	8.385(-9)		2.304(-8)	2.515(-8)	
1.960(-4)	3.940(-9)	4.302(-9)		6.304(-9)	6.883(-9)		1.891(-8)	2.065(-8)	
1.835(-4)	3.234(-9)	3.532(-9)		5.175(-9)	5.650(-9)		1.553(-8)	1.695(-8)	
1.718(-4)	2.655(-9)	2.899(-9)		4.248(-9)	4.638(-9)		1.274(-8)	1.392(-8)	
1.609(-4)	2.180(-9)	2.380(-9)		3.487(-9)	3.808(-9)		1.046(-8)	1.142(-8)	
1.506(-4)	1.789(-9)	1.954(-9)		2.863(-9)	3.126(-9)		8.588(-9)	9.377(-9)	
1.411(-4)	1.469(-9)	1.604(-9)		2.350(-9)	2.566(-9)		7.050(-9)	7.698(-9)	
1.321(-4)	1.206(-9)	1.316(-9)		1.929(-9)	2.106(-9)		5.787(-9)	6.319(-9)	
1.237(-4)	9.897(-10)	1.081(-9)		1.584(-9)	1.729(-9)		4.751(-9)	5.187(-9)	
1.158(-4)	8.125(-10)	8.871(-10)		1.300(-9)	1.419(-9)		3.900(-9)	4.258(-9)	
1.084(-4)	6.669(-10)	7.282(-10)		1.067(-9)	1.165(-9)		3.201(-9)	3.495(-9)	
1.015(-4)	5.475(-10)	5.978(-10)		8.760(-10)	9.565(-10)		2.628(-9)	2.869(-9)	
9.505(-5)	4.494(-10)	4.907(-10)		7.191(-10)	7.852(-10)		2.157(-9)	2.355(-9)	
8.900(-5)	3.689(-10)	4.028(-10)		5.903(-10)	6.445(-10)		1.771(-9)	1.934(-9)	

Термодинамические функции реальной системы представляют собой сумму соответствующих фононных функций и ряда других слагаемых. Сравним относительную значимость различных составляющих. Прежде всего, вклад в давление даёт статическая решётка:

$$P_{\text{M}} = -\frac{\partial U_0}{\partial V} = -\frac{\partial}{\partial V} N\zeta \frac{Z^2 e^2}{a} = \zeta \frac{nZ^2 e^2}{3a} \ . \tag{81}$$

Далее, вырожденные электроны дают существенный вклад во все термодинамические величины. При расчёте давления будем считать электронный газ полностью вырожденным и воспользуемся выражением, приведённым в [55] ($x_r = p_{\text{F}}/m_e c$):

$$P_e = \frac{m^4 c^5}{8\pi^2 \hbar^3} \left[x_r \left(\frac{2x_r^2}{3} - 1 \right) \sqrt{1 + x_r^2} + \ln\left(x_r + \sqrt{1 + x_r^2}\right) \right] \ . \tag{82}$$

Энтропию и теплоёмкость электронного газа можно рассчитать методом Зоммерфельда. Результат (энтропия и теплоёмкость на ион) имеет вид (например, [105]):

$$\frac{S_e}{N} = \frac{C_e}{N} = \frac{\pi^2 Z T}{m_e c^2} \frac{\sqrt{1 + x^2}}{x^2} \ . \tag{83}$$

Сравнительная важность фононного давления и теплоёмкости в плотном звёздном веществе (ядра белых карликов, оболочки нейтронных звёзд) иллюстрируется рисунками 4 и 5. Изображены различные вклады в давление и теплоёмкость в зависимости от плотности вещества при трёх значениях температуры для ОЦК решётки, образованной ядрами ^{56}Fe. В качестве маделунговского (электростатического) давления на рис. 4 изображена величина $-P_{\text{M}}$ (электростатическое давление отрицательно). Видно, что когда давление фононов приближается к модулю давления статической решётки, кристалл плавится. Плавление происходит при значении кулоновского параметра неидеальности (см. ниже) $\Gamma_m = Z^2 e^2 / a T_m \approx 172$, где T_m — температура плавления. Давление же решётки составляет небольшую долю давления электронов. Поэтому давление фононов практически никогда неважно. Иначе обстоит дело с теплоёмкостью. Рис. 5 свидетельствует о том, что теплоёмкость фононов доминирует в широком диапазоне плотностей и температур.

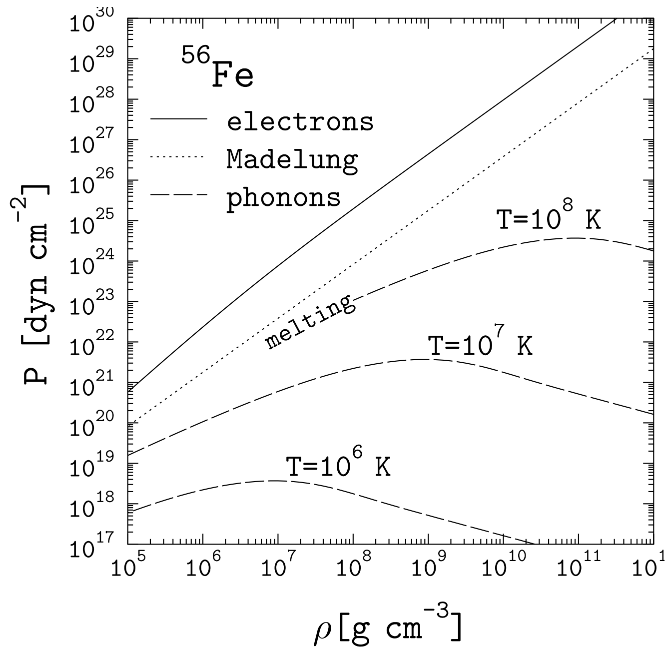

Рис. 4: Различные вклады в давление для ОЦК решётки при различных значениях температуры.

1.6 Корреляционная функция и структурный фактор кристалла

1.6.1 Определения

В этом разделе, следуя работе Байко и др. [9], исследуем парную корреляционную функцию и структурный фактор кулоновского кристалла. Поскольку численные расчёты достаточно громоздки ограничимся случаем ОЦК решётки. Для решёток других типов расчёты проводятся по той же схеме.

Точная микроскопическая плотность числа частиц даётся выражением

$$\mathrm{n}(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = \sum_i \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)} \ , \tag{84}$$

а микроскопическая плотность электрического заряда —

$$\rho(\mathbf{r}) = Z|e| \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + Zen = Z|e| \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[\sum_i e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)} - (2\pi)^3 n\delta(\mathbf{k}) \right] \ . \tag{85}$$

Поскольку $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i(t)$, микроскопические плотности зависят от времени. Для перехода к квантовомеханическому описанию величины $\mathbf{r}_i$, ρ и n следует рассматривать как операторы. Если же возникает необходимость исследовать временные зависимости в квантовом режиме, то удобнее всего перейти к представлению Гейзенберга.

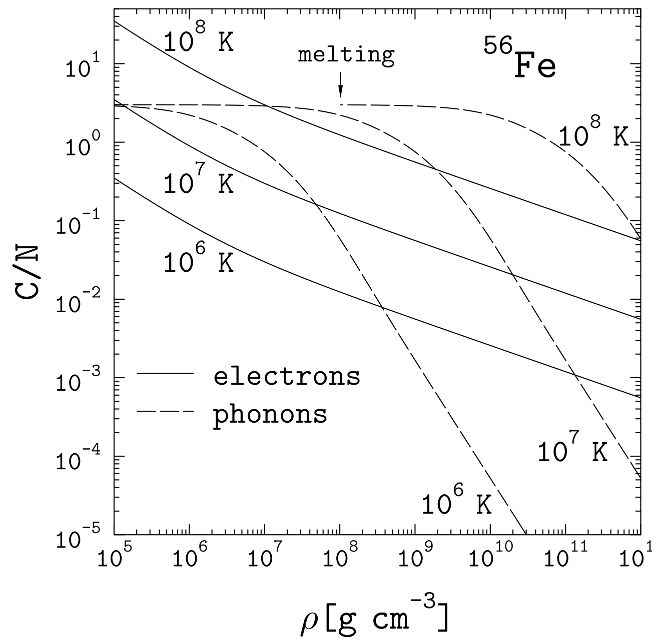

Рис. 5: Различные вклады в теплоёмкость на один ион для ОЦК решётки при различных значениях температуры.

Корреляционная функция зарядовой плотности $g(\mathbf{r},t)$ определяется выражением

$$g(\mathbf{r},t) = \frac{1}{nN}\int \mathrm{d}\mathbf{r}'\,\langle \hat{\mathrm{n}}(\mathbf{r}'+\mathbf{r},t)\hat{\mathrm{n}}(\mathbf{r}',0)\rangle_T - \frac{1}{n}\delta(\mathbf{r}) \tag{86}$$

$$= \frac{1}{nN}\int \mathrm{d}\mathbf{r}' \int\int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}\mathrm{d}\mathbf{k}'}{(2\pi)^6}\left\langle \sum_i e^{-i\mathbf{k}[\mathbf{r}'+\mathbf{r}-\hat{\mathbf{r}}_i(t)]}\sum_j e^{-i\mathbf{k}'[\mathbf{r}'-\hat{\mathbf{r}}_j(0)]}\right\rangle_T - \frac{1}{n}\delta(\mathbf{r})$$

$$= \frac{1}{n}\int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}\left[\frac{1}{N}\sum_{ij}\left\langle e^{i\mathbf{k}\hat{\mathbf{r}}_i(t)}e^{-i\mathbf{k}\hat{\mathbf{r}}_j(0)}\right\rangle_T - 1\right] . \tag{87}$$

Согласно (86) $ng(\mathbf{r},t)\mathrm{d}\mathbf{r}$ есть среднее число ионов, которые в момент времени t находятся в элементе объема $\mathrm{d}\mathbf{r}$ на расстоянии $\mathbf{r}$ от положения данного иона в момент времени $t=0$. Вводя структурный фактор зарядовой плотности

$$S(\mathbf{k},t) = \frac{1}{N}\sum_{ij}\left\langle e^{i\mathbf{k}\hat{\mathbf{r}}_i(t)}e^{-i\mathbf{k}\hat{\mathbf{r}}_j(0)}\right\rangle_T - (2\pi)^3 n\delta(\mathbf{k}) , \tag{88}$$

где последнее слагаемое связано с наличием нейтрализующего электронного фона, мы можем выразить $g(\mathbf{r},t)$ с помощью (87) как

$$g(\mathbf{r},t) = 1 + \frac{1}{n}\int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left[S(\mathbf{k},t)-1\right] e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} . \tag{89}$$

Скобки $\langle \ldots \rangle_T$ означают статистическое усреднение с точным гамильтонианом системы

$$\langle \hat{F}\rangle_T = \frac{\mathrm{Sp}\,\hat{F}e^{-\hat{H}/T}}{\mathrm{Sp}\,e^{-\hat{H}/T}} . \tag{90}$$

Однако усреднение с точным гамильтонианом $\hat{H}$ для кулоновской системы провести не удаётся. Поэтому усредним с гармоническим гамильтонианом $\hat{\mathcal{H}}_0$, формула (49), и обозначим соответствующее среднее как $\langle \ldots \rangle_{T0}$. Для вычисления среднего в равенстве (88) вспомним, что $\hat{\mathbf{r}}_i = \mathbf{R}_i + \hat{\mathbf{u}}_i$, $\mathbf{R}_i$ — постоянный вектор решётки, и $\hat{\mathbf{u}}_i$ — оператор смещения иона из положения равновесия. Операторы $\hat{\mathbf{u}}_i$ могут быть выражены через операторы рождения и уничтожения фононов с помощью (4) и (50):

$$\hat{\mathbf{u}}_i(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{\mathbf{u}}_i e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} = \sum_{\mathbf{q}\nu}\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\mathbf{q}\nu}}}\,\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu}\left(e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i - i\omega_{\mathbf{q}\nu}t}\,\hat{a}_{\mathbf{q}\nu} + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i + i\omega_{\mathbf{q}\nu}t}\,\hat{a}^\dagger_{\mathbf{q}\nu}\right)\ . \tag{91}$$

Здесь $\mathbf{q}$ лежит в 1-ой зоне Бриллюэна, а ν для $N_{\rm cell}=1$ пробегает значения 1,2,3. Усреднение экспоненты, в показателе которой имеется линейная комбинация операторов рождения и уничтожения, производится с помощью известного равенства [24]

$$\left\langle e^{(\alpha^*\hat{a}^\dagger - \alpha\hat{a})}e^{(\gamma\hat{a} - \gamma^*\hat{a}^\dagger)}\right\rangle_{T0} = \exp\left[\alpha\gamma^*(\bar{n}+1) + \alpha^*\gamma\bar{n} - \left(\bar{n}+\frac{1}{2}\right)(|\alpha|^2+|\gamma|^2)\right]\ , \tag{92}$$

где введено обозначение $\bar{n} = \langle \hat{a}^\dagger_\nu \hat{a}_\nu\rangle_{T0} = (e^{\hbar\omega_\nu/T}-1)^{-1}$.

Тогда

$$\begin{aligned} S(\mathbf{k},t) &= \frac{1}{N}\sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)}\left\langle e^{i\mathbf{k}\hat{\mathbf{u}}_i(t)}e^{-i\mathbf{k}\hat{\mathbf{u}}_j(0)}\right\rangle_T - (2\pi)^3 n\delta(\mathbf{k}) \\ &= \frac{1}{N}\sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)}\exp\left\{\sum_{\mathbf{q}\nu}\frac{\hbar(\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2}{2MN\omega_{\mathbf{q}\nu}}\right. \\ &\times \left.\left[-(2\bar{n}_{\mathbf{q}\nu}+1) + e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)-i\omega_{\mathbf{q}\nu}t}(\bar{n}_{\mathbf{q}\nu}+1) + e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)+i\omega_{\mathbf{q}\nu}t}\bar{n}_{\mathbf{q}\nu}\right]\right\} - (2\pi)^3 n\delta(\mathbf{k}) \\ &= S'(\mathbf{k}) + S''(\mathbf{k},t)\ , \end{aligned} \tag{93}$$

где мы выделили зависящую и не зависящую от времени составляющие структурного фактора

$$S'(\mathbf{k}) = e^{-2W(\mathbf{k})}\frac{1}{N}\sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)} - (2\pi)^3 n\delta(\mathbf{k}) = e^{-2W(\mathbf{k})}(2\pi)^3 n {\sum_{\mathrm{m}\in\Xi}}'\delta(\mathbf{k}-\mathbf{G}_{\mathrm{m}})\ , \tag{94}$$

$$\begin{aligned} S''(\mathbf{k},t) &= e^{-2W(\mathbf{k})}\frac{1}{N}\sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)} \times \left[-1+\right. \\ &\left.\exp\left\{\sum_{\mathbf{q}\nu}\frac{\hbar(\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2}{2MN\omega_{\mathbf{q}\nu}}\left(\cos\left[\mathbf{q}(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)-\omega_{\mathbf{q}\nu}t\right]\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}}{2T} + i\sin\left[\mathbf{q}(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)-\omega_{\mathbf{q}\nu}t\right]\right)\right\}\right] \\ &= e^{-2W(\mathbf{k})}\sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}\left[\exp\left\{\sum_{\mathbf{q}\nu}\frac{\hbar(\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2}{2MN\omega_{\mathbf{q}\nu}}\frac{\cos\left[\mathbf{q}\mathbf{R}_i - \omega_{\mathbf{q}\nu}(t+i\hbar/2T)\right]}{\operatorname{sh}\left(\hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}/2T\right)}\right\} - 1\right] \\ &\equiv e^{-2W(\mathbf{k})}\sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}\left[e^{k^\alpha k^\beta v^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i,t)} - 1\right]\ . \end{aligned} \tag{95}$$

Здесь мы ввели функцию

$$v^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i,t) = \sum_{\mathbf{q}\nu}\frac{\hbar e^\alpha_{\mathbf{q}\nu}e^\beta_{\mathbf{q}\nu}}{2MN\omega_{\mathbf{q}\nu}}\frac{\cos\left[\mathbf{q}\mathbf{R}_i - \omega_{\mathbf{q}\nu}(t+i\hbar/2T)\right]}{\operatorname{sh}\left(\hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}/2T\right)} \tag{96}$$

и фактор Дебая-Уоллера

$$2W(\mathbf{k}) = k^\alpha k^\beta v^{\alpha\beta}(0,0) = \frac{3\hbar}{2M}\left\langle \frac{(\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2}{\omega_{\mathbf{q}\nu}} \,\mathrm{cth}\, \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}}{2T}\right\rangle_{\mathrm{ph}} . \tag{97}$$

Для кубических кристаллов фактор Дебая-Уоллера оказывается изотропным, т.е. не зависит от направления $\mathbf{k}$. Чтобы убедиться в этом, вспомним, что если бы поляризационные векторы не фигурировали в (97), усреднение достаточно было бы произвести лишь по основной подзоне. Поэтому мы можем написать

$$2W(\mathbf{k}) = \frac{3\hbar}{2M}\left\langle \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}\nu}} \,\mathrm{cth}\, \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}}{2T}\left[\frac{1}{48}\sum_{\text{по подзонам}} (\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2\right]\right\rangle_{\text{основная подзона}} \tag{98}$$

Векторы $\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu}$ в различных подзонах отличаются от соответствующего вектора в основной подзоне перестановкой и/или знаком декартовых компонент, так что

$$\begin{aligned}\sum_{\text{по подзонам}} (\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2 &= (k^x e^x_{\mathbf{q}\nu} + k^y e^y_{\mathbf{q}\nu} + k^z e^z_{\mathbf{q}\nu})^2 + (k^x e^x_{\mathbf{q}\nu} + k^y e^z_{\mathbf{q}\nu} + k^z e^y_{\mathbf{q}\nu})^2 \\ &+ (-k^x e^x_{\mathbf{q}\nu} + k^y e^y_{\mathbf{q}\nu} + k^z e^z_{\mathbf{q}\nu})^2 + \ldots = 16k^2 ,\end{aligned} \tag{99}$$

и

$$2W(\mathbf{k}) = 2W(k) = \frac{\hbar k^2}{2M}\left\langle \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}\nu}} \,\mathrm{cth}\, \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}}{2T}\right\rangle_{\mathrm{ph}} \equiv \frac{k^2 r_T^2}{3} . \tag{100}$$

В последнем выражении мы ввели среднеквадратичное смещение иона из узла решётки $r_T^2 = \langle \hat{\mathbf{u}}_i^2\rangle_{T0}$. Отметим, что тем же свойством обладает и тензор $v^{\alpha\beta}(0,t)$:

$$v^{\alpha\beta}(0,t) = \sum_{\mathbf{q}\nu} \frac{\hbar e^\alpha_{\mathbf{q}\nu} e^\beta_{\mathbf{q}\nu}}{2MN\omega_{\mathbf{q}\nu}} \frac{\cos\left[\omega_{\mathbf{q}\nu}(t+i\hbar/2T)\right]}{\mathrm{sh}\,(\hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}/2T)} = \frac{\hbar\delta^{\alpha\beta}}{2M}\left\langle \frac{\cos\left[\omega_{\mathbf{q}\nu}(t+i\hbar/2T)\right]}{\omega_{\mathbf{q}\nu}\,\mathrm{sh}\,(\hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}/2T)}\right\rangle_{\mathrm{ph}} \equiv \delta^{\alpha\beta} y_T(t) . \tag{101}$$

Результаты расчётов фактора Дебая-Уоллера модифицированным методом Гаусса приведены в таблице 5 ($\theta = \hbar\omega_p/T$, $\Gamma = Z^2e^2/aT$).

Прежде чем переходить к более подробному количественному исследованию этих выражений отметим формулу для так называемого динамического структурного фактора, представляющего собой фурье-образ $S(\mathbf{k},t)$,

$$\begin{aligned}\tilde{S}(\mathbf{k},\omega) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t\, e^{-\imath\omega t} S(\mathbf{k},t) &(102)\\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t\, e^{-i\omega t-\hbar\omega/2T} \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i - 2W(k) + v^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i,\tau)k^\alpha k^\beta} - (2\pi)^3 n\,\delta(\omega)\delta(\mathbf{k}) \ , &(103)\end{aligned}$$

где переменная t вещественна, и $\tau = t - i\hbar/2T$. Последнее выражение получается из (102) переходом в область комплексных t и смещением пути интегрирования вниз, в область отрицательных значений мнимой части переменной интегрирования.

Физический смысл динамического структурного фактора легче всего установить из формулы, описывающей вероятность рассеяния электрона на произвольной системе рассеивателей (например, на кулоновском кристалле),

$$\Gamma(\mathbf{p}\to\mathbf{p}') = \frac{2\pi N}{\hbar^2}\,|\Phi_{\hbar\mathbf{k}}|^2\,\tilde{S}(\mathbf{k},\omega) . \tag{104}$$

Таблица 5: Фактор Дебая-Уоллера для ОЦК и ГЦК (в скобках даны степени 10).

$\frac{T}{T_p}$	$\frac{2W_{\text{ОЦК}}(k)}{k^2a^2\theta/3\Gamma}$	$\frac{2W_{\text{ГЦК}}(k)}{k^2a^2\theta/3\Gamma}$	$\frac{T}{T_p}$	$\frac{2W_{\text{ОЦК}}(k)}{k^2a^2\theta/3\Gamma}$	$\frac{2W_{\text{ГЦК}}(k)}{k^2a^2\theta/3\Gamma}$	$\frac{T}{T_p}$	$\frac{2W_{\text{ОЦК}}(k)}{k^2a^2\theta/3\Gamma}$	$\frac{2W_{\text{ГЦК}}(k)}{k^2a^2\theta/3\Gamma}$
1.609(1)	2.087(2)	1.954(2)	6.840(-1)	8.994(0)	8.427(0)	2.908(-2)	1.445(0)	1.406(0)
1.506(1)	1.954(2)	1.829(2)	6.405(-1)	8.437(0)	7.906(0)	2.723(-2)	1.439(0)	1.400(0)
1.410(1)	1.830(2)	1.713(2)	5.997(-1)	7.917(0)	7.419(0)	2.550(-2)	1.434(0)	1.396(0)
1.321(1)	1.713(2)	1.604(2)	5.615(-1)	7.430(0)	6.965(0)	2.388(-2)	1.430(0)	1.391(0)
1.237(1)	1.604(2)	1.502(2)	5.258(-1)	6.976(0)	6.540(0)	2.236(-2)	1.426(0)	1.388(0)
1.158(1)	1.502(2)	1.406(2)	4.923(-1)	6.552(0)	6.144(0)	2.093(-2)	1.423(0)	1.384(0)
1.084(1)	1.406(2)	1.317(2)	4.609(-1)	6.156(0)	5.774(0)	1.960(-2)	1.420(0)	1.381(0)
1.015(1)	1.317(2)	1.233(2)	4.316(-1)	5.787(0)	5.429(0)	1.835(-2)	1.417(0)	1.379(0)
9.505(0)	1.233(2)	1.154(2)	4.041(-1)	5.442(0)	5.107(0)	1.718(-2)	1.415(0)	1.376(0)
8.899(0)	1.155(2)	1.081(2)	3.784(-1)	5.121(0)	4.807(0)	1.609(-2)	1.413(0)	1.374(0)
8.333(0)	1.081(2)	1.012(2)	3.543(-1)	4.822(0)	4.528(0)	1.506(-2)	1.411(0)	1.373(0)
7.802(0)	1.012(2)	9.475(1)	3.317(-1)	4.544(0)	4.268(0)	1.411(-2)	1.410(0)	1.371(0)
7.305(0)	9.478(1)	8.872(1)	3.106(-1)	4.284(0)	4.027(0)	1.321(-2)	1.409(0)	1.370(0)
6.840(0)	8.875(1)	8.307(1)	2.908(-1)	4.043(0)	3.802(0)	1.237(-2)	1.407(0)	1.369(0)
6.405(0)	8.310(1)	7.779(1)	2.723(-1)	3.819(0)	3.594(0)	1.158(-2)	1.406(0)	1.368(0)
5.997(0)	7.781(1)	7.284(1)	2.550(-1)	3.612(0)	3.400(0)	1.084(-2)	1.406(0)	1.367(0)
5.615(0)	7.286(1)	6.820(1)	2.387(-1)	3.419(0)	3.221(0)	1.015(-2)	1.405(0)	1.366(0)
5.258(0)	6.822(1)	6.386(1)	2.235(-1)	3.240(0)	3.055(0)	9.505(-3)	1.404(0)	1.365(0)
4.923(0)	6.388(1)	5.980(1)	2.093(-1)	3.075(0)	2.901(0)	8.900(-3)	1.403(0)	1.364(0)
4.609(0)	5.982(1)	5.599(1)	1.960(-1)	2.922(0)	2.759(0)	8.333(-3)	1.403(0)	1.364(0)
4.316(0)	5.601(1)	5.243(1)	1.835(-1)	2.781(0)	2.629(0)	7.803(-3)	1.403(0)	1.363(0)
4.041(0)	5.245(1)	4.909(1)	1.718(-1)	2.651(0)	2.508(0)	7.306(-3)	1.402(0)	1.363(0)
3.784(0)	4.911(1)	4.597(1)	1.609(-1)	2.531(0)	2.397(0)	6.841(-3)	1.402(0)	1.363(0)
3.543(0)	4.599(1)	4.305(1)	1.506(-1)	2.421(0)	2.296(0)	6.405(-3)	1.401(0)	1.362(0)
3.317(0)	4.306(1)	4.031(1)	1.410(-1)	2.320(0)	2.203(0)	5.997(-3)	1.401(0)	1.362(0)
3.106(0)	4.032(1)	3.774(1)	1.321(-1)	2.227(0)	2.117(0)	5.615(-3)	1.401(0)	1.362(0)
2.908(0)	3.776(1)	3.535(1)	1.237(-1)	2.142(0)	2.039(0)	5.258(-3)	1.401(0)	1.362(0)
2.723(0)	3.536(1)	3.310(1)	1.158(-1)	2.065(0)	1.969(0)	4.923(-3)	1.401(0)	1.361(0)
2.550(0)	3.311(1)	3.100(1)	1.084(-1)	1.994(0)	1.904(0)	4.610(-3)	1.400(0)	1.361(0)
2.387(0)	3.101(1)	2.903(1)	1.015(-1)	1.930(0)	1.846(0)	4.316(-3)	1.400(0)	1.361(0)
2.235(0)	2.904(1)	2.718(1)	9.505(-2)	1.872(0)	1.793(0)	4.041(-3)	1.400(0)	1.361(0)
2.093(0)	2.719(1)	2.546(1)	8.900(-2)	1.820(0)	1.745(0)	3.784(-3)	1.400(0)	1.361(0)
1.960(0)	2.547(1)	2.384(1)	8.333(-2)	1.772(0)	1.702(0)	3.543(-3)	1.400(0)	1.361(0)
1.835(0)	2.385(1)	2.233(1)	7.802(-2)	1.730(0)	1.663(0)	3.317(-3)	1.400(0)	1.361(0)
1.718(0)	2.234(1)	2.091(1)	7.306(-2)	1.691(0)	1.629(0)	3.106(-3)	1.400(0)	1.360(0)
1.609(0)	2.092(1)	1.959(1)	6.840(-2)	1.657(0)	1.598(0)	2.908(-3)	1.400(0)	1.360(0)
1.506(0)	1.960(1)	1.835(1)	6.405(-2)	1.626(0)	1.570(0)	2.723(-3)	1.400(0)	1.360(0)
1.410(0)	1.836(1)	1.719(1)	5.997(-2)	1.599(0)	1.546(0)	2.550(-3)	1.400(0)	1.360(0)
1.321(0)	1.720(1)	1.610(1)	5.615(-2)	1.575(0)	1.524(0)	2.388(-3)	1.400(0)	1.360(0)
1.237(0)	1.611(1)	1.508(1)	5.258(-2)	1.553(0)	1.504(0)	2.236(-3)	1.400(0)	1.360(0)
1.158(0)	1.509(1)	1.413(1)	4.923(-2)	1.534(0)	1.487(0)	2.093(-3)	1.400(0)	1.360(0)
1.084(0)	1.414(1)	1.324(1)	4.610(-2)	1.517(0)	1.472(0)	1.960(-3)	1.399(0)	1.360(0)
1.015(0)	1.325(1)	1.241(1)	4.316(-2)	1.503(0)	1.459(0)	1.835(-3)	1.399(0)	1.360(0)
9.505(-1)	1.242(1)	1.163(1)	4.041(-2)	1.490(0)	1.447(0)	1.718(-3)	1.399(0)	1.360(0)
8.899(-1)	1.164(1)	1.090(1)	3.784(-2)	1.478(0)	1.437(0)	1.609(-3)	1.399(0)	1.360(0)
8.333(-1)	1.091(1)	1.022(1)	3.543(-2)	1.468(0)	1.427(0)	1.506(-3)	1.399(0)	1.360(0)
7.802(-1)	1.023(1)	9.580(0)	3.317(-2)	1.460(0)	1.419(0)	1.411(-3)	1.399(0)	1.360(0)
7.306(-1)	9.590(0)	8.984(0)	3.106(-2)	1.452(0)	1.412(0)	1.321(-3)	1.399(0)	1.360(0)

Здесь $\Gamma(\mathbf{p} \to \mathbf{p}')$ — дифференциальная частота рассеяния электрона (без учёта спина) из состояния с импульсом $\mathbf{p}$ в состояние с импульсом $\mathbf{p}'$, $\hbar\mathbf{k}$ — переданный импульс, $\hbar\omega$ — переданная энергия, и $\Phi_{\hbar\mathbf{k}}$ — фурье-образ потенциала взаимодействия иона с электроном. Тогда из (104), (94) и (95) вытекает, что S' соответствует упругому рассеянию, а S'' — неупругому. Согласно (94), упругое рассеяние сопровождается передачей кристаллу импульса, равного одному из векторов обратной решётки. Это хорошо известное правило брэгговской дифракции, поэтому S' будем называть упругой или брэгговской, или дифракционной частью структурного фактора.

Наличие временной зависимости величины $S''(\mathbf{k}, t)$ говорит о том, что эта часть структурного фактора отвечает неупругому рассеянию. Электрон передаёт энергию кристаллу, при этом в последнем возбуждаются колебания (фононы). Таким образом, $S''(\mathbf{k}, t)$ соответствует рассеянию с излучением или поглощением электроном произвольного числа фононов.

1.6.2 Корреляционная функция

Теперь перейдём к исследованию корреляционной функции кулоновского кристалла. Используя формулу (89), получим

$$g(\mathbf{r}, t) = g'(\mathbf{r}) + g''(\mathbf{r}, t) \ , \tag{105}$$

$$g'(\mathbf{r}) = 1 + \sum_{\mathrm{m} \in \Xi} e^{-2W(G_\mathrm{m})} e^{-i\mathbf{G}_\mathrm{m}\mathbf{r}} \ , \tag{106}$$

$$g''(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n} \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[S''(\mathbf{k}, t) - 1 \right] e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \ . \tag{107}$$

Подставим разложение (95) в (107) и почленно проинтегрируем по модулю вектора $\mathbf{k}$:

$$\begin{aligned} g''(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{n} \left[\frac{\sqrt{\pi} \exp\{-r^2/4[r_T^2/3 - y_T(t)]\}}{8\pi^2 \{r_T^2/3 - y_T(t)\}^{3/2}} - \delta(\mathbf{r}) \right] - \frac{3\sqrt{3\pi}}{8\pi^2 n r_T^3} e^{-3r^2/4r_T^2} \\ &+ \sum_i{}' \sum_{\sigma=\pm 1} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{(2\pi)^3 r n} \int \frac{\mathrm{d}\Omega_\mathbf{k}}{x^2} \gamma \, e^{-\gamma^2} + \frac{\sqrt{3\pi}\sigma}{8\pi^2 n r R r_T} \, e^{-\eta} \right], \end{aligned} \tag{108}$$

где $\gamma = (r + \sigma R_i \mu)/x$, $\eta = 3(r + \sigma R_i)^2/(4r_T^2)$, $\mu = \cos\vartheta$, ϑ — угол между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{R}_i$, $x^2 = 4[r_T^2/3 - (k^\alpha k^\beta v^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i, t)/k^2)]$, и $\mathrm{d}\Omega_\mathbf{k}$ — элемент телесного угла в направлении $\mathbf{k}$. Таким образом, для расчёта корреляционной функции необходимо вычислить быстро сходящиеся решёточные суммы в формуле (108). Наиболее трудоёмкая часть этой задачи — вычисление величины x, поскольку для этого необходимо провести интегрирование по зоне Бриллюэна, а при таком интегрировании разные подзоны не являются эквивалентными из-за анизотропии, вносимой явной зависимостью $v^{\alpha\beta}$ от $\mathbf{R}_i$. В численных расчётах мы ограничимся статическим случаем $t = 0$. Тогда $y_T(0) = r_T^2/3$, и первое слагаемое в равенстве (108) (первая квадратная скобка) исчезает, поскольку дробь с экспонентой в числителе стремится к дельта-функции.

Как видно из выражений (96) и (100), корреляционная функция определяется двумя параметрами, характеризующими физические условия в системе: $\theta = \hbar\omega_p/T$ и $r_s = a/a_\mathrm{B}$,

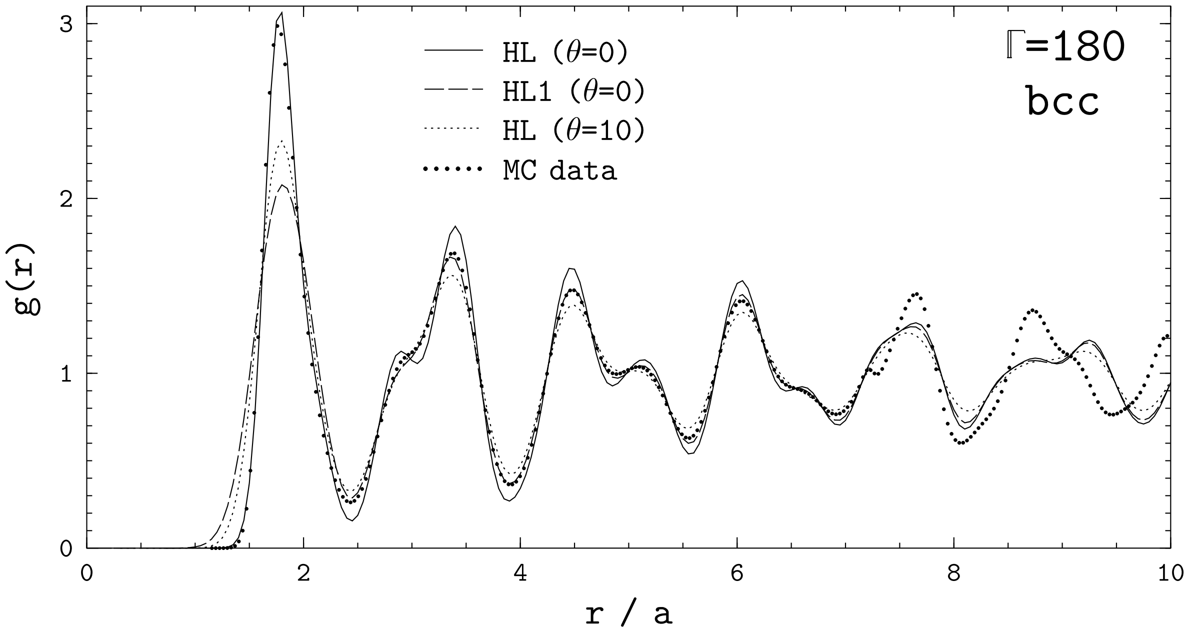

Рис. 6: Корреляционная функция при $\Gamma = 180$ (пояснения в тексте).

где $a_{\rm B}$ — боровский ионный радиус, $a_{\rm B} = \hbar^2/MZ^2e^2$. Кроме того, удобно использовать кулоновский параметр неидеальности ионов $\Gamma = Z^2e^2/aT$. Несложно убедиться в том, что $3\Gamma/\theta = \sqrt{3r_s}$.

Сначала рассмотрим классический кулоновский кристалл $\theta \to 0$, для которого $\bar{n}_\nu \approx T/\hbar\omega_\nu$. На рисунках 6 и 7 показана функция $g(r) = \int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{r}} g(\mathbf{r}, 0)/4\pi$, рассчитанная для ОЦК решётки при $\Gamma = 180$ и 800. Сплошная линия представляет собой расчёт по точным формулам (105), (106) и (108). Расчёты по точным гармоническим формулам будем называть расчётами в модели гармонической решётки (ГР) (или harmonic lattice — HL). Точечная линия рассчитана по приближённой формуле, которая получается из (108) отбрасыванием слагаемых с $\mathbf{R}_i \neq 0$. Это приближение будем называть в дальнейшем ГР1 (или HL1). Расчёты в модели ГР1 отличаются от точных большей простотой и, в то же время, позволяют получать достаточно точные результаты. Наконец, жирными точками отмечены результаты расчётов $g(r)$ методом Монте-Карло (МК или MC). Последние, если ошибки расчёта малы, могут считаться точными значениями корреляционной функции, поскольку эти расчёты выполняются с точным гамильтонианом $\hat{H}$ без приближения гармоничности. В данном примере монте-карловские расчёты были выполнены для 686 частиц в основном кубе, а усреднение проводилось по $\sim 10^8$ реализациям [9].

Обсудим соответствие между монте-карловскими и аналитическими расчётами в гармонических моделях ГР и ГР1 статической корреляционной функции кулоновского кристалла. Монте-карловские данные надежны в диапазоне $1.2a \lesssim r \lesssim 7a$. Значения корреляционной функции при более низких r методом Монте-Карло получить сложно, так как конфигурации со столь малыми значениями межчастичного расстояния весьма редки из-за кулоновского отталкивания ионов. Ограничение со стороны больших r связано с конечным числом частиц. Так, $N = 686$ частиц с концентрацией n размещаются в кубе со

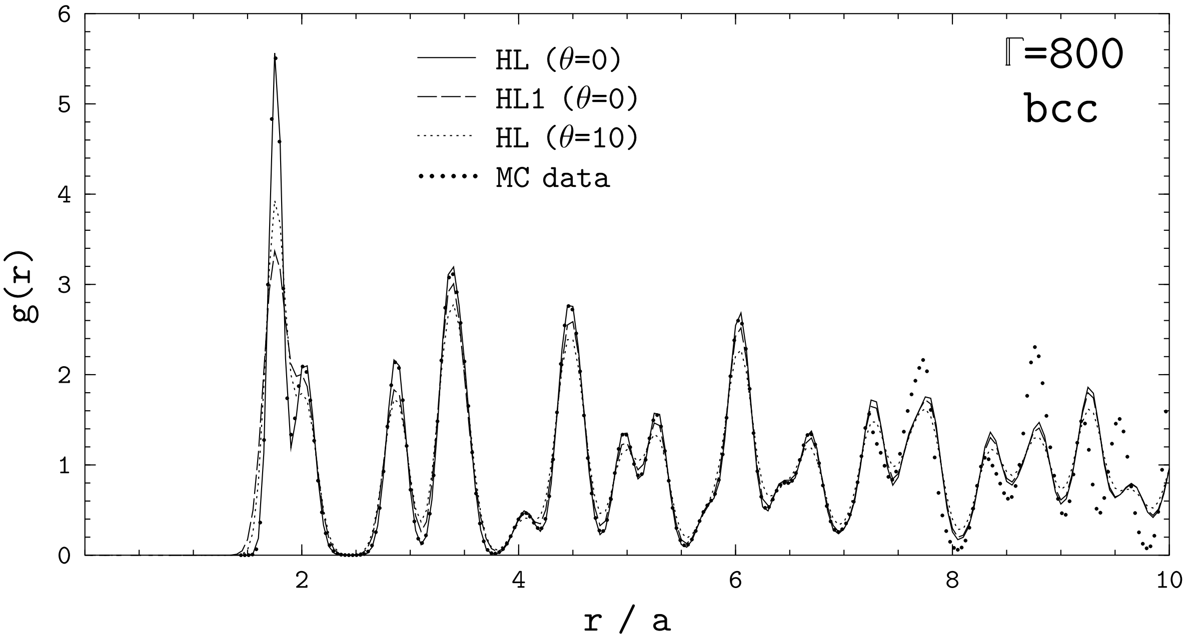

Рис. 7: Корреляционная функция при $\Gamma = 800$.

стороной $\sqrt[3]{4\pi a^3 N/3} \approx 14.2a$. Корреляционная функция надёжно определяется при этом для значений r, не превосходящих половины стороны куба. В диапазоне $1.5a \lesssim r \lesssim 7a$ корреляционная функция, рассчитанная в модели ГР, прекрасно согласуется с МК расчётом. С ростом Γ согласие только улучшается. При $r \gtrsim 7a$ точность расчёта в модели ГР остаётся столь же хорошей, как и при меньших r. С другой стороны, при $r \lesssim 1.5a$ МК и ГР расчёты приводят к существенно различным результатам. Дело в том, что при столь малых расстояниях между частицами отклонение ионов от узлов решётки велико, и гармоническое приближение становится незаконным. Касаясь модели ГР1, отметим, что она даёт очень хорошее согласие с ГР и МК расчётами за пределами первого пика корреляционной функции, т.е. при $r \gtrsim 2.5a$.

Преимущества аналитической модели сразу выявляются при переходе к квантовому случаю $\theta > 0$. В этом случае классический метод МК впрямую неприменим и следовало бы прибегнуть к более сложному методу МК интеграла по траекториям. Насколько нам известно, это до сих пор не сделано. Гармоническая модель позволяет получить результаты в квантовом режиме столь же легко, как и в классическом. Так, на рисунках 6 и 7 точечная линия соответствует $\theta = 10$. Мы видим, что мощные нулевые колебания приводят к подседанию и размазыванию решёточных пиков.

1.6.3 Кулоновская энергия кристалла

Для дальнейшего исследования статической корреляционной функции вычислим с её помощью кулоновскую энергию кристалла $U_{\rm C}$. В пренебрежении эффектом ионного обмена кулоновская энергия представляет собой сумму энергий парного взаимодействия ионов, энергии взаимодействия ионов с фоном и электростатической энергии фона. Небольшое вычисление приводит к хорошо известному выражению

$$\frac{U_{\mathrm{C}}}{N} = 2\pi n \int_0^\infty r^2 \,\mathrm{d}r\, \frac{Z^2e^2}{r}\,[g(r)-1]\ . \tag{109}$$

Подставляя сюда формулы (105), (106) и (108), получим:

$$\begin{aligned}
\frac{U_{\mathrm{C}}}{NT} &= \sum_{\mathrm{m}\in\Xi}{}' e^{-2W(G_{\mathrm{m}})}\,\frac{2\pi n Z^2e^2}{TG_{\mathrm{m}}^2} - \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{Z^2e^2}{Tr_T} + \frac{Z^2e^2}{T}\sum_i{}' \int \frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}}}{4\pi^2}\frac{\sqrt{\pi}}{x}\exp\left(-\frac{R_i^2\mu^2}{x^2}\right) \\
&- \frac{Z^2e^2}{2R_iT}\,\mathrm{erf}\left(\frac{\sqrt{3}R_i}{2r_T}\right) \\
&= \Gamma\left\{\zeta + \frac{r_T^2}{2a^2} - \sum_i{}'\left[\frac{a}{2R_i} - \int\frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}}}{4\pi^2}\frac{\sqrt{\pi}a}{x}\exp\left(-\frac{R_i^2\mu^2}{x^2}\right)\right]\right\}\ .
\end{aligned} \tag{110}$$

При переходе к последнему выражению мы использовали формулу (79) для постоянной Маделунга.

Проанализируем это выражение для классического кристалла в случае низких температур. Пренебрегая амплитудой нулевых колебаний, мы имеем $r_T^2/a^2 = u_{-2}/\Gamma$ [ср. с (100): в классическом кристалле $\mathrm{cth}\,(\hbar\omega/2T) \to 2T/\hbar\omega$]. При $T \to 0$, получим $r_T \to 0$, а также $x \to 0$. Тогда пределы интегрирования по μ в правой части (110) могут быть отнесены на $\pm\infty$, и x в первом приближении можно считать независимым от μ. При этом интеграл берется, и остаётся

$$\int_0^{2\pi}\frac{\mathrm{d}\phi}{4\pi^2}\frac{\sqrt{\pi}a}{x}\frac{\sqrt{\pi}x}{R_i} = \frac{a}{2R_i}\ ,$$

что сокращается с первым слагаемым в квадратной скобке (110) (здесь ϕ — азимутальный угол $\mathbf{k}$ в системе отсчёта с осью z вдоль $\mathbf{R}_i$). Таким образом, при $T \to 0$ имеем $U_{\mathrm{C}}/NT \to \zeta\Gamma$.

Для того чтобы проанализировать следующие члены разложения U_{C}/NT по степеням температуры, необходимо учесть зависимость $x(\mu)$. Из определения x вытекает, что

$$\begin{aligned}
x^2 &= x_0^2 + x_\mu^2\ , \\
x_0^2 &= \frac{4}{3}r_T^2 - 4\left(v^{xx}\cos^2\phi + v^{yy}\sin^2\phi + v^{xy}\sin 2\phi\right), \\
x_\mu^2 &= 4\mu^2\left(v^{xx}\cos^2\phi + v^{yy}\sin^2\phi + v^{xy}\sin 2\phi - v^{zz}\right) \\
&- 8\mu\sqrt{1-\mu^2}\left(v^{xz}\cos\phi + v^{yz}\sin\phi\right),
\end{aligned} \tag{111}$$

где $v^{\alpha\beta} = v^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i, 0)$. Разложим все выражения, содержащие x, по x_μ и далее по μ. Мы получим интеграл по телесному углу, содержащий экспоненту $\exp\left(-R_i^2\mu^2/x_0^2\right)$, умноженную на полином, который содержит чётные степени μ, $\cos\phi$, $\sin\phi$ и произведения различных компонент $v^{\alpha\beta}$. Интегрирование по μ снова может быть распространено на весь интервал $(-\infty,\infty)$ и проведено аналитически. Интегрирование по ϕ также выполняется аналитически. После этого получаем

$$
\begin{aligned}
\frac{U_{\mathrm{C}}}{NT} &= \zeta\Gamma + A_0 + \frac{A_1}{\Gamma} + \frac{A_2}{\Gamma^2} + \ldots\ , \\
A_0 &= \frac{u_{-2}}{2} + \sum_i{}' \frac{a\Gamma}{2R_i^3}\left(v^{xx} + v^{yy} - 2v^{zz}\right)\ , \\
A_1 &= \sum_i{}' \frac{3a\Gamma^2}{R_i^5}\left[(3/4)v^{xx}v^{xx} + (3/4)v^{yy}v^{yy} + 2v^{zz}v^{zz} + v^{xy}v^{xy} - 2v^{yy}v^{zz} - 2v^{xx}v^{zz}\right. \\
&+ \left.(1/2)v^{xx}v^{yy} - 4v^{xz}v^{xz} - 4v^{yz}v^{yz}\right]\ , \\
A_2 &= \sum_i{}' \frac{30a\Gamma^3}{R_i^7}\left\{(5/8)(v^{xx})^3 + (5/8)(v^{yy})^3 + (3/2)(v^{xy})^2(v^{xx} + v^{yy})\right. \\
&- 9[(v^{xz})^2v^{xx} + (v^{yz})^2v^{yy}] + (3/8)v^{xx}v^{yy}(v^{xx} + v^{yy}) \\
&- 3[(v^{xz})^2v^{yy} + (v^{yz})^2v^{xx} + (v^{xy})^2v^{zz}] - 12v^{xy}v^{xz}v^{yz} - (9/4)v^{zz}[(v^{xx})^2 + (v^{yy})^2] \\
&+ \left. 12v^{zz}[(v^{xz})^2 + (v^{yz})^2] - (3/2)v^{xx}v^{yy}v^{zz} + 3(v^{zz})^2(v^{xx} + v^{yy}) - 2(v^{zz})^3\right\}\ . \qquad (112)
\end{aligned}
$$

Естественно ожидать, что наша модель точно воспроизведёт фононный вклад в потенциальную энергию, т.е. $A_0 = 3/2$. Это и в самом деле так, в чём можно убедиться следующим образом. Заметим, что

$$
\begin{aligned}
v^{xx} + v^{yy} - 2v^{zz} &= \frac{3\hbar}{2M}\left\langle \frac{[(e^x_{\mathbf{q}\nu})^2 + (e^y_{\mathbf{q}\nu})^2 - 2(e^z_{\mathbf{q}\nu})^2]}{\omega_{\mathbf{q}\nu}} \operatorname{cth}\left(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}}{2T}\right)\cos\mathbf{q}\mathbf{R}_i\right\rangle_{\mathrm{ph}} \\
&\approx \frac{3T}{M}\left\langle \frac{1 - 3(e^z_{\mathbf{q}\nu})^2}{\omega^2_{\mathbf{q}\nu}}\cos\mathbf{q}\mathbf{R}_i\right\rangle_{\mathrm{ph}}\ .
\end{aligned}
$$

Тогда

$$
\begin{aligned}
A_0 &= \frac{u_{-2}}{2} + \frac{3T\Gamma a}{2M}\left\langle \frac{1}{\omega^2_{\mathbf{q}\nu}}\sum_i{}' \frac{R_i^2 - 3(\mathbf{R}_i\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2}{R_i^5}\cos\mathbf{q}\mathbf{R}_i\right\rangle_{\mathrm{ph}} \\
&= \frac{3}{2}\left\langle \frac{\omega_p^2}{\omega^2_{\mathbf{q}\nu}}\left[\frac{1}{3} + \frac{1}{4\pi n}\sum_i{}' \frac{R_i^2 - 3(\mathbf{R}_i\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2}{R_i^5}\cos\mathbf{q}\mathbf{R}_i\right]\right\rangle_{\mathrm{ph}} \\
&= \frac{3}{2}\left\langle \frac{\omega_p^2}{\omega^2_{\mathbf{q}\nu}}\mathcal{D}^{\alpha\beta}(\mathbf{q})e^{\alpha}_{\mathbf{q}\nu}e^{\beta}_{\mathbf{q}\nu}\right\rangle_{\mathrm{ph}} = \frac{3}{2}\ . \qquad (113)
\end{aligned}
$$

Члены более старшего порядка в разложении потенциальной энергии являются ангармоническими. Причина появления ангармонических членов в чисто гармонической модели состоит в том, что в равенстве (109) фигурирует точная кулоновская энергия Z^2e^2/r. Однако, постоянные A_1, A_2 и т. д. содержат лишь часть ангармонических членов, поскольку для точного учёта ангармонических поправок следовало бы проводить интегрирование в (109) с точной парной корреляционной функцией, а не с гармонической.

