Письма в ЭЧАЯ. 2021. Т. 18, № 6(238). С. 513–532

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА. ТЕОРИЯ

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ ФРАГМЕНТАЦИИ ОДНОФОНОННЫХ СОСТОЯНИЙ В НАГРЕТЫХ ЯДРАХ

А. А. Джиоев[1], *А. И. Вдовин*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Изучается фрагментация однофононных состояний в нагретых ядрах. Для этой цели использовано температурное обобщение квазичастично-фононной модели ядра в рамках формализма термополевой динамики (ТПД). Показано, что последовательное применение условия теплового состояния ТПД обеспечивает выполнение принципа детального баланса на каждом этапе диагонализации теплового гамильтониана. Получены уравнения, описывающие связь тепловых однофононных состояний с двухфононными.

The fragmentation of one-phonon states in hot nuclei is studied. For this purpose, the quasiparticle-phonon nuclear model is extended to a finite temperature by applying the formalism of thermal-field dynamics. It is shown that consistent application of the thermal state condition leads to the fulfillment of the detailed balance principle at each stage of the thermal Hamiltonian diagonalization. The equations describing the coupling between thermal one-phonon and two-phonon states are derived.

PACS: 24.10.Pa; 21.60.-n; 26.50.+x

ВВЕДЕНИЕ

Коллективные возбуждения нагретых ядер активно изучаются с начала 1980-х гг. Долгое время как экспериментальные, так и теоретические исследования были сосредоточены на выяснении причин изменений наблюдаемых свойств гигантского изовекторного дипольного резонанса в сильновозбужденных ядрах (см. обзоры [1, 2] и ссылки в них). Однако нагретые ядра играют важную роль и в различных астрофизических процессах. В частности, в коллапсирующих сверхновых, где температура вещества достигает порядка 10^{10} K (0,86 МэВ), реакции, обусловленные слабым взаимодействием (захват электронов, бета-распад, рассеяние нейтрино) с участием нагретых ядер, оказывают значительное влияние как на динамику коллапса, так и на протекающий во время коллапса нуклеосинтез [3–5].

Теоретический прогресс в изучении свойств нагретых ядер, как правило, связан с температурным обобщением методов, широко использующихся при изучении холод-

[1] E-mail: dzhioev@theor.jinr.ru

ных ядер. Такое обобщение с использованием температурных функций Грина имело место в рамках теории ядерных полей [6] и теории конечных ферми-систем [7, 8]. В работах [9, 10] была предпринята попытка обобщить на ненулевые температуры квазичастично-фононную модель ядра [11] на базе формализма термополевой динамики (ТПД) [12,13]. Впоследствии этот подход был частично ревизован и переосмыслен в [14,15]. Еще один подход в изучении нагретых ядер, использующий формализм функций Грина и так называемое приближение временной блокировки, в последнее время интенсивно развивается в работах [16, 17]. Фундаментальная проблема, которую стремятся решить эти исследования, — выяснить механизм затухания коллективных возбуждений (резонансов) ядра при ненулевой температуре, в частности, научиться рассчитывать для $T \neq 0$ взаимодействие простых и сложных конфигураций, которое отвечает за фрагментацию силы резонансов в «холодных» ядрах.

Стоит отметить, что фрагментация силы ядерных возбуждений играет важную роль в астрофизических приложениях. Как показывают расчеты в рамках модели оболочек, при определенных условиях скорости и сечения слабых процессов с участием ядер в плотном и горячем звездном веществе существенно зависят от деталей распределения силовой функции возбуждений различной мультипольности [18, 19]. Однако, хотя современные оболочечные расчеты с очень хорошей точностью воспроизводят экспериментальные силовые функции для основного состояния ядер с массовыми числами $A \simeq 50-70$, для сильновозбужденных ядер они пока неосуществимы. Поэтому в расчетах скоростей и сечений слабых процессов с нагретыми ядрами приходится использовать различные приближения, такие как гипотеза Акселя–Бринка и метод обратных резонансов, призванный учесть переходы, связанные с девозбуждением нагретого ядра.