Однако, сравнение с точными ангармоническими членами всё же может быть проведено. Запишем гамильтониан системы в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \mathcal{U}$, где $\hat{H}_0$ — гармонический гамильтониан, а $\mathcal{U}$ — разница между точной потенциальной энергией системы и квадратичными членами, удерживаемыми при получении $\hat{H}_0$. Величину $\mathcal{U}$ можно записать в виде

$\mathcal{U} = \sum_{n=3}^{\infty} U_n/n!$, где n-ый член разложения U_n содержит n-ые степени смещений ионов из положений равновесия. Отметим, что $\langle U_{2k+1}\rangle_{T0} = 0$ и $\langle U_{2k}\rangle_{T0} \propto T^k$, где k — целое число. Оба свойства вытекают из подсчета количества операторов рождения и уничтожения в слагаемом U_n и учёта того факта, что $\langle a^\dagger a\rangle_{T0} = \bar{n} \propto T$ (в классическом пределе). Статистическая сумма системы есть

$$Z = \mathrm{Sp} e^{-\hat{H}/T} = \mathrm{Sp} e^{-(\hat{H}_0+\mathcal{U})/T} \ . \tag{114}$$

Применяя теорию возмущений, имеем

$$Z = Z_0 \left[\frac{1}{Z_0} \mathrm{Sp} e^{-\hat{H}_0/T} \left(1 - \frac{\mathcal{U}}{T} + \frac{\mathcal{U}^2}{2T^2} + \ldots\right)\right] = Z_0 \left[1 - \frac{\langle\mathcal{U}\rangle_{T0}}{T} + \frac{\langle\mathcal{U}^2\rangle_{T0}}{2T^2} + \ldots\right] \ . \tag{115}$$

В соответствии со сказанным в наинизшем порядке по T: $\langle\mathcal{U}\rangle_{T0} \propto \langle U_4\rangle_{T0} \propto T^2$, и $\langle\mathcal{U}^2\rangle_{T0} \propto \langle U_3^2\rangle_{T0} \propto T^3$.

Точная ангармоническая энергия системы есть

$$\begin{aligned} \langle\hat{H}\rangle_T - \langle\hat{H}_0\rangle_{T0} &= \frac{T^2}{Z}\frac{\partial Z}{\partial T} - \langle\hat{H}_0\rangle_{T0} = T^2 \left(-\frac{\langle\mathcal{U}\rangle_{T0}}{T^2} + \frac{\langle\mathcal{U}^2\rangle_{T0}}{2T^3}\right) + \ldots \\ &= -\frac{\langle U_4\rangle_{T0}}{24} + \frac{\langle U_3^2\rangle_{T0}}{72T} + \ldots \ . \end{aligned} \tag{116}$$

Ангармоническая энергия системы, получающаяся в гармоническом пределе, представляет собой просто $\langle\mathcal{U}\rangle_{T0}$, т.е.

$$A_1 = \frac{\Gamma\langle U_4\rangle_{T0}}{24NT} \ , \quad A_2 = \frac{\Gamma^2\langle U_6\rangle_{T0}}{720NT} \ , \ldots \ , \tag{117}$$

тогда как из формулы (116) мы видим, что точное значение первого коэффициента есть (например, [26])

$$A_1^{\mathrm{exact}} = -\frac{\Gamma\langle U_4\rangle_{T0}}{24NT} + \frac{\Gamma\langle U_3^2\rangle_{T0}}{72NT^2} \ . \tag{118}$$

К настоящему времени только этот коэффициент и был вычислен для классических ОЦК и ГЦК решёток. Это было сделано Нагарой и др. [69] ($A_1^{\mathrm{exact}} = 10.9$ для ОЦК) и позднее Дубиным [26], который нашёл $A_1^{\mathrm{exact}} = 10.84$ для ОЦК решётки и $A_1^{\mathrm{exact}} = 12.35$ для ГЦК решётки. Наши численные расчёты показывают, что $A_1 = 10.64$ для ОЦК решётки. Тот факт, что это значение близко к A_1^{exact}, по-видимому, является случайным.

Таким образом, подход, основанный на гармонической корреляционной функции, не позволяет вычислить ангармоническую энергию полностью [ср. (117) и (118)], однако, позволяет просуммировать [см. (110)] часть бесконечного ряда ангармонических поправок, а именно $\langle\mathcal{U}\rangle_{T0}$.

Формула (110) полезна также и тем, что с её помощью легко проанализировать квантовый случай. Поскольку мы пренебрегаем обменной энергией (что часто оправданно в кристалле, где перекрытие волновых функций отдельных ионов очень мало), потенциальная энергия по-прежнему выражается формулой (109), а выражение (110) суммирует ряд ангармонических поправок к квантовой энергии.

Полагая $T = 0$, мы найдём, что $r_T = \sqrt{3\hbar u_{-1}/2M\omega_p}$, и

$$\begin{aligned}\frac{U}{N} &= \zeta\frac{Z^2e^2}{a} + \frac{2\pi n\hbar u_{-1}Z^2e^2}{M\omega_p} + \frac{3\hbar Z^2e^2}{2M}\left\langle\frac{1}{\omega_{\mathbf{q}\nu}}\sum_i{}'\frac{R_i^2-3(\mathbf{R}_i\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2}{R_i^5}\cos\mathbf{q}\mathbf{R}_i\right\rangle_{\mathrm{ph}} + \frac{\delta U_0}{N}\\ &= \zeta\frac{Z^2e^2}{a} + \frac{1}{2}\hbar\omega_p u_{-1} + \frac{3}{2}\hbar\omega_p^2\left\langle\frac{1}{4\pi n\omega_{\mathbf{q}\nu}}\sum_i{}'\frac{R_i^2-3(\mathbf{R}_i\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2}{R_i^5}\cos\mathbf{q}\mathbf{R}_i\right\rangle_{\mathrm{ph}} + \frac{\delta U_0}{N}\\ &= \zeta\frac{Z^2e^2}{a} + \frac{3}{2}\hbar\omega_p u_1 + \frac{\delta U_0}{N}\ .\end{aligned} \tag{119}$$

Второе слагаемое в последней строчке воспроизводит половину энергии нулевых колебаний фононов (как и должно быть по теореме вириала для гармонического осциллятора), а третье слагаемое представляет собой ангармоническую поправку к энергии нулевых колебаний.

1.6.4 Структурный фактор

Перейдём теперь к изучению структурного фактора кристалла. Результаты этого рассмотрения понадобятся нам уже в следующем разделе при исследовании электрон-фононного рассеяния. Поскольку упругая часть структурного фактора даётся тривиальным выражением (94), основное внимание уделим неупругой части (95). Очень простое выражение для неупругой части получается отбрасываем всех членов, кроме члена $\mathbf{R}_i = 0$. Такой подход уже успешно применялся при рассмотрении корреляционной функции (модель ГР1). Для структурного фактора получим

$$S''(\mathbf{k},t) = e^{-2W(\mathbf{k})}[e^{k^\alpha k^\beta v^{\alpha\beta}(0,t)} - 1] = \exp\{k^2[y_T(t) - r_T^2/3]\} - e^{-k^2 r_T^2/3}\ , \tag{120}$$

причём статический структурный фактор $S''(\mathbf{k}, t = 0) = 1 - e^{-2W(k)}$. Эта функция изображена на рис. 8 длинными штрихами для классической ОЦК решётки при $\Gamma = 180$.

Прежде чем вычислять структурный фактор непосредственно по формуле (95) полезно изучить зависимость $v^{\alpha\beta}$ от $\mathbf{R}_i$ при больших $|\mathbf{R}_i|$. Исследуем формулу (96) при $t = 0$. Подынтегральная функция, содержащая $\cos(\mathbf{q}\mathbf{R}_i)$, быстро осциллирует при $|\mathbf{q}\mathbf{R}_i| \gtrsim 1$. Поэтому основной вклад набирается при $q \lesssim \min(q_{\mathrm{B}}, 1/R_i|\cos\chi|)$, где $q_{\mathrm{B}} = (6\pi^2 n)^{1/3}$ — эффективный "радиус" зоны Бриллюэна, а χ — угол между $\mathbf{q}$ и $\mathbf{R}_i$. [Член с $\sin(\mathbf{q}\mathbf{R}_i)$ при $t = 0$ отсутствует, но и при $t \neq 0$ приведённые рассуждения сохраняют силу.] Дальнейшее поведение интеграла зависит от значения $\mathrm{cth}(\hbar\omega_{\mathbf{q}}/2T)$. Если кристалл классический, и гиперболический котангенс заменяется на $2T/\hbar\omega_{\mathbf{q}}$, то

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\chi\sin\chi\int_0^{\min(q_{\mathrm{B}},1/R_i|\cos\chi|)}\frac{\mathrm{d}q q^2}{q^2} = \int_0^\pi \mathrm{d}\chi\sin\chi\min(q_{\mathrm{B}}, 1/R_i|\cos\chi|) = O\left(\frac{1}{R_i}\right)\ . \tag{121}$$

Если же полностью пренебречь тепловым возбуждением мод и сохранить только вклад нулевых колебаний, т.е. заменить котангенс на 1, то получим

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\chi\sin\chi\int_0^{\min(q_{\mathrm{B}},1/R_i|\cos\chi|)}\frac{\mathrm{d}q q^2}{q} = \frac{1}{2}\int_0^\pi \mathrm{d}\chi\sin\chi[\min(q_{\mathrm{B}}, 1/R_i|\cos\chi|)]^2 = O\left(\frac{1}{R_i^2}\right)\ . \tag{122}$$

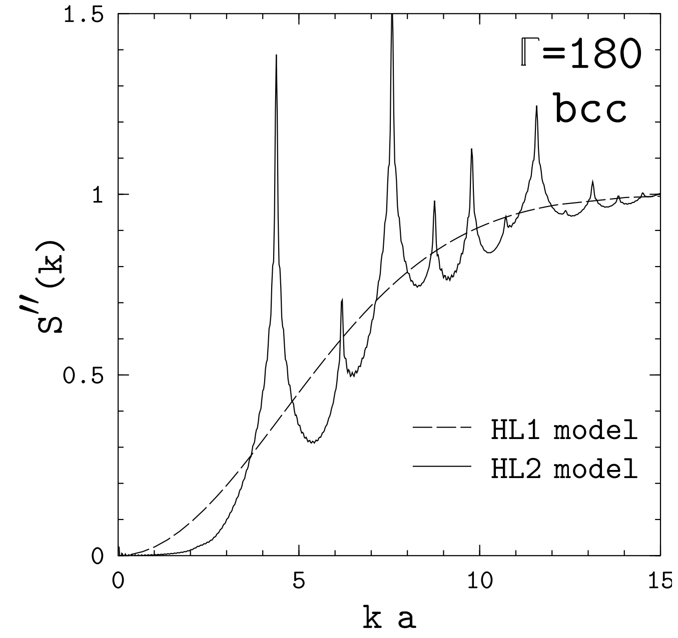

Рис. 8: Статический структурный фактор при $\Gamma = 180$.

Тот факт, что в классическом режиме $v^{\alpha\beta} = O(1/R)$ при $R \to \infty$, приводит к определённым сложностям. А именно, строго говоря, сумма

$$\sum_{R_i > R_0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}[e^{k^\alpha k^\beta O(1/R_i)} - 1] \sim k^\alpha k^\beta \sum_{R_i > R_0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} O(1/R_i) \ , \tag{123}$$

расходится на больших R_i. Аналогичная расходимость возникает при вычислении фурье-образа кулоновского потенциала,

$$\int \frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty \mathrm{d}r \sin kr \ . \tag{124}$$

Интегралу в правой части может быть приписано определённое значение только после регуляризации синуса на ∞, например, введением бесконечно слабого затухания. Мы обсудим два метода регуляризации выражения (123), оба из которых, однако, требуют знания точной асимптотики $v^{\alpha\beta}(R_i)$. Получение же этой точной асимптотики затруднительно из-за сложной зависимости тензора $e^\alpha e^\beta$ от $\mathbf{q}$. Поэтому мы сначала аппроксимируем тензор $v^{\alpha\beta}$ таким образом, чтобы он был простой функцией R_i при больших R_i, а затем выполним регуляризацию.

В статическом случае приближённо можно написать $v^{\alpha\beta}(\mathbf{R}) \approx F(R)\delta^{\alpha\beta} + J(R)R^\alpha R^\beta/R^2$, где $F(R)$ и $J(R)$ — скалярные функции, подлежащие определению. Это разложение не является точным, поскольку $v^{\alpha\beta}$ помимо $\mathbf{R}$ зависит и от базисных векторов обратной решётки, задающих геометрию зоны Бриллюэна. Сворачивая обе части этого разложения с $\delta^{\alpha\beta}$ и $R^\alpha R^\beta/R^2$ и усредняя по углу вектора $\mathbf{R}$, получим

$$\int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{R}}\, v^{\alpha\alpha}(\mathbf{R}, 0)/(4\pi) = 3F(R) + J(R) \ ,$$
$$\int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{R}}\, v^{\alpha\beta}(\mathbf{R}, 0) R^\alpha R^\beta/(4\pi R^2) = F(R) + J(R) \ .$$

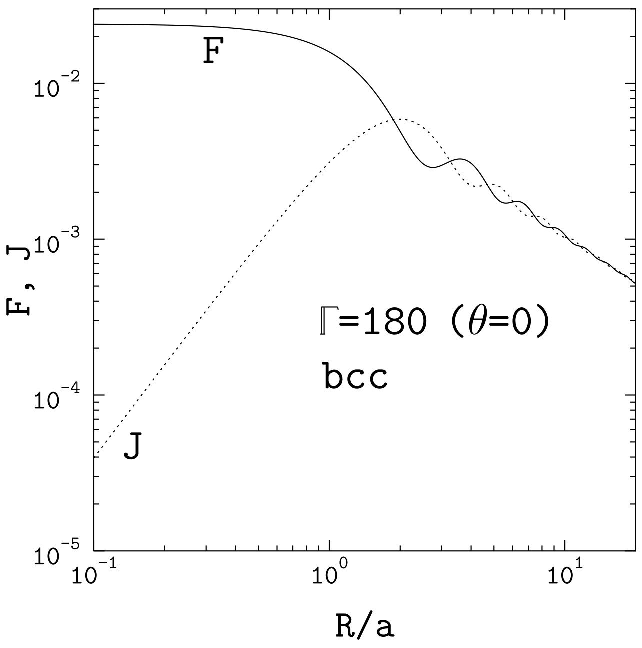

Рис. 9: Общий вид функций $F(R)$ и $J(R)$ при $\Gamma = 180$ для классического ОЦК кристалла.

С другой стороны, мы можем вычислить те же интегралы непосредственно по формуле (96). Решая получившуюся систему уравнений для $F(R)$ и $J(R)$, имеем

$$F(R) \;=\; \frac{3\hbar}{2M}\left\langle \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}\nu}}\left(\bar{n}_{\mathbf{q}\nu}+\frac{1}{2}\right)\left\{j_0(y)-\frac{j_1(y)}{y}-\frac{(\mathbf{q}\cdot\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2}{q^2}\left[j_0(y)-\frac{3j_1(y)}{y}\right]\right\}\right\rangle_{\rm ph}, \quad (125)$$

$$J(R) \;=\; \frac{3\hbar}{2M}\left\langle \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}\nu}}\left(\bar{n}_{\mathbf{q}\nu}+\frac{1}{2}\right)\left[j_0(y)-\frac{3j_1(y)}{y}\right]\left[\frac{3(\mathbf{q}\cdot\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2}{q^2}-1\right]\right\rangle_{\rm ph}, \quad (126)$$

где $y = qR$, а $j_0(y)$ и $j_1(y)$ — сферические функции Бесселя. Отметим, что $F(0)k^2 = 2W(k)$, $J(0) = 0$.

Поскольку асимптотики F и J при больших R определяются акустическими (поперечными) модами, слагаемые в (125) и (126), содержащие $\mathbf{q}\cdot\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu}$, могут быть опущены. В итоге, для классического кристалла имеем

$$\begin{aligned} F(R) \;&\approx\; \frac{T}{16\pi^3 Mn}\sum_\nu \int_{\rm B_1}\frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{\omega^2_{\mathbf{q}\nu}}\left[j_0(y)-\frac{j_1(y)}{y}\right] \\ &\approx\; \frac{T}{4\pi^2 MnR}\int_0^\infty \mathrm{d}y\left[j_0(y)-\frac{j_1(y)}{y}\right]\sum_\nu\int\frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{q}}}{4\pi}\frac{1}{c^2_{\hat{\mathbf{q}}\nu}} = \frac{T}{8\pi MnR\tilde{c}^2}\;. \end{aligned} \quad (127)$$

Аналогичным образом получим $J(R) \approx F(R)$ при $R \to \infty$. Общий вид функций $F(R)$ и $J(R)$ представлен на рис. 9. Численное исследование показывает, что для ОЦК решётки следует подставить

$$\frac{1}{\tilde{c}^2} = \frac{1}{2}\sum_\nu\int\frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{q}}}{4\pi}\frac{1}{c^2_{\hat{\mathbf{q}}\nu}} = \frac{67.85}{2a^2\omega_p^2}\;. \quad (128)$$

Используя (95) и разложение тензора $v^{\alpha\beta}$, имеем

$$S''(\mathbf{k},0) = 1 - e^{-2W(k)} + {\sum_i}' e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i - 2W(k)}\left[e^{k^2F(R_i)+(\mathbf{k}\mathbf{R}_i)^2 J(R_i)/R_i^2} - 1\right]\;. \quad (129)$$

Разлагая экспоненту в квадратных скобках в ряд Тейлора, видим, что необходимо регуляризовать только линейные члены разложения, а для учёта остальных членов достаточно точно вычислить некоторое число первых членов в формуле (129). Таким образом, задача регуляризации сводится к вычислению $\sum_{|\mathbf{R}_i|>R_0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}/R_i$, где R_0 — максимальное значение модуля вектора решётки, при котором суммирование в (129) выполняется точно. Простейшим методом регуляризации является замена бесконечного "хвоста" суммы интегралом по $\mathbf{R}$

$$\sum_{|\mathbf{R}_i|>R_0} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}}{R_i} \approx n \int_{R>R_0} \mathrm{d}\mathbf{R} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{R} = \frac{4\pi n}{k} \int_{R_0}^{\infty} \mathrm{d}R \sin kR = \frac{4\pi n}{k^2} \cos kR_0 \; . \tag{130}$$

Данный метод обладает следующим недостатком: он не учитывает, что сумма нашего ряда действительно $\to \infty$ при $\mathbf{k} = \mathbf{G}_\mathrm{m}$ (где $\mathbf{G}_\mathrm{m}$ — векторы обратной решётки). Однако, если $\mathbf{k}$ лежит вне небольших окрестностей точек $\mathbf{G}_\mathrm{m}$, этот метод позволяет получить правильный ответ, и его легко реализовать на практике.

Другой метод регуляризации основан на преобразовании Эвальда:

$$\sum_{|\mathbf{R}_i|>R_0} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}}{R_i} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\int_0^A + \int_A^{\infty} \right) \mathrm{d}\rho \sum_{|\mathbf{R}_i|>R_0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i - \rho^2 R_i^2} \; . \tag{131}$$

Меняя во втором интеграле местами суммирование и интегрирование, получим

$$\sum_{|\mathbf{R}_i|>R_0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \frac{\mathrm{erfc}(AR_i)}{R_i} \; . \tag{132}$$

Эта сумма сходится уже очень быстро. В первом же интеграле перейдём к фурье-образу

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i - \rho^2 R_i^2} = \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{\pi\sqrt{\pi}}{\rho^3} \exp\left(-\frac{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|^2}{4\rho^2} \right) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \; . \tag{133}$$

Теперь заметим, что

$$\sum_{|\mathbf{R}_i|>R_0} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} = (2\pi)^3 n \sum_{\mathrm{m}\in\Xi} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{G}_\mathrm{m}) - \sum_{|\mathbf{R}_i|<R_0} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \; .$$

Тогда

$$\frac{16\pi^3 n}{\sqrt{\pi}} \int_0^A \frac{\mathrm{d}\rho}{\rho^3} \frac{\pi\sqrt{\pi}}{(2\pi)^3} \sum_{\mathrm{m}\in\Xi} \exp\left(-\frac{|\mathbf{k}-\mathbf{G}_\mathrm{m}|^2}{4\rho^2} \right) = \sum_{\mathrm{m}\in\Xi} \frac{4\pi n}{|\mathbf{k}-\mathbf{G}_\mathrm{m}|^2} \exp\left(-\frac{|\mathbf{k}-\mathbf{G}_\mathrm{m}|^2}{4A^2} \right) , \tag{134}$$

и получившаяся бесконечная сумма также быстро сходится. Оставшаяся конечная сумма может быть упрощена следующим образом:

$$\begin{aligned}
&\sum_{|\mathbf{R}_i|<R_0} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^A \mathrm{d}\rho \frac{\pi\sqrt{\pi}}{\rho^3} \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \exp\left(-\frac{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|^2}{4\rho^2} \right) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \\
&= \sum_{|\mathbf{R}_i|<R_0} 4\pi \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \exp\left(-\frac{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|^2}{4A^2} \right) \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i}}{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|^2} = \sum_{|\mathbf{R}_i|<R_0} 4\pi e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{-q^2/4A^2} \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i}}{q^2} \\
&= \frac{2A}{\sqrt{\pi}} + \sum_{|\mathbf{R}_i|<R_0}{}' \frac{2}{\pi} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \int_0^{\infty} \mathrm{d}q \frac{\sin qR_i}{qR_i} e^{-q^2/4A^2} = \frac{2A}{\sqrt{\pi}} + \sum_{|\mathbf{R}_i|<R_0}{}' e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \frac{\mathrm{erf}(AR_i)}{R_i} \; .
\end{aligned} \tag{135}$$

Объединяя (132), (134) и (135) и усредняя по ориентации вектора $\mathbf{k}$, получим

$$\begin{aligned}\int \frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}}}{4\pi} \sum_{|\mathbf{R}_i|>R_0} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}}{R_i} &= \sum_{|\mathbf{R}_i|>R_0} \frac{\sin kR_i}{kR_i^2}\,\mathrm{erfc}(AR_i) + {\sum_{|\mathbf{R}_i|<R_0}}' \frac{\sin kR_i}{kR_i^2}\,\mathrm{erf}(AR_i) \\ &+ \frac{4\pi n}{k^2}\,e^{-k^2/4A^2} + {\sum_{\mathrm{m}\in\Xi}}' \sum_{\tau=\pm1} \frac{\pi n\tau}{kG_{\mathrm{m}}}\,\mathrm{Ei}\left(-\frac{[k+\tau G_{\mathrm{m}}]^2}{4A^2}\right) + \frac{2A}{\sqrt{\pi}}\,. \qquad (136)\end{aligned}$$

То же самое выражение используется и при суммировании члена, содержащего $J(R_i)$. Это видно из того, что после усреднения по углам вектора $\mathbf{k}$ член, подлежащий регуляризации, имеет такой же вид как и член, содержащий $F(R_i)$:

$$\int \frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}}}{4\pi} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}}{R_i} \frac{(\mathbf{k}\mathbf{R}_i)^2}{R_i^2} = \frac{k\sin kR_i}{R_i^2} + O\left(\frac{1}{R_i^3}\right)\,. \qquad (137)$$

Таким образом, для расчёта неупругой части структурного фактора следует точно вычислить конечную сумму в соответствии с равенством (129) и затем добавить вклад бесконечного хвоста, который равен результату (136), умноженному на

$$\frac{2Tk^2 e^{-2W(k)}}{8\pi M n\tilde{c}^2}\,. \qquad (138)$$

Полученный структурный фактор изображён на рис. 8 сплошной линией. По сравнению с плавной штриховой линией, даваемой моделью ГР1, этот структурный фактор обнаруживает сингулярные пики при длинах вектора $\mathbf{k}$, совпадающих с длинами векторов обратной решётки. Формально, это легко увидеть из равенства (136) — надо лишь устремить произвольную константу A (служащую для оптимизации сходимости при численных расчётах) к бесконечности. Тогда

$$\int \frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}}}{4\pi} \sum_{|\mathbf{R}_i|>R_0} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}}{R_i} = \frac{4\pi n}{k^2} + 2\pi n {\sum_{\mathrm{m}\in\Xi}}' \left[\frac{1}{kG_{\mathrm{m}}} \ln\left|\frac{k+G_{\mathrm{m}}}{k-G_{\mathrm{m}}}\right| - \frac{2}{G_{\mathrm{m}}^2}\right] - {\sum_{|\mathbf{R}_i|<R_0}}' \frac{\sin kR_i}{kR_i^2} + \frac{2\zeta}{a}, \qquad (139)$$

где ζ — постоянная Маделунга. Последнее выражение в явном виде содержит логарифмические сингулярности при $k = G_{\mathrm{m}}$.

Прежде чем переходить к анализу квантового случая, полезно понять физическую причину возникновения этих сингулярностей. Покажем, что сингулярности обусловлены неупругими процессами с излучением или поглощением одного фонона с волновым вектором, близким к вектору обратной решётки. Если разложить обе экспоненты в формуле (88) в степенные ряды и перемножить последние, то однофононным процессам будут соответствовать те члены, в которых одна свёртка операторов рождения и поглощения образована операторами, входящими в разложение радиус-векторов различных ионов, а остальные свёртки образованы операторами, входящими в разложение одного и того же радиус-вектора. Эти последние свёртки соответствуют рождению и уничтожению произвольного числа виртуальных фононов и приводят к перенормировке однофононного процесса, выражаемой фактором Дебая-Уоллера. Таким образом, перенормированный однофононный неупругий статический структурный фактор $S''_{\rm 1ph}(\mathbf{k},0)$ можно записать в виде

$$e^{2W(k)}S''_{\rm 1ph}(\mathbf{k},0)=\frac{1}{N}\sum_{ij}e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)}\left\langle(i\mathbf{k}\hat{\mathbf{u}}_i)(-i\mathbf{k}\hat{\mathbf{u}}_j)\right\rangle_{T0}=$$

$$\frac{1}{N}\sum_{ij}\sum_{\mathbf{Q}\nu}\frac{\hbar(\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{Q}\nu})^2}{2MN\omega_{\mathbf{Q}\nu}}e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{Q})(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)}(2\bar{n}_{\mathbf{Q}\nu}+1)=\sum_{\nu}\frac{\hbar(\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2}{M\omega_{\mathbf{q}\nu}}\left(\bar{n}_{\mathbf{q}\nu}+\frac{1}{2}\right)\ , \qquad (140)$$

где $\mathbf{q}$ — такой вектор из 1-ой зоны Бриллюэна, что $\mathbf{k}=\mathbf{G}+\mathbf{q}$ при некотором векторе обратной решётки $\mathbf{G}$. Предположим, что вектор $\mathbf{k}$ близок к $\mathbf{G}$ и усредним по углам $\mathbf{k}$ в окрестности $\mathbf{G}$. Основной вклад будут вносить акустические моды, поляризация которых перпендикулярна $\mathbf{q}$, так что произведение $(\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2$ ограничено снизу некоторой положительной величиной. Сингулярность возникает при усреднении

$$\frac{1}{\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}}\left(\frac{1}{2}+\bar{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}\right)\propto\frac{1}{|\mathbf{k}-\mathbf{G}|}\left(\frac{1}{2}+\bar{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}\right)\ . \qquad (141)$$

В классическом пределе имеем

$$\int_{1-\epsilon}^{1}\frac{\mathrm{d}t}{k^2+G^2-2kGt}=-\frac{1}{2kG}\ln|k-G|+\ldots\ , \qquad (142)$$

что и даёт требуемый логарифм.

Если бы в квантовом пределе $\theta\gg 1$ можно было полностью отбросить $\bar{n}$, то мы бы получили особенность типа $|k-G|$. Однако, сколь ни низка температура, при $\mathbf{k}$ достаточно близких к $\mathbf{G}$ для акустических мод мы имеем $T>\hbar\omega_{\mathbf{q}}$. Поэтому такие моды возбуждены вблизи центра зоны. Эти возбуждённые моды снова дадут логарифмическую расходимость в непосредственной близости от $k=G$, так что структурный фактор в окрестности вектора обратной решётки будет иметь вид пика $|k-G|$, на самой вершине которого отрастает логарифмическая сингулярность типа (142).

В заключение этого раздела следует подчеркнуть, что гармоническая модель позволяет относительно легко получить богатую информацию о свойствах кулоновского кристалла как в квантовом, так и в классическом режимах с возможным учётом динамических эффектов. В ряде случаев, как, например, при изучении структурных факторов, замена гармонической модели численными расчётами выглядит проблематичной. В частности, с помощью последних трудно исследовать сингулярные особенности функций S' и S''.

1.7 Общие свойства электрон-фононного рассеяния

Перейдём к изучению рассеяния электрона на ионах решётки. Дифференциальная частота рассеяния в борновском приближении даётся равенством (104). Учитывая спиновые состояния, мы можем записать дифференциальную вероятность рассеяния в единицу времени, усреднённую по начальным и просуммированную по конечным спиновым состояниям, как

$$\Gamma(\mathbf{p}\to\mathbf{p}')=\frac{2\pi N}{\hbar^2}\frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}|\Phi_{\hbar\mathbf{k},\sigma\sigma'}|^2\,\tilde{S}(\mathbf{k},\omega)\ , \qquad (143)$$

где Φ — матричный элемент потенциала взаимодействия электрона с покоящимся ионом, взятый между состояниями электрона $\mathbf{p}'\sigma'$ и $\mathbf{p}\sigma$ ($\mathbf{p}' - \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$).

Если разлагать динамический структурный фактор в степенной ряд, как это описано в предыдущем разделе, то будут возникать слагаемые, соответствующие процессам рассеяния с излучением/поглощением электроном произвольного числа фононов. В нулевом порядке получим упругое рассеяние, которому соответствует структурный фактор $\tilde{S}_{\rm el}(\mathbf{k},\omega) = S'(\mathbf{k})\delta(\omega)$. В следующем порядке имеем однофононное рассеяние со структурным фактором

$$\begin{aligned}\tilde{S}_{\rm 1ph}(\mathbf{k},\omega) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t e^{-i\omega t}\frac{e^{-2W(k)}}{N}\sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)}\,\langle[i\mathbf{k}\hat{\mathbf{u}}_i(t)][-i\mathbf{k}\hat{\mathbf{u}}_j(0)]\rangle_{T0} \\ &= e^{-2W(k)}\frac{\hbar}{2M}\sum_{\nu}\frac{(\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2}{\omega_{\mathbf{q}\nu}}[\bar{n}_{\mathbf{q}\nu}\delta(\omega-\omega_{\mathbf{q}\nu}) + (\bar{n}_{\mathbf{q}\nu}+1)\delta(\omega+\omega_{\mathbf{q}\nu})] \qquad (144)\end{aligned}$$

[ср. с (91)]. Волновой вектор $\mathbf{q}$ определяется здесь по тому же правилу, что и в конце предыдущего раздела, т.е. это такой вектор из 1-ой зоны Бриллюэна, что $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{G}$, где $\mathbf{G}$ — подходящий вектор обратной решётки. Первое слагаемое в квадратных скобках соответствует поглощению электроном фонона ($\hbar\omega = \varepsilon' - \varepsilon = \hbar\omega_{\mathbf{q}\nu} > 0$), а второе — рождению. Вероятность процесса поглощения пропорциональна числу фононов в моде, а вероятность рождения — этому числу $+1$.

Полный структурный фактор (103) учитывает процессы с поглощением и излучением произвольного числа фононов. (Отметим, что мы рассматриваем процессы взаимодействия электронов с полем фононов в одновершинном приближении; например, такие процессы как комптоновское рассеяние фонона на электроне при этом не учитываются.) Проанализируем, при каких условиях нельзя ограничиваться однофононным приближением и необходимо учитывать многофононные процессы. Показатель экспоненты, разложение которой в ряд Тейлора соответствует разложению по кратности процесса, по порядку величины равен kr_T. В сумме $e^x = \sum_n x^n/n!$ основным является член $n \sim [x]$ ($x > 0$). Для оценки величины kr_T заметим, что типичный переданный импульс порядка импульса электрона, $k \sim k_{\rm F} = (3\pi^2 nZ)^{1/3}$, где $k_{\rm F}$ — фермиевский импульс электрона (здесь и ниже электроны считаются сильно вырожденными). В свою очередь, $r_T = \sqrt{u_{-2}/\Gamma}\ a$ в классическом режиме, и $r_T = \sqrt{\theta u_{-1}/3\Gamma}\ a$ при $\theta \gg 1$. В итоге получим $k^2 r_T^2 \sim 50 Z^{2/3}/\Gamma$ в классическом режиме и $\sim 4Z^{2/3}\theta/\Gamma$ в квантовом. Выбирая, для примера, $\Gamma \sim 200$ и $Z = 26$ (железо) имеем в классическом режиме $kr_T \sim \sqrt{2}$, что указывает на важность процессов с излучением или поглощением нескольких (двух – трёх) фононов.

В классическом режиме $\theta \ll 1$ при $|\omega| \gg \omega_p$ можно вывести полезную асимптотику динамического структурного фактора. Величину $v^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i,\tau)$, фигурирующую в выражении (103), можно записать как

$$v^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i,\tau) = \sum_{\mathbf{q}\nu}\frac{\hbar e^{\alpha}_{\mathbf{q}\nu} e^{\beta}_{\mathbf{q}\nu}}{2MN\omega_{\mathbf{q}\nu}}\frac{\cos{(\mathbf{q}\mathbf{R}_i)}\cos{(\omega_{\mathbf{q}\nu}t)}}{\mathrm{sh}\,(\hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}/2T)}\ , \qquad (145)$$

где переменная t (время) — вещественна. Большие частоты ω соответствуют малым временам t. Поэтому, имея ввиду интегрирование по t в (103), можно записать $\cos{(\omega_{\mathbf{q}\nu}t)} \approx$

$1-(\omega_{\mathbf{q}\nu}t)^2/2$. В классическом кристалле, кроме того, достаточно положить $\mathrm{sh}\,(\hbar\omega/2T)\approx\hbar\omega/2T$. Тогда интеграл по t берётся, и получается следующее

$$\tilde{S}(\mathbf{k},\omega)\approx\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-\hbar\omega/2T-2W(k)}\sum_i\frac{1}{\sqrt{u(\mathbf{k},\mathbf{R}_i)}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i+2w(\mathbf{k},\mathbf{R}_i)-\omega^2/u(\mathbf{k},\mathbf{R}_i)}\ , \tag{146}$$

где $u(\mathbf{k},\mathbf{R}_i)=3v_T^2\langle(\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2\cos{(\mathbf{q}\mathbf{R}_i)}\rangle_{\mathrm{ph}}$, $v_T=\sqrt{2T/M}$, и

$$2w(\mathbf{k},\mathbf{R}_i)=\frac{3T}{M}\left\langle\frac{(\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu})^2}{\omega_{\mathbf{q}\nu}^2}\cos{(\mathbf{q}\mathbf{R}_i)}\right\rangle_{\mathrm{ph}}\ . \tag{147}$$

В частности, в модели ГР1 получаем простую формулу

$$\tilde{S}(\mathbf{k},\omega)\approx\frac{1}{\sqrt{\pi}kv_T}\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2T}-\frac{\omega^2}{k^2v_T^2}\right)\ , \tag{148}$$

из которой видно, что при рассеянии на классическом кристалле переданная энергия ограничена величиной kv_T, где v_T — тепловая скорость иона, а k — переданный импульс. Такой результат выглядит совершенно естественно.

1.8 Электронные коэффициенты переноса в кулоновских кристаллах и жидкостях

1.8.1 Общий формализм

Тепло- электропроводность и сдвиговая вязкость в коре нейтронных звёзд и ядрах белых карликов имеют первостепенное значение для эволюции этих объектов. Так, теплопроводность определяет соотношение между внутренней температурой нейтронной звезды и её эффективной поверхностной температурой; это соотношение влияет как на тепловую эволюцию звезды, так и на спектр её излучения (например, Гудмундссон и др. [36], Потехин и др. [82]). Теплопроводность вырожденного вещества необходима также для моделирования пульсаций белых карликов (например, Фонтэн и Брассар [30]). Электропроводность необходима для расчётов эволюции магнитного поля в коре нейтронной звезды или ядре белого карлика (например, Урпин и Коненков [97]). Сдвиговая вязкость нужна при исследовании релаксации напряжений кристалла, возникающих, например, в результате затухания колебаний или замедления вращения звезды.

Для приложений необходимо знать транспортные свойства плотного звёздного вещества, где электроны сильно вырождены и образуют почти идеальный ферми-газ, а ионы частично или полностью ионизованы и образуют сильно неидеальную кулоновскую жидкость или кулоновский кристалл. Состояние кулоновской системы характеризуется введённым выше кулоновским параметром неидеальности $\Gamma=Z^2e^2/aT$. Кулоновский кристалл образуется при $\Gamma\geq\Gamma_m$, где Γ_m соответствует температуре плавления T_m. Величина $\Gamma_m=\Gamma_m(\theta)$. В классическом режиме параметр Γ_m определён методом Монте-Карло и составляет $\Gamma_m(0)\approx 172$ [69]. С ростом θ параметр Γ_m также растёт (см. главу 2, рис.

11), а температура плавления падает, что свидетельствует о том, что квантовые эффекты (нулевые колебания и ионный обмен) понижают стабильность кристалла. В диапазоне $1 \lesssim \Gamma \leq \Gamma_m$ ионы образуют кулоновскую жидкость.

При сформулированных условиях электроны являются наиболее эффективными переносчиками заряда, тепла и импульса. Тепло- и электропроводность, а также сдвиговая вязкость в основном определяются рассеянием электронов на ионах.

Кинетические свойства вырожденных электронов, обусловленные электрон-ионным рассеянием, изучались рядом авторов. Общий формализм, основанный на вариационном методе (например, Займан [107]), был развит Флауэрсом и Ито [29] (там же см. ссылки на более ранние работы). Аналогичные результаты можно получить, решая кинетическое уравнение Больцмана для функции распределения электронов. Это приближение абсолютно оправданно, поскольку электроны, в силу высокой плотности, сильно вырождены и образуют почти идеальный газ. Кинетическое уравнение Больцмана имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \mathcal{I}[f] \ , \tag{149}$$

где $f = f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ — функция распределения электронов, $\mathbf{v} = \mathrm{d}\varepsilon/\mathrm{d}\mathbf{p}$ и ε — скорость и энергия электрона, $\mathbf{F}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ — внешняя сила, действующая на электрон. Функционал $\mathcal{I}[f]$ представляет собой интеграл столкновений, который в приближении Больцмана записывается как

$$\mathcal{I}[f] = \sum_{\mathbf{p}'} \left[\Gamma(\mathbf{p}' \to \mathbf{p})\, f'(1-f) - \Gamma(\mathbf{p} \to \mathbf{p}')\, f(1-f')\right] \ , \tag{150}$$

где $f' = f(\mathbf{p}', \mathbf{r}, t)$, а $\Gamma(\mathbf{p} \to \mathbf{p}')$ — вероятность перехода в единицу времени из состояния $\mathbf{p}$ в состояние $\mathbf{p}'$. Как обычно в задачах релаксации при кулоновском рассеянии, мы считаем, что функция f не зависит от ориентации спина, а вероятность перехода усреднена по начальным и просуммирована по конечным направлениям спина.

Конкретный способ решения кинетического уравнения зависит от исследуемого коэффициента переноса. Мы подробно рассмотрим случай теплопроводности, на примере которой можно продемонстрировать все основные шаги решения уравнения, и приведём аналогичные результаты для электропроводности и сдвиговой вязкости, указав, какие изменения необходимо внести для получения этих величин.

При расчёте теплопроводности мы имеем дело с пространственно неоднородной задачей, поскольку в системе имеется градиент температуры ∇T. Члены $\partial f/\partial t$ и $\mathbf{F}\partial f/\partial \mathbf{p}$, в левой части уравнения (149) могут быть опущены. Интеграл столкновений обращается в ноль, если в качестве f подставить равновесную функцию распределения

$$f_0 = \left\{1 + \exp\left[\frac{\varepsilon - \mu}{T}\right]\right\}^{-1} \ . \tag{151}$$

Поэтому интеграл столкновений можно линеаризовать по отклонению от равновесной функции распределения. Это отклонение должно быть пропорционально ∇T, так что в левой части линеаризованного уравнения функцию f можно заменить *локально* равновесной функцией $f_0[T(r)]$. Тогда

$$-(\mathbf{v}\nabla T)\,\frac{\varepsilon-\mu}{T}\,\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon} = \sum_{\mathbf{p}'}\left\{\Gamma(\mathbf{p}'\to\mathbf{p})\left[\delta f'\,(1-f_0)-f_0'\,\delta f\right]-\Gamma(\mathbf{p}\to\mathbf{p}')\left[\delta f\,(1-f_0')-f_0\,\delta f'\right]\right\}\,, \tag{152}$$

где $\delta f = f - f_0$.

Правую часть уравнения Больцмана можно упростить, если использовать так называемый принцип детального равновесия, который состоит в том, что для равновесных функций распределения вероятности прямых и обратных переходов между любыми двумя микроскопическими состояниями совпадают. В применении к электронному переносу это означает, что

$$\Gamma(\mathbf{p}\to\mathbf{p}')f_0(1-f_0') = \Gamma(\mathbf{p}'\to\mathbf{p})f_0'(1-f_0)\,, \tag{153}$$

или

$$\Gamma(\mathbf{p}\to\mathbf{p}')\,e^{\varepsilon'/T} = \Gamma(\mathbf{p}'\to\mathbf{p})\,e^{\varepsilon/T} \tag{154}$$

$\forall\mathbf{p}$, $\mathbf{p}'$. Поскольку квадрат модуля матричного элемента в правой и левой частях равенства (154) сокращается [см. (143)], мы получаем следующее утверждение для динамического структурного фактора

$$\tilde{S}(\mathbf{q},\omega)\,e^{\hbar\omega/2T} = \tilde{S}(-\mathbf{q},-\omega)\,e^{-\hbar\omega/2T}\,, \tag{155}$$

где $\hbar\mathbf{q}$ и $\hbar\omega$ — переданные импульс и энергия. Это утверждение может быть доказано непосредственно для динамического структурного фактора, описываемого формулой (103). В самом деле, экспоненциальные множители в равенстве (155) сокращаются с соответствующими множителями, стоящими под интегралом в (103). А при одновременной замене $\omega\to-\omega$, $\mathbf{q}\to-\mathbf{q}$, $\mathbf{R}_i\to-\mathbf{R}_i$ и $t\to-t$ интеграл в (103) не меняется. Подобным же образом принцип детального равновесия доказывается и в применении к упрощённому динамическому структурному фактору, возникающему в модели ГР1 и отличающемуся тем, что в (103) сумма по i, векторам решётки, заменяется единственным членом с $\mathbf{R}_i = 0$.

Для того чтобы использовать принцип детального равновесия, запишем добавку к равновесной функции распределения как $\delta f = \xi(\mathbf{p})f_0(1-f_0)$, с подлежащей определению функцией $\xi(\mathbf{p})$. Тогда кинетическое уравнение примет вид:

$$-(\mathbf{v}\nabla T)\,\frac{\varepsilon-\mu}{T}\,\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon} = \sum_{\mathbf{p}'}\Gamma(\mathbf{p}\to\mathbf{p}')\,f_0(1-f_0')(\xi'-\xi)\,. \tag{156}$$

Если бы величина $\Gamma(\mathbf{p}\to\mathbf{p}')$ зависела только от $|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|$, то мы могли бы сразу написать точный вид угловой зависимости решения: $\xi\propto(\mathbf{v}\nabla T)$. Действительно, при интегрировании по азимутальному углу $\mathbf{p}'$ относительно $\mathbf{p}$ из $\xi'\propto(\mathbf{v}'\nabla T)$ возник бы косинус угла между $\mathbf{v}$ и ∇T, как и во всех остальных членах. Однако, такая ситуация имеет место только в газах и жидкостях. В кристаллах же вероятность перехода зависит не только от величины, но и от направления переданного импульса. Это существенно усложняет расчёт кинетических коэффициентов, которые, естественно, становятся анизотропными.

Мы будем решать кинетическое уравнение для кристалла приближённо. Во-первых, отметим, что кристаллы кубической структуры обладают высокой симметрией, так что, по-видимому, с хорошей точностью можно, как и в жидкости, положить $\xi \propto (\mathbf{v}\nabla T)$. При этом левая часть уравнения уже не будет равна правой части, но можно приравнять коэффициенты при Y_{10} в разложении левой и правой частей по сферическим гармоникам Y_{lm} углов вектора $\mathbf{v}$ в системе отсчёта с полярной осью вдоль ∇T. Для этого надо домножить уравнение на $(\mathbf{v}\nabla T)$ и проинтегрировать по углам $\mathbf{v}$. Полученное уравнение для коэффициента при сферической гармонике всё ещё будет зависеть от направления ∇T. Поэтому правую часть можно усреднить по направлениям ∇T. В результате этих преобразований получим следующее:

$$\begin{aligned}
\frac{4\pi}{3}v^2(\nabla T)^2\frac{(\varepsilon-\mu)}{T}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} &= \frac{1}{3}\int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{p}}\sum_{\mathbf{p}'}\Gamma(\mathbf{p}\to\mathbf{p}')f_0(1-f_0')v(\nabla T)^2[v\chi(p)-v'\chi(p')\cos\theta]\ , \\
4\pi\frac{(\varepsilon-\mu)}{T}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} &= \int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{p}}\sum_{\mathbf{p}'}\Gamma(\mathbf{p}\to\mathbf{p}')f_0(1-f_0')\left[\chi(p)-\left(\frac{v'}{v}\right)\chi(p')\cos\theta\right]\ , \quad (157)
\end{aligned}$$

где $\xi(\mathbf{p}) = (\mathbf{v}\nabla T)\chi(p)$, и θ — угол между $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$.

Зависимость решения от энергии также будем рассматривать приближённо. Если бы в системе происходили только упругие процессы, т.е. $\tilde{S}(\mathbf{q},\omega) \propto \delta(\omega)$, то мы имели бы $\varepsilon = \varepsilon'$, $f_0 = f_0'$, $\partial f_0/\partial\varepsilon = -f_0(1-f_0')/T$. Тогда в качестве $\chi(p)$, как нетрудно сообразить, можно было бы взять $C(\varepsilon-\mu)$, где постоянная C определяется четырёхмерным интегралом по углам импульсов. При наличии неупругих столкновений выберем в качестве χ ту же самую функцию:

$$\delta f = -\frac{\tau_\kappa(\mathbf{v}\nabla T)}{T}\,\frac{(\varepsilon-\mu)}{T}f_0(1-f_0)\ , \qquad (158)$$

где $\tau_\kappa = \mathrm{const}$ имеет размерность времени, а по смыслу представляет собой эффективное время релаксации при электрон-ионных столкновениях для процесса переноса тепла. После этого приравняем коэффициенты при линейных членах разложений правой и левой частей (157) по ортогональным полиномам аргумента $(\varepsilon-\mu)/T$ с весом $\partial f_0/\partial\varepsilon$. Для этого умножим обе части уравнения на $(\varepsilon-\mu)/T$ и проинтегрируем по ε. В результате получим следующее

$$\begin{aligned}
-4\pi\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\varepsilon\left(\frac{\varepsilon-\mu}{T}\right)^2\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon} &= \frac{\tau_\kappa V}{(2\pi\hbar)^3c^2T}\int\!\!\int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{p}}\,\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{p}'}\int_{-\infty}^{+\infty}\!\!\int \mathrm{d}\varepsilon\,\mathrm{d}\varepsilon'\varepsilon'p'f_0(1-f_0') \\
&\times\ \Gamma(\mathbf{p}\to\mathbf{p}')\frac{(\varepsilon-\mu)}{T}\left[\frac{(\varepsilon-\mu)}{T}-\left(\frac{v'}{v}\right)\frac{(\varepsilon'-\mu)}{T}\cos\theta\right]. \quad (159)
\end{aligned}$$

Интеграл в левой части равен $-\pi^2/3$. Вводя переменные $z = (\varepsilon-\mu)/T$, $z' = (\varepsilon'-\mu)/T$, $y = \hbar\omega/T = (\varepsilon'-\varepsilon)/T$ и выражая вероятность перехода через матричный элемент потенциала и динамический структурный фактор согласно (143), получим следующее выражение для искомого параметра τ_κ:

$$\begin{aligned}
\tau_\kappa^{-1} &= \frac{3T\varepsilon_{\mathrm{F}}p_{\mathrm{F}}}{(2\pi\hbar)^3 4\pi^3c^2}\frac{2\pi n}{\hbar^2}\int\!\!\int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{p}}\,\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{p}'}\,\frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}V^2\left|\Phi_{\mathbf{p}'-\mathbf{p},\sigma\sigma'}\right|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\!\!\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}z\,\mathrm{d}z'\tilde{S}(\mathbf{k}'-\mathbf{k},\omega) \\
&\times\ f_0(z)[1-f_0(z+y)]\,z\,[z-(z+y)\cos\theta]\ . \qquad (160)
\end{aligned}$$

Вследствие сильного вырождения электронов мы положили $\varepsilon' = \varepsilon = \varepsilon_\mathrm{F}$, $p' = p = p_\mathrm{F}$, $v' = v = v_\mathrm{F}$ во всех плавных функциях и распространили интеграл по z' до $-\infty$. Кроме того, мы положили $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}' = \hbar\mathbf{k}'$.

Интеграл по z берётся, что даёт

$$\begin{aligned}\tau_\kappa^{-1} &= \frac{T\varepsilon_\mathrm{F}p_\mathrm{F}n}{16\pi^5\hbar^5c^2}\int\!\!\int \mathrm{d}\Omega_\mathbf{p}\,\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{p}'}\,\frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'} V^2\left|\Phi_{\mathbf{p}'-\mathbf{p},\sigma\sigma'}\right|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\,y\,\tilde{S}(\mathbf{k}'-\mathbf{k},\omega)\\ &\times\;\frac{\pi^2+y^2-(\pi^2-y^2/2)\cos\theta}{1-e^{-y}}\;.\end{aligned}\qquad(161)$$

Вводя эффективные (безразмерные) статические структурные факторы

$$\begin{aligned}S_\sigma &= \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\omega\,\tilde{S}(\mathbf{k}'-\mathbf{k},\omega)\,\frac{y}{1-e^{-y}}\;,\\ \delta S_\kappa &= \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\omega\,\tilde{S}(\mathbf{k}'-\mathbf{k},\omega)\,\frac{y^3}{1-e^{-y}}\;,\end{aligned}\qquad(162)$$

формулу (161) можно переписать в более компактном виде

$$\tau_\kappa^{-1} = \frac{\varepsilon_\mathrm{F}p_\mathrm{F}n}{16\pi^5\hbar^4c^2}\int\!\!\int \mathrm{d}\Omega_\mathbf{p}\,\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{p}'}\sum_{\sigma\sigma'}\frac{V^2}{2}\left|\Phi_{\mathbf{p}'-\mathbf{p},\sigma\sigma'}\right|^2\left[(1-\cos\theta)\left(\pi^2S_\sigma-\frac{\delta S_\kappa}{2}\right)+\frac{3\,\delta S_\kappa}{2}\right].\qquad(163)$$

Аналогичные результаты могут быть получены для электронной электропроводности. В этом случае в левой части кинетического уравнения (149) следует оставить член, содержащий внешнюю силу $\mathbf{F} = e\mathbf{E}$, где $\mathbf{E}$ — внешнее электрическое поле, а e — заряд электрона. Поскольку электрическое поле предполагается слабым, в левую часть кинетического уравнения достаточно подставить равновесную функцию распределения f_0 (температура считается постоянной). Решение ищется в виде

$$f = f_0 + \delta f\;, \qquad \delta f = \tau_\sigma e(\mathbf{vE})\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\;,\qquad(164)$$

где постоянная величина τ_σ имеет смысл эффективного времени релаксации для процесса переноса заряда. По сравнению с теплопроводностью функция распределения по-другому зависит от z. Следует приравнять коэффициенты при z^0 (а не при z^1, как для теплопроводности) в разложении правой и левой частей уравнения по степеням z. Окончательно получим

$$\tau_\sigma^{-1} = \frac{\varepsilon_\mathrm{F}p_\mathrm{F}n}{16\pi^3\hbar^4c^2}\int\!\!\int \mathrm{d}\Omega_\mathbf{p}\,\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{p}'}\,\frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'} V^2\left|\Phi_{\mathbf{p}'-\mathbf{p},\sigma\sigma'}\right|^2(1-\cos\theta)\,S_\sigma\;.\qquad(165)$$

Наконец, рассмотрим электронную сдвиговую вязкость. В этом случае мы снова имеем дело с пространственно-неоднородной ситуацией, поскольку в системе имеется градиент макроскопической скорости $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. Для определённости считаем, что отлична от нуля лишь x-компонента скорости, которая зависит от y: $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \hat{x}u_x(y)$ (тем самым, удовлетворяется условие $\mathrm{div}\mathbf{u} = 0$). Здесь $\hat{x}$ — единичный вектор вдоль оси x. В левую часть кинетического уравнения подставим *локально* равновесную функцию распределения электронов

$$\left[1+\exp\left(\frac{\varepsilon-\mu-\mathbf{pu}}{T}\right)\right]^{-1}\;,\qquad(166)$$

а в качестве решения выберем

$$f_0 + \delta f \ , \qquad \delta f = \tau_\eta (\mathbf{v}\nabla(\mathbf{pu})) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \ , \tag{167}$$

где $\tau_\eta = \mathrm{const}$ — эффективное время релаксации по отношению к процессу переноса импульса. Энергетическая часть здесь такая же, как и в случае электропроводности, однако, угловая часть имеет более сложную структуру. Имеем $(\mathbf{v}\nabla(\mathbf{pu})) = v_\beta p_\alpha A_{\alpha\beta}$, где $A_{\alpha\beta} = \partial u_\alpha / \partial r_\beta$ — тензор частных производных скорости $\mathbf{u}$. При выбранной зависимости скорости от координат имеем $A_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha x}\, \delta_{\beta y}\, \partial u_x / \partial y$ и угловая зависимость левой части даётся разностью сферических функций $Y_{2,+2}$ и $Y_{2,-2}$. Чтобы приравнять коэффициенты именно при этой разности, домножим всё уравнение на $(\mathbf{v}\nabla(\mathbf{vu}))$ и проинтегрируем по углам вектора $\mathbf{v}$. В левой части получаем

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{p}} A_{\beta\alpha} v_\alpha v_\beta v_i p_k A_{ki} &= \frac{4\pi v^3 p}{15} A_{\beta\alpha} [A_{\alpha\beta} + A_{\beta\alpha} + \delta_{\alpha\beta} \mathrm{Sp}(A)] \\ &= \frac{4\pi v^3 p}{15} [\mathrm{Sp}(A^2) + \mathrm{Sp}(AA^T) + \mathrm{Sp}^2(A)] \ . \end{aligned} \tag{168}$$

В нашем конкретном случае $\mathrm{Sp}(AA^T) = (\partial u_x / \partial y)^2$, а следы остальных матриц равны нулю. Ясно, что выражение (168) не зависит от ориентации осей кристалла относительно координатной системы, в которой скорость имеет конкретное направление и зависимость от координат. Однако, в правой части после домножения на $(\mathbf{v}\nabla(\mathbf{vu}))$ и интегрирования по углам вектора $\mathbf{v}$ такая зависимость останется. Поэтому, как и в случае теплопроводности, необходимо усреднение по всевозможным "направлениям" тензора $A_{\beta\alpha}$ относительно осей кристалла. Для этого надо, зафиксировав систему координат, а также векторы $\mathbf{v}$ и $\mathbf{v}'$, усреднить по всевозможным матрицам $U^{-1} A_{\beta\alpha} U$, получающимся из исходной матрицы $A_{\beta\alpha}$ преобразованием подобия, индуцированным всевозможными ортогональными матрицами U с определителем, равным 1. Таким образом, мы должны усреднить комбинации $(v_\alpha v_\beta U^{-1}_{\alpha\gamma} A_{\gamma\delta} U_{\delta\beta})(v_{\alpha'} v_{\beta'} U^{-1}_{\alpha'\gamma'} A_{\gamma'\delta'} U_{\delta'\beta'})$ и $(v_\alpha v_\beta U^{-1}_{\alpha\gamma} A_{\gamma\delta} U_{\delta\beta})(v'_{\alpha'} v'_{\beta'} U^{-1}_{\alpha'\gamma'} A_{\gamma'\delta'} U_{\delta'\beta'})$ по всевозможным матрицам U. Из этой матричной записи видно, что преобразованием подобия можно действовать не на тензор A, а на тензоры $v_\alpha v_\beta$ и $v'_\alpha v'_\beta$. Для этих последних тензоров преобразование подобия сводится попросту к одновременному повороту векторов $\mathbf{v}$ и $\mathbf{v}'$ (отметим что $U^{-1} = U^T$). Для комбинации, содержащий 4 вектора $\mathbf{v}$ это есть усреднение по направлениям вектора $\mathbf{v}$, а для комбинации, содержащей два вектора $\mathbf{v}$ и два вектора $\mathbf{v}'$, следует сначала усреднить по азимутальному углу вектора $\mathbf{v}'$ в системе отсчёта с вектором $\mathbf{v}$, направленным вдоль полярной оси, а затем по направлениям вектора $\mathbf{v}$, т.е. этой полярной оси. В результате получим следующие усреднения для этих двух случаев (с учётом того, что только $A_{xy} \neq 0$):

$$\begin{aligned} &\int \frac{\mathrm{d}\Omega'}{4\pi} \sin^4\theta' \cos^2\phi' \sin^2\phi' = \frac{1}{15} \ , \\ &\int \frac{\mathrm{d}\Omega'}{4\pi} \frac{\mathrm{d}\phi}{2\pi} \sin^2\theta' \cos\phi' \sin\phi' (\cos\theta \sin\theta' \cos\phi' + \sin\theta \cos\phi \sin\phi' + \sin\theta \sin\phi \cos\theta' \cos\phi') \\ \times \quad &(\cos\theta \sin\theta' \sin\phi' - \sin\theta \cos\phi \cos\phi' + \sin\theta \sin\phi \cos\theta' \sin\phi') = \frac{1}{15} \left(\frac{3}{2} \cos^2\theta - \frac{1}{2} \right) \ . \end{aligned} \tag{169}$$

Здесь θ, как и ранее — угол между $\mathbf{v}$ и $\mathbf{v}'$, θ' и ϕ' — углы вектора $\mathbf{v}$ в исходной системе (xyz), а ϕ — угол $\mathbf{v}'$ в системе $(x'y'z')$ с полярной осью z' вдоль $\mathbf{v}$ и осью x', лежащей в плоскости xy. В итоге получим

$$\tau_\eta^{-1} = \frac{\varepsilon_\mathrm{F} p_\mathrm{F} n}{16\pi^3\hbar^4 c^2} \int\int \mathrm{d}\Omega_\mathbf{p}\, \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{p}'} \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} V^2 \left|\Phi_{\mathbf{p}'-\mathbf{p},\sigma\sigma'}\right|^2 \frac{3}{2}(1-\cos^2\theta)\, S_\sigma \ . \tag{170}$$

В заключение этого подраздела покажем, как кинетические коэффициенты выражаются через времена релаксации τ. Поток тепла

$$\mathbf{j}_T = \int \frac{2\mathrm{d}\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \delta f(\varepsilon-\mu)\mathbf{v} = -\kappa\nabla T \ , \tag{171}$$

где множитель 2 в числителе учитывает 2 направления спина электронов, а κ — теплопроводность. Подставляя сюда δf из уравнения (158), получим

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_T &= \tau_\kappa \int \frac{2\mathrm{d}\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{(\varepsilon-\mu)^2}{T} \mathbf{v}(\mathbf{v}\nabla T)\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon} \\ &= \tau_\kappa \nabla T \frac{T}{3\pi^2\hbar^3} \int \mathrm{d}p p^2 v^2 \frac{(\varepsilon-\mu)^2}{T^2}\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon} = -\tau_\kappa\nabla T \frac{T\varepsilon_\mathrm{F} p_\mathrm{F} v_\mathrm{F}^2}{9\hbar^3c^2} \ , \end{aligned} \tag{172}$$

откуда

$$\kappa = \frac{\tau_\kappa T \varepsilon_\mathrm{F} p_\mathrm{F} v_\mathrm{F}^2}{9\hbar^3 c^2} \ . \tag{173}$$

Аналогичным образом найдём плотность электрического тока $\mathbf{j}_E$ и электропроводность σ:

$$\mathbf{j}_E = \sigma\mathbf{E} = \tau_\sigma \int \frac{2\mathrm{d}\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} e^2 \mathbf{v}(\mathbf{v}\mathbf{E})\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon} = \tau_\sigma \mathbf{E}\frac{e^2\varepsilon_\mathrm{F} p_\mathrm{F} v_\mathrm{F}^2}{3\pi^2\hbar^3c^2} \ , \qquad \sigma = \frac{e^2\tau_\sigma\varepsilon_\mathrm{F} p_\mathrm{F} v_\mathrm{F}^2}{3\pi^2\hbar^3c^2} \ . \tag{174}$$

В случае вязкости нас интересует плотность потока x-компоненты импульса вдоль оси y, σ_{xy}:

$$\sigma_{xy} = -\eta\frac{\partial u_x}{\partial y} = \tau_\eta \int \frac{2\mathrm{d}\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} v_y p_x (\mathbf{v}\nabla(\mathbf{p}\mathbf{u}))\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon} = -\tau_\eta \frac{\partial u_x}{\partial y}\frac{\varepsilon_\mathrm{F} p_\mathrm{F}^3 v_\mathrm{F}^2}{15\pi^2\hbar^3c^2} \ , \qquad \eta = \frac{\tau_\eta\varepsilon_\mathrm{F} p_\mathrm{F}^3 v_\mathrm{F}^2}{15\pi^2\hbar^3c^2} \ , \tag{175}$$

где η — сдвиговая вязкость. Полученные формулы можно несколько упростить, если учесть, что

$$\frac{\varepsilon_\mathrm{F} p_\mathrm{F} v_\mathrm{F}^2}{3\pi^2\hbar^3c^2} = \frac{p_\mathrm{F}^3 c^2}{3\pi^2\hbar^3\varepsilon_\mathrm{F}} = \frac{n_e}{m_e^*} \ , \tag{176}$$

где n_e — концентрация электронов, а $m_e^* = \varepsilon_\mathrm{F}/c^2$ — эффективная масса электрона. Тогда

$$\kappa = \frac{\pi^2 T n_e \tau_\kappa}{3m_e^*} \ , \qquad \sigma = \frac{e^2 n_e \tau_\sigma}{m_e^*} \ , \qquad \eta = \frac{p_\mathrm{F} v_\mathrm{F} n_e \tau_\eta}{5} \ . \tag{177}$$

1.8.2 Численный расчёт кинетических коэффициентов

Для численного расчёта кинетических коэффициентов необходимо вычислить четырёхкратные интегралы, возникшие в формулах (163), (165) и (170). Обсудим 2 величины, входящие в эти выражения: квадрат модуля матричного элемента элементарного электрон-ионного взаимодействия и эффективный статический структурный фактор.

В качестве электрон-ионного потенциала выберем потенциал кулоновского взаимодействия, экранированный поляризацией вырожденного релятивистского электронного газа. Соответствующий матричный элемент имеет вид

$$\frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'} V^2 \left|\Phi_{\hbar\mathbf{q},\sigma\sigma'}\right|^2 = \frac{16\pi^2 Z^2 e^4 |F(q)|^2}{q^4|\epsilon(q)|^2}\left(1-\frac{\hbar^2c^2q^2}{4\varepsilon_\mathrm{F}^2}\right)\ , \tag{178}$$

где $\epsilon(q)$ — статическая продольная диэлектрическая проницаемость электронного газа, Z — зарядовое число иона, а $F(q)$ — электромагнитный формфактор, учитывающий конечность размеров атомного ядра. Кроме того, в эту формулу можно вставить множитель, приближённо учитывающий неборновские поправки, важные при больших Z. Этот множитель был предложен Яковлевым [104].

Достаточно любопытна история использования различных функций в качестве (эффективных) структурных факторов. Сразу следует заметить, что именно эта величина отвечает за специфику транспортных процессов в конкретной (многочастичной) ионной системе. При наличии одного бесконечно тяжелого иона имеем $\tilde{S}(\mathbf{q},\omega)=\delta(\omega)$, $S_\sigma=1$, $\delta S_\kappa=0$. В некоррелированной системе бесконечно тяжелых примесей, где любые конфигурации ионов равновероятны, $\tilde{S}(\mathbf{q},\omega)=\delta(\omega)(1-\delta_{\mathbf{q},0})$, $S_\sigma=1-\delta_{\mathbf{q},0}$, и $\delta S_\kappa=0$. Множитель $(1-\delta_{\mathbf{q},0})$ учитывает, что при бесконечно больших прицельных параметрах система выглядит электронейтральной, и рассеяние отсутствует. Если же бесконечно тяжелые ионы образуют кристаллическую решётку, то $S_\sigma=\sum_{\mathbf{G}\neq 0}\delta_{\mathbf{qG}}$, и снова $\delta S_\kappa=0$. Всякий раз, когда мы имеем дело с упругим рассеянием, и $\delta S_\kappa=0$, выполняется закон Видемана-Франца: $\tau_\sigma=\tau_\kappa$, и $\kappa=\pi^2 T\sigma/3e^2$.

В пространственно-однородных системах (жидкостях, газах) структурный фактор зависит только от модуля переданного импульса. Тогда кинетические коэффициенты являются изотропными, и никаких усреднений по направлениям ∇T и т. п., использованных в разделе 8.1, не требуется. При этом вместо четырёхкратного интеграла остаётся однократный, например, для теплопроводности

$$\begin{aligned}\tau_\kappa^{-1} &= \frac{4\varepsilon_\mathrm{F} p_\mathrm{F} n Z^2 e^4}{\pi\hbar^4 c^2 k_\mathrm{F}^4}\int_0^{2k_\mathrm{F}}\frac{\mathrm{d}q q^3}{q^4|\epsilon(q)|^2}\left(1-\frac{\hbar^2c^2q^2}{4\varepsilon_\mathrm{F}^2}\right)\left\{\left[\pi^2 S_\sigma(q)-\frac{\delta S_\kappa(q)}{2}\right]+\frac{3k_\mathrm{F}^2}{q^2}\delta S_\kappa(q)\right\}\\ &= \frac{4\pi m_e^* n Z^2 e^4}{k_\mathrm{F}^3\hbar^3}\int_0^{2k_\mathrm{F}}\frac{\mathrm{d}q q^3}{q^4|\epsilon(q)|^2}\left(1-\frac{\hbar^2c^2q^2}{4\varepsilon_\mathrm{F}^2}\right)\left\{S_\sigma(q)+\frac{1}{\pi^2}\left[\frac{3k_\mathrm{F}^2}{q^2}-\frac{1}{2}\right]\delta S_\kappa(q)\right\}\ .\end{aligned} \tag{179}$$

Динамический структурный фактор кулоновской жидкости пока неизвестен. С другой стороны, мы видим [учитывая асимптотику (148)], что в классической области $T \gg \hbar\omega_p$ переданная при столкновении энергия много меньше, чем T. В этом случае в формулах (162) функции, меняющиеся на масштабах температуры, можно вынести за знак интеграла при значении $\omega=0$. При этом $\delta S_\kappa \to 0$, а S_σ превращается в статический структурный фактор $S(q)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\omega\tilde{S}(q,\omega)$. Поэтому все авторы, изучавшие кинетические коэффициенты в кулоновской жидкости (Флауэрс и Ито [29], Яковлев и Урпин [103], Ито и др. [42]), использовали статический структурный фактор, известный из моделирования методом Монте-Карло. Позднее Потехин и др. [82] дополнительно учли влияние на ионный структурный фактор поляризуемости электронного фона.

Обсудим теперь выбор структурного фактора в кристалле. Прежде всего отметим, что упругая часть структурного фактора кристалла $S'(\mathbf{q})$ (брэгговская дифракция), описываемая формулой (94), не даёт вклад в процессы рассеяния, ограничивающие потоки заряда, тепла или импульса электронов. Формальная причина заключается в невозможности сохранить одновременно энергию и импульс. Такие (упругие) процессы должны были бы происходить без передачи энергии, но с передачей решётке импульса, равного $\hbar\mathbf{G}$, где $\mathbf{G}$ — некоторый вектор обратной решётки. Поскольку начальное и конечное состояния электрона лежат на фермиевской сфере, то процессы с такой передачей импульса возможны лишь для электронов, лежащих на пересечении сферы Ферми с плоскостями, перпендикулярными векторам обратной решётки и делящими эти векторы пополам. Как мы знаем, эти плоскости как раз и ограничивают зоны Бриллюэна. В то же время на границах зон Бриллюэна дисперсионные кривые электронов отклоняются от соответствующих зависимостей для свободных электронов и содержат щели. Брэгговская дифракция, таким образом, должна была бы происходить с передачей энергии, равной ширине щели, что противоречит требованию упругости процесса.

В действительности именно брэгговская дифракция, испытываемая частицей в кристалле, приводит к перенормировке спектра и образованию щелей в дисперсионном соотношении. Электроны, участвующие в кинетических процессах в кристаллах, — это квазичастицы, спектр которых уже содержит щели, и которые не испытывают брэгговской дифракции.

Перейдём к неупругой части структурного фактора S''. Вплоть до недавнего времени в расчётах использовался однофононный динамический структурный фактор (144). Это относится к работе Флауэрса и Ито [29] и к более поздним работам Яковлева и Урпина [103] и Райха и Яковлева [88]. Во всех указанных работах не учитывался и фактор Дебая–Уоллера, имеющийся в формуле (144). Роль фактора Дебая–Уоллера была изучена Ито и др. [43], которые показали, что он важен при температурах, близких к температуре плавления кулоновского кристалла, или при достаточно высоких плотностях, при которых особенно сильны нулевые колебания ионов в кристалле. Позже Байко и Яковлев [5, 6] провели детальные монте-карловские расчёты электронных кинетических коэффициентов в плотном кристаллическом веществе с учётом формфактора ядер и фактора Дебая–Уоллера; они аппроксимировали свои результаты простыми аналитическими выражениями. Эти расчёты находились в разумном согласии с результатами Ито и др. [43].

Кратко опишем расчёты в однофононном приближении. Подставляя выражение (144) в (162), получим

$$\begin{aligned} S_\sigma(\mathbf{q}) &= e^{-2W(q)} \frac{\hbar^2}{MT} \sum_\nu (\mathbf{q}\mathbf{e}_{\mathbf{Q}\nu})^2 \frac{e^{\hbar\omega_{\mathbf{Q}\nu}/T}}{(e^{\hbar\omega_{\mathbf{Q}\nu}/T}-1)^2} , \\ \delta S_\kappa(\mathbf{q}) &= e^{-2W(q)} \frac{\hbar^4}{MT^3} \sum_\nu (\mathbf{q}\mathbf{e}_{\mathbf{Q}\nu})^2 \frac{\omega^2_{\mathbf{Q}\nu} e^{\hbar\omega_{\mathbf{Q}\nu}/T}}{(e^{\hbar\omega_{\mathbf{Q}\nu}/T}-1)^2} . \end{aligned} \tag{180}$$

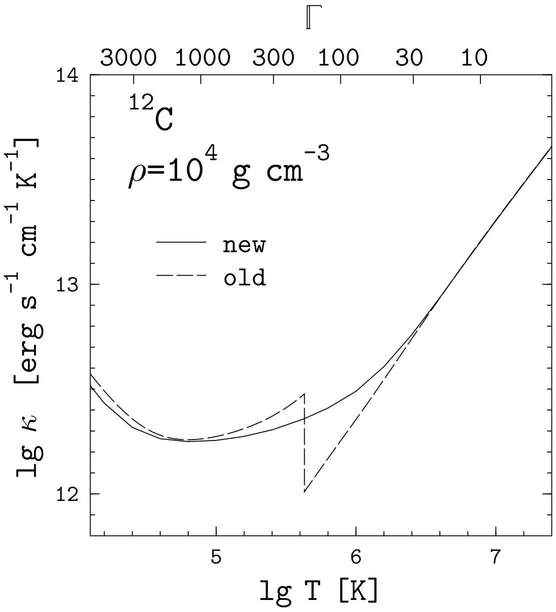

Рис. 10: Теплопроводность углеродной плазмы при плотности $\rho = 10^4$ г см$^{-3}$ как функция температуры (нижняя горизонтальная шкала) или кулоновского параметра неидеальности Γ (верхняя горизонтальная шкала). Старые расчёты изображены штрихами, а новые — сплошной линией (см. текст).

Здесь векторы $\mathbf{q}$ и $\mathbf{Q}$, как обычно, отличаются вектором обратной решётки, причём вектор $\mathbf{Q}$ лежит в 1-ой зоне Бриллюэна. Оставшийся четырёхкратный интеграл, определяющий время релаксации, в принципе, следует определять численно, например, методом Монте-Карло, что и делалось в работах [5, 6]. Однако, вполне разумные результаты получаются и в том случае, если структурный фактор искусственно изотропизовать с помощью формальной замены

$$\sum_\nu (\mathbf{q}\mathbf{e}_{\mathbf{Q}\nu})^2 f(\omega_{\mathbf{Q}\nu}) \to q^2 \langle f(\omega_{\mathbf{Q}\nu})\rangle_{\rm ph} \ , \tag{181}$$

предложенной в работе Райха и Яковлева [88]. Угловые скобки означают усреднение по фононному спектру, определённое в (60). При этом, как и в жидкости, вместо четырёхкратного интеграла остаётся однократный (179), причём эффективные статические структурные факторы даются формулами (180), в которых сделана замена (181).

Кинетические коэффициенты, рассчитанные в этих предположениях (однофононный структурный фактор в кристалле и полный статический структурный фактор в жидкости без учёта неборновских поправок [104] и влияния поляризуемости электронного фона на ионный структурный фактор [82]), изображены на рис. 10—13 длинными штрихами и помечены “old”. Мы видим, что эти расчёты дают большие скачки (в 2–4 раза) транспортных коэффициентов в точке плавления $\Gamma = \Gamma_m$. Такие скачки “старых” кинетических коэффициентов имеют место в широком диапазоне плотностей и химических составов [44], несмотря на то, что многие физические характеристики ионной жидкости и ионного кристалла очень близки. Это свидетельствует о том, что старая теория не вполне адекватно описывает реальную ситуацию.

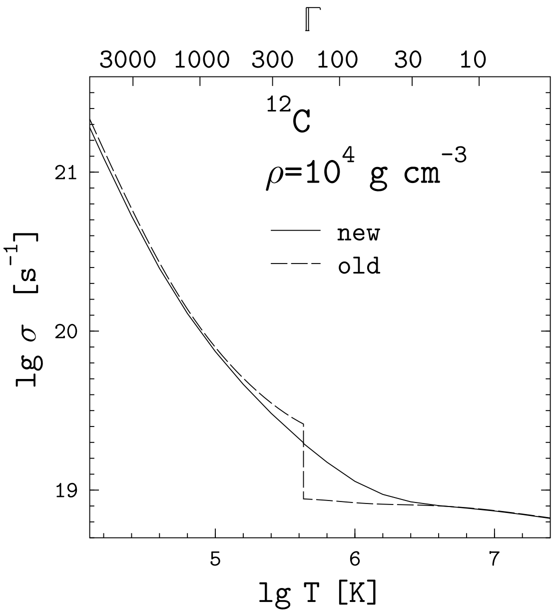

Рис. 11: То же, что и на рис. 10, но для электропроводности.

Необходимые изменения были предложены недавно Байко и др. [7]. Во-первых, в кристаллическом режиме были учтены процессы рассеяния электрона с поглощением или излучением произвольного числа фононов. Для этого вместо однофононного был использован полный динамический структурный фактор (95). Численное четырёхкратное интегрирование с точным анизотропным структурным фактором не проводилось. Многофононные процессы рассматривались в модели ГР1. Даже в этой простой модели вычислить эффективные статические структурные факторы до конца, к сожалению, не удаётся. Имеем [ср. (120) и (101)]:

$$e^{2W(q)}S_\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}t y e^{-i\omega t}}{1-e^{-y}}\left\{\exp\left[\frac{\hbar q^2}{2M}\left\langle\frac{1}{\omega_{\mathbf{Q}\nu}}\frac{\cos\left[\omega_{\mathbf{Q}\nu}(t+i\hbar/2T)\right]}{\mathrm{sh}\left(\hbar\omega_{\mathbf{Q}\nu}/2T\right)}\right\rangle_{\mathrm{ph}}\right]-1\right\}\ ,$$
$$e^{2W(q)}\delta S_\kappa = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}t y^3 e^{-i\omega t}}{1-e^{-y}}\left\{\exp\left[\frac{\hbar q^2}{2M}\left\langle\frac{1}{\omega_{\mathbf{Q}\nu}}\frac{\cos\left[\omega_{\mathbf{Q}\nu}(t+i\hbar/2T)\right]}{\mathrm{sh}\left(\hbar\omega_{\mathbf{Q}\nu}/2T\right)}\right\rangle_{\mathrm{ph}}\right]-1\right\} \quad (182)$$

($y = \hbar\omega/T$). Путь интегрирования по t можно сместить вниз в плоскости комплексного t, так чтобы выражение $t + i\hbar/2T$ оказалось вещественным. После этого интеграл по ω берётся:

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\omega e^{-i\omega t}\frac{y e^{-y/2}}{1-e^{-y}} = \frac{\pi T/\hbar}{2\,\mathrm{ch}^2\left(\pi t T/\hbar\right)}\ ,$$
$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\omega e^{-i\omega t}\frac{y^3 e^{-y/2}}{1-e^{-y}} = \frac{\pi^3 T}{\hbar}\frac{1-2\,\mathrm{sh}^2\left(\pi t T/\hbar\right)}{\mathrm{ch}^4\left(\pi t T/\hbar\right)}\ , \quad (183)$$

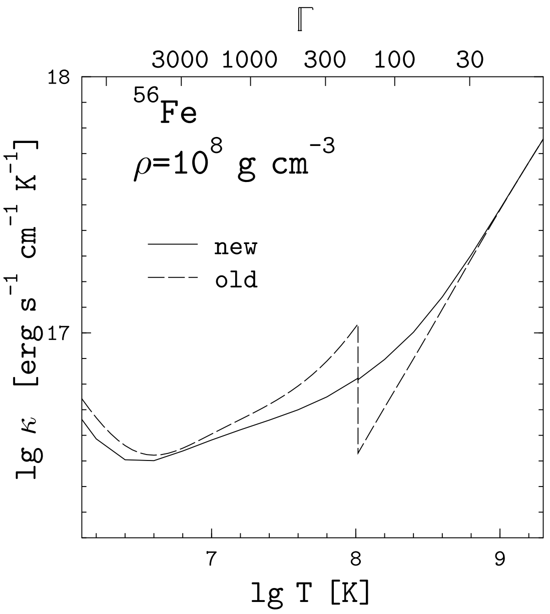

Рис. 12: То же, что и на рис. 10, но для железной плазмы при $\rho = 10^8$ г см$^{-3}$.

в результате чего получаем

$$S_\sigma = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}x}{\operatorname{ch}^2 x} e^{-2W(q)} K(q,T,t)\ , \tag{184}$$

$$\delta S_\kappa = \pi^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \frac{1-2\operatorname{sh}^2 x}{\operatorname{ch}^4 x} e^{-2W(q)} K(q,T,t)\ , \tag{185}$$

где $x = \pi T t/\hbar$, а

$$K(q,T,t) = \exp\left[\frac{\hbar q^2}{2M}\left\langle \frac{\cos(\omega_{\mathbf{Q}\nu} t)}{\omega_{\mathbf{Q}\nu}\operatorname{sh}(\hbar\omega_{\mathbf{Q}\nu}/2T)}\right\rangle_{\rm ph}\right] - 1\ . \tag{186}$$

Эффективные структурные факторы (184), (185) были рассчитаны для ОЦК решётки и аппроксимированы следующими аналитическими выражениями [84]

$$\begin{aligned} S_\sigma(q) &= e^{-2W(q)}\left[e^{2W_1(q)} - 1\right], \\ \delta S_\kappa(q) &= \alpha_1 \left[\frac{91\,\eta^2\, e^{-2W(q)}}{(1+111.4\eta^2)^2} + \frac{0.101\,\eta^4}{(0.06408+\eta^2)(0.001377+\eta^2)^{3/2}}\right], \\ W_1(q) &= \frac{\alpha_1\, u_{-2}\,\eta^2}{2\sqrt{\eta^2 + (u_{-2}/117)^2}}\ , \end{aligned} \tag{187}$$

где $\eta = 1/\theta = T/T_p$, и $\alpha_1 = q^2 a^2/3\Gamma\eta$. Данные выражения применимы в диапазоне $0.001 \le \eta \le 10$ и $0 \le \alpha_1 \le 0.3$, достаточном для расчёта транспортных коэффициентов.

Точно так же упрощаются времена релаксации для электропроводности и сдвиговой вязкости:

$$\begin{aligned} \tau_\sigma^{-1} &= \frac{4\pi m_e^* n Z^2 e^4}{k_{\rm F}^3 \hbar^3} \int_0^{2k_{\rm F}} \frac{\mathrm{d}q q^3}{q^4|\epsilon(q)|^2}\left(1 - \frac{\hbar^2 c^2 q^2}{4\varepsilon_{\rm F}^2}\right) S_\sigma(q)\ , \\ \tau_\eta^{-1} &= \frac{4\pi m_e^* n Z^2 e^4}{k_{\rm F}^3 \hbar^3} 3\int_0^{2k_{\rm F}} \frac{\mathrm{d}q q^3}{q^4|\epsilon(q)|^2}\left(1 - \frac{q^2}{4k_{\rm F}^2}\right)\left(1 - \frac{\hbar^2 c^2 q^2}{4\varepsilon_{\rm F}^2}\right) S_\sigma(q)\ . \end{aligned} \tag{188}$$

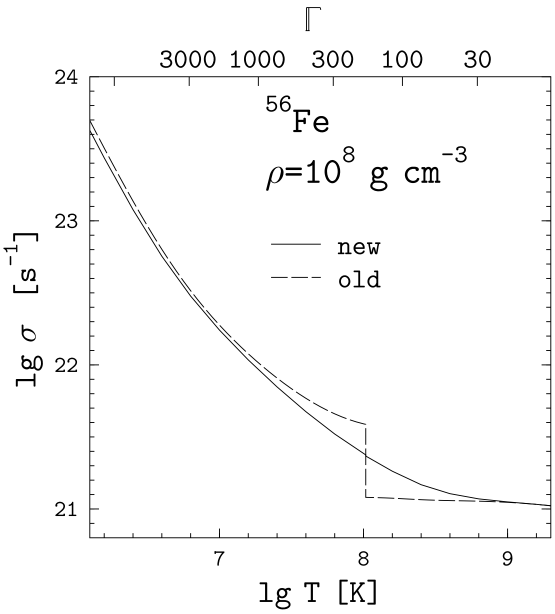

Рис. 13: То же, что на рис. 12, но для электропроводности.

Таким образом, с помощью аппроксимационных выражений (187) расчёт эффективных времён релаксации τ в кристалле сводится к однократному интегрированию по q, которое несложно выполнить численно. Для учёта того, что структурный фактор в модели ГР1 переоценивает вероятность рассеяния с малыми переданными импульсами (см. рис. 8), нижний предел интегрирования по q в формулах (179) и (188) брался равным не 0, а $q_{\rm B}$.

Кроме того, следуя [7], отметим, что статический структурный фактор ионов, используемый в жидкости, при исследовании процессов электронного рассеяния может нуждаться в модификации. Появляющиеся уже в жидкости квазиупорядоченные структуры могут приводить к особенностям в дисперсионном соотношении электронов и подавлять квазибрэгговское рассеяние (естественным образом включённое в полный структурный фактор кулоновской жидкости). Авторы работы [7] предложили приближённый способ учёта этого эффекта, сводящийся к вычитанию из статического структурного фактора жидкости величины $S'(\mathbf{k})$, формула (94), усреднённой по углам вектора $\mathbf{k}$.

Соответствующие расчёты электро- и теплопроводности были проведены в работе Потехина и др. [84]. Эти результаты изображены на рис. 10-13 сплошными линиями (как и в случае старых результатов, не учтены неборновские поправки и модификация структурного фактора поляризуемостью электронного фона). Видно, что изменения как в жидкости, так и в кристалле существенно влияют на кинетические свойства электронов вблизи точки плавления и делают скачки транспортных коэффициентов практически незаметными. Такая ситуация имеет место в широком диапазоне плотностей и химических составов. Тем не менее, большие скачки транспортных коэффициентов остаются в случае квантового плавления $T_m < T_p$. Однако, в этом режиме расчёт кинетических коэффициентов в жидкости, основанный на классическом статическом структурном факторе, не может считаться надёжным.

Некоторое отличие новых и старых результатов при низких температурах обусловлено не вполне аккуратным определением низкотемпературной асимптотики теплопроводности в работе [5].

В работе [84] результаты численных расчётов были аппроксимированы аналитическими формулами с возможностью учёта неборновской поправки. Эти формулы имеют следующий вид:

$$
\begin{aligned}
\sigma &= \frac{n_e e^2}{m_e^* \nu_\sigma}\,, \quad \kappa = \frac{\pi^2 T n_e}{3 m_e^* \nu_\kappa}\,, \\
\nu_{\sigma,\kappa} &= \frac{4\pi Z^2 e^4 n}{p_\mathrm{F}^2 v_\mathrm{F}}\,\Lambda_{\sigma,\kappa}\,, \\
\Lambda_{\sigma,\kappa}^{\mathrm{fit}} &= \left[\Lambda_1(s,w) - \frac{v_\mathrm{F}^2}{c^2}\Lambda_2(s,w)\right] G_{\sigma,\kappa}(\eta,\beta) D(\eta), \\
s &= \frac{q_\mathrm{s}^2}{(2k_\mathrm{F})^2}, \quad w = w(2k_\mathrm{F}), \quad w(q) = u_{-2}\left(\frac{q}{q_\mathrm{D}}\right)^2 \left(1+\frac{\beta}{3}\right), \quad \beta = \frac{\pi Z e^2 v_\mathrm{F}}{\hbar c^2}, \\
q_\mathrm{s}^2 &= (q_i^2 + k_\mathrm{TF}^2) e^{-\beta}, \quad q_i^2(\Gamma) = q_\mathrm{D}^2\,(1+0.06\,\Gamma) e^{-\sqrt{\Gamma}}, \quad q_\mathrm{D} = \frac{\sqrt{3\Gamma}}{a}, \quad \frac{k_\mathrm{TF}}{2k_\mathrm{F}} = \sqrt{\frac{e^2}{\pi\hbar v_\mathrm{F}}} \\
G_\sigma(\eta,\beta) &= \frac{\eta(1+0.122\beta^2)}{\sqrt{\eta^2+\eta_0^2}}\,, \quad \eta_0 = \frac{0.19}{Z^{1/6}}\,, \\
G_\kappa(\eta,\beta) &= G_\sigma(\eta,\beta) + 0.0105(1-Z^{-1})\left[1+\beta\left(\frac{v_\mathrm{F}}{c}\right)^3\right] \frac{\eta}{(\eta^2+0.0081)^{3/2}}, \\
D(\eta) &= \exp\left(-\alpha_0 u_{-1}\, e^{-9.1\eta}/4\right), \quad \alpha_0 = \frac{4k_\mathrm{F}^2 a^2}{3\Gamma\eta}, \\
2\Lambda_1(s,w) &= \ln\frac{s+1}{s} + \frac{s}{s+1}\,(1-e^{-w}) - (1+sw)\, e^{sw}\left[\mathrm{E}_1(sw) - \mathrm{E}_1(sw+w)\right], \\
2\Lambda_2(s,w) &= \frac{e^{-w}-1+w}{w} - \frac{s^2}{s+1}(1-e^{-w}) - 2s\ln\frac{s+1}{s} \\
&+ s(2+sw)\, e^{sw}\left[\mathrm{E}_1(sw) - \mathrm{E}_1(sw+w)\right],
\end{aligned}
$$

где $E_1(x) = \int_x^\infty y^{-1} e^{-y}\,\mathrm{d}y$ — интегральная показательная функция. Результаты в борновском приближении получаются, если положить $\beta = 0$. При непосредственном использовании этих формул полезно иметь ввиду следующие асимптотики ($s \ll 1$ и $s \ll w^{-1}$)

$$
\Lambda_1(s\to 0, w) = \frac{1}{2}\left[E_1(w) + \ln w + \gamma\right], \quad \Lambda_2(s\to 0, w) = \frac{e^{-w}-1+w}{2w},
$$

где $\gamma = 0.5772\ldots$ — постоянная Эйлера. В предельном случае $w \ll 1$

$$
\begin{aligned}
\Lambda_1(s, w \ll 1) &\approx w\left(\frac{2s+1}{2s+2} - s\,\ln\frac{s+1}{s}\right), \\
\Lambda_2(s, w \ll 1) &\approx w\left(\frac{1-3s-6s^2}{4s+4} + \frac{3}{2}\,\ln\frac{s+1}{s}\right).
\end{aligned}
$$

В обратном предельном случае $w \gg 1$ имеем

$$
\Lambda_1(s, w \gg 1) = \frac{1}{2}\left(\ln\frac{s+1}{s} - \frac{1}{s+1}\right), \quad \Lambda_2(s, w \gg 1) = \frac{2s+1}{2s+2} - s\,\ln\frac{s+1}{s}.
$$

Кроме того, созданы компьютерные программы, позволяющие рассчитать электро- и теплопроводность как по точным (численное интегрирование), так и по аналитическим аппроксимационным формулам.

1.9 Заключение

Подведём итоги главы. В гармоническом приближении детально рассмотрены основные свойства кулоновских кристаллов ионов, погружённых в несжимаемый однородный фон электронов, компенсирующий полный заряд. Для простых кристаллов исследованы свойства спектра фононов, а также рассчитаны основные термодинамические функции ОЦК, ГЦК и ГПУ решёток.

Подробно изучены парная корреляционная функция и структурный фактор ОЦК кристалла. Проведено сравнение корреляционной функции, полученной аналитическими методами и методом Монте-Карло. Результаты прекрасно согласуются между собой в диапазоне межионных расстояний $1.5 \lesssim r/a \lesssim 7$, где a — радиус ионной сферы. При меньших r, вплоть до 1.1—1.5 a, более надёжными являются монте-карловские результаты, а при бóльших — аналитические. Показано, что с помощью гармонической корреляционной функции можно в замкнутом виде просуммировать ряд ангармонических поправок к кулоновской энергии системы, представляющий собой часть полного ряда ангармонических поправок. Исследован статический структурный фактор кристалла и показано, что его неупругая часть содержит сингулярности в положениях брэгговских пиков, связанные с однофононным рассеянием. Тип сингулярностей оказывается разным для классического и квантового кристаллов.

Результаты исследования структурного фактора использованы для расчёта электронных транспортных коэффициентов в веществе коры нейтронной звезды или ядра белого карлика, что представляет большой астрофизический интерес. В этих системах электроны образуют почти идеальный слабо поляризуемый ферми-газ, а ионы — сильно неидеальную кулоновскую систему. Получены общие формулы для тепло- и электропроводности, а также для сдвиговой вязкости электронов, рассеивающихся на ионах, с учётом многофононных процессов в кристаллической фазе и эффекта подавления квазиупругого рассеяния в жидкой фазе. Проведены подробные численные расчёты тепло- и электропроводности для жидкой и кристаллической фаз ионной компоненты вещества в широком диапазоне плотностей, температур и химических составов. Показано, что учёт многофононных процессов в кристалле и подавления квазиупругого рассеяния в жидкости приводит к практически полному исчезновению скачков кинетических коэффициентов в точке плавления кулоновского кристалла (такие скачки получались во всех проводившихся ранее расчётах кинетических коэффициентов в плотном звёздном веществе). Новые результаты представляются более естественными с физической точки зрения, если принять во внимание то, что термодинамические функции кулоновских систем слабо меняются при переходе через точку плавления.

Глава 2

Кулоновский кристалл в магнитном поле

2.1 Введение

В этой главе изучены свойства кулоновских кристаллов, помещённых во внешнее однородное магнитное поле. Данная задача приобрела особую актуальность в связи с ассоциацией источников мягких повторяющихся гамма всплесков (SGR — soft gamma repeater) с магнитарами — нейтронными звёздами с магнитными полями, превосходящими критическое поле $B_e = 4.4 \cdot 10^{13}$ Гс. Например, для SGR 1806-20 магнитное поле, определённое по замедлению вращения, составляет $\sim 8 \cdot 10^{14}$ Гс [48].

Исследованиям трёхмерных кулоновских кристаллов в магнитных полях посвящено очень мало работ. Следует отметить работу Усова и др. [98] и 2 работы Нагаи и Фукуямы [67, 68]. Усовым и др. впервые получены уравнения собственных колебаний кулоновского кристалла в магнитном поле, качественно исследован спектр колебаний, проведена диагонализация гамильтониана кристалла. Изучены асимптотические зависимости от температуры и магнитного поля теплоёмкости и магнитного момента кристалла, а также среднеквадратичной амплитуды смещения иона из положения равновесия. Обнаружено наличие мягкой фононной моды с частотой $\nu \propto k^2$, приводящей при низких температурах к теплоёмкости $C \propto T^{3/2}$ вместо дебаевского закона $C \propto T^3$. Отмечена зависимость энергии кристалла от ориентации магнитного поля относительно его осей, а также увеличение стабильности кристалла в магнитном поле, связанное с уменьшением среднеквадратичной амплитуды отклонения иона из положения равновесия. Кроме того, рассмотрена диэлектрическая проницаемость и исследована роль собственного поперечного электромагнитного поля кристалла. К недостаткам работы [98] можно отнести полукачественный характер основных её результатов и тот факт, что авторы ограничились рассмотрением предельных случаев (очень сильные магнитные поля и т.п.).

Работа [67] посвящена сравнению энергий объёмно- и гранецентрированного кубических (ОЦК и ГЦК) кристаллов при *нулевой* температуре в магнитном поле. Энергия кристалла складывается из электростатической (маделунговой) энергии и энергии нулевых колебаний фононов (ангармонические и обменные члены роли не играют). В такой постановке задачи электростатическая энергия не зависит от величины поля, т.к. по предположению минимуму энергии соответствует одна из названных решёток. Энергия нулевых колебаний зависит от поля, поскольку магнитное поле приводит к модификации фононных мод. В отсутствие поля минимуму энергии соответствует ОЦК решётка — это утверждение верно как с учётом, так и без учёта энергии нулевых колебаний. Нагаи и Фукуяма показали, что при достаточно сильных магнитных полях и относительно высоких плотностях ($r_s < 275$; напомним, что $\sqrt{r_s} = \sqrt{a/a_\text{B}} = \sqrt{3}Z^2e^2/\hbar\omega_p a$, где ω_p — ионная плазменная частота, $a = (3/4\pi n)^{1/3}$, n — концентрация ионов, $a_\text{B} = \hbar^2/MZ^2e^2$ — ионный боровский радиус) энергия нулевых колебаний кристалла ведёт себя таким образом, что минимуму полной энергии соответствует ГЦК решётка. Отметим в этой связи, что авторы не исследовали зависимость энергии нулевых колебаний от направления магнитного поля и выполнили все расчёты при фиксированном направлении поля в одном из направлений высокой симметрии. Их выбор направления поля для ОЦК решётки при этом не является оптимальным с точки зрения её энергии. Более того, выигрыш энергии ОЦК решётки, полученный за счёт выбора более оптимального направления магнитного поля, оказывается при больших полях того же порядка, что и разница между энергиями нулевых колебаний ОЦК и ГЦК кристаллов. Однако, вопрос о влиянии зависимости энергии нулевых колебаний от направления поля на структурный переход от ОЦК к ГЦК в диссертации не исследован.

В работе [68] исследован аналогичный структурный переход между ОЦК и гексагональной плотно упакованной (ГПУ) решётками. В данном случае ГПУ структура энергетически более выгодна при $r_s < 10700$ и примерно тех же значениях магнитных полей. Этот результат представляется более оправданным, чем структурный переход ОЦК—ГЦК, поскольку разница между энергиями нулевых колебаний ОЦК и ГПУ кристаллов в несколько раз превышает выигрыш энергии ОЦК решётки за счёт выбора оптимального направления магнитного поля (в [68], как и в [67], выбор направления поля в ОЦК не соответствует минимуму энергии нулевых колебаний). Попутно описано поведение всех 6 мод фононного спектра ГПУ решётки в магнитном поле. Кроме того, количественно проанализировано поведение продольного и поперечного отклонений ионов из положения равновесия для ОЦК и ГПУ решёток (при нулевой температуре) и сделан качественный вывод о существенной стабилизации кристалла в поперечном полю направлении и о менее заметной продольной стабилизации в сильных магнитных полях.