В недавних работах [20–23,27] для расчета сечений и скоростей слабых процессов с нагретыми ядрами был разработан подход, основанный на температурном обобщении квазичастичного приближения случайной фазы (ТКПСФ) при помощи формализма термополевой динамики [12, 13]. Важное достоинство данного подхода состоит в том, что, в отличие от формально схожих методов, используемых в работах [24–26], он позволяет рассчитывать силовые функции термодинамически последовательным образом, не нарушая принципа детального баланса (ПДБ), связывающего вероятности возбуждения и девозбуждения нагретого ядра. Сравнение результатов ТКПСФ-расчетов с результатами модели оболочек и работ [24–26] показало, что выполнение ПДБ усиливает влияние тепловых эффектов на силовую функцию мультипольных переходов. В результате рассчитанные нами в [20–23, 27] скорости и сечения слабых реакций демонстрируют более сильную температурную зависимость.

Цель настоящей работы состоит в использовании формализма ТПД для выхода за рамки ТКПСФ и учете фрагментации однофононных состояний в расчетах силовых функций для нагретого ядра. В качестве модели ядра мы используем квазичастично-фононную модель (КФМ) [11]. В «холодных» ядрах КФМ учитывает связь простых и сложных конфигураций путем введения в волновую функцию возбужденных состояний двухфононных компонент. Аналогичный способ, но для нагретых ядер, используется и в настоящей работе. Следует отметить, что в предыдущих попытках обобщения КФМ на ненулевые температуры [9, 14, 15] не было уделено достаточного внимания принципу детального баланса, и он был полностью или частично нарушен.

1. ВЫЧИСЛЕНИЕ СИЛОВЫХ ФУНКЦИЙ В ФОРМАЛИЗМЕ ТЕРМОПОЛЕВОЙ ДИНАМИКИ

Рассмотрим силовую функцию произвольного оператора $\mathcal{T}$, который описывает влияние внешнего возмущения на атомное ядро. Для нагретого ядра силовая функция содержит усреднение по всем возможным термически возбужденным начальным состояниям

$$S_{\mathcal{T}}(E,T) = \sum_{if} p_i(T)\, B_{if}(\mathcal{T})\, \delta(E - E_{if}); \tag{1}$$

здесь $p_i(T) = \mathrm{e}^{-E_i/T}/Z(T)$ — вероятность возбуждения i-го состояния с энергией E_i, $B_{if}(\mathcal{T}) = |\langle f|\mathcal{T}|i\rangle|^2$ — сила (вероятность) перехода $i \to f$, а $E_{if} = E_f - E_i$ — энергия перехода. При $T \neq 0$ силовая функция определена как при $E > 0$, так и при $E < 0$. В первом случае происходит передача энергии нагретому ядру, а во втором — его девозбуждение. Так как $B_{if}(\mathcal{T}) = B_{fi}(\mathcal{T}^\dagger)$, то силовая функция удовлетворяет принципу детального баланса

$$S_{\mathcal{T}^\dagger}(-E,T) = \mathrm{e}^{-E/T} S_{\mathcal{T}}(E,T). \tag{2}$$

Используя свойство полноты собственных состояний ядерного гамильтониана H, силовую функцию (1) можно записать в виде фурье-образа временной корреляционной функции оператора $\mathcal{T}$

$$S_{\mathcal{T}}(E,T) = \int \frac{dt}{2\pi}\, \mathrm{e}^{iEt} \langle\!\langle \mathcal{T}^\dagger(t)\mathcal{T}(0)\rangle\!\rangle, \tag{3}$$

где $\langle\!\langle \ldots \rangle\!\rangle$ означает статистическое среднее, а $\mathcal{T}(t) = \mathrm{e}^{iHt}\,\mathcal{T}\,\mathrm{e}^{-iHt}$ — гейзенберговское представление оператора $\mathcal{T}$.

В основе термополевой динамики лежит постулат, что статистическое среднее произвольного оператора A можно представить в виде матричного элемента относительно зависящего от температуры состояния $|0(T)\rangle$, которое называется тепловым вакуумом [12, 13],

$$\langle\!\langle A \rangle\!\rangle = \langle 0(T)|A|0(T)\rangle. \tag{4}$$

Тепловой вакуум является вектором в гильбертовом пространстве вдвое большей размерности, чем гильбертово пространство рассматриваемой физической системы. Расширение пространства происходит за счет введения фиктивной системы, идентичной рассматриваемой[1]. Пусть $H = H(a^\dagger, a)$ — гамильтониан рассматриваемой системы. Тогда гамильтониан фиктивной системы имеет вид $\widetilde{H} = H(\widetilde{a}^\dagger, \widetilde{a})$, где операторы, связанные с фиктивной системой, обозначены значком «тильда». Связь между операторами в двух пространствах задается правилами тильда-операции

$$(AB)^\sim = \widetilde{A}\widetilde{B}, \quad (aA + bB)^\sim = a^*\widetilde{A} + b^*\widetilde{B}, \quad (\widetilde{A})^\sim = A. \tag{5}$$

[1]Математически строго расширение гильбертова пространства при описании нагретых и неравновесных квантовых систем можно обосновать в рамках формализма супероператоров [29–31].