Сделаем следующее замечание по поводу применимости представлений о кулоновском кристалле в магнитных полях к реальной ситуации в коре нейтронной звезды. Влияние магнитного поля на движение ионов характеризуется параметром $\rho_B = \omega_B/\omega_p$, где ω_B — ионная циклотронная частота. Эффекты, специфические для кристалла в магнитном поле, в основном, имеют место при $\rho_B \gtrsim 1$ (тем не менее, см. рис. 3—5 и 14). При наличии сильного магнитного поля кулоновский кристалл является бóльшей идеализацией реального кристалла, поскольку для достижения полной ионизации ионов и уменьшения поляризуемости электронного фона требуются более высокие плотности. Бóльшие плотности (и ω_p) естественно означают меньшие ρ_B. Заметим, однако, что при рассмотрении частично ионизованных систем успешным оказывается приближение эффективного заряда иона $Z_{\rm eff}$. Величина $\rho_B = v_{\rm A}/c$, где $v_{\rm A} = B/\sqrt{4\pi\rho}$ — альфвеновская скорость (ρ — плотность), от заряда иона не зависит. Поэтому, используя модель эффективного иона, можно рассматривать бо́льшие ρ_B при малых плотностях. Поляризуемость электронного фона в отсутствие поля приводит к интересному эффекту превращения оптической моды с частотой $\approx \omega_p$ в акустическую в непосредственной близости центра зоны Бриллюэна (например, [80]). Аналогичного эффекта можно, по-видимому, ожидать и при наличии магнитного поля. Однако в этом случае, одна из мод вблизи центра зоны должна оставаться оптической с частотой $\approx \omega_B$, поскольку в дисперсионном уравнении (9) множитель при ν^4, равный сумме квадратов всех частот, будет содержать ω_B^2/ω_p^2 независимо от поляризуемости фона[1]. Более подробно влияние поляризуемости фона электронов на спектр фононов в диссертации не анализируется.

Данная глава построена следующим образом. В разделе 2 получены уравнения колебаний кулоновского кристалла в магнитном поле. В разделе 3 проанализированы особенности фононного спектра кулоновского кристалла с простой решёткой. В разделе 4 проведена диагонализация гамильтониана кристалла в магнитном поле, в результате чего получено выражение для оператора смещения иона через операторы рождения и уничтожения фононов. В разделе 5 представлены численные расчёты термодинамических функций ОЦК кулоновского кристалла в широком диапазоне магнитных полей и температур, а также качественно проанализировано поведение этих функций в различных режимах. В разделе 6 проведено исследование среднеквадратичной амплитуды смещения иона из положения равновесия, фактора Дебая-Уоллера для кулоновского кристалла в магнитном поле и плавления квантового замагниченного кулоновского кристалла. Наконец, в разделе 7 численно исследована зависимость моментов спектра фононов от величины и направления магнитного поля.

2.2 Уравнения колебаний кристалла в магнитном поле

Предположим, что кулоновский кристалл, рассмотренный в главе 1, помещён в однородное магнитное поле $\mathbf{B}$. Лагранжиан нерелятивистской частицы с зарядом e и массой m в электромагнитном поле есть

$$L = \frac{mv^2}{2} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\mathbf{v} - e\phi \ , \qquad (1)$$

где $\mathbf{v}$ — скорость частицы, $\mathbf{A}$ — векторный потенциал, и $e\phi$ — потенциальная энергия частицы (ϕ — скалярный потенциал). Выбирая векторный потенциал, в котором находится i-ая частица, в форме $A_i^\alpha = ([\mathbf{B}\times\mathbf{u}_i])^\alpha/2 = \varepsilon^{\alpha\beta\gamma}B^\beta u_i^\gamma/2$, получим лагранжиан системы

[1]В отсутствие поля и поляризуемости этот множитель равен 1, что выражает правило сумм Кона; как следует из результатов [80], при учёте поляризуемости эта единица превращается в 0 при стремлении волнового вектора к центру зоны; возникающая же в магнитном поле добавка ω_B^2/ω_p^2 от поляризуемости фона не зависит.

ионов в виде

$$L_B = L_0 + \frac{Z|e|}{2c}\sum_{i=1}^{N} A_i^\alpha \dot{u}_i^\alpha = L_0 + \frac{M\omega_B}{2}\sum_{i=1}^{N} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma}\dot{u}_i^\alpha n^\beta u_i^\gamma \ , \tag{2}$$

где $\mathbf{n}$ — единичный вектор в направлении магнитного поля, ω_B — ионная циклотронная частота, и L_0 — лагранжиан без магнитного поля.

Выбирая те же коллективные координаты, что и в формуле (4) главы 1,

$$u_{\mathrm{l}p}^\alpha = \sqrt{\frac{N_{\mathrm{cell}}}{MN}}\sum_{\mathbf{k}\in\Pi_N} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_\mathrm{l}}\mathcal{A}_{\mathbf{k}p}^\alpha \tag{3}$$

$$\mathcal{A}_{\mathbf{k}p}^\alpha = \sqrt{\frac{MN_{\mathrm{cell}}}{N}}\sum_{\mathrm{l}\in\Xi_N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_\mathrm{l}} u_{\mathrm{l}p}^\alpha \ , \tag{4}$$

приходим к следующему выражению для лагранжиана

$$L = L_0 + \frac{\omega_B}{2}\sum_{\mathbf{k}\in\Pi_N, p} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma}\dot{\mathcal{A}}_{\mathbf{k}p}^\alpha n^\beta \mathcal{A}_{\mathbf{k}p}^\gamma \ . \tag{5}$$

Переходя здесь к термодинамическому пределу и рассматривая $\mathcal{A}_{\mathbf{k}p}^\alpha$ как обобщённые координаты, получаем уравнение Эйлера, аналогичное уравнению (23) главы 1:

$$\ddot{\mathcal{A}}_{\mathbf{k}p}^\alpha + \sum_{p'}\mathcal{D}_{pp'}^{\alpha\beta}(\mathbf{k})\mathcal{A}_{\mathbf{k}p'}^\beta + \omega_B\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}n^\beta\dot{\mathcal{A}}_{\mathbf{k}p}^\gamma = 0 \ . \tag{6}$$

Снова переходя к фурье-образу $\mathcal{A}_{\mathbf{k}p}^\alpha(t) \to A_{\mathbf{k}p}^\alpha(\nu)$, имеем систему однородных уравнений

$$-\nu^2 A_{\mathbf{k}p}^\alpha + \sum_{p'}\mathcal{D}_{pp'}^{\alpha\beta}(\mathbf{k})A_{\mathbf{k}p'}^\beta - i\nu\omega_B\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}n^\beta A_{\mathbf{k}p}^\gamma = 0 \ , \tag{7}$$

разрешимую при условии, что ν является решением дисперсионного уравнения

$$\det\left\{\mathcal{D}_{pp'}^{\alpha\beta} - \nu^2\delta_{pp'}\delta^{\alpha\beta} - i\nu\omega_B\varepsilon^{\alpha\gamma\beta}n^\gamma\right\} = 0 \ . \tag{8}$$

После этого, как и в главе 1, можно ввести векторы поляризации, однако, они уже не будут ортогональными, поскольку в магнитном поле решение уравнения (7) уже не является задачей на собственные векторы эрмитовой матрицы. Это влечёт за собой сложности в приведении гамильтониана кулоновского кристалла в магнитном поле к сумме гамильтонианов независимых осцилляторов. Такое приведение будет осуществлено в разделе 4.

2.3 Особенности спектра фононов в магнитном поле

Как и в главе 1, будем считать, что волновые векторы $\mathbf{k}$, отвечающие неэквивалентным фононным модам, лежат в 1-ой зоне Бриллюэна. Каждому вектору $\mathbf{k}$ в магнитном поле соответствует $3N_{\mathrm{cell}}$ мод, частоты которых удовлетворяют обобщённому правилу сумм $\sum_\nu \nu_{\mathbf{k}\nu}^2 = N_{\mathrm{cell}}(\omega_p^2 + \omega_B^2)$.

При малых $k = |\mathbf{k}|$ поведение частот фононов более сложно, чем в отсутствие магнитного поля, и качественно зависит от направления волнового вектора относительно поля.

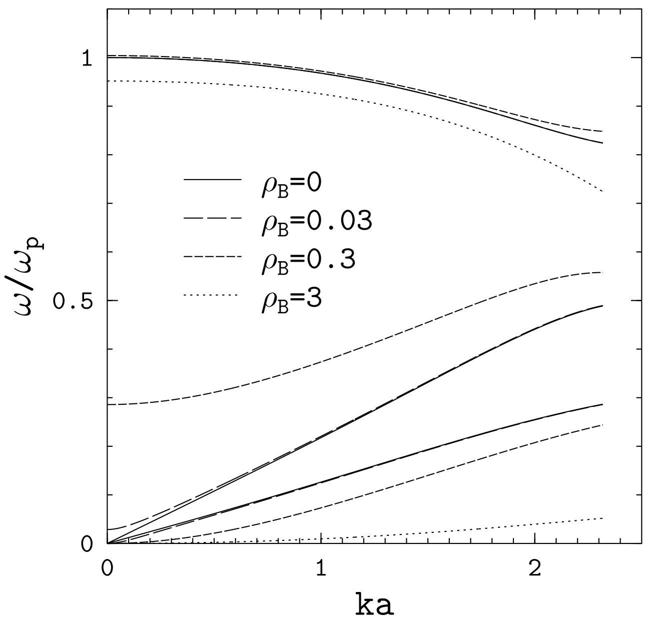

Рис. 1: Фононный спектр ОЦК решётки при наличии магнитного поля для того же направления волнового вектора **k**, что и на рис. 1 главы 1 при нескольких значениях $\rho_B = \omega_B/\omega_p$. Не показана медленно растущая мода $\omega/\omega_p \approx 3$ при $\rho_B = 3$. Направление магнитного поля соответствует одному из направлений на ближайшего соседа.

Ограничимся случаем $N_{\rm cell} = 1$. Для таких решёток можно получить точные асимптотики частот для малых k. Дисперсионное уравнение (8) (обезразмеренное на ω_p^2) имеет вид:

$$-\frac{\nu^6}{\omega_p^6} + (1+\rho_B^2)\frac{\nu^4}{\omega_p^4} + B_B\frac{\nu^2}{\omega_p^2} + C = 0\ , \tag{9}$$

где $\rho_B = \omega_B/\omega_p$, коэффициент C совпадает с аналогичным коэффициентом в дисперсионном уравнении в отсутствие магнитного поля, и

$$\begin{aligned} 16\pi B_B k^2 &= 16\pi B_0 k^2 - 16\pi\rho_B^2(\mathbf{kn})^2 + (ka_{\rm l})^2\rho_B^2[(\beta+\gamma_2)k^2 + (\alpha+2\gamma_2)(\mathbf{kn})^2 \\ &+ (\gamma_1 - 3\gamma_2)(n_x^2k_x^2 + n_y^2k_y^2 + n_z^2k_z^2)] \end{aligned} \tag{10}$$

[B_0 — коэффициент в (9) в отсутствие поля]. Асимптотику наименьшей частоты при $k \to 0$ здесь можно найти, отбрасывая член, содержащий ν^6, и выбирая меньший из корней оставшегося биквадратного уравнения:

$$\frac{\nu_1^2}{\omega_p^2} = \frac{1}{2(1+\rho_B^2)}\left[-B_B - \sqrt{B_B^2 - 4(1+\rho_B^2)C}\right]\ . \tag{11}$$

При достаточно малых k имеем $\nu_1^2/\omega_p^2 \approx C/|B_B|$. Тогда для фононов, распространяющихся строго поперёк магнитного поля, в пределе $k \to 0$ имеем $\nu_1 \propto k$. Если же $\mathbf{kn} \neq 0$, то при достаточно малых k получаем $\nu_1 \propto k^2$, в отличие от линейной зависимости в отсутствие поля. С уменьшением угла между **k** и магнитным полем увеличивается и диапазон k, в котором справедлива квадратичная асимптотика ν_1.

Асимптотику наибольшей частоты при $k \to 0$ можно найти, отбрасывая в уравнении (9) член, содержащий коэффициент C, сокращая ν^2 и выбирая максимальный корень

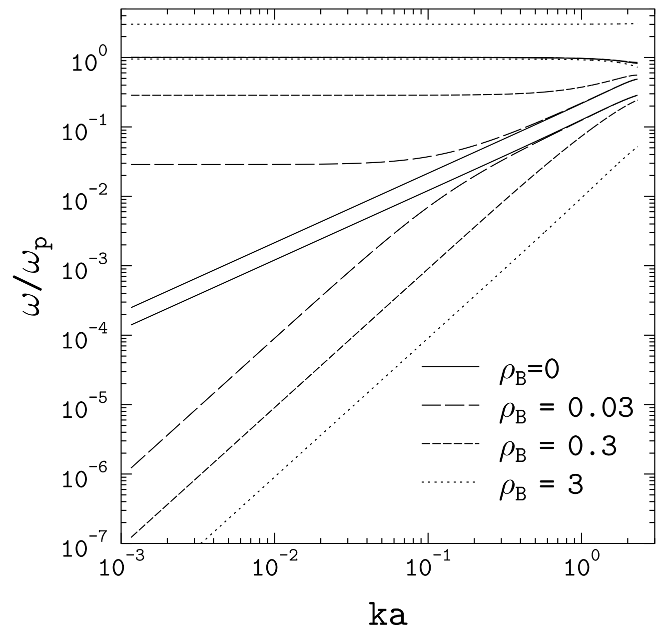

Рис. 2: Фононный спектр ОЦК решётки в логарифмическом масштабе при тех же условиях, что и на рис. 1, для нескольких значений ρ_B.

получившегося биквадратного уравнения:

$$\frac{\nu_3^2}{\omega_p^2} = \frac{1}{2}\left[1 + \rho_B^2 + \sqrt{(1+\rho_B^2)^2 + 4B_B}\right] \ . \tag{12}$$

При малых k это даёт

$$\frac{\nu_3^2}{\omega_p^2} = \frac{1}{2}\left[1 + \rho_B^2 + \sqrt{(1+\rho_B^2)^2 - 4\rho_B^2(\hat{\mathbf{k}}\mathbf{n})^2}\right] + O(k^2) \ . \tag{13}$$

Положим теперь $k = 0$. Тогда для фононов, распространяющихся поперёк поля, получим $\nu_3^2/\omega_p^2 = 1 + \rho_B^2$. Отсюда с использованием правила сумм получим, что промежуточная частота ν_2 при $k = 0$ обращается в 0. Из анализа зависимости $\nu_{1,3}$ от k нетрудно сообразить, что $\nu_2 \propto k$ при $k \to 0$ ($\nu_2 > \nu_1$). Если же, наоборот, фонон распространяется вдоль поля, то при $k = 0$ имеем $\nu_3^2/\omega_p^2 = \max(1, \rho_B^2)$, и, следовательно, $\nu_2^2/\omega_p^2 = \min(1, \rho_B^2)$. Поэтому как мода с максимальной, так и мода с промежуточной частотой являются оптическими. С уменьшением угла между $\mathbf{k}$ и магнитным полем, растёт и $\lim_{k\to 0}\nu_2$.

Естественно, уравнение (9) можно решить аналитически, не пренебрегая никакими членами. Однако, при достаточно малых k аналитические схемы становятся численно неустойчивыми. Поэтому для определения термодинамических функций при малых температурах и, особенно, при больших полях, когда приходится интегрировать функции, зависящие от спектра фононов вблизи центра зоны Бриллюэна, приведённые здесь асимптотики оказываются крайне полезными.

На рисунках 1 и 2 в естественном и логарифмическом масштабах представлены спектры колебаний ОЦК решётки в том же направлении волнового вектора $\mathbf{k}$, что и на рис. 1 главы 1 ($\theta = 1.3\,\mathrm{arctg}\,\sqrt{2}$, $\phi = 0.9\pi/4$). Направление магнитного поля совпадает с направлением

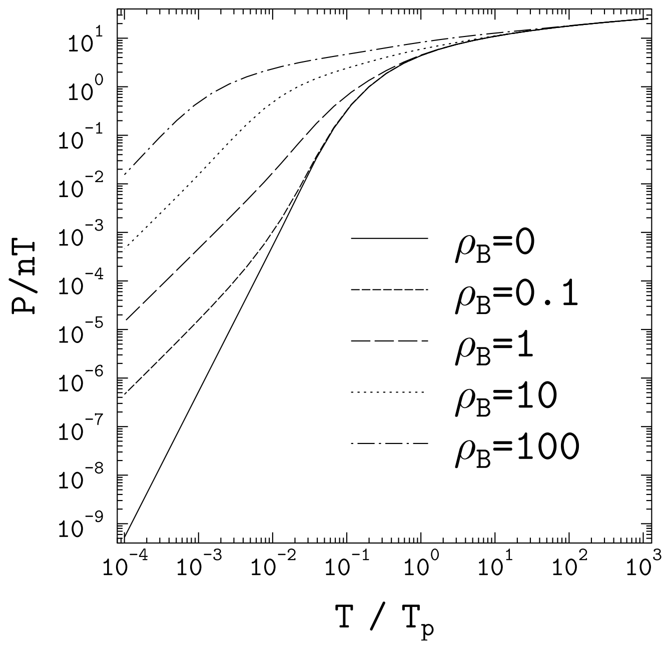

Рис. 3: Фононное давление ОЦК решётки в зависимости от температуры для различных значений магнитного поля.

от иона к одному из его ближайших соседей ($\theta = \operatorname{arctg}\sqrt{2}$, $\phi = \pi/4$). При $ka \lesssim 0.01$ использована обсуждавшаяся выше аналитическая асимптотика частот, при бо́льших ka — точный расчёт. На рис. 1 не показана медленно растущая оптическая мода $\nu_3/\omega_p \approx 3$ при $\rho_B = 3$. На рис. 2 хорошо видна квадратичная зависимость наименьшей частоты от волнового вектора вблизи центра зоны с последующим выходом на линейный закон ближе к границам зоны (при $\rho_B < 1$).

2.4 Диагонализация гамильтониана кристалла в магнитном поле

В этом разделе мы, следуя работе Усова и др. [98], рассмотрим диагонализацию гамильтониана кулоновского кристалла (т.е. представление его в виде суммы гамильтонианов независимых осцилляторов) в магнитном поле. Перейдём в декартову систему координат, оси которой направлены по собственным векторам матрицы $\mathcal{D}^{\alpha\beta}$ (рассматривается случай $N_{\rm cell} = 1$). Тогда лагранжиан будет иметь вид

$$L_B = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}} \dot{\mathcal{A}}^{\alpha}_{\mathbf{k}}\dot{\mathcal{A}}^{\alpha}_{\tilde{\mathbf{k}}} - U_0 - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}} \omega^2_{\mathbf{k}\alpha}\mathcal{A}^{\alpha}_{\mathbf{k}}\mathcal{A}^{\alpha}_{\tilde{\mathbf{k}}} + \frac{\omega_B}{2}\sum_{\mathbf{k}} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma}\dot{\mathcal{A}}^{\alpha}_{\mathbf{k}} n^{\beta}\mathcal{A}^{\gamma}_{\tilde{\mathbf{k}}}\ . \tag{14}$$

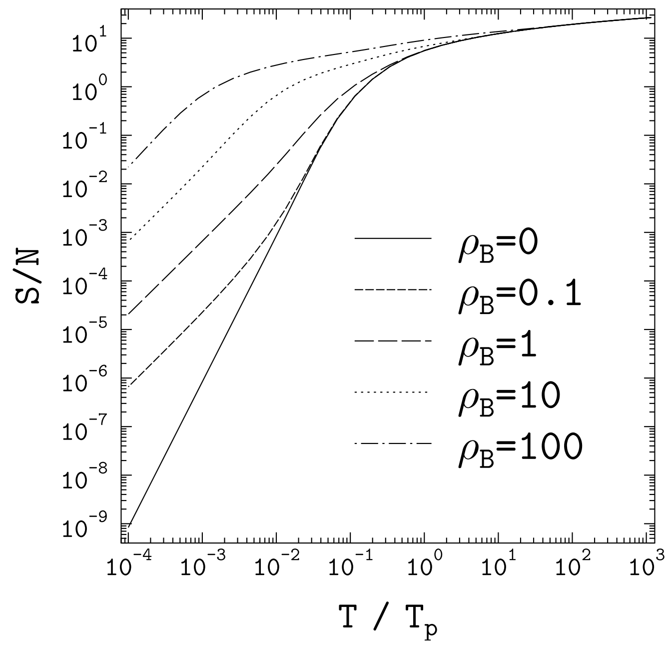

Рис. 4: Фононная энтропия ОЦК решётки в зависимости от температуры для различных значений магнитного поля.

Через ω мы обозначили частоты фононов в отсутствие магнитного поля. Отбрасывая несущественную постоянную U_0 и переходя к гамильтониану H_B, имеем

$$
\begin{aligned}
\mathcal{P}^{\alpha}_{\mathbf{k}} &= \dot{\mathcal{A}}^{\alpha}_{\tilde{\mathbf{k}}} + \frac{\omega_B}{2}\varepsilon^{\alpha\beta\gamma} n^{\beta} \mathcal{A}^{\gamma}_{\tilde{\mathbf{k}}} , \qquad (15) \\
H_B &= \sum_{\mathbf{k}} \dot{\mathcal{A}}^{\alpha}_{\mathbf{k}} \mathcal{P}^{\alpha}_{\mathbf{k}} - L_B \\
&= \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}} \left[\mathcal{P}^{\alpha}_{\tilde{\mathbf{k}}} - \frac{\omega_B}{2}\varepsilon^{\alpha\beta\gamma} n^{\beta} \mathcal{A}^{\gamma}_{\mathbf{k}}\right] \left[\mathcal{P}^{\alpha}_{\mathbf{k}} - \frac{\omega_B}{2}\varepsilon^{\alpha\beta'\gamma'} n^{\beta'} \mathcal{A}^{\gamma'}_{\tilde{\mathbf{k}}}\right] + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}} \omega^2_{\mathbf{k}\alpha} \mathcal{A}^{\alpha}_{\mathbf{k}} \mathcal{A}^{\alpha}_{\tilde{\mathbf{k}}} \\
&\equiv \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}} \pi^{\alpha}_{\tilde{\mathbf{k}}} \pi^{\alpha}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}} \omega^2_{\mathbf{k}\alpha} \mathcal{A}^{\alpha}_{\mathbf{k}} \mathcal{A}^{\alpha}_{\tilde{\mathbf{k}}} , \qquad (16)
\end{aligned}
$$

где через $\pi^{\alpha}_{\mathbf{k}}$ обозначены величины $\mathcal{P}^{\alpha}_{\mathbf{k}} - \omega_B \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} n^{\beta} \mathcal{A}^{\gamma}_{\tilde{\mathbf{k}}}/2$. Если теперь считать $\mathcal{A}^{\alpha}_{\mathbf{k}}$ и $\mathcal{P}^{\alpha}_{\mathbf{k}}$ операторами с обычными правилами коммутации $\left[\mathcal{A}^{\alpha}_{\mathbf{k}}, \mathcal{P}^{\beta}_{\mathbf{k}'}\right] = i\hbar\delta^{\alpha\beta}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, то операторы $\pi^{\alpha}_{\mathbf{k}}$ и $\pi^{\beta}_{\tilde{\mathbf{k}}}$ не будут коммутировать при $\alpha \neq \beta$: $\left[\pi^{\alpha}_{\mathbf{k}}, \pi^{\beta}_{\mathbf{k}'}\right] = i\hbar\omega_B \varepsilon^{\beta\gamma\alpha} n^{\gamma} \delta_{\mathbf{k}'\tilde{\mathbf{k}}}$, и операторы рождения и уничтожения, образованные по тем же, что и без магнитного поля, формулам, но с участием π вместо $\mathcal{P}$, не будут иметь нужных соотношений коммутации.

Будем искать операторы рождения и уничтожения в виде более общих линейных комбинаций операторов обобщённых координат и импульсов:

$$
\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}} = \alpha^{\lambda}_{\mathbf{k}} \pi^{\lambda}_{\mathbf{k}} + \beta^{\lambda}_{\mathbf{k}} \mathcal{A}^{\lambda}_{\tilde{\mathbf{k}}} , \qquad (17)
$$

где $\alpha^{\lambda}_{\mathbf{k}}$ и $\beta^{\lambda}_{\mathbf{k}}$ — некоторые коэффициенты. Эти коэффициенты определим из уравнения $\left[H_B, \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}}\right] = \hbar\nu_{\mathbf{k}} \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}}$. Подставляя сюда (16) и (17), получим следующие уравнения:

$$
\hbar\nu_{\mathbf{k}} (\alpha^{\lambda}_{\mathbf{k}} \pi^{\lambda}_{\mathbf{k}} + \beta^{\lambda}_{\mathbf{k}} \mathcal{A}^{\lambda}_{\tilde{\mathbf{k}}}) = i\hbar\omega_B \varepsilon^{\lambda\gamma\alpha} n^{\gamma} \alpha^{\lambda}_{\mathbf{k}} \pi^{\alpha}_{\mathbf{k}} + i\hbar\omega^2_{\mathbf{k}\lambda} \alpha^{\lambda}_{\mathbf{k}} \mathcal{A}^{\lambda}_{\tilde{\mathbf{k}}} - i\hbar\beta^{\lambda}_{\mathbf{k}} \pi^{\lambda}_{\mathbf{k}} , \qquad (18)
$$

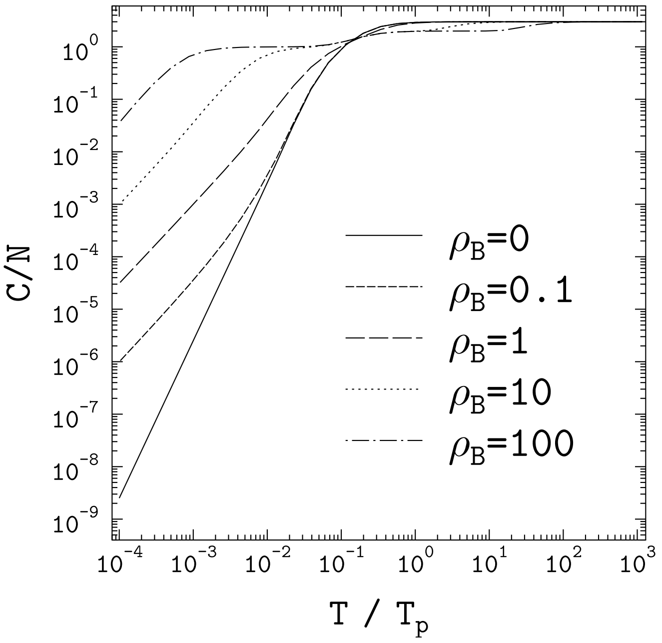

Рис. 5: Фононная теплоёмкость ОЦК решётки в зависимости от температуры для различных значений магнитного поля.

или

$$\nu_{\mathbf{k}}\beta^{\lambda}_{\mathbf{k}} = i\omega^2_{\mathbf{k}\lambda}\alpha^{\lambda}_{\mathbf{k}} \,, \tag{19}$$

$$\nu_{\mathbf{k}}\alpha^{\lambda}_{\mathbf{k}} = i\omega_B\varepsilon^{\alpha\gamma\lambda}n^{\gamma}\alpha^{\alpha}_{\mathbf{k}} - i\beta^{\lambda}_{\mathbf{k}} \,. \tag{20}$$

Подставляя (19) в (20), получим систему линейных однородных уравнений для коэффициентов $\alpha^{\lambda}_{\mathbf{k}}$:

$$(\omega^2_{\mathbf{k}\lambda} - \nu^2_{\mathbf{k}})\alpha^{\lambda}_{\mathbf{k}} - i\nu_{\mathbf{k}}\omega_B\varepsilon^{\lambda\gamma\alpha}n^{\gamma}\alpha^{\alpha}_{\mathbf{k}} = 0 \,. \tag{21}$$

Мы видим, что уравнения для коэффициентов $\alpha^{\lambda}_{\mathbf{k}}$ и $\alpha^{\lambda}_{\tilde{\mathbf{k}}}$ совпадают, т.е. совпадают и сами эти коэффициенты. Поэтому для краткости будем опускать у них индекс $\mathbf{k}$. Система (21) имеет решение в том случае, если $\nu_{\mathbf{k}}$ удовлетворяет дисперсионному уравнению (8), т.е. является частотой колебательной моды с волновым вектором $\mathbf{k}$. Таким образом, имеется три возможных решения для оператора $\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}}$, соответствующие трём различным частотам $\nu_{\mathbf{k}s}$, $s = 1, 2, 3$: $\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}s} = \alpha^{\lambda}_{s}(\pi^{\lambda}_{\mathbf{k}} + i\omega^2_{\mathbf{k}\lambda}\mathcal{A}^{\lambda}_{\tilde{\mathbf{k}}}/\nu_{\mathbf{k}s})$.

Решениями системы уравнений (21) являются наборы алгебраических дополнений к элементам любой из строк матрицы

$$\begin{Vmatrix} \omega^2_{\mathbf{k}x} - \nu^2_{\mathbf{k}s} & i\nu_{\mathbf{k}s}\omega_B n^z & -i\nu_{\mathbf{k}s}\omega_B n^y \\ -i\nu_{\mathbf{k}s}\omega_B n^z & \omega^2_{\mathbf{k}y} - \nu^2_{\mathbf{k}s} & i\nu_{\mathbf{k}s}\omega_B n^x \\ i\nu_{\mathbf{k}s}\omega_B n^y & -i\nu_{\mathbf{k}s}\omega_B n^x & \omega^2_{\mathbf{k}z} - \nu^2_{\mathbf{k}s} \end{Vmatrix} \tag{22}$$

(можно показать, что все 3 набора, возможные при данном s, пропорциональны друг другу).

Остаётся отнормировать эти наборы решений, а вместе с ними и операторы $a^{\dagger}$, так

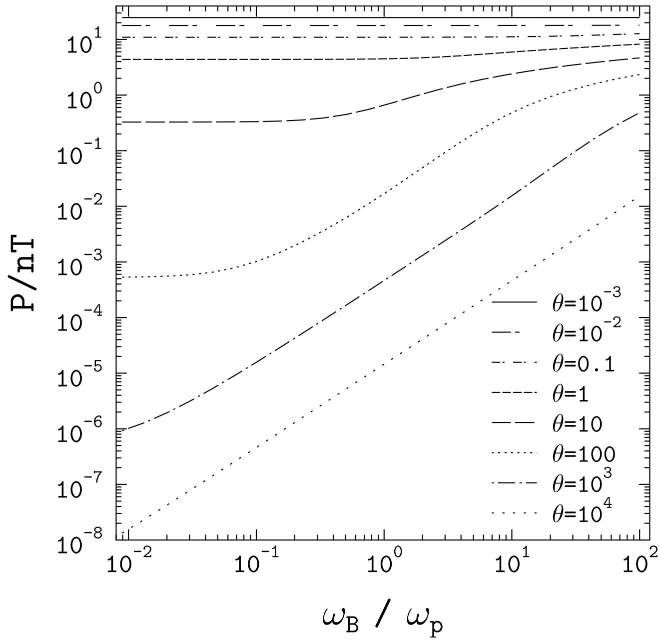

Рис. 6: Фононное давление ОЦК решётки в зависимости от магнитного поля для различных значений квантового параметра θ.

чтобы $\left[\hat{a}_{\mathbf{k}s}, \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}s}\right] = 1$. Имеем

$$\left[\hat{a}_{\mathbf{k}s}, \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}s'}\right] = \alpha_s^{\lambda *}\alpha_{s'}^{\lambda'} i\hbar\omega_B \varepsilon^{\lambda'\gamma\lambda} n^{\gamma} + \alpha_s^{\lambda *}\alpha_{s'}^{\lambda}\hbar\omega^2_{\mathbf{k}\lambda}\left(\frac{1}{\nu_{\mathbf{k}s}} + \frac{1}{\nu_{\mathbf{k}s'}}\right) = \alpha_s^{\lambda *}\alpha_{s'}^{\lambda}\hbar\left(\frac{\omega^2_{\mathbf{k}\lambda}}{\nu_{\mathbf{k}s}} + \nu_{\mathbf{k}s'}\right) \;, \quad (23)$$

где мы воспользовались уравнением (21). Рассмотрим теперь следующую цепочку равенств:

$$\begin{aligned} 0 &= \alpha_{s'}^{\lambda}[(\nu^2_{\mathbf{k}s} - \omega^2_{\mathbf{k}\lambda})\alpha_s^{\lambda *} - i\nu_{\mathbf{k}s}\omega_B\varepsilon^{\lambda\gamma\mu}n^{\gamma}\alpha_s^{\mu *}] \\ &= \alpha_{s'}^{\lambda}\alpha_s^{\lambda *}(\nu^2_{\mathbf{k}s} - \omega^2_{\mathbf{k}\lambda}) + \alpha_{s'}^{\mu}\alpha_s^{\mu *}\frac{\nu_{\mathbf{k}s}}{\nu_{\mathbf{k}s'}}(\omega^2_{\mathbf{k}\mu} - \nu^2_{\mathbf{k}s'}) \\ &= \alpha_{s'}^{\lambda}\alpha_s^{\lambda *}\left(\frac{\nu_{\mathbf{k}s}}{\nu_{\mathbf{k}s'}} - 1\right)(\omega^2_{\mathbf{k}\lambda} + \nu_{\mathbf{k}s}\nu_{\mathbf{k}s'}) \end{aligned} \quad (24)$$

[здесь мы снова дважды воспользовались уравнением (21)]. Отсюда видно, что выражение в правой части формулы (23) равно 0, если $\nu_{\mathbf{k}s} \neq \nu_{\mathbf{k}s'}$. Это свойство аналогично соотношению ортогональности векторов поляризации в отсутствие магнитного поля. При $s = s'$ равенство (23) определяет нормировку коэффициентов α :

$$\alpha_s^{\lambda}\alpha_s^{\lambda *}\hbar\left(\frac{\omega^2_{\mathbf{k}\lambda}}{\nu_{\mathbf{k}s}} + \nu_{\mathbf{k}s}\right) = 1 \; . \quad (25)$$

Остальные коммутаторы операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^{\dagger}$ автоматически обращаются в 0.

В силу равенства $\left[H_B, \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}}\right] = \hbar\nu_{\mathbf{k}}\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}}$ и полученных соотношений нормировки, гамильтониан (16) может быть записан в каноническом виде

$$H_B = \sum_{\mathbf{k}s}\hbar\nu_{\mathbf{k}s}\left(\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}s}\hat{a}_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2}\right) . \quad (26)$$

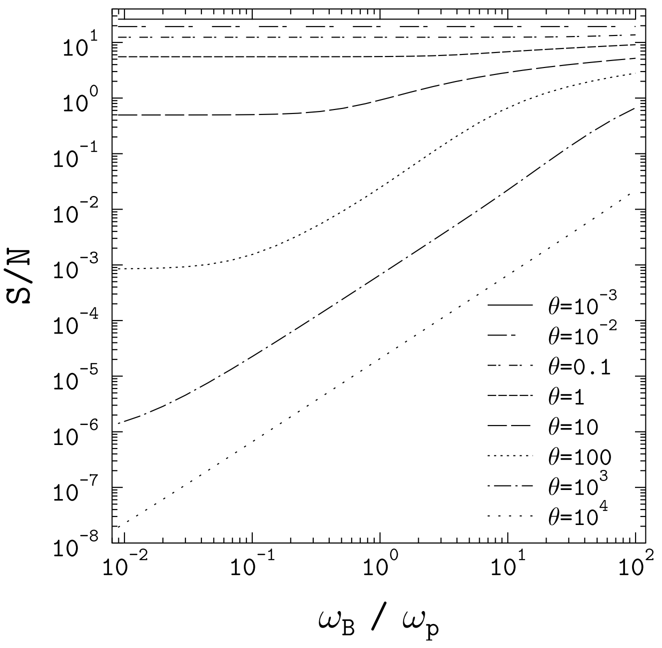

Рис. 7: Фононная энтропия ОЦК решётки в зависимости от магнитного поля для различных значений квантового параметра θ.

Подставляя сюда выражение (17), получим следующие соотношения ортогональности

$$\sum_s \alpha_s^\lambda \alpha_s^{\lambda'*} - \alpha_s^{\lambda*}\alpha_s^{\lambda'} \;=\; 0 \tag{27}$$

$$\hbar \sum_s \frac{\omega_\lambda \omega_{\lambda'}}{\nu_s}(\alpha_s^\lambda \alpha_s^{\lambda'*} + \alpha_s^{\lambda*}\alpha_s^{\lambda'}) \;=\; \delta^{\lambda\lambda'} \tag{28}$$

$$\hbar \sum_s \nu_s(\alpha_s^\lambda \alpha_s^{\lambda'*} + \alpha_s^{\lambda*}\alpha_s^{\lambda'}) \;=\; \delta^{\lambda\lambda'} \; . \tag{29}$$

Домножая $\hat{a}^\dagger_{\tilde{\mathbf{k}}s}$ на $\alpha_s^{\lambda*}$, а $\hat{a}_{\mathbf{k}s}$ на α_s^λ, суммируя по s и вычитая второе из первого, а также используя далее (27) и (28), получим

$$\mathcal{A}_{\mathbf{k}}^\lambda = \hbar \sum_s (-i)\alpha_s^{\lambda*}\hat{a}^\dagger_{\tilde{\mathbf{k}}s} + i\alpha_s^\lambda \hat{a}_{\mathbf{k}s} \; . \tag{30}$$

Это выражение позволяет вычислить такие характеристики кристалла, как фактор Дебая-Уоллера, а также средний квадрат смещения иона из узла решётки в магнитном поле. Соответствующие расчёты представлены в разделе 6.

2.5 Термодинамика фононного газа в магнитном поле

Термодинамические функции фононного газа в магнитном поле вычисляются с помощью тех же схем интегрирования и по тем же общим формулам, что и в разделе 1.5. Особенность заключается в том, что в магнитном поле появляются 2 новых параметра, $\rho_B = \omega_B/\omega_p$ и направление магнитного поля. Как можно заключить из исследования моментов фононного спектра (см. раздел 7), зависимость от направления является довольно слабой. Поэтому при изучении термодинамики мы ограничимся рассмотрением случая,

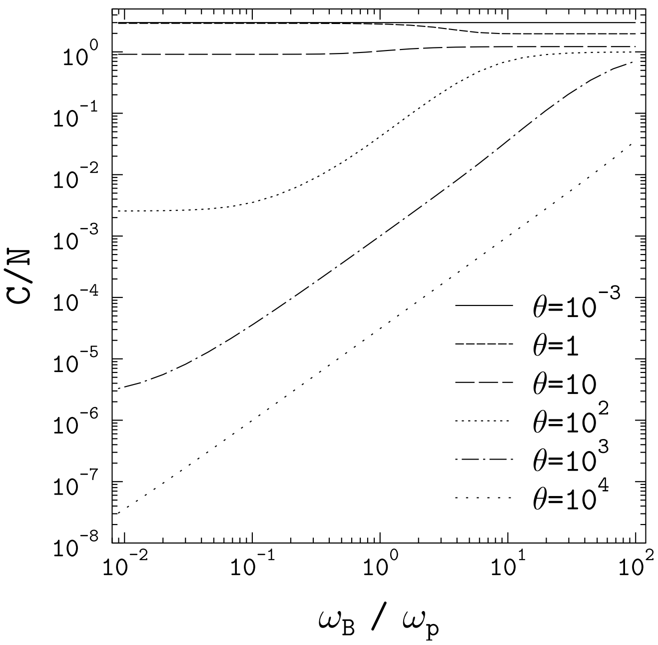

Рис. 8: Фононная теплоёмкость ОЦК решётки в зависимости от магнитного поля для различных значений квантового параметра θ.

когда направление поля соответствует минимуму нулевой энергии кристалла. Для ОЦК решётки это направление совпадает с направлением от данного равновесного положения иона к ближайшему соседнему равновесному положению. Расчёты термодинамических функций проиллюстрированы рисунками 3 — 8. Квантовый параметр, как обычно, есть $\theta = \hbar\omega_p/T = T_p/T$.

Известно, что классическая статистическая сумма не меняется при наличии магнитного поля. Напомним, что классическая асимптотика, например, энтропии имеет вид:

$$\frac{S}{nV} = 3 - 3\ln\frac{\hbar\omega_p}{T} - 3\left\langle \ln\frac{\nu_{\mathbf{k}s}}{\omega_p}\right\rangle_{\rm ph} . \qquad (31)$$

Из сформулированного выше общего принципа вытекает, что величина $\langle \ln(\nu_{\mathbf{k}s}/\omega_p)\rangle_{\rm ph}$ *не зависит* от магнитного поля. Это положение несложно доказать непосредственно. Разлагая на множители уравнение (9), мы видим, что $\forall \mathbf{k}$: $\nu_1^2\nu_2^2\nu_3^2 = C\omega_p^6$. Однако, как было сказано выше, коэффициент C от магнитного поля не зависит, что и доказывает требуемое утверждение.

В сильных магнитных полях для достижения классических асимптотик требуются более высокие температуры, нежели в отсутствие поля. Это объясняется тем, что классическая асимптотика имеет место, когда возбуждено много фононных мод *всех* типов. В сильном магнитном поле частота $\nu_3 \sim \omega_B$ (раздел 3), поэтому условием классичности становится $\rho_B\theta < 1$, в отличие от привычного условия $\theta < 1$ в отсутствие поля (глава 1). Сказанное легко иллюстрируется поведением теплоёмкости, рис. 5 и 8. Мы видим, что при $\rho_B = 100$ классическое значение $C = 3$ достигается лишь при $\theta \lesssim 0.01$.

Плато на кривых теплоёмкости (рис. 5) при $\rho_B = 10$ и 100 с ростом температуры отвечают $C/N = 1$, 2 и 3. Это объясняется последовательным возбуждением мод 1, 2 и 3 во всём

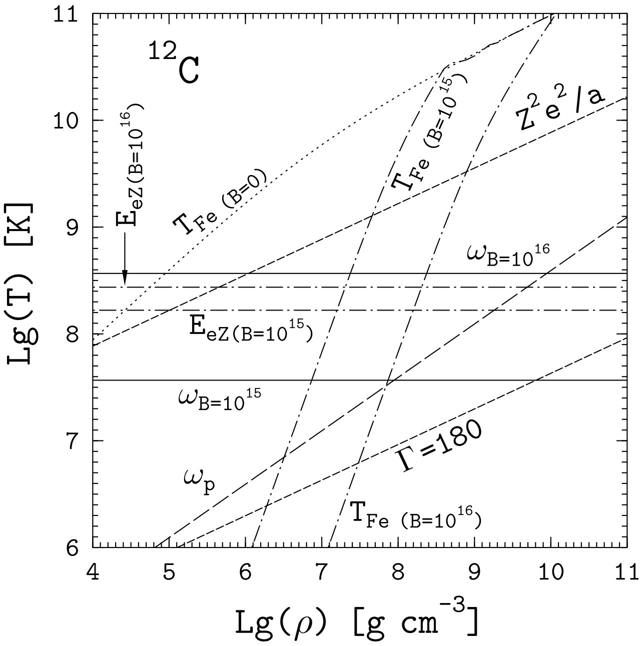

Рис. 9: Диаграмма температура-плотность для углеродной плазмы.

объёме зоны Бриллюэна. Такое поведение напоминает теплоёмкость многоатомных молекул, когда с ростом температуры образуются плато на кривой теплоёмкости, связанные с последовательным возбуждением вращательных и колебательных степеней свободы. При низких температурах теплоёмкость определяется возбуждением мягкой фононной моды ν_1 вблизи центра зоны Бриллюэна. В работе [98] показано, что в этом пределе при сильных полях $C \propto (BT)^{3/2}$. Доказательство этого факта проводится тем же способом, что и в разделе 1.5, где был рассмотрен закон Дебая. Следует лишь учесть, что здесь $\nu_1 \propto k^2/B$.

Типичные значения параметров θ и ρ_B для полей 10^{15} и 10^{16} Гс можно оценить с помощью рисунков 9 и 10 для полностью ионизованной углеродной и железной плазмы коры нейтронной звезды. Кривая $\Gamma = 180$ показывает линию плавления классического кристалла в отсутствие поля. Линия Z^2e^2/a — типичная электростатическая энергия, приходящаяся на один ион; $T_{\mathrm{F}e}$ — температура вырождения электронов для различных значений магнитного поля. Эти кривые ограничивают область вырождения электронов ($T < T_{\mathrm{F}e}$). Наконец, через E_{eZ} обозначена наибольшая энергия связи электрона с ионом для указанного значения магнитного поля. Эта энергия была найдена с помощью масштабирующей формулы, позволяющей перейти к эквивалентной задаче для водорода $E(Z,B) = Z^2E(Z=1, B/Z^2)$ (например, [102]), и аппроксимационной формулы для энергии основного состояния в атоме водорода [83]. Отметим, что условие полной ионизации можно использовать при $\min(T, T_{\mathrm{F}e}) > E_{eZ}$ (при соответствующем поле). В противном случае плазму нельзя считать полностью ионизованной и приходится использовать приближение эффективного заряда иона.

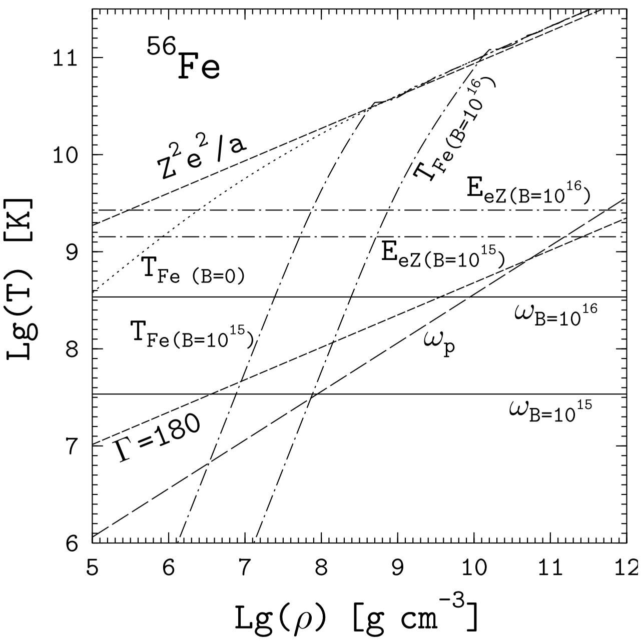

Рис. 10: Диаграмма температура-плотность для железной плазмы.

2.6 Смещение иона из положения равновесия, плавление кулоновского кристалла и фактор Дебая-Уоллера в магнитном поле

Используя формулы (3) и (30), можно получить следующее выражение для оператора смещения иона из положения равновесия

$$\hat{u}_{\mathrm{l}}^{\lambda} = \frac{i\hbar}{\sqrt{MN}} \sum_{\mathbf{k}\in\Pi_N,s} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\mathrm{l}}}(\alpha_s^{\lambda}\hat{a}_{\mathbf{k}s} - \alpha_s^{\lambda *}\hat{a}^{\dagger}_{\tilde{\mathbf{k}}s}) = \frac{i\hbar}{\sqrt{MN}} \sum_{\mathbf{k}\in\Pi_N,s} \alpha_s^{\lambda}\hat{a}_{\mathbf{k}s}e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\mathrm{l}}} - \alpha_s^{\lambda *}\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}s}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\mathrm{l}}} \; . \qquad (32)$$

Тогда можно вычислить среднеквадратичное значение смещения $r_T = \sqrt{\langle \hat{u}^{\lambda}\hat{u}^{\lambda}\rangle_T}$,

$$r_T^2 = \frac{\hbar^2}{MN} \sum_{\mathbf{k}\in\Pi_N,s} \alpha_s^{\lambda *}\alpha_s^{\lambda}\langle \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}s}\hat{a}_{\mathbf{k}s} + \hat{a}_{\mathbf{k}s}\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}s}\rangle_T = \frac{\hbar^2}{MN} \sum_{\mathbf{k}\in\Pi_N,s} \alpha_s^{\lambda *}\alpha_s^{\lambda}(2\bar{n}_{\mathbf{k}s} + 1) \; , \qquad (33)$$

где $\bar{n}_{\mathbf{k}s} = (e^{\hbar\nu_{\mathbf{k}s}/T} - 1)^{-1}$ — среднее число фононов в моде $\mathbf{k}s$. Можно вычислить и среднеквадратичное значение смещения $u_{\hat{\mathbf{q}}}$ в направлении, задаваемом произвольным единичным вектором $\hat{\mathbf{q}}$:

$$u_{\hat{\mathbf{q}}}^2 = \langle \hat{u}^{\lambda}\hat{u}^{\mu}\hat{q}^{\lambda}\hat{q}^{\mu}\rangle_T = \frac{\hbar^2}{MN} \sum_{\mathbf{k}\in\Pi_N,s} \alpha_s^{\lambda *}\alpha_s^{\mu}\hat{q}^{\lambda}\hat{q}^{\mu}(2\bar{n}_{\mathbf{k}s} + 1) \; . \qquad (34)$$

В отсутствие магнитного поля в ОЦК кристалле величина $u_{\hat{\mathbf{q}}}$ не зависит от направления $\hat{\mathbf{q}}$ (см. обсуждение изотропии фактора Дебая-Уоллера в разделе 1.6.1). Однако, с появлением магнитного поля $u_{\hat{\mathbf{q}}}$ становится анизотропной.