Отметим, что последнее правило двойной тильда-операции отличается от того, что было изначально предложено в работах [12, 13]. Необходимость такого отличия и его последствия обсуждаются в работах [15, 32].

Для того чтобы вектор $|0(T)\rangle$ обладал свойством (4), он должен удовлетворять так называемому условию теплового состояния (thermal state condition)

$$A\,|0(T)\rangle = \sigma_A\,\mathrm{e}^{\mathcal{H}/2T}\widetilde{A}^{\dagger}\,|0(T)\rangle. \tag{6}$$

Здесь $\sigma_A = 1(-i)$ для бозоноподобного (фермионоподобного) оператора A, а оператор $\mathcal{H} = H - \widetilde{H}$ называется тепловым гамильтонианом. Тепловой гамильтониан является оператором временной эволюции в расширенном гильбертовом пространстве, т. е. $A(t) = \mathrm{e}^{i\mathcal{H}t}A\,\mathrm{e}^{-i\mathcal{H}t}$, а его собственные состояния образуют полный набор в этом пространстве. При этом каждому собственному состоянию с положительной энергией

$$\mathcal{H}\,|\mathcal{O}_k\rangle = \mathcal{E}_k\,|\mathcal{O}_k\rangle \tag{7}$$

соответствует тильда-сопряженное собственное состояние с отрицательной энергией

$$\mathcal{H}\,|\widetilde{\mathcal{O}}_k\rangle = -\mathcal{E}_k\,|\widetilde{\mathcal{O}}_k\rangle. \tag{8}$$

Тепловой вакуум является собственным состоянием теплового гамильтониана с нулевой энергией, т. е. $\mathcal{H}\,|0(T)\rangle = 0$. Подействовав обеими частями равенства (6) на собственные состояния теплового гамильтониана, условие теплового состояния можно записать в виде

$$\langle\mathcal{O}_k|A|0(T)\rangle = \sigma_A\,\mathrm{e}^{\mathcal{E}_k/2T}\langle 0(T)|A|\widetilde{\mathcal{O}}_k\rangle, \tag{9}$$

где учтено, что $\langle 0(T)|\widetilde{A}|\mathcal{O}_k\rangle^* = \langle 0(T)|A|\widetilde{\mathcal{O}}_k\rangle$.

Свойство полноты собственных состояний теплового гамильтониана позволяет записать силовую функцию (3) в виде следующего разложения:

$$S_{\mathcal{T}}(E,T) = \sum_k \Big\{B_k(\mathcal{T})\delta(E-\mathcal{E}_k) + \widetilde{B}_k(\mathcal{T})\delta(E+\mathcal{E}_k)\Big\}, \tag{10}$$

где B_k и $\widetilde{B}_k$ — вероятности переходов с теплового вакуума на собственные состояния $\mathcal{H}$,

$$\begin{aligned} B_k(\mathcal{T}) &= |\langle\mathcal{O}_k|\mathcal{T}|0(T)\rangle|^2,\\ \widetilde{B}_k(\mathcal{T}) &= |\langle\widetilde{\mathcal{O}}_k|\mathcal{T}|0(T)\rangle|^2. \end{aligned} \tag{11}$$

Переходы с теплового вакуума на состояния $|\mathcal{O}_k\rangle$ гамильтониана соответствуют передаче энергии нагретому ядру, а переходы на тильда-состояния $|\widetilde{\mathcal{O}}_k\rangle$ — его девозбуждению. Условие теплового состояния (9) приводит к следующему соотношению между вероятностями переходов на тильда-сопряженные состояния:

$$\widetilde{B}_k(\mathcal{T}) = \mathrm{e}^{-\mathcal{E}_k/T}B_k(\mathcal{T}^{\dagger}), \tag{12}$$

откуда непосредственно следует выполнение принципа детального баланса (2). Таким образом, в рамках ТПД выполнение принципа детального баланса является следствием условия теплового состояния (6).