Средняя величина смещения иона из положения равновесия может быть использована для определения температуры плавления кристалла (критерий Линдемана). В отсутствие магнитного поля плавление ОЦК решётки происходит при условии (Шабрие и др. [21],

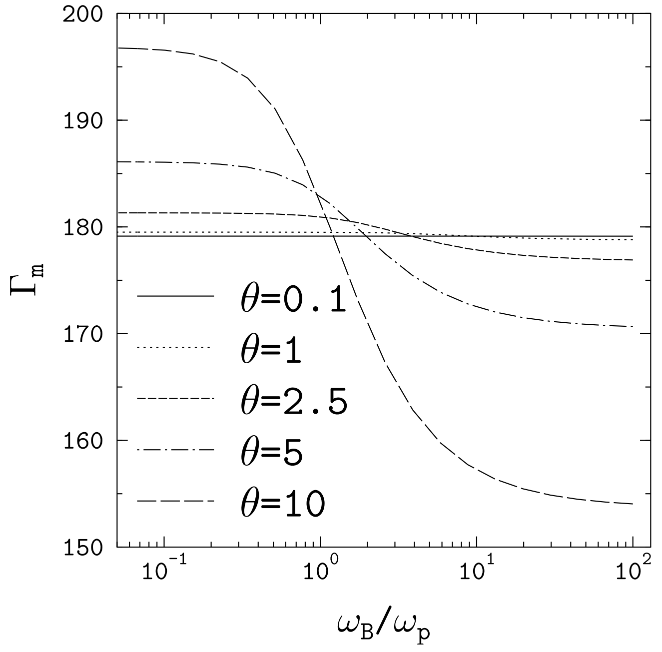

Рис. 11: Кулоновский параметр неидеальности, соответствующий плавлению ОЦК кристалла, как функция магнитного поля для различных значений квантового параметра θ.

ионный обмен отсутствует)

$$\frac{r_T}{a_n} = 0.249 - \frac{0.096}{1 + 0.00341\theta^2} , \tag{35}$$

где a_n — расстояние до ближайшего соседа, равное $(3\pi^2)^{1/6}a$ для ОЦК решётки. Применяя критерий Линдемана в форме (35) к величине r_T в магнитном поле, вычисленной по формуле (33), получим значения температуры плавления и параметра неидеальности в точке плавления Γ_m (напомним определение введённого в главе 1 кулоновского параметра неидеальности $\Gamma = Z^2e^2/aT$) в зависимости от величины магнитного поля[2]. Результаты изображены на рис. 11. Из рисунка можно заключить, что поле существенно меняет плавление в квантовой области $\theta \gg 1$. Это согласуется с общим принципом, в соответствии с которым поле не влияет на статистическую сумму классической системы. Влияние магнитного поля проявляется в уменьшении Γ_m при $\rho_B \gtrsim 1$, т.е. в увеличении устойчивости кристалла вплоть до температур, более высоких по сравнению со случаем $B = 0$. Причина такого поведения Γ_m заключается в уменьшении амплитуды колебаний ионов поперёк сильного магнитного поля.

Анизотропия амплитуды колебаний проиллюстрирована на рис. 12. Рисунок нужно интерпретировать следующим образом. Положение равновесия иона находится в точке (0,0). Ось OY совпадает с направлением магнитного поля и направлением на ближайшего соседа. Имеется симметрия в азимутальной относительно **B** плоскости (плоскости, перпендикулярной оси OY). Поэтому OX соответствует произвольному направлению поперёк **B**. Линии — сплошная, длинные штрихи, короткие штрихи, точечная и штрих-пунктирная —

[2]С учётом того, что коэффициенты α имеют размерность $\sqrt{\hbar\omega}$, а N уходит в усреднение по спектру фононов, в правой части формулы (33), обезразмеренной на a^2, возникает множитель $\hbar/M\omega_p a^2 = \theta/3\Gamma$. Поэтому результаты легко масштабируются по Γ при фиксированном θ, что упрощает определение $\Gamma_m(\theta)$ по критерию Линдемана.

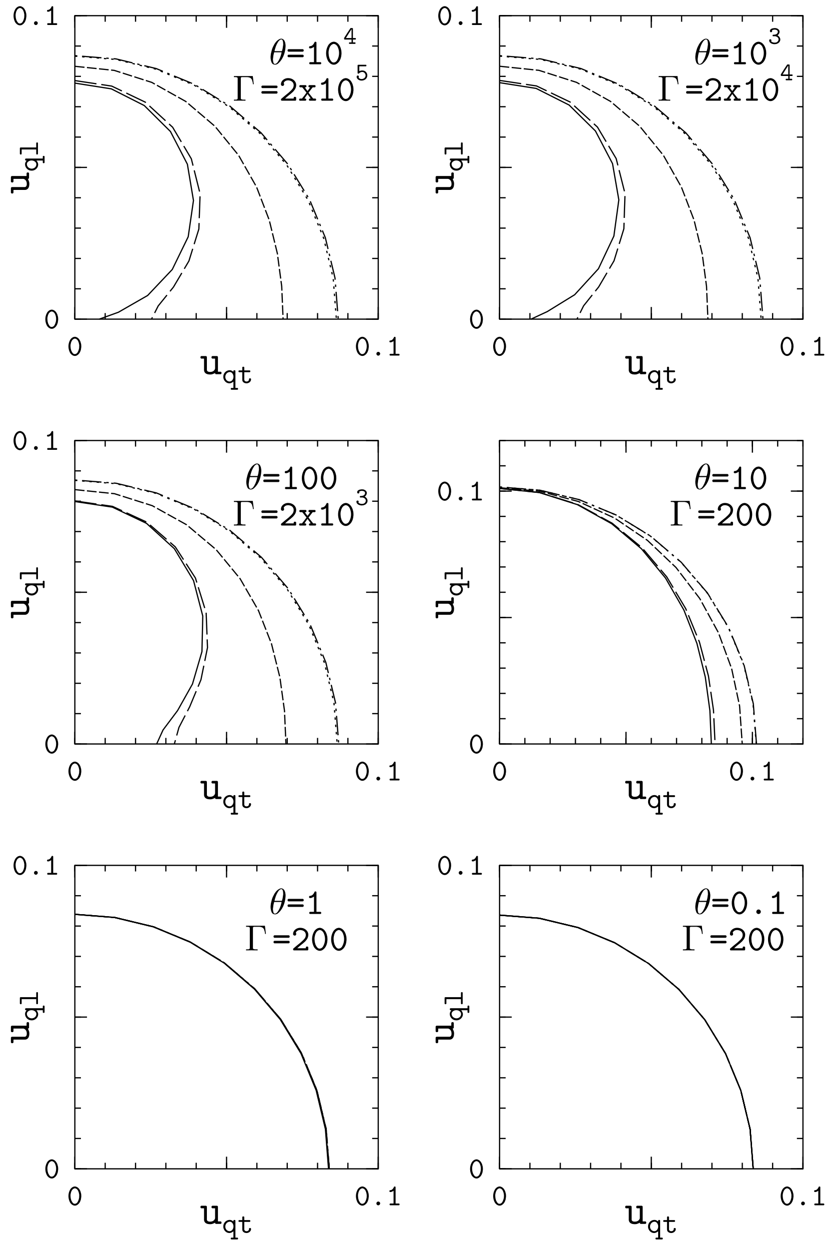

Рис. 12: Среднеквадратичное смещение иона из положения равновесия под данным углом к направлению магнитного поля есть длина отрезка от начала координат до линии соответствующего типа, проведённого под этим углом к оси ординат. Линии — сплошная, длинные штрихи, короткие штрихи, точечная и штрих-пунктирная — отвечают, соответственно, $\rho_B = 100, 10, 1, 0.1, 0.01$. Ось ординат продольна, а ось абсцисс поперечна магнитному полю.

отвечают, соответственно, $\rho_B = 100, 10, 1, 0.1, 0.01$. Длина отрезка между началом отсчёта и произвольной точкой на линии выбранного типа равна среднеквадратичному смещению $u_{\hat{\mathbf{q}}}$ в направлении этого отрезка для выбранного значения ρ_B, выраженная в длинах расстояния до ближайшего соседа a_n. Видно, что существенная анизотропия имеет место для квантового, сильно замагниченного кристалла $\theta \gg 1$, $\rho_B \gg 1$.

Величина $u_{\hat{\mathbf{q}}}$ тесно связана с фактором Дебая-Уоллера $W(\hat{\mathbf{q}})$: $\langle e^{i\hat{\mathbf{q}}\hat{\mathbf{u}}}\rangle_T = e^{-W}$. В соответ-

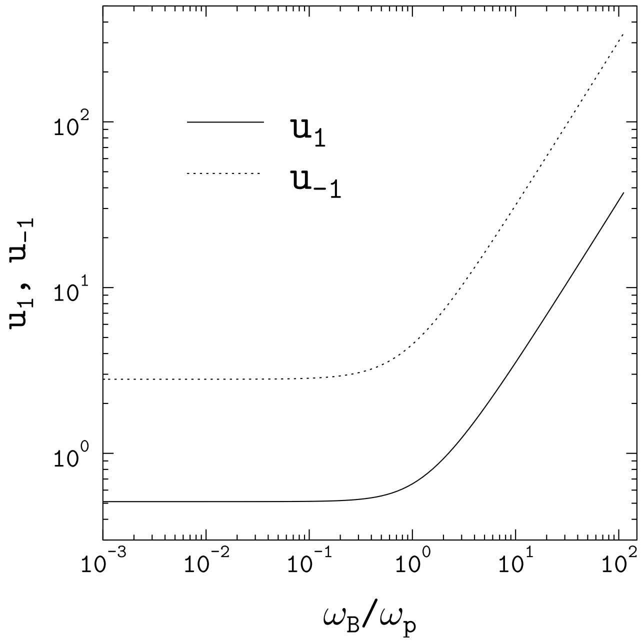

Рис. 13: Зависимость моментов фононного спектра от величины магнитного поля при условии, что направление поля соответствует минимуму энергии нулевых колебаний (т.е. совпадает с направлением на ближайшего соседа).

ствии с формулой (92) главы 1, имеем

$$\langle e^{i\hat{\mathbf{q}}\hat{\mathbf{u}}}\rangle_T = \exp\left[-\frac{\hbar^2}{MN}\sum_{\mathbf{k}s}\hat{q}^\lambda\hat{q}^\mu\alpha_s^{\lambda *}\alpha_s^\mu\left(\bar{n}_{\mathbf{k}s}+\frac{1}{2}\right)\right] = e^{-W(\hat{\mathbf{q}})}\ , \tag{36}$$

откуда $u_{\hat{\mathbf{q}}}^2 = 2W(\hat{\mathbf{q}})$.

2.7 Зависимость моментов спектра фононов от величины и направления магнитного поля

Моменты фононного спектра зависят как от величины, так и от направления магнитного поля. Наибольший интерес представляют моменты u_1 и u_{-1}. Момент u_{-2} расходится, $u_2 = 1+\rho_B^2$. Наконец, усреднённый логарифм частоты фононов от поля не зависит. Зависимости моментов u_1 и u_{-1} от величины магнитного поля в том случае, когда направление поля соответствует минимуму энергии нулевых колебаний, представлены на рис. 13. При больших магнитных полях оба момента ведут себя одинаково $\propto \rho_B$, хотя это связано с влиянием различных мод. В момент u_1 основной вклад даёт мода $\nu_3 \sim \omega_B$, тогда как в момент u_{-1} — мода $\nu_1 \propto B^{-1}$ в окрестности центра зоны Бриллюэна.

Зависимость моментов от направлений, вообще говоря, оказывается очень слабой. На рис. 14 показаны разности моментов $\Delta u_1 = u_1(\mathbf{n}_2) - u_1(\mathbf{n}_1)$ и $\Delta u_{-1} = u_{-1}(\mathbf{n}_2) - u_{-1}(\mathbf{n}_1)$, где $\mathbf{n}_1$ — направление магнитного поля на ближайшего соседа, и $\mathbf{n}_2$ — направление на соседа, расстояние до которого равно a_l, т.е. длине стороны куба ОЦК решётки.

Особенно важно поведение величины Δu_1, поскольку она определяет выигрыш нулевой энергии $E_0 = 1.5N\hbar\omega_p u_1$ при повороте осей кристалла относительно магнитного поля.

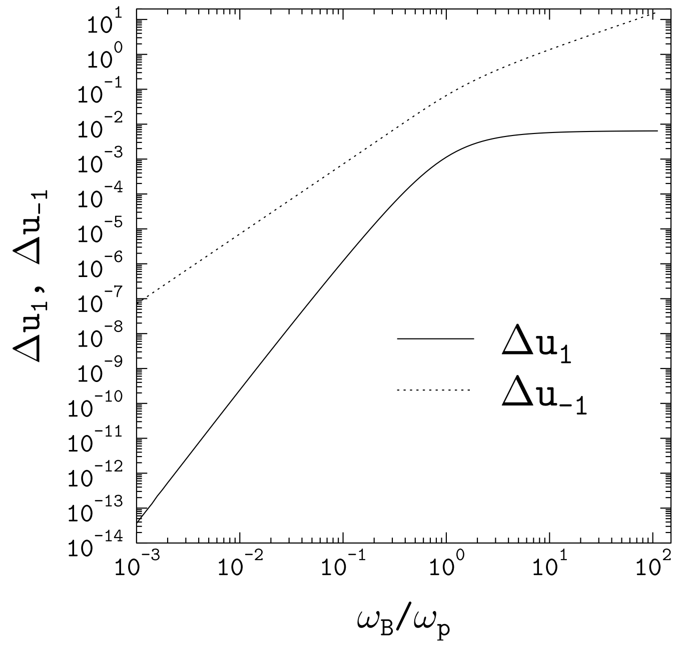

Рис. 14: Зависимость моментов фононного спектра от направления магнитного поля (см. детали в тексте).

При малых магнитных полях $1 > \rho_B \gtrsim 10^{-3}$ разность Δu_1 ведёт себя приблизительно как ρ_B^4. В сильных полях происходит насыщение Δu_1 при значении $\sim 10^{-2}$, зависящем от конкретного выбора сравниваемых направлений. Разность Δu_{-1} ведёт себя как ρ_B^2 при малых и как ρ_B при больших магнитных полях.

2.8 Заключение

В этой главе мы рассмотрели поведение кулоновского кристалла в однородном магнитном поле. При появлении магнитного поля качественно меняется спектр колебательных мод кулоновского кристалла. В частности, для простого (например, ОЦК) кристалла вместо двух акустических и одной оптической моды в центре зоны Бриллюэна имеется мягкая мода с частотой $\nu_1 \propto k^2$ и 2 оптические моды с частотами $\nu_{2,3} \to \text{const}$ при $k \to 0$. Лишь при $\mathbf{k} \perp \mathbf{B}$ в центре зоны, как и при $B = 0$, имеются 2 акустические моды и одна оптическая.

Характерным параметром, определяющим влияние поля на кристалл, является отношение $\rho_B = \omega_B/\omega_p$ ионной циклотронной частоты к ионной плазменной. Если $\rho_B \gg 1$, магнитное поле можно считать сильным, а при $\rho_B \ll 1$ — слабым. Даже очень сильное поле не оказывает влияния на статистическую сумму (а следовательно на термодинамические функции, плавление и т. п.) классического кристалла (т.е. кристалла, в котором тепловая энергия многократно превосходит энергию любой фононной моды). Отсюда вытекает интересное правило для фононного спектра, состоящее в том, что средний по фононным модам логарифм частоты колебаний не зависит от магнитного поля: $\langle \ln (\nu/\omega_p) \rangle_{\rm ph} = \text{const}(B)$.

Сильное магнитное поле резко меняет свойства квантовых кристаллов. Особенно ярко это проявляется при $\theta = \hbar\omega_p/T \gg 1$. Низкотемпературные асимптотики термодинамических функций качественно изменяются — соответствующие термодинамические функции при этом увеличиваются на порядки (рис. 3 — 8). Резко анизотропным становится смещение ионов из положения равновесия и связанный с этим смещением фактор Дебая-Уоллера (рис. 12). Поскольку подавляется смещение ионов поперёк поля, уменьшается и усреднённое по направлениям смещение, что, в соответствии с критерием Линдемана, приводит к увеличению стабильности, т.е. к увеличению температуры плавления кулоновского кристалла в квантовом режиме (рис. 11).

Зависимость термодинамических величин от направления магнитного поля относительно осей кристалла для ОЦК решётки является достаточно слабой (например, рис. 14). Тем не менее, если при низких температурах кристалл ориентирован так, что не достигается минимум энергии нулевых колебаний, то он будет стремиться изменить ориентацию с тем, чтобы минимизировать энергию нулевых колебаний. С другой стороны, можно ожидать, что кристаллизация в остывающем веществе происходит таким образом, чтобы направление на ближайшего соседа в образующемся кристалле совпало с направлением магнитного поля.

Глава 3

Прямой урка-процесс в сильных магнитных полях и остывание нейтронных звёзд

3.1 Введение

Начнём с краткого описания прямого урка-процесса в отсутствие магнитного поля. Под прямым урка-процессом мы понимаем цепочку реакций распада нейтрона $n \to e + p + \bar{\nu}_e$ и захвата электрона протоном $e + p \to n + \nu_e$. В силу обсуждаемых ниже условий, эти реакции имеют порог и могут иметь место только в наиболее плотных областях ядра нейтронной звезды. Пороговая плотность определяется уравнением состояния и, по-видимому, должна превосходить 10^{15} г см$^{-3}$. Родившись при столь высоких плотностях, нейтрино и антинейтрино беспрепятственно покидают нейтронную звезду, что ведёт к её остыванию. Хорошо известно, что если прямой урка-процесс разрешён, то он является доминирующим среди механизмов нейтринного охлаждения, превосходя на несколько порядков все остальные процессы эмиссии нейтрино (например, Петик [78]). Тем самым, он определяет остывание нейтронной звезды на нейтринной стадии (возраст $t \lesssim 10^5$ – 10^6 лет).

Обсудим причины, по которым реакции прямого урка-процесса имеют порог. При рассмотрении прямой урка-реакции в ядре нейтронной звезды надо принять во внимание несколько условий: 1) сохранение энергии и импульса; 2) условия бета-равновесия: $\mu_n = \mu_p + \mu_e$, где μ_α — химический потенциал; 3) сильное вырождение n, p и e. Объединяя условие бета-равновесия с законом сохранения энергии, нетрудно заключить, что энергия нейтрино $\varepsilon_\nu \sim |\varepsilon_\alpha - \mu_\alpha| \sim T$. Следовательно, импульс нейтрино мал по сравнению с фермиевскими импульсами остальных реагирующих частиц, $p_{\mathrm{F}\alpha}$. С другой стороны, типичные импульсы n, p и e примерно равны их фермиевским импульсам, так что импульсом нейтрино можно пренебречь при рассмотрении сохранения импульса. Мы имеем $\mathbf{p}_n \simeq \mathbf{p}_p + \mathbf{p}_e$, и из правила треугольника получаем $p_{\mathrm{F}n} \leq p_{\mathrm{F}p} + p_{\mathrm{F}e}$. Это и есть искомое условие порога. Его можно переформулировать на языке концентраций частиц, используя равенство $p_{\mathrm{F}\alpha} = \hbar(3\pi^2 n_\alpha)^{1/3}$. Предполагая, для простоты, что $n_e = n_p$ (что подразумевает отсутствие других заряженных частиц, например, мюонов и гиперонов), получим пороговое условие в виде $n_p \geq n_n/8$, что, в принципе, достаточно трудно реализовать для многих уравнений состояния. Тем не менее, некоторые уравнения состояния допускают столь большую долю протонов при довольно высоких плотностях вещества (например, Латтимер и др. [56]). С другой стороны, существуют уравнения состояния плотного вещества, в которых доля протонов уменьшается с ростом плотности, и пороговая плотность вообще не достигается (например, Виринга и др. [101]).

В этой главе изучается возможность включения прямого урка-процесса при наличии внешнего магнитного поля B при условии, что доля протонов мала, и процесс запрещён при $B = 0$. Бета-распад и связанные с ним реакции в сильных магнитных полях изучались с конца 60-х годов (например, Кануто и Чью [20], Дорофеев и др. [25], Лай и Шапиро [54], а также ссылки, приведенные в этих работах). Однако, эти результаты были получены при различных упрощающих предположениях (постоянство матричного элемента, невырожденные нуклоны и т.п.) и не позволяют определить энерговыделение в реакции прямого урка-процесса в ядрах нейтронных звёзд. Несколько работ на эту тему появилось в самые последние годы. Леинсон и Перез [57] рассмотрели случай сверхсильных магнитных полей ($B \gtrsim 10^{18}$ Гс), в которых электроны и протоны заселяют только основные уровни Ландау. Было обнаружено, что подобные поля позволяют избавиться от требования высокой доли протонов, прямой урка-процесс разрешён всегда и приводит к быстрому остыванию нейтронной звезды. Случай сверхсильных полей изучался также Бандопадхаем и др. [12]. Однако, эти авторы пришли к выводу, что условие “$p_{\mathrm{F}n} \leq p_{\mathrm{F}p} + p_{\mathrm{F}e}$” (кавычки поставлены потому, что в сверхсильных магнитных полях надо быть осторожным с определением фермиевского импульса) по-прежнему определяет порог прямого урка-процесса, и что столь сильные поля усиливают энерговыделение реакции в разрешённой области на 1-2 порядка по сравнению со стандартным значением

$$Q_\nu^0 = 4 \cdot 10^{27} (n_e/n_0)^{1/3}\ T_9^6\ \frac{m_n^* m_p^*}{m_n m_p}\ \text{эрг см}^{-3}\ \text{с}^{-1}\ . \tag{1}$$

Здесь $T_9 = T/10^9$ К, n_e — концентрация электронов, $n_0 = 0.16$ фм$^{-3}$, m_n^* и m_p^* — эффективные массы нуклонов в плотном веществе, а m_n и m_p — массы свободных частиц.

Данная глава построена следующим образом.

В разделе 2 проанализирован закон сохранения импульса в магнитном поле и качественно пояснено, каким образом магнитное поле помогает открыть прямой урка-процесс. В разделе 3 получено общее выражение для скорости нейтринного энерговыделения Q_ν в прямом урка-процессе. В разделе 4 рассмотрен наиболее реалистический случай не предельно высоких (хотя и очень высоких; $B \leq 3 \cdot 10^{16}$) полей, в которых заряженные частицы заселяют много уровней Ландау. Мы покажем, что магнитное поле позволяет открыть процесс за пределами области $p_{\mathrm{F}n} < p_{\mathrm{F}p} + p_{\mathrm{F}e}$, разрешённой при $B = 0$ (применяется стандартное определение p_{F}, как при $B = 0$). В разделе 5 мы иллюстрируем этот результат, путём моделирования остывания замагниченной нейтронной звезды с несверхтекучей внутренней частью ядра и с нейтронной сверхтекучестью во внешней части. Наконец, в разделе 6 кратко рассмотрен случай сверхсильных полей и показано, что результаты Леинсона и

Переза [57] в целом верны, хотя не очень точны в деталях, а результаты Бандопадхая и др. [12] неверны.

3.2 Несохранение импульса при $B \neq 0$

Проанализируем несохранение импульса в ненулевом магнитном поле. Пусть поле направлено вдоль оси z. При вычислении матричного элемента потенциала взаимодействия следует вычислить интеграл по всему пространству [см. раздел 3, формулу (4)]. В нулевом поле волновые функции частиц представляют собой плоские волны. В результате интегрирования возникает дельта-функция, отвечающая за сохранение импульса:

$$\int \mathrm{d}\mathbf{r}\, e^{i\mathbf{r}(\mathbf{p}_n-\mathbf{p}_p-\mathbf{p}_e-\mathbf{p}_\nu)/\hbar} \to (2\pi\hbar)^3\delta(\mathbf{p}_n-\mathbf{p}_p-\mathbf{p}_e-\mathbf{p}_\nu)\ . \tag{2}$$

Если поле конечно, то заряженные частицы можно описывать состояниями Ландау. В калибровке Ландау $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ ($\mathbf{A}$ — векторный потенциал) состояния частиц можно задавать следующими квантовыми числами: импульсом нейтрона $\mathbf{p}_n$, x- и z-компонентами импульсов протона и электрона p_{px}, p_{pz}, p_{ex} и p_{ez}, а также номерами уровней Ландау протонов и электронов, $\mathrm{n}_p \equiv n'$ и $\mathrm{n}_e \equiv n$. Имеются также спиновые квантовые числа, несущественные в этом разделе. Если мы теперь проинтегрируем по всему пространству, то получим дельта-функции, сохраняющие импульс вдоль направлений x и z, однако, интегрируя по y, мы получим другую функцию, поскольку зависимость волновых функций заряженных частиц от y содержит полиномы Эрмита:

$$\int \mathrm{d}y\, e^{iyp_{ny}/\hbar} \exp\left(-\frac{|e|By^2}{\hbar c}\right) H_{\mathrm{n}_p}\left(\sqrt{\frac{|e|B}{\hbar c}}y\right) H_{\mathrm{n}_e}\left(\sqrt{\frac{|e|B}{\hbar c}}y\right)\ . \tag{3}$$

Если $B \neq 0$, то x-компоненты импульсов заряженных частиц неважны с точки зрения динамики реакции, поскольку энергия поперечного движения определяется только номером уровня Ландау частицы. [По этой причине мы положили их равными нулю в выражении (3), служащем для качественной иллюстрации.] Мы можем, следовательно, ввести модуль импульса частицы, который определяет её энергию, как $p = \sqrt{p_z^2 + p_\perp^2}$, где $p_{\alpha\perp}^2 = 2\mathrm{n}_\alpha|e|B\hbar/c$. Таким образом, в магнитном поле поперечный импульс не сохраняется, и именно это приводит к возможности прямого урка-процесса в кинематически запрещённой в нулевом поле области (при $n_p < n_n/8$).

3.3 Квантовый формализм

В этом разделе мы получим общую формулу для скорости нейтринного энерговыделения в прямом урка-процессе, пригодную для магнитных полей $B \ll 10^{20}$ Гс (при более высоких полях нуклоны становятся релятивистскими). Расчёт проводится в борновском приближении с использованием стандартного формализма квантовой механики. Слабые взаимодействия описываются по теории Вейнберга-Салама-Глэшоу. Как обычно, считаем, что электроны являются ультрарелятивистскими, а протоны и нейтроны нерелятивистскими. Все эти частицы сильно вырождены. Частота переходов из начального состояния $|i\rangle$ в конечное состояние $|f\rangle$ есть $Q_{fi} = 2\pi\hbar^{-1}V^{-1}|\langle f|\mathcal{H}|i\rangle|^2\delta(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i)$, где V — нормировочный объём, и $\mathcal{H}$ описывает слабое взаимодействие в формализме вторичного квантования. Для распада нейтрона имеем ($c = \hbar = 1$)

$$\mathcal{H} = \frac{G}{\sqrt{2}} \int_{(V)} \mathrm{d}\mathbf{r}\ \hat{\psi}_p^\dagger(\delta_{\mu 0} - g_A\delta_{\mu i}\sigma_i)\hat{\psi}_n\ \hat{\bar{\psi}}_e\gamma_\mu(1+\gamma^5)\hat{\psi}_\nu\ . \tag{4}$$

Здесь $G = G_F \cos\theta_C$, $G_F = 1.436 \cdot 10^{-49}$ эрг см^3 фермиевская константа связи для слабого взаимодействия, $\theta_C \approx 13^{\circ}$ угол Кабиббо, $g_A = 1.261$ — аксиально-векторная константа связи, σ_i — матрицы Паули, и γ_μ — матрицы Дирака. Наконец, $\hat{\psi}_\alpha$ — полевые операторы в координатном представлении, т.е. выражения вида $\sum_q \hat{a}_q\psi_q(\mathbf{r})$, где q обозначает полный набор квантовых чисел, $\hat{a}_q$ — операторы уничтожения, и $\psi_q(\mathbf{r})$ — собственные функции.

Для расчёта энерговыделения величину Q_{fi} следует умножить на энергию рождённого антинейтрино и просуммировать по всем начальным и конечным состояниям. Прежде всего, мы можем просуммировать матричный элемент $|\langle f|\mathcal{H}|i\rangle|^2$ по электронным спиновым состояниям. Сохраняющая энергию дельта-функция при таком суммировании может быть вынесена за скобку, поскольку все, за исключением основного, электронные состояния вырождены по спину. Выбирая калибровку Ландау для векторного потенциала (см. раздел 2) и производя довольно громоздкие преобразования, получим

$$\sum_{\sigma_e} |\langle f|\mathcal{H}|i\rangle|^2 \;=\; \frac{(2\pi)^2 M}{L_x L_z V^2}\,\delta(p_{nz} - p_{ez} - p_{pz} - p_{\nu z})\,\delta(p_{nx} - p_{ex} - p_{px} - p_{\nu x})\ , \tag{5}$$

где

$$\begin{aligned}
\frac{M}{G^2} \;&=\; \frac{1}{2}\,\delta_{s_p s_n}\,(1+g_A^2)\,\left[\left(1-\frac{p_{ez}}{\varepsilon_e}\right)\left(1-\frac{p_{\nu z}}{\varepsilon_\nu}\right)F'^2 + \left(1+\frac{p_{ez}}{\varepsilon_e}\right)\left(1+\frac{p_{\nu z}}{\varepsilon_\nu}\right)F^2\right] \\
&-\; \delta_{s_p s_n}\,g_A\,s_p\,\left[\left(1-\frac{p_{ez}}{\varepsilon_e}\right)\left(1-\frac{p_{\nu z}}{\varepsilon_\nu}\right)F'^2 - \left(1+\frac{p_{ez}}{\varepsilon_e}\right)\left(1+\frac{p_{\nu z}}{\varepsilon_\nu}\right)F^2\right] \\
&+\; 2\,\delta_{s_p,1}\,\delta_{s_n,-1}\,g_A^2\,\left(1+\frac{p_{ez}}{\varepsilon_e}\right)\left(1-\frac{p_{\nu z}}{\varepsilon_\nu}\right)F^2 + 2\,\delta_{s_p,-1}\,\delta_{s_n,1}\,g_A^2\,\left(1-\frac{p_{ez}}{\varepsilon_e}\right)\left(1+\frac{p_{\nu z}}{\varepsilon_\nu}\right)F'^2 \\
&+\; \delta_{s_p s_n}\,(1-g_A^2)\frac{p_{e\perp}}{\varepsilon_e}\frac{\mathbf{p}_\nu\mathbf{q}}{\varepsilon_\nu q}\,FF'\ .
\end{aligned} \tag{6}$$

В этих формулах $p_{\alpha i}$ — декартовы компоненты импульсов частиц, ε_α — энергии частиц, $s_p = \pm 1$ и $s_n = \pm 1$ — удвоенные проекции спинов протона и нейтрона на направление магнитного поля, $p_{e\perp} = \sqrt{2bn}$, $b \equiv |e|B$, $\mathbf{p}_\nu$ — импульс антинейтрино, $\mathbf{q} = (p_{nx} - p_{\nu x}, p_{ny} - p_{\nu y}, 0)$; L_x и L_z — нормировочные длины. Наконец, $F = F_{n',n}(u)$ и $F' = F_{n',n-1}(u)$ — функции Лагерра (например, Каминкер и Яковлев [47]), и $u = q^2/(2b)$. Если какой-либо из индексов (n или n') отрицателен, то $F_{n,n'}(u) = 0$.

Следующий шаг состоит в интегрировании по x-компонентам импульсов протона и электрона, которые определяют y-координату плоскости локализации этих частиц. Эта операция дает множитель $L_x^2 L_y b/(2\pi)^2$ и уничтожает вторую дельта-функцию в равенстве

(5). Таким образом, мы можем написать общую формулу для нейтринного энерговыделения (включая обратную реакцию, удваивающую результат) как

$$\begin{aligned} Q_\nu &= \frac{2b}{(2\pi)^7} \sum_{nn' s_p s_n} \int \mathrm{d}\mathbf{p}_n \, \mathrm{d}\mathbf{p}_\nu \, \mathrm{d}p_{pz} \, \mathrm{d}p_{ez} \, f_n \, (1 - f_p) \, (1 - f_e) \, \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_e - \varepsilon_p - \varepsilon_\nu) \, \varepsilon_\nu \\ &\times \; \delta(p_{nz} - p_{ez} - p_{pz} - p_{\nu z}) \, M. \end{aligned} \tag{7}$$

Здесь $f_\alpha = (1 + \exp\left[(\varepsilon_\alpha - \mu_\alpha)/T\right])^{-1}$ — функция распределения Ферми-Дирака, а энергии частиц определяются известными выражениями

$$\begin{aligned} \varepsilon_e &= \sqrt{m_e^2 + p_{ez}^2 + 2bn}, \\ \varepsilon_p &= \frac{p_{pz}^2}{2m_p^*} + \left[n' + \frac{1}{2} \left(1 - g_p s_p \frac{m_p^*}{m_p} \right) \right] \frac{b}{m_p^*}, \\ \varepsilon_n &= \frac{p_n^2}{2m_n^*} - \frac{g_n s_n b}{2m_p}, \qquad \varepsilon_\nu = p_\nu, \end{aligned} \tag{8}$$

с гиромагнитными отношениями $g_p = 2.79$ и $g_n = -1.91$ для протонов и нейтронов. В принципе, множители g_A, g_p, g_n могут перенормироваться в плотном веществе — эффект, которым мы для простоты пренебрегаем.

Поскольку электронная и протонная функции распределения не зависят от знаков p_{ez} и p_{pz}, мы можем упростить выражение для M опустив члены, которые всё равно дадут ноль после интегрирования:

$$\begin{aligned} \frac{M}{G^2} &= \frac{1}{2} \, \delta_{s_p s_n} (1 + g_A^2) \left[\left(1 + \frac{p_{ez}}{\varepsilon_e} \frac{p_{\nu z}}{\varepsilon_\nu} \right) F'^2 + \left(1 + \frac{p_{ez}}{\varepsilon_e} \frac{p_{\nu z}}{\varepsilon_\nu} \right) F^2 \right] \\ &- \; \delta_{s_p s_n} \, g_A \, s_p \left[\left(1 + \frac{p_{ez}}{\varepsilon_e} \frac{p_{\nu z}}{\varepsilon_\nu} \right) F'^2 - \left(1 + \frac{p_{ez}}{\varepsilon_e} \frac{p_{\nu z}}{\varepsilon_\nu} \right) F^2 \right] \\ &+ \; 2 \, \delta_{s_p,1} \, \delta_{s_n,-1} \, g_A^2 \left(1 - \frac{p_{ez}}{\varepsilon_e} \frac{p_{\nu z}}{\varepsilon_\nu} \right) F^2 + 2 \, \delta_{s_p,-1} \, \delta_{s_n,1} \, g_A^2 \left(1 - \frac{p_{ez}}{\varepsilon_e} \frac{p_{\nu z}}{\varepsilon_\nu} \right) F'^2 \\ &+ \; \delta_{s_p s_n} (1 - g_A^2) \, \frac{p_{e\perp}}{\varepsilon_e} \, \frac{\mathbf{p}_\nu \mathbf{q}}{\varepsilon_\nu q} \, F F'. \end{aligned} \tag{9}$$

Учёт $p_{\nu z}$ в дельта-функции, сохраняющей импульс вдоль оси z в равенстве (7), приводит к слабому температурному эффекту, а именно, к сглаживанию результирующих функций на масштабах температуры. Мы не стремимся к аккуратному описанию этого эффекта, поскольку соответствующий расчёт является трудным, а также потому, что температурный масштаб действительно мал по сравнению с другими энергетическими масштабами, присутствующими в данной задаче. Поэтому пренебрежём нейтринным импульсом в дельта-функции и, по той же причине, опустим его в определении вектора $\mathbf{q}$. Тогда, используя изотропию нейтронного распределения, можно ещё более упростить выражение для M:

$$\begin{aligned} \frac{M}{G^2} &= 2g_A^2 \left(\delta_{s_p,1} \, \delta_{s_n,-1} \, F^2 + \delta_{s_p,-1} \, \delta_{s_n,1} \, F'^2 \right) + \frac{1}{2} \, \delta_{s_p s_n} (1 + g_A^2) \left(F'^2 + F^2 \right) \\ &- \; \delta_{s_p s_n} \, g_A \, s_p \left(F'^2 - F^2 \right), \end{aligned} \tag{10}$$

где функции F и F' зависят теперь от $u = (p_{nx}^2 + p_{ny}^2)/(2b) \equiv p_{n\perp}^2/(2b)$.

Отметим, что результаты этого и последующих разделов в равной степени пригодны для изучения прямого урка-процесса с участием гиперонов. Соответствующие результаты для гиперонов легко получаются заменой значений констант реакции (g_A и т. д.), как описано, например, Пракашем и др. [86].

3.4 Квазиклассический случай

3.4.1 Общее рассмотрение и предел $B \to 0$

Прежде всего рассмотрим наиболее реалистический случай не слишком сильных магнитных полей, в которых электроны и протоны заселяют много уровней Ландау. В этом случае поперечные длины волн электронов и протонов много меньше, чем их ларморовские радиусы. Поэтому мы имеем дело с квазиклассическим случаем. Если основной вклад связан с большими n и n', можно пренебречь различием между F^2 и F'^2. Более того, можно пренебречь вкладом спиновых магнитных моментов в энергию частиц. Тогда все функции энергии выносятся за знак суммы по s_n и s_p, и сумма вычисляется в явном виде:

$$\sum_{s_n s_p} M = 2\,G^2\,(1+3g_A^2)\,F^2. \tag{11}$$

Подставляя это равенство в (7) и интегрируя по направлениям импульса нейтрино, получаем

$$\begin{aligned} Q_\nu &= \frac{16\pi G^2\,(1+3g_A^2)\,b}{(2\pi)^7}\int \mathrm{d}\varepsilon_\nu\,\mathrm{d}\mathbf{p}_n\,\mathrm{d}p_{pz}\,\mathrm{d}p_{ez}\,\varepsilon_\nu^3 \\ &\times \sum_{nn'} F^2_{n',n}(u)\,f_n\,(1-f_p)\,(1-f_e)\,\delta(\varepsilon_n-\varepsilon_e-\varepsilon_p-\varepsilon_\nu)\,\delta(p_{nz}-p_{ez}-p_{pz}), \end{aligned} \tag{12}$$

где

$$\varepsilon_p = \frac{p_{pz}^2+p_{p\perp}^2}{2m_p^*}, \quad \varepsilon_n = \frac{p_n^2}{2m_n^*}, \tag{13}$$

$p_{p\perp}=\sqrt{2bn'}$, тогда как энергия электрона по-прежнему даётся выражением (8).

Если магнитное поле не слишком велико, то поперечные импульсы электрона и протона $p_{e\perp}^2$ и $p_{p\perp}^2$, соответствующие целым индексам n и n', заполняют с очень мелким шагом всю возможную область значений, и двойная сумма в выражении (12) может быть аппроксимирована двойным интегралом по $p_{e\perp}^2$ и $p_{p\perp}^2$,

$$2b\sum_{nn'} F^2_{n',n}(u)\ldots \to \int \mathrm{d}p_{e\perp}^2\mathrm{d}p_{p\perp}^2\;\mathcal{F}\ldots\,, \tag{14}$$

где $\mathcal{F}$ есть асимптотика при малых b функции

$$\frac{1}{2b}F^2_{Np,Ne}(u)\,, \tag{15}$$

$N_p \equiv p_{p\perp}^2/(2b)$ и $N_e \equiv p_{e\perp}^2/(2b)$.

После замены двойной суммы двойным интегралом выражение (12) существенно упрощается. Отметим, что $\mathrm{d}p_z\,\mathrm{d}p_\perp^2 = \mathrm{d}\mathbf{p}/\pi = 2m^*\,\mathrm{d}\varepsilon\,p\,\sin\theta\,\mathrm{d}\theta$, где θ — питч-угол. Тогда энергетический интеграл $\int \mathrm{d}\varepsilon_n\,\mathrm{d}\varepsilon_p\,\mathrm{d}\varepsilon_e\,\mathrm{d}\varepsilon_\nu$ берётся, если предположить, что температурный масштаб мал и приводит к наиболее резким изменениям подынтегральной функции. Если так, можно положить $p = p_{\mathrm{F}} = (3\pi^2 n)^{1/3}$, $\varepsilon = \varepsilon_{\mathrm{F}}$ и т. д. во всех остальных функциях. (В принципе, это предположение ограничивает область применимости результатов. Мы вернёмся к этому вопросу в конце раздела.) Наконец, мы проинтегрируем по азимутальному углу нейтронного импульса, а также, по его полярному углу — чтобы использовать сохраняющую импульс дельта-функцию — и получим

$$\begin{aligned}
Q_\nu &= Q_\nu^0 \cdot R_B^{\mathrm{qc}}; \\
Q_\nu^0 &= \frac{457\pi\, G^2\,(1+3g_A^2)}{10080}\, m_n^*\, m_p^*\, \mu_e\, T^6, \\
R_B^{\mathrm{qc}} &= 2\int\!\!\int_{-1}^{1} \mathrm{d}\cos\theta_p\,\mathrm{d}\cos\theta_e\, \frac{p_{\mathrm{F}p}p_{\mathrm{F}e}}{4b}\, F_{Np,Ne}^2(u)\,\Theta(p_{\mathrm{F}n} - |p_{\mathrm{F}p}\cos\theta_p + p_{\mathrm{F}e}\cos\theta_e|), \qquad (16)
\end{aligned}$$

где Q_ν^0 — скорость потерь энергии (1) в отсутствие магнитного поля, и множитель R_B^{qc} описывает эффект магнитного поля. Далее, $p_{p,e\perp} = p_{\mathrm{F}p,e}\sin\theta_{p,e}$, и $p_{n\perp}^2$ теперь определяется выражением $p_{\mathrm{F}n}^2 - (p_{\mathrm{F}p}\cos\theta_p + p_{\mathrm{F}e}\cos\theta_e)^2$; $\Theta(x) = 1$ при $x > 0$, $\Theta(x) = 0$ при $x < 0$.

Асимптотическое поведение (15) зависит от соотношения между аргументом функции F и её индексами. Анализ показывает, что существуют три области изменения этих параметров: (I) $p_{n\perp} < |p_{p\perp} - p_{e\perp}|$; (II) $|p_{p\perp} - p_{e\perp}| < p_{n\perp} < (p_{p\perp} + p_{e\perp})$; и (III) $(p_{p\perp} + p_{e\perp}) < p_{n\perp}$. В областях (I) и (III) исследуемые асимптотики затухают экспоненциально, при удалении $p_{n\perp}$ от области (II). В обоих случаях показатели экспонент обратно пропорциональны b, и обе асимптотики стремятся к нулю при $b \to 0$, хотя и неравномерно в окрестностях границ области (II) (которые являются точками поворота). В области (II) асимптотика выражения (15) осциллирует по закону

$$\mathcal{F} \approx \frac{1}{\pi p b}\cos^2\Phi\ , \quad p = \sqrt{4N_pN_e - (N_p + N_e - u)^2}\ , \qquad (17)$$

с префактором, который, в действительности, не зависит от b. Фаза косинуса

$$\begin{aligned}
\Phi &= -(1+N_p)\arg(u + N_p - N_e, -ip) + N_e\arg(u + N_e - N_p, ip) - \frac{p-\alpha}{2}\ , \qquad (18) \\
\mathrm{e}^{i\alpha} &= \frac{p(N_p - N_e) + i\,[(N_p - N_e)^2 - u(N_p + N_e)]}{2u\sqrt{N_pN_e}}\ ,
\end{aligned}$$

где $\arg(z)$ — аргумент комплексного числа z, лежащий в интервале $[-\pi, \pi]$. Для целых индексов эта формула совпадает с формулой (30) работы [47]. Она также распространяет $\mathcal{F}$ на нецелые индексы. Можно показать, что естественным продолжением $F_{Np,Ne}^2(u)/(2b)$ в область нецелых индексов является аналитическая функция $W_{km}^2(u)/[2bu\Gamma(N_e+1)\Gamma(N_p+1)]$, где $W_{km}(u)$ — функция Уиттекера, $u = p_{n\perp}^2/(2b)$, $k = (1 + N_p + N_e)/2$, и $m = (N_e - N_p)/2$. Равенства (17) и (18) выведены с использованием асимптотик $W_{km}(u)$ при малых b, которые, в свою очередь, могут быть получены из интегрального представления этой функции методом перевала.

Приведённой информации достаточно, чтобы проверить, воспроизводит ли $R_B^{\rm qc}$ функцию Хевисайда $\Theta(p_{{\rm F}p}+p_{{\rm F}e}-p_{{\rm F}n})$, описывающую порог реакции в пределе $b\to 0$. Если $p_{{\rm F}n}>p_{{\rm F}p}+p_{{\rm F}e}$, мы всегда находимся в области (III) (поскольку z-компонента импульса сохраняется), и $R_B^{\rm qc}\to 0$. Если, наоборот, $p_{{\rm F}n}<p_{{\rm F}p}+p_{{\rm F}e}$, интегрирование в формуле (16) захватывает все три области, причём граница области (II) соответствует обнулению выражения под корнем в (17). Вклад областей (I) и (III) опять равен нулю, а интеграл по области (II) дает в точности 1. Чтобы убедиться в этом, достаточно положить быстро осциллирующий $\cos^2\Phi$ в (17) равным 1/2 и заменить переменные интегрирования: $s=\cos\theta_p+\cos\theta_e$, $t=\cos\theta_p-\cos\theta_e$. Во всех случаях тета-функция в равенстве (16) не играет никакой роли.

3.4.2 Эффект магнитного поля в запрещённой области ($p_{{\rm F}n}>p_{{\rm F}p}+p_{{\rm F}e}$)

В соответствии с аргументами, приведёнными в разделе 2, в магнитном поле конечной величины можно ожидать, что граница между режимами открытого и закрытого прямого урка-процесса будет размыта на некотором масштабе, зависящем от величины магнитного поля. В выражении (12) возможность несохранения поперечного импульса реализована появлением функции F, имеющей хоть и малый, но ненулевой “хвост” в области (III), кинематически запрещённой в нулевом поле. Это имеет важное значение для остывания нейтронных звёзд (раздел 5), поскольку даже будучи экспоненциально подавленным на несколько порядков, прямой урка-процесс может по-прежнему оставаться доминирующим механизмом энергетических потерь.

Для того чтобы исследовать эту возможность, следует вычислить Q_ν по формуле (12). Мы использовали два подхода, один из которых является квазиклассическим и позволяет провести быстрое вычисление, а другой носит квантовый характер, является более точным, но требует больших затрат компьютерного времени.

Удобно ввести два параметра, x и y, характеризующих кинематику реакции в сопоставлении с масштабом магнитного поля:

$$x=\frac{p_{{\rm F}n}^2-(p_{{\rm F}p}+p_{{\rm F}e})^2}{p_{{\rm F}p}^2\,N_{{\rm F}p}^{-2/3}},\quad y={N_{{\rm F}p}}^{2/3}, \tag{19}$$

где $N_{{\rm F}p}=p_{{\rm F}p}^2/(2b)$ — число уровней Ландау, заселённых протонами. С практической точки зрения, наиболее интересен случай не очень больших положительных x (скажем, $x\lesssim 10$), поскольку если $p_{{\rm F}n}$ существенно превосходит $p_{{\rm F}p}+p_{{\rm F}e}$, реакция подавлена слишком сильно. Первый подход основан на выражении (16). Основной вклад в этот интеграл даёт окрестность линии $\theta_p=\theta_e$, соответствующей наименьшему расстоянию от $p_{n\perp}$ до области (II). Поскольку это расстояние не должно быть большим, в (16) можно использовать асимптотику (15) при малых b в окрестности правой точки поворота, т.е. при $p_{n\perp}\approx p_{p\perp}+p_{e\perp}$. Эта асимптотика дана, например, Каминкером и Яковлевым [47] и имеет вид

$$F_{Np,Ne}^2(u)\ \approx\ \frac{(2b)^{2/3}(p_{p\perp}p_{e\perp})^{-1/3}}{(p_{p\perp}+p_{e\perp})^{2/3}}\ {\rm Ai}^2(\xi)=\frac{(\sin\theta_p\sin\theta_e)^{-1/3}}{y\,(\sin\theta_p+\sin\theta_e)^{2/3}}\ {\rm Ai}^2(\xi), \tag{20}$$

$$\xi = \frac{[p_{n\perp}^2 - (p_{p\perp} + p_{e\perp})^2]\,(p_{p\perp}p_{e\perp})^{1/3}}{(2b)^{2/3}(p_{p\perp} + p_{e\perp})^{4/3}} \approx [x + 2y\,(1 - \cos(\theta_p - \theta_e))]\,\frac{(\sin\theta_p \sin\theta_e)^{1/3}}{(\sin\theta_p + \sin\theta_e)^{4/3}},$$

где $\mathrm{Ai}(\xi)$ — функция Эйри, определённая так же, как и в справочнике Абрамовица и Стиган [1]. Кроме того, мы положили $p_{\mathrm{F}p} = p_{\mathrm{F}e}$. При отрицательных аргументах, которые отвечают области (II), функция Эйри осциллирует, тогда как при положительных аргументах, т.е. в области (III), экспоненциально затухает, приближаясь к асимптотике

$$\mathrm{Ai}^2(\xi) \approx \frac{1}{4\pi\sqrt{\xi}}\ \exp\left(-\frac{4}{3}\xi^{3/2}\right), \qquad \xi \gg 1. \tag{21}$$

Подставив последнее выражение в равенство (16), мы получим, что при относительно больших x

$$R_B^{\mathrm{qc}} \approx \sqrt{\frac{y}{x + 12\,y}}\ \frac{3}{x^{3/2}}\ \exp\left(-\frac{x^{3/2}}{3}\right). \tag{22}$$

При очень больших x эта асимптотика может служить лишь для ориентира, поскольку формула (20) не работает вдали от точки поворота.

С другой стороны, в квазиклассике всегда $y \gg 1$. Это позволяет ещё более упростить выражение (16) при любом x, используя (20) и замечая, что все функции могут быть разложены в окрестности линии $\theta_p = \theta_e$. Тогда получим

$$\begin{aligned} R_B^{\mathrm{qc}} &= 2^{-2/3}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}s\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\,\sin^{2/3}\theta\ \mathrm{Ai}^2(\xi), \\ \xi &= \frac{x + s^2}{2^{4/3}\sin^{2/3}\theta}. \end{aligned} \tag{23}$$

При $x = 0$ этот интеграл берется аналитически и даёт $R_B^{\mathrm{qc}} = 1/3$. Подставляя (21), легко убедиться в том, что при $x \ll 12y$ выражение (23) воспроизводит асимптотику (22).

Наконец, мы рассчитали множитель R_B^{qc} при $N_{\mathrm{F}p} \equiv y^{3/2} = 100$, 1000, 10000 и x от 0 до 20, используя оба квазиклассических метода: во-первых, по формуле (16) в приближении (20) и, во-вторых, по формуле (23). В обоих случаях были получены практически одинаковые результаты, что свидетельствует о том, что для указанных комбинаций x и y зависимость R_B^{qc} от y несущественна. Эти результаты показаны на рис. 1 пустыми кружками. Короткие штрихи изображают асимптотику (22).

В квазиклассическом подходе были сделаны два приближения: во-первых, мы заменили сумму интегралом при *конечном* b, и, во-вторых, в качестве F мы подставили асимптотику в виде функции Эйри. Чтобы проверить справедливость обоих упрощений был использован квантовый подход, основанный непосредственно на формуле (12).

Если в (12) заменить интегрирование по p_z интегрированием по ε, подынтегральная функция станет сингулярной [появятся знаменатели вида $\sqrt{\varepsilon(p_z) - \varepsilon(p_z = 0)}$]. Если $T \to 0$, величина Q_ν/T^6 будет расходится при целых $N_{\mathrm{F}p}$. При ненулевой температуре эта величина остаётся сходящейся, но осциллирует как функция магнитного поля и плотности. Эти осцилляции хорошо известны и проявляются в поведении многих величин (намагниченность, электро- и теплопроводность и т.п., например, Ландау и Лифшиц [55]). Осцилляции

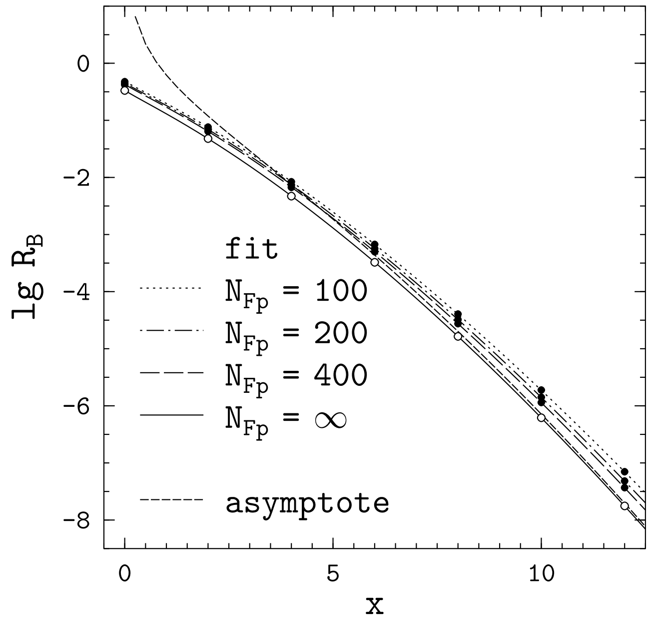

Рис. 1: Логарифм R_B как функция x в запрещённой области $\Delta p \equiv p_{\mathrm{F}n} - p_{\mathrm{F}p} - p_{\mathrm{F}e} > 0$ для различных значений $N_{\mathrm{F}p}$. Пустые кружки соответствуют квазиклассическому приближению (R_B^{qc}), нечувствительному к значению $N_{\mathrm{F}p}$, а сплошные кружки изображают квантовые численные результаты. Короткие штрихи отвечают асимптотике (22). Остальные кривые вычислены по аппроксимационной формуле (24).

связаны с заселением электронами и протонами новых уровней Ландау при изменении параметров плазмы.

Если тепловая энергия T превосходит расстояние между соседними уровнями Ландау, то осцилляции размываются. В более важном случае малых температур истинное нейтринное энерговыделение и в самом деле осциллирует. Однако, для приложений достаточно знать усреднённое по осцилляциям значение Q_ν (т.е. плавную кривую). Мы называем этот подход квантовым, поскольку в явном виде выполняется суммирование по уровням Ландау. Таким способом мы вычислили энерговыделение и усреднили по осцилляциям двумя различными методами. Оба метода приводят к практически неразличимым сглаженным Q_ν. Простое рассмотрение (см. конец раздела) показывает, что этот (нетепловой квантовый) подход справедлив при $T < \sqrt[3]{N_{\mathrm{F}p}}\,\omega_B$, или, что то же самое, при $N_{\mathrm{F}p}^{2/3} < \mu_p/T$, где ω_B — протонная гирочастота, и μ_p — химический потенциал протонов.

Результаты этих расчётов представлены на рис. 1 для $N_{\mathrm{F}p} = 100$, 200 и 400 сплошными кружками. Видно, что с ростом $N_{\mathrm{F}p}$ квантовый результат R_B стремится к квазиклассическому R_B^{qc}.

Мы также нашли аппроксимационную формулу, которая точно (ср. с рис. 1) описывает квантовые расчёты при $0 \le x \le 20$ и $N_{\mathrm{F}p} \ge 100$ и воспроизводит квазиклассическую кривую в пределе $N_{\mathrm{F}p} \to \infty$:

$$
\begin{aligned}
R_B &= \frac{(3x+6.800)\,R}{(x_c+6.800)(3+x\sqrt{12})}\,\exp\Bigl(-\frac{x_c}{3}\Bigr), \qquad (24)\\
R &= P_1 + P_2 \mathrm{e}^{P_3 x} + P_4 x,\\
P_1 &= 1 + \frac{3.801}{N_{\mathrm{F}p}^{0.5280}}, \quad P_2 = 1 + \frac{2.242}{N_{\mathrm{F}p}^{0.3498}} - P_1,\\
P_3 &= 0.07221 + \frac{1.751}{N_{\mathrm{F}p}^{0.5001}}, \quad P_4 = \frac{1.551}{N_{\mathrm{F}p}^{0.8128}},\\
x_c &= x\sqrt{x+0.4176} - 0.04035\,x.
\end{aligned}
$$

3.4.3 Эффект магнитного поля в разрешённой области ($p_{\mathrm{F}n} < p_{\mathrm{F}p} + p_{\mathrm{F}e}$)

Поскольку $R_B < 1$ при $x = 0$, то можно ожидать, что магнитное поле влияет на нейтринное энерговыделение также и в разрешённой области. Это в действительности так. Применив квазиклассическую формулу (23) при отрицательных x, мы получим для R_B^{qc} осциллирующую кривую, изображенную на рис. 2 пустыми кружками. Используя более точный квантовый подход, получим набор кривых для $N_{\mathrm{F}p} = 100$, 200 и 400, причем кривая с наибольшим $N_{\mathrm{F}p}$ снова оказывается наиболее близко расположенной к квазиклассическому результату. Природа этих достаточно плавных осцилляций — квазиклассическая и не имеет ничего общего с квантовыми осцилляциями, описанными выше. С практической точки зрения, они не очень важны, поскольку едва ли будут иметь заметное влияние на остывание нейтронной звезды. Отметим, что при $-20 \le x \le 0$ и $N_{\mathrm{F}p} \to \infty$ эти результаты с хорошей точностью аппроксимируются следующим выражением (сплошная кривая на рис. 2)

$$
\begin{aligned}
R_B &= 1 - \frac{\cos\varphi}{(0.5816+|x|)^{1.192}}, \qquad (25)\\
\varphi &= \frac{1.211 + 0.4823|x| + 0.8453|x|^{2.533}}{1 + 1.438|x|^{1.209}}.
\end{aligned}
$$

3.4.4 Обсуждение результатов

Напомним, что прямой урка-процесс при $B = 0$ разрешён в том случае, если невязка импульса $\Delta p \equiv p_{\mathrm{F}n} - p_{\mathrm{F}p} - p_{\mathrm{F}e} < 0$. При наличии магнитного поля это условие несколько ослабляется, и реакция становится достаточно эффективной при $x \lesssim 10$, т.е. $\Delta p / p_{\mathrm{F}n} \lesssim N_{\mathrm{F}p}^{-2/3}$. Если, к примеру, $B = 10^{16}$ Гс, и плотность вещества лежит вблизи порога прямого урка-процесса, то $N_{\mathrm{F}p} \sim 300$, и $\Delta p / p_{\mathrm{F}p} \lesssim 1/25$.

Интегральное влияние магнитного поля на нейтринную светимость проиллюстрировано на рис. 3. Для уравнения состояния Пракаша и др. [85] изображён логарифм полной скорости нейтринного энерговыделения как функция плотности вещества. Скачок сплошной кривой примерно на 7 порядков отвечает порогу прямого урка-процесса, $\Delta p = 0$. Кривые остальных типов демонстрируют влияние магнитного поля: при плотностях ниже пороговой импульс не сохраняется, и прямой урка-процесс оказывается подавленным, однако,

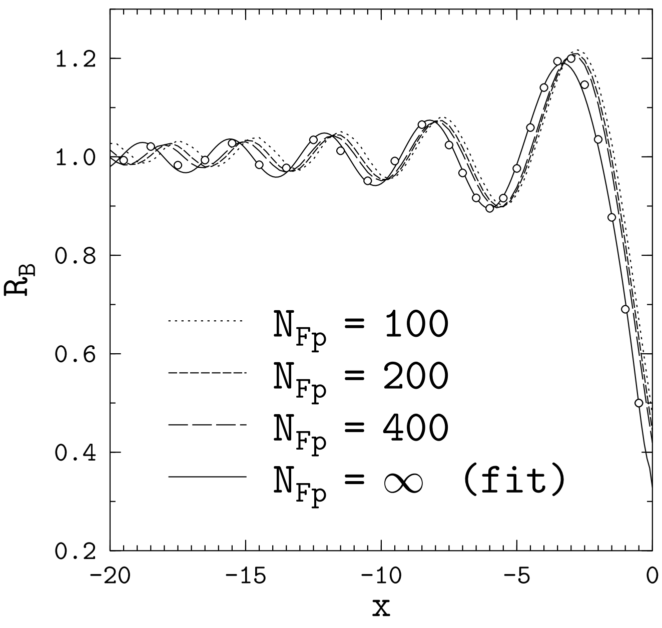

Рис. 2: Множитель R_B в разрешённой области $\Delta p < 0$ как функция x для различных значений $N_{\mathrm{F}p}$. Пустые кружки соответствуют квазиклассическому подходу (23), сплошная линия рассчитана по аппроксимационной формуле (25), остальные кривые — численные квантовые результаты.

в широком диапазоне плотностей по-прежнему доминирующим механизмом нейтринных потерь.

Отметим, что и в отсутствие магнитного поля прямой урка-процесс может включиться вне области $\Delta p < 0$ благодаря *температурному* размытию поверхности Ферми. Если $B = 0$, и $\Delta p > 0$, скорость реакции может быть представлена в виде $Q_\nu = Q_\nu^0 \cdot R_T$. При этом, можно ожидать, что $R_T \propto \exp(-v_{\mathrm{F}p}\,\Delta p/T)$. (Чтобы промоделировать этот эффект, мы домножили Q_ν^0 на $[1+\exp(v_{\mathrm{F}p}\,\Delta p/T)]^{-1}$, в результате чего, сплошная кривая на рис. 3 несколько отклоняется от вертикали в точке скачка.) Таким образом, температурный эффект позволяет реакции протекать в области $\Delta p/p_{\mathrm{F}p} \lesssim T/\mu_p$. Размытие, очевидно, определяется параметром вырождения протонов, типичное значение которого при $T \sim 10^9$ K составляет около 300. Магнитное размытие порога реакции оказывается более важным чем температурное, если $N_{\mathrm{F}p}^{2/3} \lesssim \mu_p/T$, что легко выполняется во внутренних областях ядер нейтронных звёзд.

3.5 Остывание замагниченных нейтронных звёзд

В этом разделе мы проиллюстрируем полученные выше результаты расчётами остывания нейтронных звёзд. Рассмотрим набор моделей нейтронных звёзд с фиксированным уравнением состояния и меняющимися центральной плотностью и величиной магнитного поля. Мы используем уравнение состояния Пракаша и др. [85] с модулем сжатия $K_0 = 180$ МэВ при $n_b = n_0$ (n_b — концентрация барионов) и энергией симметрии в форме, предложенной Пажем и Эпплгейтом [75]. Предположим, что вещество в ядре звезды состоит из

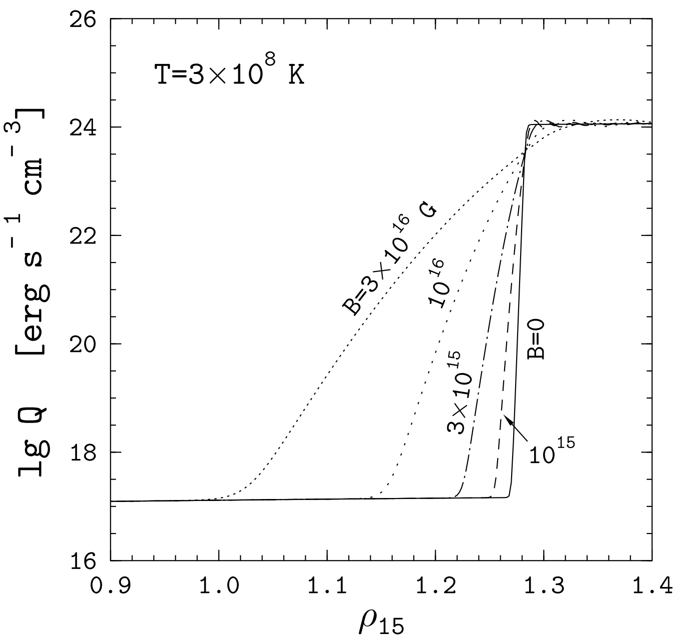

Рис. 3: Логарифм скорости нейтринного энерговыделения как функция плотности в единицах 10^{15} г см$^{-3}$. Сплошная кривая — случай без магнитного поля, остальные кривые демонстрируют влияние магнитного поля.

нейтронов, протонов и электронов (нет мюонов и гиперонов). Данное уравнение состояния предсказывает монотонное увеличение доли протонов с ростом массовой плотности. Следовательно, если плотность в центре ρ_c выше чем определённое пороговое значение $\rho_{\rm crit}$ (соответствующее доле протонов $x_p = n_p/n_b = 1/9$), или масса звезды M выше чем некоторая пороговая масса M_c, прямой урка-процесс открывается в ядрышке, расположенном в центре внутреннего ядра звезды. Для выбранного уравнения состояния критические параметры равны $\rho_{\rm crit} = 12.976 \cdot 10^{14}$ г см$^{-3}$ и $M_c = 1.442 M_\odot$.

Согласно Пажу и Эпплгейту [75], скорость остывания нейтронной звезды в отсутствие магнитного поля очень чувствительна к её массе: если масса превосходит M_c, звезда быстро остывает благодаря прямому урка-процессу, тогда как остывание менее массивных звёзд, в основном, определяется модифицированным урка-процессом и происходит гораздо медленнее. Магнитное поле приводит к ускорению остывания звёзд с массой ниже M_c, поскольку сильное магнитное поле открывает прямой урка-процесс, даже если условие $p_{{\rm F}n} \le p_{{\rm F}p} + p_{{\rm F}e}$ (или $x_p \ge 1/9$), необходимое при $B = 0$, не выполняется.

Магнитное поле в ядре нейтронной звезды может эволюционировать на временах остывания (возраст $t \lesssim 10^7$ лет). Это может происходить, если электрические токи, поддерживающие магнитное поле, протекают в тех областях ядра, где протоны и нейтроны являются несверхтекучими. Если так, то токи, поперечные полю, могут испытывать ускоренный омический распад из-за замагничивания заряженных частиц (Хэнсель и др. [37]). Последствия распада будут двоякими. Во-первых, если поле занимает достаточно большой объём ядра, распад приводит к дополнительному нагреву, замедляющему остывание. Во-вторых, распад поля уменьшает энерговыделение в прямом урка-процессе, поскольку (в запрещённой области) уменьшается множитель R_B. Однако, если нейтроны сильно сверхтекучие, то ускоренный распад отсутствует (Хэнсель и др. [37]; Остгард и Яковлев [74]), и время омического распада внутреннего магнитного поля превосходит время жизни Вселенной (Бэйм и др. [13]).

С другой стороны, микроскопические расчёты сверхтекучих щелей в дисперсионном соотношении нейтронов в ядрах нейтронных звёзд предсказывают, что критические температуры достаточно высоки при не слишком высоких плотностях (скажем, ниже 10^{15} г см$^{-3}$), и уменьшаются с ростом плотности (см., например, обзор Такацуки и Тамагаки [95] и ссылки там). Поэтому электрические токи могут течь во внешних областях ядра звезды, где имеются сверхтекучие нейтроны, и механизм ускоренного омического распада не работает, а прямые урка-реакции происходят во внутреннем ядре и не подавлены сверхтекучестью. Этот сценарий мы и примем в дальнейшем. Будем считать, что в ядрышке, где может быть разрешён прямой урка-процесс, имеется магнитное поле B, и предположим, что всё это ядрышко является несверхпроводящим, и магнитное поле не меняется на временах остывания, будучи вмороженным во внешние области ядра.

Будем рассматривать стадию остывания, на которой внутренние области нейтронной звезды ($\rho \gtrsim \rho_b = 10^{10}$ г см$^{-3}$) являются изотермическими ($t \gtrsim 10^2$ – 10^3 лет). С учётом эффектов ОТО это означает, что постоянной является величина $T_i = T(r,t)e^{\Phi(r)}$, где $T(r,t)$ — истинная локальная температура, Φ — безразмерный гравитационный потенциал, а r — радиальная координата. Использовалась программа остывания, описанная, например, Левенфиш и Яковлевым [59] и Яковлевым и др. [106]. Данная программа решает уравнение теплового баланса

$$C(T_i)\frac{\mathrm{d}T_i}{\mathrm{d}t} = -L_\nu(T_i) - L_{\mathrm{ph}}(T_s) \ , \tag{26}$$

где C — теплоёмкость ядра звезды, L_ν — полная нейтринная светимость, $L_{\mathrm{ph}} = 4\pi R^2 \sigma T_s^4 g^2$ — фотонная светимость, T_s — локальная температура поверхности, R — радиус звезды, $g = \sqrt{1 - R_g/R}$, R_g — гравитационный радиус звезды. Поверхностная температура T_s однозначно определяется локальной температурой на границе изотермической области T_b. Эта связь устанавливается в результате решения уравнения переноса тепла $q = -\kappa \nabla T$ во внешней коре с граничным условием $q = \sigma T_s^4$ на поверхности. Здесь q — плотность потока тепла, κ — теплопроводность. Соответствующая зависимость $T_s(T_b)$ была рассчитана недавно Потехиным и др. [82]. В данной задаче мы не предполагали наличия оболочки из лёгких элементов на поверхности звезды, а также считали, что внутреннее и внешнее магнитные поля разделены, так что сильное внутреннее магнитное поле не влияет на соотношение между поверхностной и внутренней температурами.

Нейтринная светимость обусловлена стандартными нейтринными реакциями во всём ядре звезды и прямым урка-процессом во внутреннем ядре. Влияние нейтронной сверхтекучести на нейтринные реакции и нейтронную теплоемкость во внешней области ядра учитывалось согласно результатам Левенфиш и Яковлева [59]. Кроме того, мы включили в расчёт нейтринное излучение, связанное с триплетным куперовским спариванием нейтронов (Яковлев и др. [106]).

Зависимость нейтронной критической температуры от плотности (триплетное спарива-

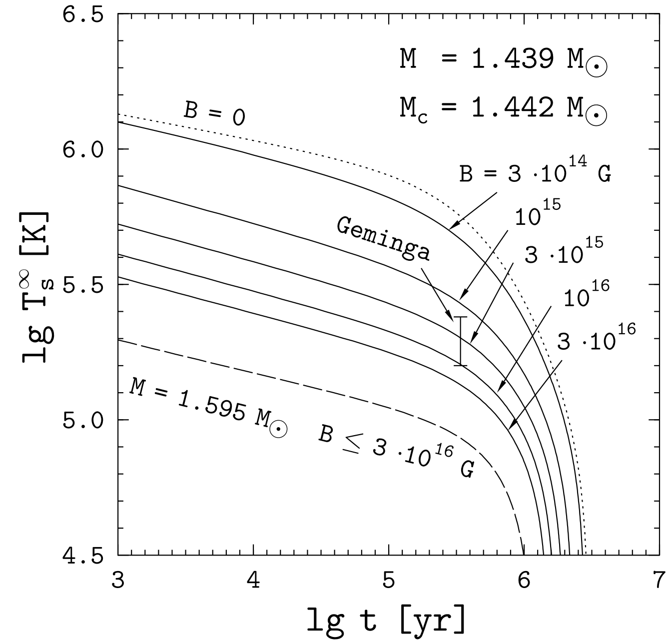

Рис. 4: Логарифм поверхностной температуры, регистрируемой удалённым наблюдателем, T_s^∞, как функция возраста нейтронной звезды. Штриховая линия соответствует звезде массы $M = 1.595 M_\odot$, существенно превышающей пороговое значение M_c, с магнитным полем $0 \leq B \leq 3 \cdot 10^{16}$ Гс. Точечная и сплошная линии отвечают звезде массы $1.439 M_\odot$. Усы показывают наблюдательные данные для пульсара Геминга (Мейер и др. [65]).

ние) мы задавали ступенчатой функцией: $T_{cn} = 10^{10}$ K при $\rho < 7.5 \cdot 10^{14}$ г см$^{-3}$, и $T_{cn} = 0$ при $\rho \geq 7.5 \cdot 10^{14}$ г см$^{-3}$. Полученные кривые остывания $T_s(t)$ не зависят от начальной внутренней температуры при условии, что последняя достаточно высока ($\gtrsim 10^9$ K).

Кривые остывания изображены на рис. 4 и 5. Штриховая линия соответствует быстрому остыванию звезды с массой 1.595 $M_\odot$, обусловленному прямым урка-процессом, который разрешён при $B = 0$ в большой области ядра. Рассчитывая эту кривую, мы использовали значения фактора R_B, полученные на основе квантового расчёта (раздел 4). Мы показали, что результаты нечувствительны к деталям поведения R_B в разрешённой области. В частности, в этой области можно использовать квазиклассическую формулу (25) или даже просто положить $R_B = 1$. С другой стороны, даже огромное внутреннее магнитное поле в запрещённой области не меняет результат (кривые при $B = 0$ и $3 \cdot 10^{16}$ Гс совпадают): новые области ядра, в которых прямой урка-процесс включается магнитным полем, дают пренебрежимо малый вклад в полную нейтринную светимость.

Точечные кривые рассчитаны для звёзд масс 1.439 $M_\odot$ (рис. 4) и 1.320 $M_\odot$ (рис. 5) при $B = 0$. Они отвечают медленному остыванию посредством стандартных нейтринных реакций (прямой урка-процесс запрещён). Сплошные линии иллюстрируют роль магнитного поля для звёзд тех же масс. Если масса звезды слегка (на 0.2 %) ниже M_c (рис. 4) кривая остывания начинает отклоняться от стандартной уже для не слишком высоких полей, $B = 3 \cdot 10^{14}$ Гс. Более сильные поля, 10^{15}–$3 \cdot 10^{15}$ Гс, приводят к остыванию со скоростью, промежуточной между стандартным и быстрым режимами. Ещё более высокие поля $B \gtrsim 10^{16}$ Гс открывают прямой урка-процесс в большой области внутреннего ядра

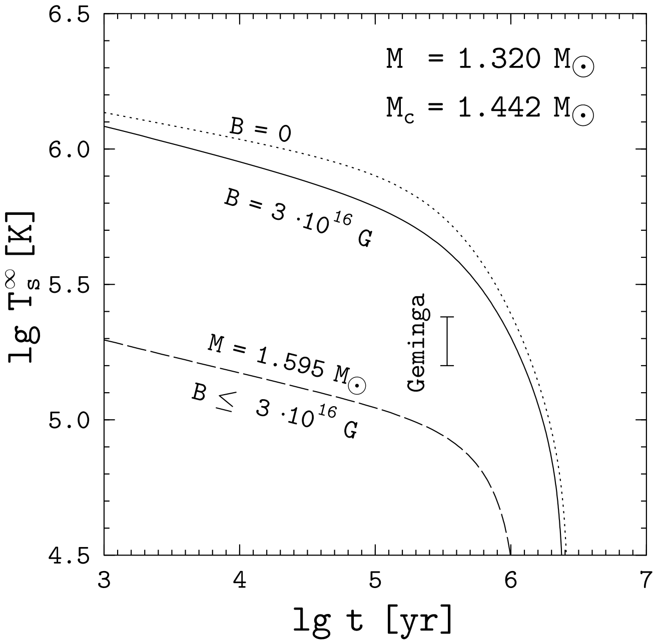

Рис. 5: То же, что на рис. 4, но точечная и сплошная кривые соответствуют звезде массы $1.320 M_\odot$. Штриховая линия та же, что и на рис. 4.

и вызывают ускоренное остывание. Однако, если масса звезды примерно на 8% ниже порогового значения (рис. 5), только очень сильное магнитное поле $B = 3 \cdot 10^{16}$ Гс может слегка приоткрыть прямой урка-процесс и ускорить остывание.

Таким образом, магнитное поле в центральных областях ядра действительно может ускорить остывание, при условии, что масса звезды несколько ниже порогового значения M_c. Если $B = 3 \cdot 10^{16}$ Гс, этот эффект играет важную роль в диапазоне масс $M - M_c \lesssim 0.1\, M_c$. Для меньших полей диапазон масс сокращается. Если, к примеру, $B = 3 \cdot 10^{15}$ Гс, диапазон сужается до величины $M - M_c \lesssim 0.015\, M_c$.

Полученные результаты могут быть использованы для интерпретации наблюдательных данных. Для иллюстрации рассмотрим наблюдения теплового излучения пульсара Геминга. Мейер и др. [65] интерпретировали наблюдаемый спектр с помощью набора моделей водородных атмосфер. Эти исследования позволили сделать вывод о довольно низкой эффективной поверхностной температуре (без учёта гравитационного красного смещения) $T_s = (2 - 3) \cdot 10^5$ K. Вводя гравитационный фактор $g \approx 0.8$, получаем наблюдаемую поверхностную температуру $\lg T_s^\infty$ [K] $= 5.29 \pm 0.09$ ($T_s^\infty = g\, T_s$). Принимая динамический возраст Геминги $t = 3.4 \times 10^5$ лет, мы получим доверительный интервал для Геминги, изображённый на рис. 4 и 5. Используем теперь нашу модель остывания (с возможным наличием сильного магнитного поля B вблизи центра звезды, не связанного со слабым поверхностным магнитным полем Геминги). При $B = 0$ Геминга находится между кривыми стандартного ($M \leq M_c$) и быстрого ($M > M_c$) остывания. Ясно, что подбирая массу, слегка превосходящую M_c, мы можем заставить кривую остывания пройти через интервал ошибок. Однако, диапазон масс, отвечающий этому интервалу (рис. 6), будет очень маленьким (около $0.003 M_\odot$), поскольку скорость остывания очень чувствительна к массе

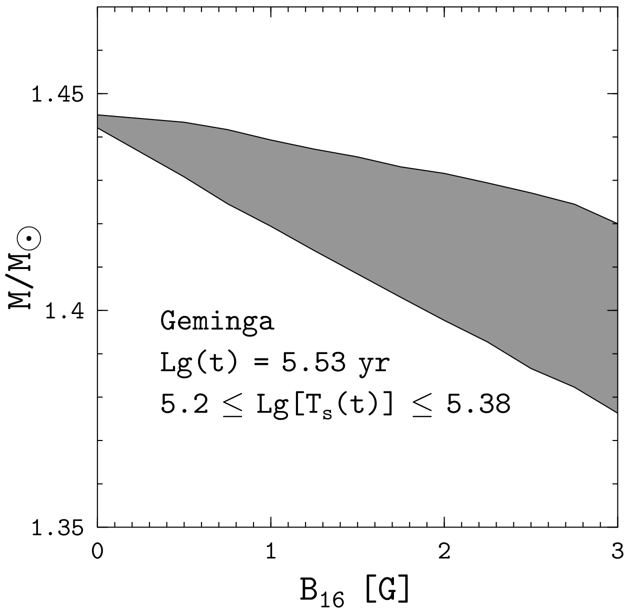

Рис. 6: Допустимый интервал масс для пульсара Геминга в зависимости от внутреннего магнитного поля.

в области M слегка выше M_c. Узость допустимого интервала масс делает предположение о том, что Геминга попадает в этот интервал, весьма неправдоподобным. Ситуация кардинально меняется при наличии сильного магнитного поля. Поле опускает допустимый диапазон масс (заштрихованная область на рис. 6) ниже M_c (ср. с рис. 4), где зависимость T_s от M при данном t гораздо плавнее. Это значительно расширяет допустимый диапазон масс. При $B = 10^{16}$ Гс он составляет порядка 0.02 $M_\odot$, а при $B = 3 \cdot 10^{16}$ Гс — порядка 0.04 $M_\odot$, так что вероятность того, что масса Геминги попадает в допустимый диапазон значительно повышается.

3.6 Случай сверхсильных магнитных полей

Используя формализм раздела 3, опишем основные особенности прямого урка-процесса с участием электронов и протонов, заселяющих самые низкие уровни Ландау (спины протонов сонаправлены с магнитным полем). Однако, для того чтобы заставить все электроны и протоны заселить основные уровни Ландау, требуются сверхвысокие поля, $B \gtrsim 10^{18}$ Гс. Пусть n_e и n_p — концентрации этих частиц. В отличие от фермиевских импульсов при нулевых или не слишком высоких полях, которые обсуждались в разделах 3 и 4, предельный импульс вдоль сверхсильного поля зависит от поля $p^0_{e,p} = 2\pi^2 n_{e,p}/b$, $p^0_e \approx \mu_e$. Распределение нейтронов может быть охарактеризовано двумя фермиевскими импульсами, для частиц со спинами вдоль и против магнитного поля $p_{\mathrm{F}n,s_n}$, причём $p_{\mathrm{F}n,1} < p_{\mathrm{F}n,-1}$. Исходным пунктом наших рассуждений является формула (10), которая сводится к

$$
\begin{aligned}
M &= G^2 F^2 \left[\frac{1}{2}(1+g_A)^2\,\delta_{s_n,1} + 2g_A^2\,\delta_{s_n,-1}\right]. \\
F^2 &= F_{00}^2 = \exp\left(-\frac{p_{n\perp}^2}{2b}\right).
\end{aligned}
\tag{27}
$$

Подставим это выражение в (7), опустим $p_{\nu z}$ в дельта-функции, сохраняющей импульс, и проинтегрируем по ориентациям импульса нейтрино и по азимутальному углу импульса нейтрона. После этого преобразуем интегралы по p_{ez} и p_{pz} в интегралы по энергиям частиц, возьмём стандартный энергетический интеграл и проинтегрируем по питч-углу нейтрона. Тогда получим (с учётом обратной реакции)

$$
\begin{aligned}
Q_\nu &= \frac{457\pi\,G_F^2\,(1+3g_A^2)}{10080} m_n^* m_p^*\,\mu_e T^6 \\
&\times\; \frac{b}{p_p^0 p_e^0\,(1+3g_A^2)} \sum_{\alpha=\pm 1}\left[\frac{1}{4}\,(1+g_A)^2\,\Theta(u_{1\alpha})\,e^{-u_{1\alpha}} + g_A^2\,\Theta(u_{-1\alpha})\,e^{-u_{-1\alpha}}\right],
\end{aligned}
\tag{28}
$$

где $2b\,u_{s_n,\alpha} = p_{\mathrm{F}n,s_n}^2 - (p_p^0 + \alpha p_e^0)^2$, и $\alpha = \pm 1$ отвечает двум различным каналам реакции, в которых z-компоненты импульсов электрона и протона либо параллельны ($\alpha = 1$), либо антипараллельны ($\alpha = -1$). Ступенчатые функции означают, что каналы открыты, если $u_{s_n,\alpha} \geq 0$. Канал $\alpha = -1$ всегда открыт в плотном *npe* веществе со сверхсильным магнитным полем, тогда как канал $\alpha = 1$ открыт только в том случае, если $p_{\mathrm{F}n} \geq p_p^0 + p_e^0$. Последнее условие противоположно привычному неравенству $p_{\mathrm{F}n} \leq p_{\mathrm{F}p} + p_{\mathrm{F}e}$, регулирующему включение реакции в отсутствие поля.

В формуле (28) имеем $\exp(-u_{s_n,\alpha}) \leq 1$, и $Q_\nu \propto b^2$, однако, трудно ожидать, что Q_ν будет существенно превосходить значение в отсутствие магнитного поля, по крайней мере, пока $B \lesssim 10^{19}$ Гс. Отметим также, что выражение (28) описывает вклад частиц, заселяющих основные уровни Ландау, не только в пределе сверхвысоких полей. Для того чтобы использовать этот результат для умеренных полей, в формуле, определяющей $p_{e,p}^0$, вместо n_e и n_p следует подставить концентрации e и p на основных уровнях Ландау.

Похожие результаты для сверхсильных магнитных полей были получены недавно Леинсоном и Перезом [57]. Тем не менее, их выражение отличается от нашего некоторыми деталями. В частности, эти авторы получили $(1 + g_A^2)$ вместо $(1 + g_A)^2$ в квадратных скобках в правой части (28). Ещё более отличный от нашего результат в тех же самых предположениях был получен Бандопадхаем и др. [12]. В наших обозначениях последние авторы нашли скорость энерговыделения, пропорциональную $\Theta(-u_{11})e^{-u_{11}}$, и неправомерно получили усиление нейтринного излучения и дополнительное ускорение остывания в сверхсильных полях. Их условие, открывающее реакцию, противоположно истинному.

3.7 Заключение

Рассмотрено излучение нейтрино в прямом урка-процессе в ядрах нейтронных звёзд с сильными магнитными полями. Получено общее выражение для скорости нейтринного энерговыделения [формулы (7) и (9)], которое проанализировано в наиболее важном случае не слишком сильных магнитных полей, когда участвующие в реакции электроны и протоны заселяют много уровней Ландау. Показано, что магнитное поле может включить прямой урка-процесс при условиях, в которых в отсутствие поля он полностью подавлен законом сохранения импульса. Результаты аппроксимированы аналитическими формулами (24) и (25). Проведено моделирование остывания нейтронных звёзд в модели, в которой имеется сильная сверхтекучесть нейтронов во внешней области ядра звезды, а во внутренней области вещество является несверхтекучим. В результате сделан вывод, что магнитное поле $B \lesssim 3 \cdot 10^{16}$ Гс в центре звезды может существенно увеличить нейтринную светимость и ускорить остывание нейтронных звёзд с массами, примерно на 10 % ниже, чем минимальная масса, при которой прямой урка-процесс включается в отсутствие поля. Следовательно, остывание может регулироваться центральными магнитными полями звёзд. Указанный эффект не требует нереалистически высоких полей $B \gtrsim 10^{18}$ Гс, рассмотренных разными авторами.

Глава 4

Астрофизические проявления локализации протонов в ядрах нейтронных звёзд

4.1 Введение

Состав вещества ядер нейтронных звёзд при плотностях $\rho > 3\rho_0$, где $\rho_0 = 2.8 \times 10^{14}$ г см$^{-3}$, слабо изучен. Некоторые микроскопические расчёты указывают, что выше $3\rho_0$ барионная компонента вещества состоит почти исключительно из нейтронов с небольшой примесью (несколько процентов) протонов; такой состав напоминает состав вещества при $\rho \simeq \rho_0$. Подобные результаты были получены, например, в моделях UV14+TNI и AV14+UVII Вирингой и др. [101]. Эти авторы провели подробные многочастичные расчёты уравнения состояния вещества, основанные на вариационном методе с использованием реалистического гамильтониана ядерного взаимодействия. В частности, их модель UV14+TNI предсказывает долю протонов x_p ниже 5% при плотностях $\rho > 3\rho_0$, и, в конце концов, полное исчезновение протонов при $\rho \sim 7\rho_0$.

Заметим, что этот результат противоречит расчётам уравнения состояния вещества ядра нейтронной звезды, основанным на релятивистской модели среднего поля, см., например, Гленденнинг [34], или на многочастичной теории Бракнера-Бете-Голдстоуна, например, Балдо и др. [11], согласно которым доля протонов монотонно увеличивается с ростом концентрации барионов n_b. Таким образом, тенденция изменения $x_p(n_b)$ при сверхъядерных плотностях достоверно неизвестна. Аргументы в пользу уменьшения x_p с ростом плотности с полным исчезновением протонов при высоких плотностях приведены Кучерой [52].

Малая примесь протонов в нейтронном веществе высокой плотности может вести себя совершенно иначе, чем при плотностях $\rho \simeq \rho_0$. Как было показано Кучерой и Вуйчиком [51], взаимодействие “протонных примесей” с волнами плотности нейтронной материи может, выше некоторого критического значения ρ, приводить к локализации протонов в потенциальных ямах, связанных с неоднородностями нейтронной плотности; при меньших

ρ это взаимодействие проявляется в постепенном росте эффективной массы протонов [51].

В этой главе будет показано, что локализация протонов приводит к серьёзным изменениям кинетических свойств вещества нейтронной звезды, что, в свою очередь, сказывается на эволюции этих объектов.

Для уяснения возможного эффекта протонной локализации рассмотрим стандартную модель, когда нейтроны и протоны образуют вырожденные нормальные ферми-жидкости. Кинетические коэффициенты вещества нейтронной звезды в этих условиях имеют характерные температурные зависимости, обусловленные принципом Паули и сохранением энергии и импульса в реакциях рассеяния [61]. Главные члены низкотемпературных разложений электропроводности σ и сдвиговой вязкости η пропорциональны T^{-2}, тогда как теплопроводность κ при низких температурах ведёт себя как $\kappa \propto T^{-1}$. Скорость потерь энергии в процессах излучения нейтрино в стандартном npe веществе (модифицированный урка-процесс и тормозное излучение нейтринных пар в nn-, np-, и pp-столкновениях) в отсутствие сверхтекучести нуклонов зависит от температуры как T^8 (например, Фриман и Максвелл, [32]).

Локализованные протоны будут играют роль очень эффективных рассеивателей нейтронов и электронов. В последующих рассуждениях мы будем предполагать, что локализованные протоны не проявляют дальнего порядка (это положение обсуждается в разделе 2). В таком случае, как показывает элементарный анализ, локализация протонов даёт $\sigma^{\text{loc.p.}}$, $\eta^{\text{loc.p.}} \propto T^0$, и $\kappa^{\text{loc.p.}} \propto T$; можно, стало быть, ожидать сильного изменения транспортных коэффициентов при низких температурах, где доминирует рассеяние на протонах, вследствие локализации последних. Как будет показано далее, локализация протонов приводит к резкому уменьшению транспортных коэффициентов в ядре нейтронной звезды по сравнению со стандартным случаем, когда протоны образуют фермиевскую жидкость: $\sigma^{\text{loc.p.}}/\sigma$, $\eta^{\text{loc.p.}}/\eta \ \sim (10^{-5} - 10^{-6})\ T_8^2$, и $\kappa^{\text{loc.p.}}/\kappa \ \sim 10^{-4}\ T_8^2$ при $\rho \sim 4\rho_0$ и концентрациях протонов около 1 % ($T_8 \equiv T/10^8$ K). Это приводит, в частности, к тому, что независимо от состояния нейтронов (нормального или сверхтекучего) время установления теплового равновесия в ядре нейтронной звезды увеличивается примерно на 2 порядка.

Нейтринная светимость вещества с локализованными протонами также оказывается весьма нестандартной. Прежде всего, обычные бета-процессы с участием заряженных токов (прямой и модифицированный урка-процессы) запрещены, поскольку при данной плотности барионов минимум энергии соответствует определённой доле протонов, тогда как любой процесс, изменяющий долю протонов, требует перестройки всего состояния и, соответственно, гораздо больше энергии, чем тепловая энергия, имеющаяся в распоряжении, скажем, при $T \lesssim 10^9$ K. Таким образом, возможны процессы только с участием нейтральных токов. Это тормозное излучение нейтринных пар при nn-, np- и ep-столкновениях. Скорость процессов, связанных с рассеянием на локализованных протонах, имеет ту же температурную зависимость, что и прямой урка-процесс (T^6), который, как известно (см. главу 3), сильно ускоряет остывание нейтронной звезды. Как будет показано в разделе 6, при отсутствии сверхтекучести нейтронов скорость нейтринного энерговыделения при np-столкновениях приблизительно на 3.5 порядка больше, чем при ep-

столкновениях. Несмотря на одинаковую температурную зависимость, излучение нейтрино при рассеянии нейтронов на локализованных протонах менее эффективно, чем прямой урка-процесс. Однако, отношение скорости энерговыделения тормозного излучения при np-столкновениях и модифицированного урка-процесса (наиболее важного стандартного процесса в ядрах нейтронных звёзд) может быть весьма большим, как раз в представляющем интерес температурном диапазоне: $Q_{\rm Brem}^{n-{\rm loc.p.}}/Q_{\rm mURCA} \sim 2 \cdot 10^3\ T_8^{-2}$ (при $\rho \sim 4\rho_0$ и концентрациях протонов около 1 %). Это позволяет сделать вывод, что протонная локализация приводит к промежуточному режиму остывания нейтронной звезды: быстрее чем стандартное остывание, обусловленное модифицированным урка-процессом, но медленнее чем ускоренное остывание с помощью прямого урка-процесса.

Глава построена следующим образом. Физические условия в ядре нейтронной звезды с локализованными протонами подробно обсуждаются в разделе 2. В частности, отмечено сходство между поведением протона в нейтронном веществе и поляронным поведением медленных электронов в твёрдых телах; также приведены аргументы против кристаллического упорядочивания локализованных протонов и обсуждается важность релятивистских эффектов для нейтронной компоненты вещества. В разделе 3 приведены кинетические уравнения, описывающие перенос заряда, тепла и импульса, а также получены их вариационные решения и аналитические выражения для транспортных коэффициентов. Усреднённые по углам вероятности рассеяния, необходимые для расчётов транспортных коэффициентов, вычислены в разделе 4. В разделе 5 вариационные решения модифицированы таким образом, чтобы в пределе высоких температур они воспроизводили известные точные решения. Окончательные результаты для кинетических коэффициентов приведены в виде, удобном для практического использования. Скорости потерь энергии в нейтрино при ep- и np-столкновениях оценены в разделе 6. В разделе 7 обсуждаются астрофизические следствия полученных результатов. Наконец, в разделе 8 описано моделирование остывания нейтронной звезды с протонной локализацией в наиболее плотной области ядра и проведено сравнение результатов моделирования с наблюдательными данными об эффективных температурах поверхностей пульсаров среднего возраста.

В данной главе, в основном, используется система единиц с $\hbar = c = k_{\rm B} = 1$. Мы используем физические единицы в окончательных выражениях.

4.2 Вещество с локализованными протонами в ядре нейтронной звезды

Рассмотрим npe вещество при плотностях, больших ρ_0. Типичную кинетическую энергию протона можно оценить из принципа неопределённости:

$$T_p \sim \frac{\hbar^2 n_p^{2/3}}{2m_p^*} = 0.7 \left(\frac{n_b}{4n_0} \cdot \frac{x_p}{0.01}\right)^{2/3} \left(\frac{m_p}{m_p^*}\right) \quad \text{Мэв}, \tag{1}$$

где n_b — концентрация барионов, $x_p = n_p/n_b$ — доля протонов среди барионов (равная относительной концентрации электронов $x_e = n_e/n_b$), $n_0 = 0.16$ фм$^{-3}$ — нормальная ядерная концентрация нуклонов, и m_p^* — эффективная масса протона, учитывающая парные нуклон-нуклонные взаимодействия.

В нейтронном веществе протон обладает также эффективной потенциальной энергией V_{eff}, величина которой зависит от плотности нейтронов и колеблется, согласно различным расчётам, от 55 до 75 МэВ при концентрации нейтронов $n_n \sim 4n_0$ (рис. 1 работы [51]). Тогда, учитывая возможную неоднородность нейтронного фона, гамильтониан протона можно записать в следующем виде:

$$H_p = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_p^*} + V_{\text{eff}}(n_n) + n_n\frac{\partial V_{\text{eff}}}{\partial n_n}\left(\frac{\delta n_n}{n_n}\right), \tag{2}$$

где последний член описывает взаимодействие протона с волнами плотности нейтронного вещества. Величина $\sigma(n_n) = n_n\partial V_{\text{eff}}/\partial n_n$ играет роль константы связи и при $n_n \sim 4n_0$ имеет порядок величины 550 – 600 МеВ. Из сравнения с оценкой кинетической энергии (1) следует, что при реалистическом описании поведения малой примеси протонов в нейтронном веществе высокой плотности, вообще говоря, нельзя пренебрегать взаимодействием протонов с волнами плотности нейтронов [51].

Расчёты, проведённые в работе [51], свидетельствуют о том, что при малой и умеренной константе связи протон, взаимодействующий с волнами плотности нейтронов (в дальнейшем для краткости именуемыми фононами, поскольку, в сущности, это звуковые моды нейтронного вещества), приобретает дополнительную эффективную массу, которая постепенно увеличивается с ростом плотности нейтронов. Эта ситуация напоминает так называемый “большой” полярон в твёрдом теле, т.е. медленный электрон, движущийся в кристалле и окружённый облаком виртуальных фононов, благодаря которому эффективная масса превосходит массу электрона в зоне проводимости. Если сила взаимодействия увеличивается и дальше, то поляризация ионной решётки электроном становится очень сильной. В конечном счёте, электрон может быть захвачен локальной деформацией решётки, созданной им самим, см. Тойозава [96]. В результате образуется так называемый “малый” полярон. Если температура достаточно высока, то электрон может быть выбит из потенциальной ямы, удерживающей его. Однако, в режиме низких температур электрон может лишь очень медленно туннелировать по решётке, проводя основную часть времени около какого-нибудь иона.

Вернёмся к протону, помещённому в нейтронное вещество. Поляризацию нейтронного фона, индуцированную протоном, можно характеризовать некоторым пространственным масштабом R_p. С ростом плотности нейтронов постоянная протон-фононного взаимодействия увеличивается, а R_p уменьшается. Условие протонного самозахвата качественно описывается двумя неравенствами: $m_p^*\sigma(n_n)|\delta n_n|R_p^2/n_n\hbar^2 > 1$ (т.е. потенциальная яма содержит связанное протонное состояние) и $R_p < n_p^{-1/3}$ (каждый протон образует собственную потенциальную яму, волновые функции отдельных протонов не перекрываются).

Чтобы проверить, имеет ли место режим “малого” полярона для протона в нейтронном веществе, следует провести детальный расчёт. Следует сравнить энергию состояния с локализованным протоном и состояния, в котором протон свободен. Результаты такого сравнения были представлены в работе [51]. Авторы вычислили энергию ячейки Вигнера-Зейца с однородным распределением нейтронов и протона и сравнили её с энергией ячейки, в которой протонная волновая функция локализована вблизи центра ячейки, а распределение нейтронов имеет минимум в центре. Параметры, характеризующие отклонение этих распределений от однородных, варьировались. Было обнаружено, что выше некоторой критической плотности (колеблющейся от $4n_0$ до $9n_0$ в зависимости от модели; начиная с этого места, мы примем наиболее оптимистическую модель и будем считать критическую плотность $\simeq 4n_0$) существует область параметров, в которой локализованное состояние является предпочтительным, с энергетической точки зрения, по сравнению с однородным состоянием. Следовательно, при более высоких плотностях, и при условии, что типичный радиус R_p распределения вероятности протона, соответствующего минимуму энергии, достаточно мал, протоны находятся в эффективных потенциальных ямах, локализующих их волновые функции. Типичное значение R_p при $n_n = 4n_0$ составляет около 1 фм, а типичная глубина ямы ~ 100 МэВ. Среднее расстояние между протонами

$$a_p \simeq n_p^{-1/3} = 5.4 \left(\frac{n_b}{4n_0} \cdot \frac{x_p}{0.01}\right)^{-1/3} \text{ фм} , \tag{3}$$

в то время как энергия нулевых колебаний протона в яме $T_0 \sim 42(R_p/1 \text{ фм})^2$ (m_p/m_p^*) МэВ. Таким образом, мы видим, что при концентрациях нейтронов, больших $4n_0$, и при достаточно низкой доле протонов, скажем, 1 – 5 %, волновые функции протонов хорошо локализованы около минимумов нейтронной плотности и не перекрываются между собой. Это, в свою очередь, означает, что для описания системы протонов не нужно привлекать статистику Ферми. Температура, после падения ниже, скажем, 10 МэВ, пренебрежимо мала по сравнению с характерным энергетическим масштабом для протонной ямы, так что протоны занимают основные энергетические уровни, а остальные (вырожденные) частицы рассеиваются на них упруго. Протон может лишь туннелировать с очень низкой вероятностью через море нейтронов; в дальнейшем мы пренебрежём вероятностью таких событий.