Формально выражение (10) имеет вид силовой функции при нулевой температуре, так как содержит однократное суммирование по собственным состояниям (теплового) гамильтониана, а роль основного состояния играет тепловой вакуум. Отличие состоит в том, что спектр теплового гамильтониана состоит как из положительных, так и отрицательных собственных значений, и в принципе зависит от температуры. От температуры зависят и вероятности переходов из теплового вакуума на собственные состояния теплового гамильтониана. Таким образом, в рамках термополевой динамики задача расчета силовой функции сводится к нахождению собственных состояний теплового гамильтониана. Достоинством ТПД является то, что для нахождения собственных состояний (диагонализации) теплового гамильтониана мы можем применять методы, используемые при нулевой температуре: приближение независимых квазичастиц, приближение случайных фаз (ПСФ) и т. д. В то же время, как будет показано ниже, требование выполнения условия теплового состояния вносит в диагонализацию теплового гамильтониана свою специфику.

Как и при $T = 0$, для нахождения собственных состояний теплового гамильтониана удобно воспользоваться методом уравнений движения [33, 34]

$$\langle 0(T)|[\delta O, \mathcal{H}, \mathcal{O}_k^\dagger]|0(T)\rangle = \mathcal{E}_k \langle 0(T)|[\delta \mathcal{O}, \mathcal{O}_k^\dagger]|0(T)\rangle. \tag{13}$$

Здесь $\mathcal{O}_k^\dagger$ — оператор рождения собственного состояния $|\mathcal{O}_k\rangle$, т. е. $|\mathcal{O}_k\rangle = \mathcal{O}_k^\dagger\,|0(T)\rangle$. Тильда-сопряженный оператор $\widetilde{\mathcal{O}}_k^\dagger$, такой что $|\widetilde{\mathcal{O}}_k\rangle = \widetilde{\mathcal{O}}_k^\dagger\,|0(T)\rangle$, является решением (13) с энергией $-\mathcal{E}_k$. Определим тепловой вакуум как вакуум операторов $\mathcal{O}_k$, $\widetilde{\mathcal{O}}_k$:

$$\mathcal{O}_k\,|0(T)\rangle = \widetilde{\mathcal{O}}_k\,|0(T)\rangle = 0. \tag{14}$$

В отличие от ситуации при $T = 0$, при $T \neq 0$ решение уравнения движения не приводит к однозначному определению собственных состояний теплового гамильтониана. Действительно, если $\mathcal{O}_k^\dagger$ есть решение уравнения (13), то, применяя к обеим частям уравнения операцию эрмитова и тильда-сопряжений, можно показать, что оператор $\widetilde{\mathcal{O}}_k$ также является его решением с той же самой энергией $\mathcal{E}_k$. Следовательно, произвольная линейная комбинация этих операторов также удовлетворяет уравнению движения. Для определения «истинных» решений из множества решений уравнения движения необходимо выделить те, что удовлетворяют условию теплового состояния (9).

Формально уравнение движения (13) совместно с условием теплового состояния в форме (9) позволяет находить точные собственные состояния теплового гамильтониана. Однако в практических вычислениях мы ищем решение уравнения в виде разложения по ограниченному набору некоторых базисных операторов δO. Кроме того, точное решение (13) требует знания вакуумного состояния $|0(T)\rangle$. Этому условию в принципе можно удовлетворить, решая уравнение движения при помощи итераций. Но поскольку наличие двойного симметричного коммутатора в левой части (13) понижает чувствительность решения уравнения движения к выбору $|0(T)\rangle$, вместо точного теплового вакуума можно использовать его приближение. Напомним, что именно такая ситуация реализуется при выводе уравнений ПСФ для $T = 0$, когда в качестве основного состояния в уравнении движения вместо фононного вакуума используется хартри-фоковский вакуум [34].

Приближенный характер решения уравнения движения приводит к тому, что условию теплового состояния (9) можно удовлетворить лишь для некоторого класса операторов A. Обратим внимание на то, что если (9) выполняется для некоторого множества операторов A_n, то оно справедливо и для их линейной комбинации. Поэтому для того чтобы силовая функция одночастичного оператора перехода $\mathcal{T}$ удовлетворяла принципу детального баланса (2), в качестве множества A_n будем использовать одно- и двухфермионные операторы $a^\dagger$, a, $a_1^\dagger a_2^\dagger$, $a_1^\dagger a_2$, $a_1 a_2$.