Обсудим астрофизический сценарий образования плотного ядра нейтронной звезды, в котором можно ожидать локализацию протонов. В соответствии со стандартным сценарием образования нейтронных звёзд в результате гравитационного коллапса ядер массивных звёзд исходная температура в центральной области только что рождённой нейтронной звезды составляет $T \simeq 30$ МэВ. Более того, благодаря пленению нейтрино в плотной горячей плазме, исходная доля протонов очень высока, $x_p \simeq 0.3$. Как высокое значение x_p, так и высокое значение T исключают возможность локализации протонов. Она может наступить после того, как ядро нейтронной звезды сделается прозрачным для нейтрино, и температура ядра упадёт ниже ~ 10 МэВ.

Возникает вопрос, не будут ли протонные примеси упорядочены в процессе локализации благодаря дальнодействующему взаимодействию? Кулоновская энергия, оцениваемая как

$$E_{Cpp} \sim \frac{e^2}{a_p} \simeq 0.3 \left(\frac{n_b}{4n_0} \cdot \frac{x_p}{0.01}\right)^{1/3} \text{ МэВ} , \tag{4}$$

пренебрежимо мала по сравнению с потенциальной энергией локализованного протона в его эффективной яме или по сравнению с энергией фермиевского движения протона до момента локализации. Однако, не исключено, что некоторая корреляция положений отдельных протонов может быть следствием дальнодействующих корреляций, обусловленных ядерным взаимодействием в море нейтронов. Детальное обсуждение этой возможности выходит за рамки настоящей работы. Можно лишь напомнить, что локализация происходит при достаточно высокой температуре, подразумевающей большие тепловые флуктуации, и нелегко представить себе дальнодействующие корреляции, возникающие благодаря сильному короткодействующему взаимодействию, с энергетическим масштабом в несколько МэВ. Следовательно, мы полагаем, что вещество нейтронной звезды с локализованными протонами образуется в неупорядоченном состоянии и остаётся в нём в течение последующего остывания. В дальнейшем считаем, что положения локализованных протонов не коррелируют: локализованные протоны рассматриваем как случайно распределённые, фиксированные центры, рассеивающие нейтроны и электроны.

В веществе нейтронной звезды с локализованными протонами процессы переноса осуществляются электронами и нейтронами. Для простоты предположим, что мюоны отсутствуют. Их наличие приводит к некоторой модификации кинетического уравнения (см., например, работу Гнедина и Яковлева [35], где в стандартных предположениях рассмотрена теплопроводность электронов и мюонов в ядре нейтронной звезды), но не изменит качественно основные результаты нашей работы.

Фермиевская энергия электронов есть

$$\varepsilon_{\mathrm{F}e} = 113.4 \left(\frac{n_b}{4n_0} \cdot \frac{x_p}{0.01} \right)^{1/3} \text{ МэВ} . \tag{5}$$

Типичная энергия кулоновских ee- и ep-взаимодействий порядка $E_{\mathrm{C}pp}$ [формула (4)], т.е. гораздо меньше чем $\varepsilon_{\mathrm{F}e}$. Следовательно, электроны следует рассматривать как почти свободный, ультрарелятивистский и сильно вырожденный ($\varepsilon_{\mathrm{F}e} \gg T$) ферми-газ. Перенос энергии, импульса и заряда осуществляется элементарными тепловыми возбуждениями электронного газа — электронными квазичастицами. Электронные квазичастицы описываем возбуждёнными одночастичными состояниями, близкими к поверхности Ферми [т.е. с импульсами, близкими к $k_{\mathrm{F}e} = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$] в идеальном электронном газе. Эффективная масса $m_e^* = \varepsilon_{\mathrm{F}e}$. Парное взаимодействие между электронными квазичастицами описываем с помощью формализма диэлектрической проницаемости (раздел 3). Здесь мы отметим лишь, что поскольку в ядрах нейтронных звёзд мы обычно имеем $T \ll 0.1\varepsilon_{\mathrm{F}e}$, то можно рассматривать *статическое* экранирование (без передачи энергии) и пользоваться статической диэлектрической проницаемостью $\epsilon(0, \mathbf{q})$, где $\mathbf{q}$ — импульс, переданный при взаимодействии.

Нейтроны, наоборот, образуют сильно неидеальную фермиевскую систему. Мы будем рассматривать случай нормальных (несверхтекучих) нейтронов. Транспортные явления с участием нейтронов могут быть описаны с помощью теории нормальных ферми-жидкостей Ландау. А именно, перенос энергии и импульса осуществляется нейтронными квазичастицами — элементарными одночастичными возбуждениями вблизи поверхности Ферми, с эффективными массами и амплитудами рассеяния, отличающимися от соответствующих величин для свободных нейтронов. Поскольку мы изучаем сильно вырожденное нейтронное вещество, газ нейтронных квазичастиц является достаточно разреженным, так что можно ввести одночастичные функции распределения. Импульс Ферми нейтронных квазичастиц совпадает с импульсом Ферми нейтронного вещества $k_{\mathrm{F}n} = (3\pi^2 n_n)^{1/3}$. Скорость нейтронной квазичастицы на фермиевской поверхности есть

$$v_{\mathrm{F}n} = \frac{\hbar k_{\mathrm{F}n}}{m_n^*} = 0.56c \left[\frac{n_b}{4n_0}(1-x_p)\right]^{1/3} \frac{m_n}{m_n^*} \,, \tag{6}$$

где m_n^* — эффективная масса нейтронной квазичастицы. Мы видим, что при интересующих нас плотностях (а мы ограничимся концентрациями ниже $5n_0$) и при $x_p \ll 1$ нейтроны постепенно становятся умеренно релятивистскими. Тем не менее, мы будем учитывать релятивизм нейтронов. В нерелятивистской системе эффективная масса нейтронной квазичастицы $m_n^* = p_{\mathrm{F}n}/v_{\mathrm{F}n}$ отличается от массы изолированного нуклона m_N из-за многочастичных эффектов. Здесь же она должна учитывать и релятивистский эффект. Используя принцип лоренцевой инвариантности в системе покоя нейтронного вещества можно получить $m_n^*/\varepsilon_{\mathrm{F}n} = 1 + F_1^s/3$, где $\varepsilon_{\mathrm{F}n}$ — энергия Ферми нейтрона, включающая массу покоя, а F_1^s — параметр Ландау (например, [15]).

На самом деле, наличие протонных примесей приводит к появлению неоднородностей нейтронной плотности. Эти неоднородности будут изменять среднее поле, ощущаемое налетающей нейтронной квазичастицей (длина волны де Бройля которой обычно меньше чем размеры неоднородностей), приводя к дрейфу квазичастицы в пространстве импульсов. Отметим, что эти неоднородности сосредоточены в очень небольшой доле объёма вещества $(R_p/a_p)^3 \sim 0.01$ и концентрируются около протонных примесей. Последние приводят к резкому изменению импульса нейтрона и дают основной вклад в рассеяние. Неоднородности будут давать поправку к рассеянию на протоне, которую, в принципе, можно включить в вероятность перехода при np-рассеянии. Однако, ввиду ожидаемой малости этого эффекта, будем им пренебрегать.

4.3 Кинетическое уравнение

Перенос заряда, тепла или импульса лимитируется рассеянием элементарных возбуждений (квазичастиц) на локализованных протонах, а также взаимными столкновениями квазичастиц. Мы пренебрежём en-столкновениями, обусловленными спин-спиновым взаимодействием, что позволяет исследовать транспортные свойства нейтронов и электронов поотдельности. Функция распределения электронов удовлетворяет обычному, не зависящему от времени уравнению Больцмана, применимому для описания почти идеальных газов (например, Займан [107]), а функция распределения нейтронов удовлетворяет не зависящему от времени уравнению Ландау, которое учитывает самосогласованное среднее поле, зависящее от самой функции распределения. В результате линеаризации (например, Бэйм и Петик [15]) оказывается, что кинетические процессы определяются отклонением функции распределения от локально-равновесной. Такое отклонение удовлетворяет линеаризованному уравнению Больцмана, что позволяет с самого начала применять одинаковый подход к электронам и нейтронам:

$$\mathbf{v}_1\ \partial_{\mathbf{r}} f_{\mathbf{k}_1} = I_{ii} + I_{ip}, \tag{7}$$

$$e\mathbf{E}\ \partial_{\mathbf{k}_1} f_{\mathbf{k}_1} = I_{ee} + I_{ep}, \tag{8}$$

где $f_{\mathbf{k}_1}$ — искомая функция распределения, $i = \{n, e\}$, $\mathbf{E}$ — внешнее электрическое поле, e — заряд электрона, $\mathbf{v}_1$ — скорость квазичастицы (уже не зависящая от координат), и $\mathbf{k}_1$ — волновой вектор квазичастицы. В правой части этих уравнений имеются интегралы столкновений вида

$$I_{ii} = \frac{(2\pi)^4}{(2\pi)^9} \int \mathrm{d}\mathbf{k}_2 \mathrm{d}\mathbf{k}_1' \mathrm{d}\mathbf{k}_2'\ \delta(\mathcal{E}' - \mathcal{E})\, \delta(\mathbf{K}' - \mathbf{K})\ \mathcal{L}_{ii}\ \frac{1}{2} \sum_{\sigma_2 \sigma_1' \sigma_2'} |A_{ii}|^2, \tag{9}$$

$$I_{ip} = \frac{2\pi n_p}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\mathbf{k}_1'\ \delta(\varepsilon_1' - \varepsilon_1)\ \frac{1}{2} \sum_{\sigma_p \sigma_1' \sigma_p'} |A_{ip}|^2 \left[f_{\mathbf{k}_1'}(1 - f_{\mathbf{k}_1}) - f_{\mathbf{k}_1}(1 - f_{\mathbf{k}_1'}) \right]. \tag{10}$$

Здесь нештрихованные и штрихованные переменные соответствуют частицам до и после столкновения, A_{ii} и A_{ip} — амплитуды перехода для ii- и ip-процессов рассеяния, содержащие все обменные вклады, $\mathcal{L}_{ii}$ — обычный двухфермионный множитель Паули, и n_p — концентрация локализованных протонов. В первом интеграле множитель $1/2$ позволяет избежать двойного учёта конечных состояний в процессе рассеяния одинаковых частиц. Во втором интеграле тот же множитель учитывает, что концентрация n_p включает протоны с двумя возможными ориентациями спина.

Суммы по спинам удобно преобразовать к более симметричной форме:

$$\frac{1}{2} \sum_{\sigma_2 \sigma_1' \sigma_2'} |A_{ii}|^2 = \frac{1}{4} \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_1' \sigma_2'} |A_{ii}|^2 \equiv Q_{ii}\ . \tag{11}$$

Аналогичным образом определим и Q_{ip}.

Если функции распределения известны, то кинетические коэффициенты можно найти, вычисляя токи, индуцированные в системе пространственными градиентами или внешними полями:

$$\mathbf{j}_{\mathrm{T}} = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\mathbf{k}\ f_{\mathbf{k}}\, (\varepsilon - \mu)\, \mathbf{v} = -\kappa \nabla T, \tag{12}$$

$$\mathbf{j}_{\mathrm{e}} = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\mathbf{k}\ f_{\mathbf{k}}\, e\, \mathbf{v} = \sigma \mathbf{E}, \tag{13}$$

$$-\sigma_{\mathrm{xy}} = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\mathbf{k}\ f_{\mathbf{k}}\, k_{\mathrm{x}}\, v_{\mathrm{y}} = -\eta \frac{\partial u_{\mathrm{x}}}{\partial y}, \tag{14}$$

где κ — теплопроводность, σ — электропроводность, η — сдвиговая вязкость, и $\mathbf{u}$ — макроскопическая скорость, направленная вдоль оси x и зависящая только от координаты y (тем самым выполняется $\mathrm{div}\ \mathbf{u} = 0$). Далее, $\mathbf{j}_{\mathrm{T}}$, $\mathbf{j}_{\mathrm{e}}$ и σ_{xy} — плотность потока тепла, потока заряда и xy компонента диссипативной части тензора напряжений.

По аналогии с главой 1, при наличии пространственных градиентов аппроксимируем истинные функции распределения в левой части уравнения Больцмана (7) локальноравновесными (le) распределениями

$$
\begin{aligned}
f_\kappa^{\mathrm{le}}(\varepsilon) &= \left[1+\exp\frac{\varepsilon-\mu}{T(\mathbf{r})}\right]^{-1}, &(15)\\
f_\eta^{\mathrm{le}}(\varepsilon) &= \left[1+\exp\frac{\varepsilon-\mu-\mathbf{ku}(\mathbf{r})}{T}\right]^{-1}. &(16)
\end{aligned}
$$

Простые оценки показывают [15], что это приближение применимо при условии, что типичные масштабы градиентов температуры или макроскопической скорости велики по сравнению с длиной свободного пробега квазичастиц l. В левой части (8) мы используем глобально-равновесное распределение $f^0(\varepsilon)$. Соответствующее условие применимости имеет вид $|eEl| \ll T$.

В правой части представим истинную функцию распределения следующим образом:

$$
f_{\kappa,\sigma,\eta} = f^0 + \frac{f^0\,(1-f^0)}{T}\Phi_{\kappa,\sigma,\eta}. \qquad (17)
$$

Здесь Φ_α — неизвестная функция энергии и угловых переменных, которая определяет неравновесную поправку к функции распределения; индекс α может означать κ, σ или η. Ясно, что неравновесная поправка должна отличаться от нуля только в окрестности поверхности Ферми.

Угловые и энергетические переменные разделяются, и функцию Φ можно искать в виде

$$
\begin{aligned}
\Phi_\kappa &= -\tau_{ii}\Psi_\kappa(x)\,\mathbf{v}\nabla T,\\
\Phi_\sigma &= \tau_{ii}\Psi_\sigma(x)\,\mathbf{vE}e,\\
\Phi_\eta &= -\tau_{ii}\Psi_\eta(x)\,\mathbf{v}\nabla(\mathbf{ku}). &(18)
\end{aligned}
$$

Безразмерная функция Ψ_α содержит зависимость от энергии $[x = (\varepsilon-\mu)/T]$, а угловые зависимости однозначно определяются левыми частями уравнений (7) и (8); τ_{ii} — постоянная, имеющая смысл типичного времени между столкновениями частиц одного сорта.

Опуская стандартные выкладки (например, [15]), состоящие в линеаризации интегралов столкновений (9) и (10) относительно малой неравновесной добавки (17) и интегрировании дельта-функций, отвечающих за сохранение энергии и импульса, мы получим следующее одномерное уравнение для функций Ψ_α:

$$
\begin{aligned}
g_\alpha(x_1)f_1^0(1-f_1^0) &= \frac{x_1^2+\pi^2}{2}f_1^0(1-f_1^0)\Psi_\alpha(x_1) + \lambda_\alpha\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_2\; f_1^0 f_2^0\frac{x_1+x_2}{1-\mathrm{e}^{-x_1-x_2}}\Psi_\alpha(x_2)\\
&+ \frac{\tau_{ii}}{\tau_{ip}}\,f_1^0(1-f_1^0)\,(1-\omega_\alpha)\,\Psi_\alpha(x_1), &(19)
\end{aligned}
$$

где $g_\kappa(x_1) = x_1$, и $g_{\sigma,\eta} = 1$. Характерное время релаксации равно

$$
\tau_{ii} = \frac{8\pi^3}{m_i^{*3}T^2\langle Q_{ii}\rangle}, \qquad (20)
$$

где угловые скобки означают усреднение по углам вида

$$
\langle Q_{ii}\rangle = \int_{(4\pi)}\frac{\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi}{4\pi}\;\frac{\sin\theta}{\cos(\theta/2)}\;Q_{ii}(\theta,\phi). \qquad (21)
$$

Здесь углы θ и ϕ описывают столкновение одинаковых частиц в системе отсчёта Абрикосова-Халатникова. Точнее, θ — угол между импульсами исходных частиц, а ϕ — угол между плоскостями, в которых лежат импульсы начальных частиц и импульсы конечных частиц. Другие величины, характеризующие столкновение ii-типа выражаются следующим образом:

$$\begin{aligned} \lambda_\kappa &= \frac{1}{\langle Q_{ii}\rangle}\,\langle Q_{ii}(\theta,\phi)\,(1+2\cos\theta)\rangle, \\ \lambda_\eta &= \frac{1}{\langle Q_{ii}\rangle}\,\left\langle Q_{ii}(\theta,\phi)\,\left[3\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)\,\sin^2\phi-1\right]\right\rangle, \end{aligned} \tag{22}$$

и $\lambda_\sigma = -1$. Последнее соотношение означает то, что ee-столкновения не препятствуют переносу электрического заряда.

Время релаксации по отношению к столкновениям с локализованным протоном имеет вид

$$\tau_{ip} = \frac{2}{n_p m_i^* k_{\mathrm{F}i}\langle Q_{ip}\rangle}, \tag{23}$$

где угловые скобки означают усреднение по углам вида

$$\langle Q_{ip}\rangle = \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \mathrm{d}\chi\,\sin\chi\,Q_{ip}(\chi)\ , \tag{24}$$

χ — угол рассеяния частицы при столкновении с локализованным протоном. Наконец, эффективность ip-столкновений описывается параметром ω_α, определяемым так:

$$\begin{aligned} \omega_\kappa &= \omega_\sigma = \frac{1}{\langle Q_{ip}\rangle}\,\langle Q_{ip}(\chi)\cos\chi\rangle, \\ \omega_\eta &= \frac{1}{\langle Q_{ip}\rangle}\,\left\langle Q_{ip}(\chi)\,\frac{1}{2}\,(3\cos^2\chi-1)\right\rangle. \end{aligned} \tag{25}$$

Уравнение (19) может быть точно решено, если доминируют столкновения рассеивающихся частиц с протонами ($\tau_{ii} \gg \tau_{ip}$) или, наоборот, друг с другом. В первом случае мы имеем $\Psi_\alpha(x) = g_\alpha(x)\tau_{ip}[\tau_{ii}(1-\omega_\alpha)]^{-1}$. Во втором случае точное решение нетривиально. Оно может быть получено с помощью метода, развитого Брукером и Сайксом [19] и Х. Йенсеном и др. [46]. Кроме того, легко найти вариационное решение по аналогии с решением кинетического уравнения в главе 1 (см. также [107]) для функций Ψ_α при произвольном значении отношения τ_{ii}/τ_{ip}. Для этого необходимо предположить определённую зависимость этих функций от x ($\Psi_\kappa \propto x, \Psi_{\sigma,\eta} = \mathrm{const}$), не нарушающую симметрии уравнения (19), после чего определить коэффициенты, интегрируя уравнение по x_1 в бесконечных пределах (уравнение переноса тепла надо предварительно домножить на x_1). В результате получим:

$$\Psi_\kappa(x) = \left[\frac{2}{5}\,\pi^2\,(3-\lambda_\kappa) + \frac{\tau_{ii}}{\tau_{ip}}\,(1-\omega_\kappa)\right]^{-1} x, \tag{26}$$

$$\Psi_{\sigma,\eta}(x) = \left[\frac{2}{3}\,\pi^2\,(1+\lambda_{\sigma,\eta}) + \frac{\tau_{ii}}{\tau_{ip}}\,(1-\omega_{\sigma,\eta})\right]^{-1}. \tag{27}$$

Как только функции Ψ_α найдены, расчёт транспортных коэффициентов становится простым. Подставив равенства (17), (18), (26) и (27) в (12) – (14), получим

$$\kappa_i = \frac{\pi^2\, n_i\, T}{3\, m_i^* \left(\nu_{\kappa ii} + \nu_{\kappa ip}\right)}, \tag{28}$$

$$\sigma_e = \frac{e^2\, n_e}{m_e^* \nu_{\sigma ep}}, \tag{29}$$

$$\eta_i = \frac{m_i^*\, n_i\, v_{\mathrm{F}i}^2}{5\left(\nu_{\eta ii} + \nu_{\eta ip}\right)}. \tag{30}$$

Здесь $\nu_{\alpha ii}$ — эффективные частоты ii-столкновений:

$$\nu_{\kappa ii} = \frac{m_i^{*3} T^2}{20\pi}\, \langle Q_{ii}\rangle \,(3-\lambda_\kappa) = \frac{3}{5}\, \nu_{\eta ii}\, \frac{3-\lambda_\kappa}{1+\lambda_\eta}, \tag{31}$$

а $\nu_{\alpha ip}$ — эффективные частоты ip-столкновений:

$$\begin{aligned} \nu_{\kappa ip} &= \frac{1}{2} n_p m_i^* k_{\mathrm{F}i}\, \langle Q_{ip}\rangle \,(1-\omega_\kappa) = \nu_{\eta ip}\, \frac{1-\omega_\kappa}{1-\omega_\eta}, \\ \nu_{\sigma ep} &= \nu_{\kappa ep}. \end{aligned} \tag{32}$$

Полученные вариационные выражения для кинетических коэффициентов являются точными в пределе, когда доминируют ip-столкновения. Однако, в противоположном пределе вариационный метод оказывается не очень точным (особенно при расчёте теплопроводности). Точные формулы работ [19, 46] отличаются от получаемых этим способом некоторыми множителями, зависящими от параметров λ. Мы вернёмся к этим множителям и исправим с их учётом наши выражения в разделе 5. А сейчас перейдём к вычислению угловых интегралов, которые фигурируют в приведённых выше соотношениях для эффективных частот.

4.4 Вероятности рассеяния

4.4.1 Электроны

Сформулируем основные предположения, позволяющие произвести усреднение по углам для электронов в формулах (21) — (22) и (24) — (25). Электрон-электронное рассеяние адекватно описывается кулоновским потенциалом, экранированным неоднородностью плотности заряда, возникающей вблизи каждой из сталкивающихся частиц. Это экранирование, будучи чисто электронным (поскольку протоны фиксированы и никак не реагируют на малое внешнее возмущение), описывается диэлектрической проницаемостью $\epsilon(\omega, \mathbf{q})$ [$(\omega, \mathbf{q})$ — 4-импульс, переданный в процессе столкновения] и проявляется, главным образом, в сильном подавлении вероятности столкновений с переданными импульсами q, меньшими $q_{\mathrm{TF}} = 2\sqrt{\alpha/\pi v_{\mathrm{F}e}}\, k_{\mathrm{F}e}$, волнового числа Томаса-Ферми (здесь α — постоянная тонкой структуры). При $\omega \ll q v_{\mathrm{F}e}$ в вырожденном электронном газе, экранирование является статическим. При этом диэлектрическая проницаемость ультрарелятивистского газа даётся выражением [45]

$$\epsilon(0,\mathbf{q}) = 1 + \frac{\alpha}{\pi u^2}\left(\frac{2}{3} - \frac{1-3u^2}{6u}\,\ln\left|\frac{1-u}{1+u}\right| - \frac{u^2}{3}\,\ln\left|\frac{1-u^2}{u^2}\right|\right), \tag{33}$$

где $u = q/2k_{\mathrm{F}e}$. На практике требуемая малость переданной энергии для вырожденной системы сводится к ограничению сверху на температуру: $T \ll qv_{\mathrm{F}e} \sim q_{\mathrm{TF}}v_{\mathrm{F}e} = \sqrt{3}T_{pe}$, где T_{pe} — плазменная электронная температура. На языке параметра вырождения для ультрарелятивистской системы это означает, что $T \ll 0.1\varepsilon_{\mathrm{F}e}$ — условие, выполнение которого мы предполагаем.

Более того, как легко проверить, правую часть (33) при любых $q < 2k_{\mathrm{F}e}$ достаточно аппроксимировать формулой

$$\epsilon(0,\mathbf{q}) = 1 + \frac{q_{\mathrm{TF}}^2}{q^2}, \tag{34}$$

строго обоснованной при малых переданных импульсах $q \ll 2k_{\mathrm{F}e}$. Даже после этого упрощения интегрирование в выражениях (21) и (22) остаётся громоздким. Однако, для ультрарелятивистских частиц отношение $y = q_{\mathrm{TF}}/2k_{\mathrm{F}e}$ мало, и, в принципе, достаточно вычислить лишь главные члены разложения искомых величин по степеням y. Таким способом находим

$$\langle Q_{ee}\rangle = \frac{3\pi^3}{2}\,\frac{e^4}{\varepsilon_{\mathrm{F}e}^4 y^3}, \qquad \lambda_\kappa = -\frac{1}{3}, \qquad \lambda_\eta = -1 + 10y^2. \tag{35}$$

Вытекающие отсюда выражения для парциальных электрон-электронных теплопроводности и вязкости совпадает с полученными ранее другими авторами (например, [29, 35]) в ультрарелятивистском пределе.

Исследование электрон-протонных столкновений даже несколько проще. Прежде всего, здесь электронное экранирование всегда статическое (конечно, при условии, что температура не настолько велика, чтобы возбудить протоны в их ямах). Ситуация с протон-протонными корреляциями не вполне определённая. В соответствии с аргументами, приведёнными в разделе 2, будем считать, что протонная система полностью неупорядочена. При таких условиях ep-рассеяние очень похоже на рассеяние электронов на примесях, изучавшееся, например, Флауэрсом и Ито [29]. В этом случае интегрирование можно провести точно при любой степени релятивизма электронов и для любых y. Однако, как и выше, в выражениях (24) и (25) нужны только главные члены разложений по y. Точные формулы можно найти в [29], однако, формула для вязкости, полученная в этой работе, слегка неточна. Поэтому, мы приведём здесь как точное, так и упрощённое выражения для сдвиговой вязкости, а также упрощённые формулы для тепло- и электропроводности:

$$\langle Q_{ep}\rangle = \frac{2\pi e^4}{k_{\mathrm{F}e}^4 y^2}, \qquad \omega_\kappa = 1 + 4y^2(\ln y + 1), \qquad \omega_\eta = 1 + 12y^2(\ln y + 1.25). \tag{36}$$

Точное выражение для вязкости имеет вид

$$\langle Q_{ep}\rangle\,(1-\omega_\eta) = \frac{12\pi e^4}{k_{\mathrm{F}e}^4}\left\{[1 + 2y^2(1+\beta^2) + 3y^4\beta^2]\,\ln\frac{1+y^2}{y^2} - 2 - \frac{\beta^2}{2} - 3y^2\beta^2\right\}, \tag{37}$$

где $\beta = v_{\mathrm{F}e}/c$.

Наконец заметим, что результаты, полученные для *ep*-рассеяния, сохраняют силу, если протоны полностью поляризованы по спину.

4.4.2 Нейтроны

Описание рассеяния с участием нуклонов содержит большую неопределённость. Теорию Ландау нельзя применить к описанию *nn*-рассеяния, поскольку в интересующем нас диапазоне плотностей функциональные зависимости амплитуд рассеяния от переданного импульса неизвестны. Ещё хуже мы понимаем рассеяние нейтронной квазичастицы вблизи фермиевской поверхности на локализованном протоне.

Гораздо более грубый, однако, легче реализуемый подход состоит в том, чтобы полностью пренебречь влиянием многочастичных эффектов на амплитуды рассеяния, т.е. положить в основу расчёта данные по нуклон-нуклонному рассеянию в *вакууме*. Очевидным недостатком этого подхода является неправильное описание короткодействующей отталкивательной части нуклон-нуклонного взаимодействия: при столкновении квазичастиц последнее в некоторой степени заэкранировано, тогда как свободные нуклоны, наоборот, хорошо чувствуют эту часть потенциала при столкновениях. Следовательно, можно ожидать, что этот метод будет переоценивать роль столкновительных процессов в ограничении нейтронного переноса, недооценивая, тем самым, кинетические коэффициенты. Следуя этим путём, мы надеемся получить правильные оценки нейтронных транспортных коэффициентов, однако, предупреждаем читателя, что эти результаты могут быть в несколько раз меньше, чем истинные значения коэффициентов переноса.

В рамках этого подхода вероятности перехода для *nn*-столкновений при любой степени релятивизма легко восстанавливаются по значениям вакуумных дифференциальных сечений рассеяния в системе отсчёта центра масс (cm):

$$Q_{nn}(\theta,\phi) = \frac{16\pi^2\hbar^4}{m_N^2 + k_{\mathrm{F}n}^2 \sin^2(\theta/2)} \frac{\mathrm{d}\sigma_{nn}}{\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{cm}}}(E_{\mathrm{lab}}, \phi_{\mathrm{cm}}), \tag{38}$$

где

$$E_{\mathrm{lab}} = \frac{k_{\mathrm{F}n}^2}{m_N}(1 - \cos\theta), \quad \text{и} \quad \phi_{\mathrm{cm}} = \phi, \tag{39}$$

энергия столкновения в лабораторной (lab) системе отсчёта и угол рассеяния в системе центра масс.

В случае *np*-столкновений ситуация более проблематична. Если нейтроны нерелятивистские, то вероятность перехода при рассеянии нейтрона на локализованном протоне (что эквивалентно рассеянию нейтрона на внешнем поле, описываемом тем же самым *np*-потенциалом) можно снова вывести из дифференциального сечения *np*-рассеяния в вакууме:

$$Q_{np}(\theta) = \frac{16\pi^2\hbar^4}{m_N^2} \frac{\mathrm{d}\sigma_{np}}{\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{cm}}}(E_{\mathrm{lab}}, \phi_{\mathrm{cm}}), \tag{40}$$

где

$$E_{\rm lab} = \frac{2k_{{\rm F}n}^2}{m_N}, \quad \text{и} \quad \phi_{\rm cm} = \theta. \tag{41}$$

Однако, с увеличением степени релятивизма такая процедура перестаёт быть адекватной, поскольку рассеяние на (незапаздывающем) внешнем потенциале начинает отличаться от рассеяния двух частиц (случай, изучаемый в лаборатории). Но для рассматриваемых плотностей ($\leq 5n_0$) нейтроны являются лишь умеренно релятивистскими, и, следовательно, можно применить описанный выше формализм, обобщив естественным образом равенство (40):

$$Q_{np}(\theta) = \frac{16\pi^2\hbar^4}{m_N^2 + k_{{\rm F}n}^2} \frac{{\rm d}\sigma_{np}}{{\rm d}\Omega_{\rm cm}}(E_{\rm lab}, \phi_{\rm cm}). \tag{42}$$

Мы вычислили необходимые угловые средние от вероятностей перехода [те, которые фигурируют в (31) и (32)], используя таблицы вакуумных сечений в системе отсчёта центра масс как функций лабораторной энергии (в диапазоне от 10 до 700 МэВ) и угла рассеяния в системе центра масс. Таблицы для pp- и np-рассеяния были получены с использованием разложения по парциальным волнам WI96, имеющегося в базе данных SAID, созданной в Вирджинском политехническом институте Арндтом и др. [4]. Чтобы получить сечения nn-рассеяния из сечений pp-рассеяния использовалась следующая процедура. Прежде всего, мы вычитали из табличных значений хорошо известные кулоновские сечения. Это давало разумную оценку сечений nn-рассеяния при больших углах, но делало таблицы неприменимыми при малых углах (например, при энергиях менее 400 МэВ табличные значения для $5^{\rm o}$ становились отрицательными, свидетельствуя о важности интерференционных членов). Поэтому была использована плавная экстраполяция значений nn-сечений из области больших углов ($\gtrsim 20^{\rm o} - 40^{\rm o}$ в зависимости от энергии) в область малых углов, что дало разумное значение nn-сечений во всём диапазоне углов. Наконец, при нулевой энергии мы использовали значение 3030 мб, вытекающее из известной длины nn-рассеяния (например, [87]).

Расчёты были выполнены для значений $k_{{\rm F}n}$ от 1.1 до 2.9 фм$^{-1}$ (n_n от $0.5n_0$ до $5n_0$). Для значений, лежащих в промежутках между соседними узлами таблицы, использовалась билинейная интерполяция. Результаты наших расчётов аппроксимированы с максимальной ошибкой менее 1.5 % следующими аналитическими выражениями:

$$\begin{aligned}
S_{\kappa n} &= \frac{m_N^2\,\langle Q_{nn}\rangle\,(3-\lambda_\kappa)}{256\,\pi\hbar^4\,1\text{мб}} = \frac{0.3833}{z_n^3\sqrt{z_n}} + 3.652 z_n^{0.4}, \\
S_{\eta n} &= \frac{m_N^2\,\langle Q_{nn}\rangle\,(1+\lambda_\eta)}{192\,\pi\hbar^4\,1\text{мб}} = \frac{0.1152}{z_n^3} + \frac{3.965 z_n}{2.499 + z_n^6\sqrt{z_n}}, \\
S_{\kappa p} &= \frac{m_N^2\,\langle Q_{np}\rangle\,(1-\omega_\kappa)}{16\,\pi\hbar^4\,1\text{мб}} = \frac{1.833}{z_n^2} + \frac{1.430 z_n^2}{0.3958 + z_n^8}, \\
S_{\eta p} &= \frac{m_N^2\,\langle Q_{np}\rangle\,(1-\omega_\eta)}{16\,\pi\hbar^4\,1\text{мб}} = \frac{0.5663}{z_n^3} + \frac{4.545 z_n}{1.276 + z_n^6}.
\end{aligned} \tag{43}$$

В этих выражениях величина z_n представляет собой волновой вектор Ферми нейтрона в единицах 2.666 фм$^{-1}$ (что соответствует плотности $4n_0$).

4.5 Расчётные формулы

Объединим результаты, полученные в предыдущих разделах, и представим их в форме, удобной для практического использования. Прежде всего следует отметить, что полученные вариационные решения можно модифицировать таким образом, чтобы они стали точными в пределе, когда доминируют ii-столкновения. Это обычно делается путём домножения парциальных вариационных транспортных коэффициентов на хорошо известные множители C_α, зависящие от величин λ_α. Для электронов $C_\kappa(-1/3) = 1.3$, а $C_\eta(-1+y^2) \approx 1$, т.е. вариационное решение для сдвиговой вязкости, обусловленной межэлектронными столкновениями ультрарелятивистских электронов, оказывается фактически точным. Для нейтронов коэффициенты C_α являются медленно меняющимися функциями плотности. В рассматриваемом диапазоне плотностей с очень хорошей точностью можно принять постоянные значения поправочных множителей $C_\kappa = 1.2$ и $C_\eta = 1.05$.

Объединяя равенства (28) – (32), (35), (36) и (43) и учитывая приведённые выше множители, можем написать для теплопроводности:

$$\begin{aligned}
\kappa_i^{-1} &= \kappa_{ii}^{-1} + \kappa_{ip}^{-1}, \\
\kappa_{ee} &= 2.2 \cdot 10^{23} \left(\frac{n_b}{4n_0} \cdot \frac{x_e}{0.01} \right) \frac{1}{T_8} \quad \text{эрг} \;\; \text{с}^{-1}\,\text{см}^{-1}\,\text{K}^{-1}, \\
\kappa_{ep} &= 2.5 \cdot 10^{19} \left(\frac{n_b}{4n_0} \cdot \frac{x_e}{0.01} \right)^{1/3} T_8 \quad \text{эрг} \;\; \text{с}^{-1}\,\text{см}^{-1}\,\text{K}^{-1}, \\
\kappa_{nn} &= 8.3 \cdot 10^{23} \left(\frac{m_N}{m_n^*} \right)^4 \left(\frac{n_n}{4n_0} \right) \frac{1}{T_8} \frac{1}{S_{\kappa n}} \quad \text{эрг} \;\; \text{с}^{-1}\,\text{см}^{-1}\,\text{K}^{-1}, \\
\kappa_{np} &= 8.9 \cdot 10^{17} \left(\frac{m_N}{m_n^*} \right)^2 \left(\frac{n_n}{4n_0} \right)^{2/3} \left(\frac{n_b}{4n_0} \cdot \frac{x_p}{0.01} \right)^{-1} \frac{T_8}{S_{\kappa p}} \quad \text{эрг} \;\; \text{с}^{-1}\,\text{см}^{-1}\,\text{K}^{-1}, \qquad (44)
\end{aligned}$$

для электропроводности:

$$\sigma_e = \sigma_{ep} = 9.2 \cdot 10^{23} \left(\frac{n_b}{4n_0} \cdot \frac{x_e}{0.01} \right)^{1/3} \text{с}^{-1}, \qquad (45)$$

и для сдвиговой вязкости:

$$\begin{aligned}
\eta_i^{-1} &= \eta_{ii}^{-1} + \eta_{ip}^{-1}, \\
\eta_{ee} &= 1.7 \cdot 10^{19} \left(\frac{n_b}{4n_0} \cdot \frac{x_e}{0.01} \right)^{5/3} \frac{1}{T_8^2} \quad \text{г}\;\text{см}^{-1}\,\text{с}^{-1}, \\
\eta_{ep} &= 1.1 \cdot 10^{13} \left(\frac{n_b}{4n_0} \cdot \frac{x_e}{0.01} \right) \quad \text{г}\;\text{см}^{-1}\,\text{с}^{-1}, \\
\eta_{nn} &= 1.5 \cdot 10^{19} \left(\frac{m_N}{m_n^*} \right)^4 \left(\frac{n_n}{4n_0} \right)^{5/3} \frac{1}{T_8^2} \frac{1}{S_{\eta n}} \quad \text{г}\;\text{см}^{-1}\,\text{с}^{-1}, \\
\eta_{np} &= 2.2 \cdot 10^{13} \left(\frac{m_N}{m_n^*} \right)^2 \left(\frac{n_n}{4n_0} \right)^{4/3} \left(\frac{n_b}{4n_0} \cdot \frac{x_p}{0.01} \right)^{-1} \frac{1}{S_{\eta p}} \quad \text{г}\;\text{см}^{-1}\,\text{с}^{-1}\;. \qquad (46)
\end{aligned}$$

Напомним условия применимости этих выражений. Как электроны, так и нейтроны должны быть сильно вырожденными. Пренебрежение динамическим экранированием для электронов основано на более сильном условии $T \ll 0.1\varepsilon_{\mathrm{F}e}$. Электроны должны быть ультрарелятивистскими. Наконец, концентрация нейтронов лежит в диапазоне от $0.5n_0$ до $5n_0$.

4.6 Нейтринное излучение

В этом разделе изучены два процесса излучения нейтрино, дающие вклад в нейтринное остывание и характерные для вещества нейтронной звезды с локализованными протонами. Первый из этих процессов — тормозное излучение нейтринных пар при рассеянии электронов на локализованных протонах, второй — та же реакция при рассеянии нейтронов на локализованных протонах. Оба процесса зависят от температуры как T^6, т.е. так же, как и прямой урка-процесс. Поэтому локализация протонов может иметь следствием нестандартное (ускоренное) остывание нейтронной звезды.

4.6.1 Электроны

В случае электронов мы можем использовать результаты работы Хэнселя и др. [39]. В этой статье рассматривалось тормозное излучение нейтринных пар при рассеянии электронов на ядрах в жидкой фазе в коре нейтронной звезды. Авторы получили следующее общее выражение для скорости потерь энергии [их формула (8)]

$$Q^e_{\mathrm{Brem}} = \frac{8\pi G_F^2 Z^2 e^4 C_+^2}{567\hbar^9 c^8}(k_B T)^6 n_i L \quad \text{эрг с}^{-1}\,\text{см}^{-3}, \tag{47}$$

где $G_F = 1.436 \cdot 10^{-49}$ эрг см^3 — константа Ферми слабого взаимодействия, множитель $C_+^2 = 1.675$ учитывает излучение трёх типов нейтрино: ν_e, ν_μ и ν_τ; Z — зарядовое число ядра, n_i — концентрация ядер, и величина $L \approx 1$, интерпретируемая как кулоновский логарифм, представляет собой медленно меняющуюся функцию Z, T и n_i. Авторы получили общую формулу для L [их равенство (19)], учитывающую электромагнитный формфактор ядра, статический структурный фактор ядер, статическое электронное экранирование, неборновские поправки, а также температурный эффект (пояснённый ниже). Они предложили аналитическую формулу, описывающую поведение L [их формула (25)]. В нашем случае мы, очевидно, имеем $Z = 1$ и $n_i = n_p$. Подгоночное выражение работы [39] в этом случае не годится (авторов интересовали процессы в коре нейтронной звезды, поэтому они рассматривали $Z \geq 10$). Кроме того, в нашем случае температура много меньше обратной длины экранирования (*низкотемпературный режим* по терминологии [39]). В этом режиме температура является наименьшим энергетическим масштабом и обеспечивает наиболее быстрое изменение подынтегральных функций. В функциях, не зависящих от температуры, можно считать энергию и импульс электрона до и после рассеяния равными их значениям на поверхности Ферми. Таким образом, температурный эффект, детально рассмотренный авторами [39], оказывается здесь несущественным, а кулоновский логарифм L определяется гораздо более простой формулой (21) из [39]. В этом выражении мы можем пренебречь неборновскими поправками, формфактором ядра, а также структурным фактором ядер (поскольку наша система протонов предполагается полностью неупорядоченной), и заменить статическую диэлектрическую проницаемость электронов выражением (34). Производя одномерное интегрирование, для ультрарелятивистских электронов получим $L = 1.755$. Подставляя это значение в равенство (47), имеем

$$Q_{\text{Brem}}^{e-\text{loc.p.}} = 6.0 \cdot 10^{18}\, T_9^6 \left(\frac{n_b}{4n_0} \cdot \frac{x_e}{0.01} \right) \quad \text{эрг с}^{-1}\ \text{см}^{-3}, \tag{48}$$

где $T_9 \equiv T/10^9$ К.

4.6.2 Нейтроны

В этом подразделе будет получена оценка скорости потерь энергии в результате излучения нейтринных пар при рассеянии нейтронов на локализованных протонах. Чтобы упростить вывод, будем, во-первых, считать нейтроны нерелятивистскими, а, во-вторых, описывать np-взаимодействие очень упрощённой моделью контактного, не зависящего от спина потенциала в борновском приближении. Константа этого взаимодействия U будет зависеть от плотности так, чтобы при данной плотности (или, что эквивалентно, при данной энергии столкновения) воспроизвести полное сечение np-рассеяния в вакууме, известное экспериментально или теоретически (см. ниже). Мы не будем вводить никаких поправок, учитывающих влияние среды, за исключением принципа Паули в начальном и конечном состояниях нейтрона.

Интересующий нас процесс в низшем порядке описывается двумя фейнмановскими диаграммами (A) и (B). На обеих диаграммах имеется исходный нейтрон с 4-импульсом $k = (\varepsilon, \mathbf{k})$. В случае диаграммы (A) нейтрон сначала излучает нейтринную пару с полным 4-импульсом $p = (\omega, \mathbf{p}) = k_1 + k_2$, где $k_1 = (\omega_1, \mathbf{k}_1)$ и $k_2 = (\omega_2, \mathbf{k}_2)$ — 4-импульсы нейтрино и антинейтрино, затем распространяется с 4-импульсом $k - p$ и, наконец, взаимодействует сильно с локализованным протоном, поглощая 4-импульс $q = (0, \mathbf{q})$ и переходя в конечное состояние с 4-импульсом $k' = (\varepsilon', \mathbf{k}')$. Диаграмма (B) соответствует процессу, в котором нейтрон сначала сильно взаимодействует с локализованным протоном, потом распространяется с 4-импульсом $k' + p$, и, наконец, излучает нейтринную пару с полным импульсом p, переходя в состояние k'.

Будем использовать нерелятивистский формализм (для нейтронов) при описании электрослабой вершины, возьмём нерелятивистскую функцию Грина нейтрона в промежуточном состоянии и нерелятивистские спиноры для нейтрона в начальном и конечном состояниях. Тогда амплитуда процесса примет вид:

$$M = M_A + M_B = -\frac{iG_F U}{2\sqrt{2}}\, \chi'^{\dagger}(\delta_{\mu 0} - g_A \delta_{\mu i} \sigma_i)\chi \left[G(k-p) + G(k'+p) \right] l_\mu, \tag{49}$$

где $g_A \approx 1.261$ — аксиально-векторная константа связи; греческие индексы принимают значения 0, 1, 2, 3, а латинские — 1, 2, 3; σ_i — матрицы Паули; χ и χ' — спиноры Паули, описывающие исходные и конечные состояния нейтрона. Далее, l_μ представляет собой нейтральный ток нейтрино:

$$l_\mu = \bar{u}_1 \gamma_\mu (1 + \gamma^5) u_{-2}, \tag{50}$$

где $u_1 = u(k_1)$ и $u_{-2} = u(-k_2)$ — биспиноры нейтрино и антинейтрино, а черта над u_1 означает дираковское сопряжение.

В нашей задаче знаменатели нейтронных пропагаторов G не могут быть равны нулю. Поэтому можно заменить их вакуумными пропагаторами, несмотря на то, что изучаемый процесс идёт при наличии фермиевского моря нейтронов. Нерелятивистский нейтронный пропагатор имеет вид:

$$G(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i0}. \tag{51}$$

Скорость потери энергии на излучение нейтринных пар даётся выражением

$$Q_{\rm Brem}^{n-{\rm loc.p.}} = 3n_p \int \frac{{\rm d}\mathbf{k}\,{\rm d}\mathbf{k}'\,{\rm d}\mathbf{k}_1\,{\rm d}\mathbf{k}_2\,{\rm d}\mathbf{q}}{4\omega_1\omega_2\,(2\pi)^{15}}\,(2\pi)^4\,\delta^{(4)}(k+q-k'-k_1-k_2)f(1-f')\,\omega\sum_{ss'}|M|^2, \tag{52}$$

где n_p — концентрация локализованных протонов, $f = f(\varepsilon)$ и $f' = f(\varepsilon')$ — функции распределения Ферми-Дирака нейтронов, и суммирование проводится по исходным и конечным спиновым состояниям нейтронов. Множитель 3 учитывает излучение пар $\nu_e\bar{\nu}_e, \nu_\mu\bar{\nu}_\mu$ и $\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$.

Вычисляя просуммированный по спинам квадрат модуля матричного элемента и используя тождество Ленарта [16]

$$\int \frac{{\rm d}\mathbf{k}_1\,{\rm d}\mathbf{k}_2}{\omega_1\omega_2}\,k_1^\mu k_2^\nu \delta^{(4)}(p-k_1-k_2) = \frac{\pi}{6}\,(p^2 g^{\mu\nu} + 2p^\mu p^\nu), \tag{53}$$

получим следующее выражение для нейтринного энерговыделения

$$\begin{aligned} Q_{\rm Brem}^{n-{\rm loc.p.}} &= \frac{\pi G_F^2 U^2 n_p}{(2\pi)^{11}} \int {\rm d}\mathbf{k}\,{\rm d}\mathbf{k}'\,{\rm d}\mathbf{p}\,f(1-f')\,\omega\,[3g_A^2\omega^2 + (1-2g_A^2)\mathbf{p}^2] \\ &\times\ 4m_n^2 \left(\frac{1}{2m_n\omega - 2\mathbf{p}\mathbf{k}' - \mathbf{p}^2} - \frac{1}{2m_n\omega - 2\mathbf{p}\mathbf{k} + \mathbf{p}^2}\right)^2, \end{aligned} \tag{54}$$

где интегрирование по ${\rm d}\mathbf{q}$ заменено интегрированием по ${\rm d}\mathbf{p}$. В этом выражении мы должны интегрировать по области, где $\varepsilon' < \varepsilon$ и $|\mathbf{p}| < \omega = \varepsilon - \varepsilon'$. В знаменателях мы можем опустить члены $\mathbf{p}^2/2m_n$, которые пренебрежимо малы по сравнению с ω. Используя тот факт, что нейтроны нерелятивистские, мы можем разложить знаменатели до первого порядка по $\mathbf{p}\mathbf{k}'/m_n$ и $\mathbf{p}\mathbf{k}/m_n$. После этого направим ось z декартовой системы координат вдоль вектора $\mathbf{k}$ и расположим вектор $\mathbf{k}'$ в плоскости xz. Интегрирование по ${\rm d}\mathbf{p}$ и по углу между векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ позволяет записать искомую величину в форме двумерного фермиевского интеграла:

$$\begin{aligned} Q_{\rm Brem}^{n-{\rm loc.p.}} &= \frac{8\pi G_F^2 U^2 n_p}{21(2\pi)^8}\,(1+2.2g_A^2)\,\left(\frac{m_n^*}{m_n}\right)^2 \int {\rm d}\varepsilon\,{\rm d}\varepsilon'|\mathbf{k}||\mathbf{k}'|(\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2)f(1-f')\omega^4 \\ &= \frac{16\pi G_F^2 U^2 n_p}{21(2\pi)^8}\,(1+2.2g_A^2)\,\left(\frac{m_n^*}{m_n}\right)^2 k_{{\rm F}n}^4 T^6 \int_{-\infty}^{\infty}{\rm d}x \int_0^\infty \frac{{\rm d}\omega\,\omega^4}{(e^x+1)(e^{\omega-x}+1)}, \end{aligned} \tag{55}$$

где мы учли, что нейтроны сильно вырождены и вынесли за знак интеграла все плавные функции нейтронных импульсов, взяв $k = k_{{\rm F}n}$. Последний интеграл является стандартным и равен $(2\pi)^6/504$. Подставляя это значение в (55), получаем

$$Q_{\rm Brem}^{n-{\rm loc.p.}} = \frac{G_F^2 U^2}{2646\pi}\,(1+2.2g_A^2)\,\left(\frac{m_n^*}{m_n}\right)^2 n_p k_{{\rm F}n}^4 T^6. \tag{56}$$

Последний шаг — определить значение U^2. Для контактного, не зависящего от спина np-взаимодействия U^2 даёт дифференциальную вероятность упругого рассеяния нейтрона на локализованном протоне (одинаковую для всех углов рассеяния θ). Наше приближение состоит в том, чтобы выразить U^2 через полное сечение упругого np-рассеяния в вакууме, используя равенства (40) и (41). Интегрируя по телесному углу, имеем

$$4\pi U^2 = \frac{16\pi^2\hbar^4}{m_N^2}\,\sigma_{np}^{\text{tot.el.}}\left(\frac{2k_{\text{F}n}^2}{m_N}\right). \tag{57}$$

Здесь, $\sigma_{np}^{\text{tot.el}}$ — полное сечение упругого np-рассеяния, которое может быть получено на основе той же самой теоретической модели, что и в разделе 4.2, а именно, WI96 в базе данных SAID. Мы предлагаем следующую аппроксимационную формулу для U^2 в диапазоне энергий от 100 до 700 МэВ:

$$U^2 = \frac{4\pi\hbar^4 \ 1\ \text{мб}}{m_N^2}\,S_{np}^{\text{t}}, \quad \text{где} \quad S_{np}^{\text{t}} = 26.09 + 3.444\,\frac{4n_0}{n_n}\ . \tag{58}$$

Средняя ошибка этой аппроксимации $\approx 1.2\%$, а максимальная ошибка $\approx 2.9\%$ имеет место при 700 МэВ. Объединяя равенства (56) и (58), получим следующий численный результат:

$$Q_{\text{Brem}}^{n-\text{loc.p.}} = 1.3\cdot 10^{21}\,S_{np}^{\text{t}}\left(\frac{n_b}{4n_0}\cdot\frac{x_p}{0.01}\right)\left(\frac{n_n}{4n_0}\right)^{4/3}\left(\frac{m_n^*}{m_n}\right)^2 T_9^6 \quad \text{эрг}\,\text{с}^{-1}\,\text{см}^{-3}. \tag{59}$$

Можно ожидать, что эффекты среды модифицируют как значение U^2, так и вид зависимости (58) этой величины от плотности. Следовательно, выражение (59) можно рассматривать как грубую оценку $Q_{\text{Brem}}^{n-\text{loc.p.}}$.

4.7 Астрофизические следствия

Как видно из результатов, полученных в предыдущих разделах, наличие случайно распределённых локализованных протонов, удаляя множитель T^{-2} из кинетических коэффициентов, приводит при низких температурах к резкому уменьшению κ, σ и η по сравнению со стандартным случаем, когда протоны образуют ферми-жидкость. С другой стороны, существенно увеличивается нейтринная светимость. Обсудим астрофизические следствия этих эффектов для нейтронных звёзд.

4.7.1 Теплопроводность

Перенос тепла в ядре нейтронной звезды в основном обеспечивается электронами. Основным механизмом рассеяния электронов является рассеяние на локализованных протонах, так что $\kappa^{\text{loc.p.}} \simeq \kappa_e^{\text{loc.p.}} \simeq \kappa_{ep}^{\text{loc.p.}}$. Сравним этот результат со стандартной теплопроводностью κ. Последняя определяется формулой, полученной Гнединым и Яковлевым [35]:

$$\kappa_e = \frac{7.6\cdot 10^{24}}{T_8}\left(\frac{m_p}{m_p^*}\right)^{1/2}\left(\frac{n_e}{n_0}\right)^{7/6} \quad \text{эрг} \quad \text{с}^{-1}\,\text{см}^{-1}\,\text{К}^{-1}, \tag{60}$$

для несверхтекучих p, и

$$\kappa_e = \frac{5.6 \cdot 10^{24}}{T_8} \left(\frac{n_e}{n_0}\right) \text{ эрг } \text{с}^{-1}\,\text{см}^{-1}\,\text{K}^{-1}, \tag{61}$$

для сильно сверхтекучих p. Решающей разницей между двумя режимами оказывается наличие или отсутствие протонного экранирования: теплопроводность электронов уменьшается, несмотря на уменьшение числа рассеивателей, выпадающих в конденсат, за счёт ослабления протонного экранирования. При $n_b = 4n_0$ и $x_e = 0.01$ мы получаем

$$\frac{\kappa_e}{\kappa^{\text{loc.p.}}} \simeq \frac{(5 \div 10) \cdot 10^3}{T_8^2}\ . \tag{62}$$

Стандартная диффузионная теплопроводность нейтронов обычно порядка или несколько меньше чем теплопроводность электронов. Отношение теплопроводностей нейтронов и электронов чувствительно к 1) доле электронов, 2) эффективной массе нуклонов и 3) силе взаимодействия квазичастиц; в несверхтекучем режиме $\kappa_{nn}^{\text{loc.p.}}$ может служить хорошей аппроксимацией нейтронной теплопроводности. Учитывая это, для оценок положим $\kappa/\kappa^{\text{loc.p.}} \sim 10^4/T_8^2$.

Нейтронные звёзды рождаются очень горячими и постепенно остывают, благодаря излучению нейтрино из их внутренних областей. Остыванию сопутствует выравнивание температуры внутренних областей звезды с характерным временным масштабом $\tau_{\text{t.e.}}$, определяемым размерами ядра R_{core}, теплоёмкостью единицы объёма C и теплопроводностью вещества κ:

$$\tau_{\text{t.e.}} \sim \frac{R_{\text{core}}^2 C}{\kappa}. \tag{63}$$

Для оценок, в стандартном несверхтекучем случае можем положить $C = C_n$, теплоёмкость вырожденных нейтронов

$$C_n = 2.6 \cdot 10^{20} \left(\frac{m_n^*}{m_N}\right) \left(\frac{n_n}{4n_0}\right)^{1/3} T_9 \text{ эрг } \text{см}^{-3}\,\text{K}^{-1}, \tag{64}$$

и аппроксимировать κ величиной κ_e из (60). Полагая далее все эффективные массы равными массам свободных частиц и считая постоянной плотность ядра ($n_b \simeq n_n = 4n_0$) и его состав ($x_e = 0.01$), получим $\tau_{\text{t.e.}} \sim 460\ T_9^2\ (R_{\text{core}}/10\ \text{км})^2$ лет. Если ядро является сверхтекучим, то в качестве C можно подставить теплоёмкость электронов C_e:

$$C_e = 6.6 \cdot 10^{18} \left(\frac{n_b}{4n_0} \cdot \frac{x_e}{0.01}\right)^{2/3} T_9 \text{ эрг } \text{см}^{-3}\text{K}^{-1}, \tag{65}$$

и взять κ из формулы (61). Это даёт $\tau_{\text{t.e.}} \sim 10\ T_9^2\ (R_{\text{core}}/10\ \text{км})^2$ лет (последнее соотношение следует считать нижним пределом, поскольку теплоёмкость нейтронов может уменьшаться достаточно медленно [58]). Оба эти выражения для $\tau_{\text{t.e.}}$ перестают зависеть от температуры в результате локализации протонов. Умножая $\tau_{\text{t.e.}}$ на $\kappa/\kappa^{\text{loc.p.}}$ [см. (62)], получим $\tau_{\text{t.e.}}^{\text{loc.p.}} = 4.6 \cdot 10^4\ (R_{\text{core}}^{\text{loc.p.}}/10\ \text{км})^2$ лет и $10^3\ (R_{\text{core}}^{\text{loc.p.}}/10\ \text{км})^2$ лет для несверхтекучего и сильно сверхтекучего случаев, соответственно.

Теплопроводность является важной, когда указанные выше временные масштабы становятся сравнимыми или меньшими, чем характерное время тепловой эволюции, связанной с нейтринными потерями. В противном случае, температура данного элемента вещества определяется локально и не зависит от температуры окружающего вещества. Временной масштаб нейтринного остывания можно оценить как CT/Q_ν, где Q_ν — полная скорость нейтринного энерговыделения. Температурная зависимость Q_ν в различных процессах излучения нейтрино обычно очень сильна. Ввиду этого, температура, при которой устанавливается тепловое равновесие, для случая локализованных протонов не будет на много ниже, чем в стандартном случае; в обоих случаях эта температура лежит в диапазоне 10^8 – 10^9 К. Однако, время, необходимое для того чтобы достичь теплового равновесия в ядре, содержащем локализованные протоны, будет на два порядка больше нежели для стандартного жидкого ядра. Последнее утверждение не изменится и в сверхтекучем случае.

Ещё одна разница между двумя случаями заключается в том, что время установления теплового равновесия в случае протонной локализации не зависит от температуры. Если в стандартном случае ядро при температурах ниже $\sim 10^8$ К может считаться абсолютно изотермическим, при наличии локализованных протонов по-прежнему требуется $\sim 10^3 - 10^4$ лет, чтобы размыть любую возникшую температурную неоднородность.

4.7.2 Электропроводность

Электропроводность определяет процесс омической диссипации магнитного поля нейтронных звёзд. В стандартном случае *npe* вещества с несверхпроводящими протонами перенос заряда осуществляется, главным образом, ультрарелятивистскими электронами, рассеивающимися на протонах. В этих условиях электропроводность составляет $\sigma_{ep} = 2.1 \times 10^{31}\ (n_e/n_0)^{3/2}/T_8^2\ \text{с}^{-1}$ (Бэйм и др. [13]). Локализация протонов препятствует образованию протонного сверхпроводника (поскольку температура локализации достаточно высока, порядка $10^{10} - 10^{11}$ К, что, по современным представлениям, выше критической температуры протонов). При $n_b = 4n_0$ и $x_e = 0.01$ локализация уменьшает теплопроводность во много раз:

$$\frac{\sigma_{ep}}{\sigma_e^{\text{loc.p.}}} \simeq \frac{2 \cdot 10^5}{T_8^2}. \tag{66}$$

Столь низкая электропроводность будет приводить к заметному распаду электрических токов, циркулирующих в ядре с локализованными протонами, на временах

$$\tau_{\text{d}}^{\text{loc.p.}} \sim \frac{\sigma_e^{\text{loc.p.}}(R_{\text{core}}^{\text{loc.p.}})^2}{c^2} \simeq 3 \cdot 10^7 \left(\frac{R_{\text{core}}^{\text{loc.p.}}}{10\ \text{км}}\right)^2 \quad \text{лет}. \tag{67}$$

Анализ популяций радиопульсаров не позволяет сделать вывод о распаде магнитного поля в течение активного периода жизни нормального радиопульсара [17]. Конкретные нижние пределы на временной масштаб распада магнитного поля, полученные с помощью различных статистических методов, варьируются от $2 \cdot 10^7$ лет до 10^8 лет [17]. Чтобы не противоречить этим наблюдательным фактам, следует предположить, что либо ядрышко, содержащее локализованные протоны, мало, и магнитное поле в основном поддерживается токами, текущими во внешней области ядра; либо внешнее поле отделено от внутреннего, и наблюдаемые пределы на распад поверхностного поля не приводят к каким-либо определённым ограничениям на эволюцию поля в ядре; либо магнитное поле в ядре обязано своим происхождением не электрическим токам, а ферромагнитной намагниченности вещества. На самом деле, как показано Кучерой и Вуйчиком [49, 50], ферромагнетизм, связанный с полной спиновой поляризацией протонов и частичной спиновой поляризацией нейтронов (порядка x_p), может быть естественным свойством вещества нейтронной звезды с локализованными протонами (сопоставление этого теоретического предсказания с наблюдениями радиопульсаров проведено в [38]).

4.7.3 Сдвиговая вязкость

Локализация протонов приводит к сильному уменьшению сдвиговой вязкости вещества нейтронной звезды. Предполагая, что нейтроны нормальны, мы можем оценить значение вязкости η стандартного *npe* вещества как $\eta = \eta_{nn}^{\text{loc.p.}}$. В результате локализации получаем уменьшение вязкости

$$\frac{\eta}{\eta^{\text{loc.p.}}} \simeq \frac{7 \cdot 10^5}{T_8^2} \ . \tag{68}$$

В отличие от стандартного случая вязкость $\eta^{\text{loc.p.}}$ не зависит от температуры. Это может иметь важное значение для устойчивости быстро вращающихся нейтронных звёзд. В стандартном случае *npe* вещества вязкость увеличивается с понижением температуры как T^{-2}. Диссипативные эффекты, связанные с вязкостью дают вклад в подавление секулярных неустойчивостей, вызываемых реакцией на гравитационное излучение [31, 99] в быстро вращающихся нейтронных звёздах. Детальные расчёты показывают, что вязкость полностью подавляет секулярную неустойчивость, связанную с гравитационным излучением, если внутренняя температура опускается ниже 10^7 K [62]. Однако, в ядре нейтронной звезды с локализованными протонами сдвиговая вязкость остаётся постоянной и близкой к значению вязкости стандартного *npe* вещества при $T \simeq 10^{11}$ K [см. (68)]. Столь низкое значение сдвиговой вязкости не может предотвратить рост секулярной неустойчивости, связанной с реакцией на гравитационное излучение, при любой внутренней температуре нейтронной звезды [62].

4.7.4 Комментарий о кристаллическом упорядочивании локализованных протонов

В этом подразделе мы вернёмся к вопросу о кристаллическом упорядочивании локализованных протонов и обсудим значения транспортных коэффициентов в этом случае. Как обсуждалось в разделе 2, мы считаем эту возможность не очень вероятной (тем не менее, см. [53]). Для температур ниже 1 МэВ фазовое пространство, доступное рассеивающимся фононам (в протонном кристалле), мало (как T^3). Перенос энергии, заряда и импульса будет ограничиваться *ee*, *nn*, а в случае электропроводности, *en* столкновениями. Это означает, что все кинетические коэффициенты окажутся даже больше, чем в стандартном случае, и будут иметь стандартные температурные зависимости, характерные для фермиевской жидкости. Ситуация будет осложняться зонной структурой квазичастичных состояний. Однако, это приведёт к дальнейшему увеличению кинетических коэффициентов, урезая фазовый объём, доступный рассеивающимся квазичастицам.

4.8 Остывание нейтронных звёзд с локализованными протонами: эффект увеличения нейтринных потерь

В настоящем разделе, следуя работе Байко и Хэнселя [10], применим результаты раздела 6 к моделированию остывания нейтронных звёзд и проверим, согласуется ли гипотетическая протонная локализация с наблюдательными данными об эффективных температурах поверхностей нейтронных звёзд.

Для этого необходимо, во-первых, построить модель нейтронной звезды. В ядре (при плотностях $\rho > \rho_{\rm cr} = 2.5\times10^{14}$ г см$^{-3}$) мы возьмём уравнение состояния UV14+TNI [101], а в коре (ниже $\rho_{\rm cr}$) — уравнение состояния Негеля и Вотрена [70] выше плотности нейтронизации и уравнение состояния Бэйма и др. [14] ниже плотности нейтронизации. После этого модель звезды определяется единственным параметром — центральной плотностью $\rho_{\rm c}$ и строится интегрированием уравнения Толмана-Оппенгеймера-Волкова из центра звезды к поверхности.

Мы использовали ту же программу остывания, что и в главе 3, описанную, например, в работе Левенфиш и др. [60]. В данной задаче мы допускали возможность наличия внешней оболочки массы ΔM, образуемой лёгкими элементами (лёгкой оболочки). Такая оболочка, в принципе, может сформироваться на поверхности нейтронной звезды. Благодаря более высокой теплопроводности вещества оболочки, она приводит к уменьшению теплоизоляции внутренних областей звезды и модификации соотношения $T_s(T_b)$, определяющей зависимость локальной поверхностной температуры T_s от локальной температуры на границе изотермической области T_b. Аналитические зависимости $T_s(T_b,\Delta M)$ также были опубликованы Потехиным и др. [82].

Для расчёта остывания при наличии локализованных протонов программа остывания была модифицирована. Все изменения касались областей звезды при плотностях, больших критической плотности $\rho_{\rm lp}$, выше которой происходит локализация протонов. Прежде всего, локализованные протоны не вносят вклад в теплоёмкость. Далее, изменяется нейтринная светимость вещества. Выше $\rho_{\rm lp}$, при несверхтекучих нейтронах (мы ограничиваемся рассмотрением этого случая) основной вклад в нейтринное энерговыделение даёт тормозное излучение нейтринных пар при nn- и np-столкновениях. Скорость nn-процесса не меняется при локализации протонов и остаётся такой же, как и в стандартном случае [32]. Энерговыделение в np-процессе даётся формулой (59), раздел 6.

Типичные кривые остывания, полученные в этой модели, представлены на рис. 1. Влияние локализации протонов легко понять, сравнивая точечные кривые, изображающие остывание без локализации (главным образом, за счёт модифицированного урка-процес-

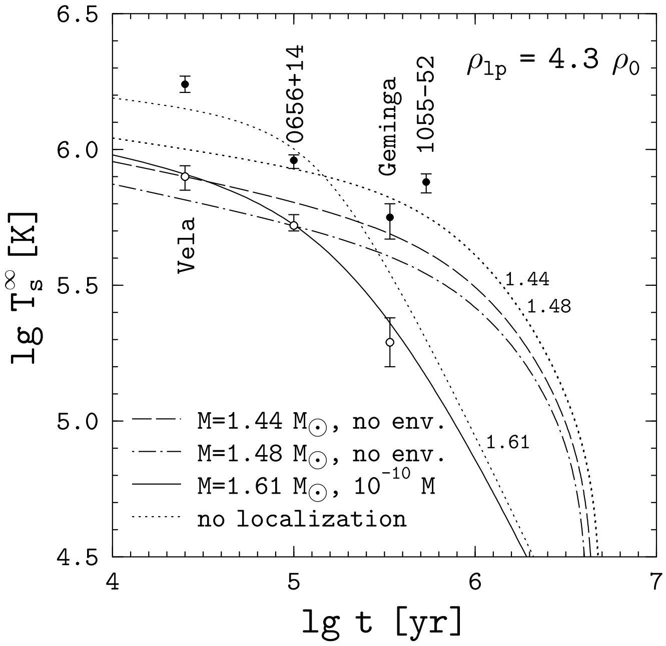

Рис. 1: Поверхностная температура с учётом гравитационного красного смещения в зависимости от возраста нейтронной звезды. Сплошные кружки получены путём интерпретации наблюдений моделью чёрного тела, а пустые кружки — моделью водородных атмосфер. Пороговые параметры локализации протонов: $x_{p0} = 5\%$ и $\rho_{\rm lp} = 4.3\rho_0$. Сплошная кривая соответствует модели звезды с оболочкой из лёгких элементов, а штриховая и штрих-пунктирная рассчитаны для звезды без лёгких элементов на поверхности. Точечные кривые построены для тех же моделей звёзд (те же массы, наличие или отсутствие лёгкой оболочки), но без протонной локализации.

са), с кривыми других типов, отвечающих более быстрому остыванию благодаря эффекту локализации. Скорость остывания без протонной локализации практически не зависит от массы: точечные кривые для звёзд с массами, равными 1.44 $M_\odot$ и 1.48 $M_\odot$, совпадают. Если же предположить наличие локализации протонов, то более массивная звезда будет остывать быстрее, поскольку при фиксированной пороговой плотности $\rho_{\rm lp}$ более мощное тормозное излучение нейтринных пар при столкновениях нейтронов с локализованными протонами будет возможно в большей области ядра нейтронной звезды, увеличивая полную нейтринную светимость.

Результаты моделирования можно использовать для интерпретации теплового излучения с поверхности остывающих нейтронных звёзд, возраст которых $t \gtrsim 10^4$ лет, что является типичным временем установления теплового равновесия в нейтронной звезде с локализованными протонами [раздел 7.1].

В настоящее время 4 источника, идентифицированных как изолированные нейтронные звезды, демонстрируют тепловое излучение в мягком рентгеновском диапазоне и имеют характеристический возраст t, превосходящий 10^4 лет. Это Вела, PSR 0656+14, Геминга и PSR 1055-52. Использованные данные объединены в таблице 1. Эффективные поверхностные температуры источников T_s^∞ определяются в результате подгонки наблюдаемых спектров двумя различными способами, либо чёрнотельным спектром ($T_{\rm bb}^\infty$ в табл. 1), либо спектрами моделей атмосфер нейтронных звёзд (T_H^∞ в табл. 1 для модели замагниченной

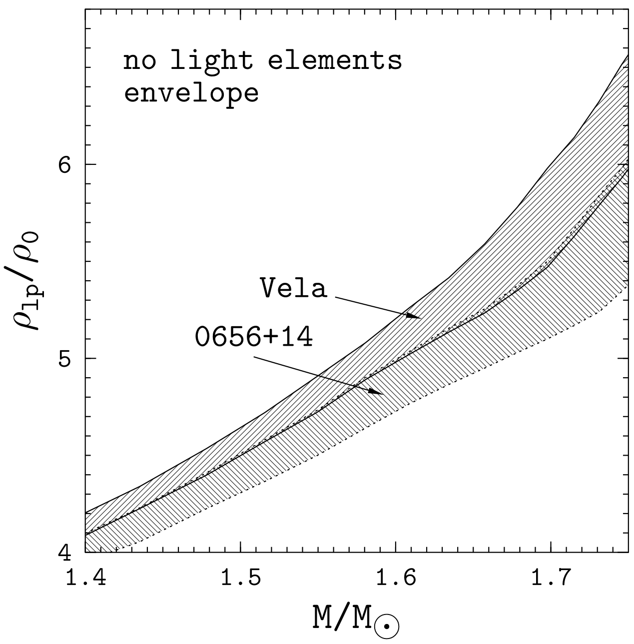

Рис. 2: Пороговая плотность протонной локализации в зависимости от массы нейтронной звезды для модели остывания без оболочки из лёгких элементов на поверхности. Точечная и сплошная линия ограничивают область параметров, отвечающих доверительным интервалам T_s^∞ для пульсаров PSR 0656+14 и Вела.

водородной атмосферы). Получаемые значения T_s^∞ оказываются совершенно различными. Излучение, выходящее из атмосферы, состоящей из лёгких элементов (водород и гелий), имеет более жёсткий спектр, чем чёрнотельное излучение с той же эффективной температурой T_s^∞, благодаря уменьшению непрозрачности при более высоких энергиях (Романи [90]). Соответственно, эффективная температура, получаемая в атмосферной модели, оказывается в 2–3 раза ниже, чем чёрнотельная температура. Атмосферная модель также требует более низкое отношение d/R (расстояния к радиусу). При фиксированном стандартном значении радиуса звезды ($\sim$ 10 км) требуется примерно в 10 раз меньшее расстояние до объекта.

С другой стороны, в моделях атмосфер, состоящих из железа, излучается более мягкий спектр, в среднем напоминающий спектр чёрного тела при той же температуре.

Магнитные поля, определяемые по скорости замедления вращения, для всех четырёх источников превосходят 10^{12} Гс. Такие поля оказывают существенное влияние на атмосферные непрозрачности и, следовательно, будут изменять спектр выходящего излучения (Шибанов и др. [92]). Вообще говоря, магнитные поля делают спектр мягче и несколько поднимают эффективную температуру по сравнению со случаем немагнитной атмосферы. Однако, до сих пор отсутствуют аккуратные модели магнитных атмосфер в практически важном диапазоне температур ($T_s < 10^6$ К), где следует учитывать влияние на непрозрачность эффектов движения атомов поперёк магнитного поля (например, Павлов и Завлин [77]). Эти эффекты не учитывались при получении значений, приведённых в табл. 1.

Поверхностные температуры T_s^∞ изображены на рис. 1. Сплошные и пустые кружки соответствуют чёрнотельной модели и упрощённой модели магнитной водородной атмо-

	Вела	PSR0656+14	Геминга	PSR1055−52
$t, 10^4$ лет	$2.5^{a)}$	11	34	54
$T_{\rm bb}^{\infty}, 10^5$ K	17.4±1.2	9.1±0.5	$5.6^{+0.7}_{-0.9}$	7.5±0.6
$T_{\rm bb}^{\infty}$, Ref	[OFZ93]	[PMC96]	[HW97]	[OF93]
$T_{H}^{\infty}, 10^5$ K	7−8.6	$5.3^{+0.4}_{-0.3}$	2−3	–
T_{H}^{∞}, Ref	[PSZ96]	[ACPRT93]	[MPM94]	–

Таблица 1: Наблюдательные данные по 4 изолированным нейтронным звёздам среднего возраста.
$^{a)}$ согласно Лайну и др. [64];
[OFZ93] Огельман и др. [73];
[PMC96] Поссенти и др. [81], 90% уровень значимости (у.з.);
[HW97] Халперн и Ванг [40], 90% у.з.;
[OF93] Огельман и Финли [72];
[PSZ96] Паж и др. [76], 90% у.з. для принятого нижнего ограничения на расстояние $d = 300$ пк;
[ACPRT93] Андерсон и др. [3];
[MPM94] Мейер и др. [65], использовано типичное значение поверхностного красного смещения $T_s^{\infty}/T_s = 0.8$.

сферы. Как можно заключить из табл. 1 и рис. 1, общая теоретическая неопределённость поверхностной температуры оказывается очень большой; например, $T_s^{\infty} \sim (2{-}6) \times 10^5$ К для Геминги. Это не позволяет сделать практически никаких конкретных выводов о сценарии остывания нейтронной звезды, за исключением того, что, видимо, не подтверждается "быстрое" остывание (посредством прямого урка-процесса, не подавленного сверхтекучестью в плотном веществе). Заметим, что поверхностные температуры, полученные в моделях водородных атмосфер, довольно низки и не могут быть объяснены в рамках "стандартного" сценария остывания (модифицированный урка-процесс в несверхтекучем веществе). Однако, эта модель может объяснить чёрнотельные температуры. Поэтому "атмосферные" температуры (если истинные температуры окажутся близкими к ним) служат более сложным тестом теории строения нейтронных звёзд. По этой причине, мы примем "атмосферную" интерпретацию наблюдательных данных и сконцентрируемся на нижнем наборе доверительных интервалов для Велы, PSR 0656+14 и Геминги в табл. 1. Атмосферная интерпретация спектра PSR 1055-52 на сегодняшний день отсутствует.

При фиксированном уравнении состояния остаётся 3 параметра, влияющих на скорость остывания. Это центральная плотность звезды $\rho_{\rm c}$ (определяющая массу звезды) и пороговые значения плотности $\rho_{\rm lp}$ и доли протонов x_{p0}. Кроме того, можно варьировать ΔM, массу оболочки из лёгких элементов вблизи поверхности звезды. Отметим, что наличие водородной атмосферы неэквивалентно наличию лёгкой оболочки, поскольку количество водорода, требуемое для изменения формы выходящего спектра (1-10 г см$^{-2}$ или $\sim 10^{-20}{-}10^{-19} M_{\odot}$) значительно меньше, чем требуется для изменения зависимости $T_s(T_b)$. Зафиксируем пороговую долю протонов $x_{p0} = 5\%$ и рассмотрим две модели: без оболочки, рис. 2, и с лёгкой оболочкой массы $\Delta M = 10^{-10} M$, рис. 3. На рис. 2 и 3 области, ограничен-

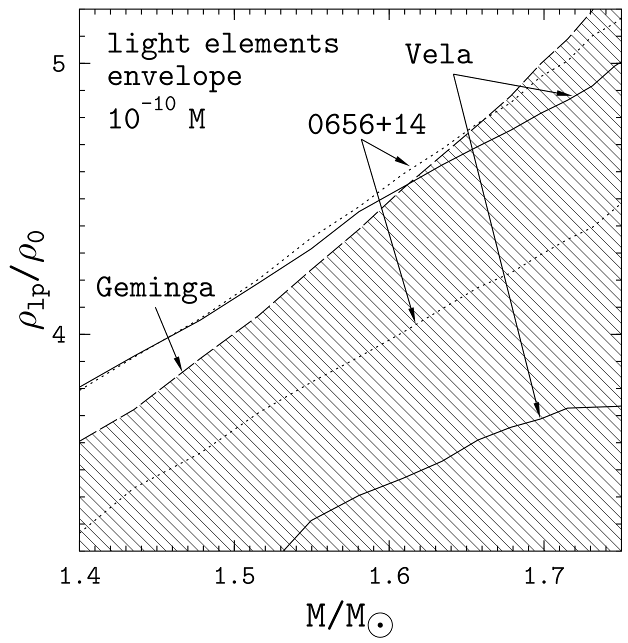

Рис. 3: То же, что на рис. 2, но для модели нейтронной звезды с оболочкой из лёгких элементов (массы $10^{-10}\,M$). Штриховая линия ограничивает (затенённую) область параметров, допустимых для Геминги.

ные линиями различных типов, соответствуют таким комбинациям $\rho_{\rm lp}$ и M, для которых кривые остывания проходят через доверительный интервал поверхностной температуры для данного источника. Подчеркнём, что данные по Геминге (область параметров для которой заштрихована на рис. 3) могут быть объяснены только в предположении о наличии лёгкой оболочки. В этом случае и для реалистической критической плотности $\rho_{\rm lp}$ (скорее всего, превышающей $4\rho_0$) масса Геминги должна превосходить 1.5 $M_\odot$. Два других источника могут быть объяснены как моделями с оболочкой, так и моделями без неё. Однако, при фиксированной плотности $\rho_{\rm lp}$ массы источников в модели с оболочкой должны быть выше. Наконец, отметим, что границы областей допустимых параметров на рис. 2 и 3 нечувствительны к массе оболочки при $\Delta M \gtrsim 10^{-10} M$.

На рис. 1 изображены кривые остывания при фиксированной пороговой плотности $\rho_{\rm lp} = 4.3\rho_0$. Сплошная кривая отвечает модели с лёгкой оболочкой и $M = 1.61 M_\odot$ ($\rho_{\rm c} = 5.4\rho_0$). Она проходит через "атмосферные" доверительные интервалы Велы, PSR 0656+14 и Геминги одновременно. Штриховая и штрих-пунктирная кривые соответствуют моделям без лёгкой оболочки. Массы должны быть меньше, например, 1.44 и $1.48 M_\odot$ для Велы и PSR 0656+14.

4.9 Заключение

В ядрах нейтронных звёзд при сверхвысоких плотностях $\rho \gtrsim 4\rho_0$ и при условии малой концентрации протонов возможна локализация последних неоднородностями плотности нейтронов. Рассмотрено влияние протонной локализации на кинетические свойства и нейтринную светимость вещества ядер нейтронных звёзд. Показано, что локализация протонов приводит к резкому уменьшению основных кинетических коэффициентов (тепло- и электропроводности, а также сдвиговой вязкости) вещества, а также к росту нейтринной светимости за счёт процессов тормозного излучения нейтринных пар при столкновениях нейтронов с локализованными протонами. Для электронных и нейтронных транспортных коэффициентов, а также для скоростей нейтринного энерговыделения в реакциях тормозного излучения нейтринных пар при *ep*- и *np*-столкновениях получены аналитические выражения, удобные для практического использования. Обсуждаются астрофизические следствия уменьшения транспортных коэффициентов и, в частности, отмечено увеличение на 2 порядка времени выравнивания температуры и снижение на 5 порядков времени жизни магнитного поля в ядре нейтронной звезды с локализованными протонами.

Для изучения эффекта увеличения нейтринных потерь проведено моделирование остывания нейтронных звёзд с реалистическим уравнением состояния, в предположении локализации протонов при плотностях выше некоторой пороговой плотности $\rho_{\rm lp}$. Результаты использованы для интерпретации наблюдательных данных об эффективных поверхностных температурах изолированных нейтронных звёзд среднего возраста ($t \geq 10^4$ лет). Показано, что эти данные могут быть воспроизведены при определённом выборе параметров модели на плоскости $\rho_{\rm lp} - M$ (где M — масса звезды). Зафиксировав пороговую плотность протонной локализации и подбирая массу нейтронной звезды, удалось объяснить поверхностные температуры Велы и PSR 0656+14 как в моделях звезды с водородной оболочкой, так и без неё. Однако, наличие водородной оболочки необходимо в этой модели для объяснения температуры Геминги.

Следует заметить, что локализация протонов не является обязательной для объяснения эффективных поверхностных температур нейтронных звёзд. Тем не менее, имеющаяся совокупность наблюдательных данных о нейтронных звёздах не противоречит гипотезе о протонной локализации в их ядрах. Как видно из рис. 1, локализация существенно изменяет скорость остывания, и, в случае её подтверждения, представляет собой важный эффект, который должен быть принят во внимание в будущих реалистических моделях остывания.

Заключение

Сформулируем основные результаты диссертации:

1. Численным интегрированием с высокой точностью определены фононные термодинамические функции и фактор Дебая-Уоллера для объёмно- и гранецентрированных кубических кулоновских кристаллов в широком диапазоне значений отношения температуры к плазменной температуре $10^{-4} < T/T_p < 20$. С несколько худшей точностью рассчитаны термодинамические функции гексагональных плотно упакованных кристаллов.

2. В модели гармонической решётки рассчитаны статическая парная корреляционная функция и статический структурный фактор кулоновского объёмноцентрированного кубического кристалла в зависимости от параметра неидеальности $\Gamma = Z^2e^2/aT$ и квантового параметра $\theta = T_p/T$. Показано, что парная корреляционная функция в гармоническом приближении прекрасно согласуется с расчётом методом Монте-Карло при $r > 1.5a$. Проанализированы сингулярности неупругого статического структурного фактора, возникающие в положениях брэгговских пиков. Рассчитан ангармонический вклад в кулоновскую энергию с использованием гармонической корреляционной функции, но с учётом точной формы кулоновского потенциала.

3. Вычислены тепло- и электропроводность вырожденных электронов, рассеивающихся на ионах в кулоновских кристаллах и жидкостях. Расчёты проведены с учётом многофононных процессов рассеяния в кристалле и с приближённым учётом подавления квазибрэгговского рассеяния в жидкости. Показано, что учёт этих эффектов приводит к исчезновению скачков кинетических коэффициентов в точке плавления.

4. С высокой точностью рассчитаны термодинамические функции кулоновского объёмноцентрированного кубического кристалла в сильном магнитном поле (при $10^{-3} < T_p/T < 10^4$ и $0 < \omega_B/\omega_p < 100$). Вычислены фактор Дебая-Уоллера и среднеквадратичная амплитуда отклонений иона из положения равновесия. Показано, что при $\omega_B/\omega_p \gtrsim 1$ и $T_p/T \gtrsim 1$ эта амплитуда становится сильно анизотропной: поперечное полю смещение ионов подавлено. Проанализированы условия плавления квантового замагниченного кулоновского кристалла. Показано, что магнитное поле стабилизирует квантовый кулоновский кристалл, увеличивая температуру плавления.

5. Рассчитано нейтринное энерговыделение в прямом урка-процессе в ядрах нейтронных звёзд с сильным магнитным полем. Основные результаты получены для полей, в которых электроны и протоны заселяют много уровней Ландау. Показано, что в таких полях процесс разрешён при более низких плотностях, чем в отсутствие магнитного поля.

6. Проведено моделирование остывания нейтронной звезды с сильным внутренним маг-

нитным полем. Показано, что с ростом массы звезды при наличии поля $\sim 10^{16}$ Гс переход от медленного остывания к быстрому происходит в диапазоне масс $\sim 0.05M_\odot$, на порядок более широком, чем в отсутствие поля. Результаты использованы для объяснения значений поверхностной температуры пульсара Геминга. Найдены значения масс и магнитных полей, при которых теоретическое остывание Геминги соответствует наблюдаемым поверхностным температурам. Показано, что сильное внутреннее магнитное поле облегчает интерпретацию, поскольку отпадает необходимость в точном подборе массы Геминги.
7. Рассчитаны тепло- и электропроводность, а также сдвиговая вязкость сверхплотных слоёв ядра нейтронной звезды в предположении о локализации протонов. Показано, что локализованные протоны являются очень эффективными рассеивателями электронов и нейтронов, что приводит к изменению температурной зависимости и резкому уменьшению коэффициентов переноса. Также рассчитана скорость нейтринного энерговыделения при столкновениях электронов и нейтронов с локализованными протонами. Энерговыделение np-реакции значительно превосходит энерговыделение в реакции модифицированного урка-процесса, который протекал бы в этом веществе в отсутствие протонной локализации. Уменьшение транспортных коэффициентов затягивает тепловую релаксацию в ядре нейтронной звезды; ускоряет омический распад магнитного поля в области протонной локализации; снижает стабильность звезды по отношению к неустойчивостям, связанным с реакцией на гравитационное излучение.
8. Промоделировано остывания нейтронных звёзд с учётом излучения нейтринных пар при столкновениях нейтронов с локализованными протонами. Данный процесс ускоряет остывание звёзд по сравнению со стандартным случаем. Показано, что зафиксировав параметр критической плотности и варьируя массу звезды, можно объяснить низкие поверхностные температуры Велы, PSR 0656+14 и Геминги. Сделан вывод о том, что имеющаяся совокупность наблюдательных данных о нейтронных звёздах не противоречит гипотезе о протонной локализации в их ядрах.

Я признателен Валентину Дмитриевичу Пальшину, Юрию Александровичу Уварову и Алексею Борисовичу Копцевичу за помощь при подготовке электронной версии работы.

С удовольствием благодарю Хью Де Витта, Александра Давидовича Каминкера, Ксению Петровну Левенфиш, Александра Юрьевича Потехина, Павла Хэнселя и Юрия Анатольевича Шибанова за многочисленные ценные обсуждения различных вопросов физики нейтронных звёзд в течение моей работы в секторе теоретической астрофизики.

Мне особенно приятно поблагодарить моего руководителя Дмитрия Георгиевича Яковлева, научившего меня столь многому в науке и всегда приходящему на помощь в житейских вопросах. Без его советов и участия эта работа никогда не смогла бы состояться.

Выражаю глубокую благодарность моим родителям Байко Евгении Яковлевне и Байко Алексею Валериановичу, без заботы и поддержки которых эта диссертация никогда не была бы написана.

Литература

[1] М. Абрамовиц, И. Стиган, *Справочник по специальным функциям*, Москва, Наука (1979).

[2] R.C. Albers, J.E. Gubernatis, препринт LASL LA-8674-MS (1981).

[3] S.B. Anderson, F.A. Córdova, G.G. Pavlov, C.R. Robinson, R.J. Thompson, Jr., Astrophys. J. **414**, 867 (1993).

[4] R.A. Arndt, L.D. Roper, R.A. Bryan, R.B. Clark, B.J. VerWest, P. Signell, Phys. Rev. **D28**, 97 (1983).

[5] Д.А. Байко, Д.Г. Яковлев, Письма в АЖ **21**, 702 (1995).

[6] Д.А. Байко, Д.Г. Яковлев, Письма в АЖ **22**, 708 (1996).

[7] D.A. Baiko, A.D. Kaminker, A.Y. Potekhin, D.G. Yakovlev, Phys. Rev. Lett. **81**, 5556 (1998).

[8] D.A. Baiko, P. Haensel, Acta Physica Polonica **B30**, 1097 (1999).

[9] D.A. Baiko, D.G. Yakovlev, H.E. De Witt, W.L. Slattery, Phys. Rev. **E**, (2000).

[10] D.A. Baiko, P. Haensel, Astron. Astrophys. **356**, 171 (2000).

[11] M. Baldo, I. Bombaci, G.F. Burgio, Astron. Astrophys. **328**, 274 (1997).

[12] D. Bandyopadhyay, S. Chakrabarty, P. Dey, S. Pal, *Rapid cooling of magnetized neutron stars*, astro-ph/9804145.

[13] G. Baym, C. Pethick, D. Pines, Nature **224**, 673, 674 (1969).

[14] G. Baym, C. Pethick, P. Sutherland, Astrophys. J. **170**, 299 (1971).

[15] G. Baym, C. Pethick, *Landau Fermi–Liquid Theory*, John Wiley, New York (1991).

[16] В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Москва, Наука (1989).

[17] D. Bhattacharya, G. Srinivasan, in *X–ray Binaries*, W.H.G. Lewin, J. Van Paradijs, E.P.J. Van den Heuvel (eds), Cambridge University Press, Cambridge (1995).

[18] M. Born and K. Huang, *Dynamical theory of crystal lattices*, Claredon Press, Oxford (1954).

[19] G.A. Brooker, J. Sykes, Phys. Rev. Lett. **21**, 279 (1968);
J. Sykes, G.A. Brooker, Ann. Phys. (N.Y.) **56**, 1 (1970).

[20] V. Canuto, H.Y. Chiu, Space Sci. Rev. **12**, 3 (1971).

[21] G. Chabrier, N.W. Ashcroft, H.E. DeWitt, Nature **360**, 48 (1992).

[22] G. Chabrier, Astrophys. J. **414**, 695 (1993).

[23] M.H. Cohen, F. Keffer, Phys. Rev. **99**, 1128 (1955).

[24] А.С. Давыдов, *Теория твёрдого тела*, Москва, Наука (1976).

[25] О.Ф. Дорофеев, В.Н. Родионов, И.М. Тернов, Письма в АЖ **11**, 302 (1985).

[26] D.H.E. Dubin, Phys. Rev. **A42**, 4972 (1990).

[27] D.H.E. Dubin, T.M. O'Neil, Rev. Mod. Phys. **71**, 87 (1999).

[28] R.T. Farouki, S. Hamaguchi, Phys. Rev. **E47**, 4330 (1993).

[29] E. Flowers, N. Itoh, Astrophys. J. **206**, 218 (1976).

[30] G. Fontaine, P. Brassard, *White dwarf seismology: Influence of the constitutive physics on the period spectra.* In: Chabrier G., Schatzman E. (eds.) The Equation of State in Astrophysics, Cambridge University Press, Cambridge, p. 347 (1994).

[31] J.L. Friedman, Phys. Rev. Lett. **51**, 11 (1983).

[32] B.L. Friman, O.V. Maxwell, Astrophys. J. **232**, 541 (1979).

[33] K. Fuchs, Proc. R. Soc. London **A151**, 585 (1935).

[34] N.K. Glendenning, *Compact Stars*, Springer, New York (1996).

[35] O.Y. Gnedin, D.G. Yakovlev, Nucl. Phys. **A582**, 697 (1995).

[36] E.H. Gudmundsson, C.J. Pethick, R.I. Epstein, Astrophys. J. **272**, 286 (1983).

[37] P. Haensel, V.A. Urpin, D.G. Yakovlev, Astron. Astrophys. **229**, 133 (1990).

[38] P. Haensel, S. Bonazzola, Astron. Astrophys. **314**, 1017 (1996).

[39] P. Haensel, A.D. Kaminker, D.G. Yakovlev, Astron. Astrophys. **314**, 328 (1996).

[40] J.P. Halpern, F.Y.-H. Wang, Astrophys. J. **477**, 905 (1997).

[41] W.M. Itano, J.J. Bollinger, J.N. Tan, B. Jelenković, X.-P. Huang, D.J. Wineland, Science **279**, 686 (1998).

[42] N. Itoh, S. Mitake, H. Iyetomi, S. Ichimaru, Astrophys. J. **273**, 774 (1983).

[43] N. Itoh, Y. Kohyama, N. Matsumoto, M. Seki, Astrophys. J. **285**, 758 (1984).

[44] N. Itoh, *Transport processes in dense stellar plasmas.* In: Chabrier G., Schatzman E. (eds.) The Equation of State in Astrophysics, Cambridge University Press, Cambridge, p. 394 (1994).

[45] B. Jancovici, Nuovo Cimento **25**, 428 (1962).

[46] H. Højgaard Jensen, H. Smith, J.W. Wilkins, Phys. Lett. **A27**, 532 (1968); Phys. Rev. **185**, 323 (1969).

[47] А.Д. Каминкер, Д.Г. Яковлев, Теор. и мат. физика **49**, 248 (1981).

[48] C. Kouveliotou et al., Nature **393**, 235 (1998).

[49] M. Kutschera, W. Wójcik, Phys. Lett. **B223**, 11 (1989).

[50] M. Kutschera, W. Wójcik, Acta Physica Polonica **B23**, 947 (1992).

[51] M. Kutschera, W. Wójcik, Phys. Rev. **C47**, 1077 (1993).

[52] M. Kutschera, Phys. Lett. **B340**, 1 (1994).

[53] M. Kutschera, W. Wójcik, Nucl. Phys. **A581**, 706 (1995).

[54] D. Lai, S.L. Shapiro, Astrophys. J. **383**, 745 (1991).

[55] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика, часть 1*, Москва, Наука (1995).

[56] J.M. Lattimer, C.J. Pethick, M. Prakash, P. Haensel, Phys. Rev. Lett. **66**, 2701 (1991)

[57] L.B. Leinson, A. Pérez, J. of High Energy Physics, **09**, 20 (1998); astro-ph/9711216.

[58] К.П. Левенфиш, Д.Г. Яковлев, АЖ **38**, 247 (1994).

[59] К.П. Левенфиш, Д.Г. Яковлев, Письма в АЖ **22**, 56 (1996).

[60] К.П. Левенфиш, Ю.А. Шибанов, Д.Г. Яковлев, Письма в АЖ **25**, 417 (1999).

[61] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Моска, Наука (198?).

[62] L. Lindblom, Astrophys. J. **438**, 265 (1995).

[63] C.P. Lorenz, D.G. Ravenhall, C.J. Pethick, Phys. Rev. Lett. **70**, 379 (1993).

[64] A.G. Lyne, R.S. Pritchard, F. Graham-Smith, F. Camilo, Nature **381**, 497 (1996).

[65] R.D. Meyer, G.G. Pavlov, P. Mészáros, Astrophys. J. **433**, 265 (1994).

[66] R. Mochkovitch, J.-P. Hansen, Phys. Lett. **A73**, 35 (1979).

[67] T. Nagai, H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jap. **51**, 3431 (1982).

[68] T. Nagai, H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jap. **52**, 44 (1983).

[69] H. Nagara, Y. Nagata, T. Nakamura, Phys. Rev. **A36**, 1859 (1987).

[70] J.W. Negele, D. Vautherin, Nucl. Phys. **A207**, 298 (1973).

[71] S. Ogata, Astrophys. J. **481**, 883 (1997).

[72] H. Ögelman, J.P. Finley, Astrophys. J. **413**, L31 (1993).

[73] H. Ögelman, J.P. Finley, H.U. Zimmerman, Nature **361**, 136 (1993).

[74] E. Østgaard, D.G. Yakovlev, Nucl. Phys. **A540**, 211 (1992).

[75] D. Page, J.H. Applegate, Astrophys. J. **394**, L17 (1992).

[76] D. Page, Yu.A. Shibanov, V.E. Zavlin V. E., in: Röntgenstrahlung from the Universe, eds. H.U. Zimmermann, J. Trümper, H. Yorke, MPE Report 263, p. 173 (1996).

[77] G.G. Pavlov, V.E. Zavlin, in: Neutron Stars and Pulsars, eds. N. Shibazaki, N. Kawai, S. Shibata, T. Kifune, p. 327 (1998).

[78] C.J. Pethick, Rev. Mod. Phys. **64**, 1133 (1992).

[79] Д. Пайнс, *Элементарные возбуждения в твёрдых телах*, Москва, Мир (1965).

[80] E.L. Pollock, J.P. Hansen, Phys. Rev. **A8**, 3110 (1973).

[81] A. Possenti, S. Mereghetti, M. Colpi, Astron. Astrophys. **313**, 565 (1996).

[82] A.Y. Potekhin, G. Chabrier, D.G. Yakovlev, Astron. Astrophys. **323**, 415 (1997).

[83] A.Y. Potekhin, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **31**, 49 (1998).

[84] A.Y. Potekhin, D.A. Baiko, P. Haensel, D.G. Yakovlev, Astron. Astrophys. **346**, 344 (1999).

[85] M. Prakash, T.L. Ainsworth, J.M. Lattimer, Phys. Rev. Lett. **61**, 2518 (1988).

[86] M. Prakash, M. Prakash, J.M. Lattimer, C.J. Pethick, Astrophys. J. **390**, L77 (1992).

[87] M.A. Preston, R.K. Bhaduri, *Structure of the Nucleus*, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts (1975).

[88] M.E. Raikh, D.G. Yakovlev, Astrophys. Sp. Science **87**, 193 (1982).

[89] С.Я. Рахманов, ЖЭТФ **75**, 160 (1978).

[90] R.W. Romani, Astrophys. J. **313**, 718 (1987).

[91] С. Шапиро, С. Тьюколски, *Чёрные дыры, белые карлики, нейтронные звёзды*, Москва, Мир (1985).

[92] Yu.A. Shibanov, V.E. Zavlin, G.G. Pavlov, J. Ventura, Astron. Astrophys. **266**, 313 (1992).

[93] W.L. Slattery, G.D. Doolen, H.E. DeWitt, Phys. Rev. **A21**, 2087 (1980).

[94] G.S. Stringfellow, H.E. DeWitt, W.L. Slattery, Phys. Rev. **A41**, 1105 (1990).

[95] T. Takatsuka, R. Tamagaki, Prog. Theor. Phys. **97**, 345 (1997).

[96] Y. Toyozawa, Prog. Theor. Phys. **26**, 29 (1961).

[97] V. Urpin, D. Konenkov, MNRAS **292**, 167 (1997).

[98] Н.А. Усов, Ю.Б. Гребенщиков, Ф.Р. Улинич, ЖЭТФ **78**, 296 (1980).

[99] R.V. Wagoner, Astrophys. J. **278**, 345 (1984).

[100] E.P. Wigner, Phys. Rev. **46**, 1002 (1934).

[101] R.B. Wiringa, V. Fiks, A. Fabrocini, Phys. Rev. **C38**, 1010 (1988).

[102] G. Wunner, H. Ruder, H. Herold, Astrophys. J. **247**, 374 (1981).

[103] Д.Г. Яковлев, В.А. Урпин, Письма в АЖ **24**, 303 (1980).

[104] Д.Г. Яковлев, Письма в АЖ **31**, 347 (1987).

[105] D.G. Yakovlev, D.A. Shalybkov, Sov. Sci. Rev. **E7**, 311 (1989).

[106] D.G. Yakovlev, A.D. Kaminker, K.P. Levenfish, Astron. Astrophys. **343**, 650 (1999).

[107] J.M. Ziman, *Electrons and Phonons*, Oxford University Press, Oxford (1960).