2. ТЕПЛОВЫЕ КВАЗИЧАСТИЦЫ И ФОНОНЫ

В используемой нами здесь версии КФМ гамильтониан ядра состоит из потенциала среднего поля для протонов и нейтронов, спаривательного взаимодействия в форме БКШ и сепарабельного мультипольного взаимодействия в канале частица–дырка

$$H = H_{\rm sp} + H_{\rm pair} + H_{\rm ph}. \tag{15}$$

Для сферических ядер слагаемые гамильтониана H можно записать в следующем виде:

$$H_{\rm sp} = \sum_\tau \sum_{jm}{}^{\tau} (E_j - \lambda_\tau) a^\dagger_{jm} a_{jm}, \tag{16}$$

,

$$H_{\rm pair} = -\frac{1}{4} \sum_\tau G_\tau \sum_{\substack{j_1 m_1 \\ j_2 m_2}}{}^{\tau} a^\dagger_{j_1 m_1} a^\dagger_{\overline{j_1 m_1}} a_{\overline{j_2 m_2}} a_{j_2 m_2} \quad (a_{\overline{jm}} = (-1)^{j-m} a_{j-m}), \tag{17}$$

$$H_{\rm ph} = -\frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu} \sum_{\tau\rho=\pm 1} (\kappa_0^{(\lambda)} + \rho \kappa_1^{(\lambda)}) M^\dagger_{\lambda\mu}(\tau) M_{\lambda\mu}(\rho\tau), \tag{18}$$

где $M^\dagger_{\lambda\mu}(\tau)$ — мультипольный одночастичный оператор

$$M^\dagger_{\lambda\mu}(\tau) = \sum_{\substack{j_1 m_1 \\ j_2 m_2}}{}^{\tau} \langle j_1 m_1 | i^\lambda R_\lambda(r) Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) | j_2 m_2 \rangle a^\dagger_{j_1 m_1} a_{j_2 m_2}. \tag{19}$$

В (16)–(19) использованы следующие стандартные обозначения: символ $\sum^\tau$ означает суммирование по протонным (нейтронным) $\tau = p$ ($\tau = n$) одночастичным уровням среднего поля с квантовыми числами $nljm \equiv jm$ и энергией E_j; изменение знака τ соответствует замене $n \leftrightarrow p$; $\lambda_{n,p}$ — химические потенциалы; $G_{n,p}$ — константы спаривательного взаимодействия; $\kappa_{0,1}^{(\lambda)}$ — константы изоскалярного и изовекторного взаимодействий мультипольности λ; функции $R_\lambda(r)$ определяют радиальную зависимость остаточных сил. Предполагается, что параметры гамильтониана не зависят от температуры, что является обоснованным при температурах $T \lesssim 5$ МэВ [35, 36].

Так как гамильтониан (15) содержит только мультипольные остаточные силы, то его собственные состояния мультипольности J соответствуют возбужденным состояниям ядра нормальной четности, т. е. $\pi = (-1)^J$. Запишем одночастичный оператор перехода на эти состояния в терминах нуклонных операторов рождения и уничтожения

$$\mathcal{T}_{JM} = \sum_{\tau} \sum_{\substack{j_1 m_1 \\ j_2 m_2}}^{\tau} \langle j_1 m_1 | \mathcal{T}_{JM} | j_2 m_2 \rangle a^{\dagger}_{j_1 m_1} a_{j_2 m_2} = -\hat{J}^{-1} \sum_{\tau} \sum_{j_1 j_2}^{\tau} t^{(J)}_{j_1 j_2} [a^{\dagger}_{j_1} a_{\overline{j_2}}]_{JM}. \quad (20)$$

Здесь $t^{(J)}_{j_1 j_2}$ — приведенный матричный элемент оператора перехода, $\hat{J} = \sqrt{2J+1}$, а $[\ldots]_{JM}$ означает связку двух угловых моментов с суммарным угловым моментом J с проекцией M. Далее мы будем предполагать, что при эрмитовом сопряжении $\mathcal{T}_{JM}$ преобразуется как мультипольный оператор, т.е. $\mathcal{T}^{\dagger}_{JM} = (-1)^{J-M} \mathcal{T}_{J-M}$, так что $t^{(J)}_{j_2 j_1} = (-1)^{j_1 - j_2 + J} t^{(J)}_{j_1 j_2}$. Тогда, согласно принципу детального баланса (2), силовая функция оператора (20) удовлетворяет условию

$$S_{\mathcal{T}_J}(-E, T) = \mathrm{e}^{-E/T} S_{\mathcal{T}_J}(E, T), \quad (21)$$

которое связывает вероятности возбуждения и девозбуждения нагретого ядра.

Тепловой гамильтониан, соответствующий приведенному выше гамильтониану КФМ, имеет вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\mathrm{sp}} + \mathcal{H}_{\mathrm{pair}} + \mathcal{H}_{\mathrm{ph}}. \quad (22)$$

Как и в случае нулевой температуры, нахождение собственных состояний теплового гамильтониана (22) начинается с учета парных корреляций. Для этой цели вводятся операторы рождения $\beta^{\dagger}$, $\widetilde{\beta}^{\dagger}$ и уничтожения β, $\widetilde{\beta}$ тепловых квазичастиц, которые приводят к диагональному виду одночастичную часть теплового гамильтониана:

$$\mathcal{H}_{\mathrm{BCS}} = \mathcal{H}_{\mathrm{sp}} + \mathcal{H}_{\mathrm{pair}} \approx \sum_{\tau} \sum_{jm}^{\tau} \varepsilon_j(T) (\beta^{\dagger}_{jm} \beta_{jm} - \widetilde{\beta}^{\dagger}_{jm} \widetilde{\beta}_{jm}). \quad (23)$$

Знак приближенного равенства в (23) означает, что в выражении для $\mathcal{H}_{\mathrm{BCS}}$ не указаны слагаемые, описывающие монопольное взаимодействие между тепловыми квазичастицами. Вакуум тепловых квазичастиц $|\varphi_0(T)\rangle$ при дополнительном условии (9) является тепловым вакуумом в БКШ-приближении, а величины $\pm\varepsilon_j(T)$ — это энергии тепловых квазичастиц.

Операторы рождения и уничтожения тепловых квазичастиц связаны с операторами $a^{\dagger}$, a, $\widetilde{a}^{\dagger}$ и $\widetilde{a}$, входящими в определение исходного теплового гамильтониана, посредством двух унитарных преобразований. Первое преобразование — это стандартное (u,v)-преобразование Боголюбова от операторов частиц к операторам квазичастиц $(u_j^2 + v_j^2 = 1)$

$$a^{\dagger}_{jm} = u_j \alpha^{\dagger}_{jm} + v_j \alpha_{\overline{jm}}, \quad a_{jm} = u_j \alpha_{jm} + v_j \alpha^{\dagger}_{\overline{jm}}. \quad (24)$$

Аналогичное преобразование совершается с операторами рождения и уничтожения тильда-частиц, т.е. в рассмотрение вводятся операторы тильда-квазичастиц $\widetilde{\alpha}^{\dagger}_{jm}$ и $\widetilde{\alpha}_{jm}$. Второе, так называемое тепловое (x,y)-преобразование смешивает тепловые операторы квазичастиц $\beta^{\dagger}$, β и тильда-квазичастиц $\widetilde{\beta}^{\dagger}$ $\widetilde{\beta}$ $(x_j^2 + y_j^2 = 1)$

$$\alpha^{\dagger}_{jm} = x_j \beta^{\dagger}_{jm} + i y_j \widetilde{\beta}_{jm}, \quad \widetilde{\alpha}^{\dagger}_{jm} = x_j \widetilde{\beta}^{\dagger}_{jm} - i y_j \beta_{jm}. \quad (25)$$

Так как оба преобразования унитарны, то операторы рождения и уничтожения тепловых квазичастиц подчиняются стандартным антикоммутационным соотношениям. Отметим, что использование двойной операции тильда в форме (5) приводит к комплексному тепловому преобразованию [15].

Решение уравнения движения

$$\langle\varphi_0(T)|\{\delta O, \mathcal{H}_{\mathrm{BCS}}, \beta^{\dagger}_{jm}\}|\varphi_0(T)\rangle = \varepsilon_{jm}(T)\langle\varphi_0(T)|\{\delta O, \beta^{\dagger}_{jm}\}|\varphi_0(T)\rangle, \tag{26}$$

где $\delta O = a^{\dagger}_{jm},\ a^{\dagger}_{jm},\ \widetilde{a}^{\dagger}_{jm},\ \widetilde{a}_{jm}$, при дополнительном условии (9) ($A = \alpha^{\dagger}_{j},\ \alpha_j$) приводит к хорошо известным уравнениям температурного БКШ (ТБКШ), описывающим парные корреляции в нагретых ядрах [37, 38]. В рамках термополевой динамики эти уравнения получили в [10, 39], используя метод, сходный с изложенным выше, т. е. диагонализуя одночастичную часть $\mathcal{H}_{\mathrm{BCS}}$. Однако коэффициенты теплового (x, y)-преобразования авторы работ [10, 39] находили путем минимизации термодинамического потенциала. Впервые метод диагонализации $\mathcal{H}_{\mathrm{BCS}}$ с использованием условия теплового состояния был предложен в работе [14].

Решение уравнений ТБКШ определяет энергии тепловых квазичастиц и коэффициенты преобразований (24) и (25) как функции температуры. В частности, коэффициенты теплового преобразования связаны с числами заполнения Ферми–Дирака боголюбовских квазичастиц

$$y_j^2 = \left[1 + \mathrm{e}^{\varepsilon_j/T}\right]^{-1} = \langle\varphi_0(T)|\alpha^{\dagger}_{jm}\alpha_{jm}|\varphi_0(T)\rangle. \tag{27}$$

Благодаря наличию в тепловом вакууме термически возбужденных квазичастиц возможен как процесс рождения, так и процесс уничтожения боголюбовских квазичастиц. В формализме ТПД первый процесс соответствует рождению тепловой квазичастицы с положительной энергией, а второй — процессу рождения тепловой тильда-квазичастицы с отрицательной энергией [15].

В приближении независимых тепловых квазичастиц элементарными модами возбуждения нагретого ядра под влиянием внешнего одночастичного возмущения являются состояния вида $|[\beta^{\dagger}_{j_1}, \beta^{\dagger}_{j_2}]_{JM}\rangle,\ |[\widetilde{\beta}^{\dagger}_{j_1}, \widetilde{\beta}^{\dagger}_{j_2}]_{JM}\rangle,\ |[\beta^{\dagger}_{j_1}, \widetilde{\beta}^{\dagger}_{j_2}]_{JM}\rangle$. Переходы из теплового вакуума на такие состояния описывают, соответственно, процессы рождения двух квазичастиц, уничтожения двух термически возбужденных квазичастиц и переход возбужденной квазичастицы из одного состояния в другое. Можно показать [15], что вероятности переходов на тильда-сопряженные состояния, построенные, как это выписано чуть выше, из двух тепловых квазичастиц, связаны принципом детального баланса (12).

На следующем этапе собственные состояния теплового гамильтониана находятся с учетом взаимодействия между тепловыми квазичастицами, обусловленного остаточным частично-дырочным взаимодействием. Для этого используется так называемое тепловое квазичастичное приближение случайной фазы (ТКПСФ), согласно которому тепловой гамильтониан (22) приближено диагонализуется в терминах операторов фононов, построенных из тепловых квазичастиц [10, 15]

$$Q^{\dagger}_{JMi} = \frac{1}{2}\sum_{\tau}\sum_{j_1 j_2}^{\tau}\Big(\psi^{Ji}_{j_1 j_2}\big[\beta^{\dagger}_{j_1}\beta^{\dagger}_{j_2}\big]_{JM} + \widetilde{\psi}^{Ji}_{j_1 j_2}\big[\widetilde{\beta}^{\dagger}_{\overline{j_1}}\widetilde{\beta}^{\dagger}_{\overline{j_2}}\big]_{JM} + i\eta^{Ji}_{j_1 j_2}\big[\beta^{\dagger}_{j_1}\widetilde{\beta}^{\dagger}_{\overline{j_2}}\big]_{JM} + \\ + i\widetilde{\eta}^{Ji}_{j_1 j_2}\big[\widetilde{\beta}^{\dagger}_{\overline{j_1}}\beta^{\dagger}_{j_2}\big]_{JM} - \phi^{Ji}_{j_1 j_2}\big[\beta^{\dagger}_{j_1}\beta^{\dagger}_{j_2}\big]^{\dagger}_{\overline{JM}} - \widetilde{\phi}^{Ji}_{j_1 j_2}\big[\widetilde{\beta}^{\dagger}_{\overline{j_1}}\widetilde{\beta}^{\dagger}_{\overline{j_2}}\big]^{\dagger}_{\overline{JM}} + \\ + i\xi^{Ji}_{j_1 j_2}\big[\beta^{\dagger}_{j_1}\widetilde{\beta}^{\dagger}_{\overline{j_2}}\big]^{\dagger}_{\overline{JM}} + i\widetilde{\xi}^{Ji}_{j_1 j_2}\big[\widetilde{\beta}^{\dagger}_{\overline{j_1}}\beta^{\dagger}_{j_2}\big]^{\dagger}_{\overline{JM}}\Big). \quad (28)$$

Наличие мнимой единицы в определении оператора фонона связано с использованием комплексного теплового преобразования [15]. Операторы фононов $\widetilde{Q}^{\dagger}_{JMi}$, Q_{JMi}, $\widetilde{Q}_{JMi}$ получаются из (28) путем применения операций эрмитова и тильда-сопряжения. Вакуум тепловых фононов $|\psi_0(T)\rangle$ является тепловым вакуумом ТКПСФ при условии, что он удовлетворяет условию теплового состояния (9). Полагая, что $|\psi_0(T)\rangle$ близко к тепловому вакууму ТБКШ-приближения $|\varphi_0(T)\rangle$, мы приходим к квазибозонному приближению, согласно которому операторы тепловых фононов подчиняются бозонным коммутационным соотношениям.

Для нахождения структуры (т. е. амплитуд ψ, ϕ и т. д.) и энергии фононов решается уравнение движения

$$\langle\varphi_0(T)|[\delta O, \mathcal{H}, Q^{\dagger}_{JMi}]|\varphi_0(T)\rangle = \omega_{Ji}(T)\langle\varphi_0(T)|[\delta O, Q^{\dagger}_{JMi}]|\varphi_0(T)\rangle, \quad (29)$$

где в качестве δO используются операторы рождения и уничтожения пары тепловых квазичастиц. Подчеркнем, что, как и в стандартном ПСФ, в уравнении движения (29) фигурирует не вакуум фононов, а вакуум тепловых квазичастиц. Уравнение (29) приводит к системе линейных однородных уравнений для амплитуд. Сепарабельный вид остаточного взаимодействия позволяет записать условие разрешимости этой системы уравнений в виде секулярного уравнения для энергии тепловых фононов ω_{Ji} [10, 15]. Требование, чтобы вакуум тепловых фононов удовлетворял условию теплового состояния (9) ($A = \alpha^{\dagger}_{j_1}\alpha^{\dagger}_{j_2}$, $\alpha^{\dagger}_{j_1}\alpha_{j_2}$, $\alpha_{j_1}\alpha_{j_2}$), приводит к следующим соотношениям для амплитуд [22]

$$\begin{pmatrix}\Psi\\ \Phi\end{pmatrix}^{Ji}_{j_1 j_2} = \big[X_{Ji}x_{j_1}x_{j_2} - Y_{Ji}y_{j_1}y_{j_2}\big]^{-1}\begin{pmatrix}\psi\\ \phi\end{pmatrix}^{Ji}_{j_1 j_2} = \big[Y_{Ji}x_{j_1}x_{j_2} - X_{Ji}y_{j_1}y_{j_2}\big]^{-1}\begin{pmatrix}\widetilde{\phi}\\ \widetilde{\psi}\end{pmatrix}^{Ji}_{j_1 j_2},$$
$$\begin{pmatrix}\mathrm{H}\\ \Xi\end{pmatrix}^{Ji}_{j_1 j_2} = \big[X_{Ji}x_{j_1}y_{j_2} - Y_{Ji}y_{j_1}x_{j_2}\big]^{-1}\begin{pmatrix}\eta\\ \xi\end{pmatrix}^{Ji}_{j_1 j_2} = \big[Y_{Ji}x_{j_1}y_{j_2} - X_{Ji}y_{j_1}x_{j_2}\big]^{-1}\begin{pmatrix}\widetilde{\xi}\\ \widetilde{\eta}\end{pmatrix}^{Ji}_{j_1 j_2}, \quad (30)$$

где введены так называемые эффективные амплитуды Ψ, Φ, H и Ξ, а зависящие от температуры величины Y_{Ji} и X_{Ji} связаны с функцией распределения Бозе–Эйнштейна

$$Y_{Ji} = (\mathrm{e}^{\omega_{Ji}/T} - 1)^{-1/2}, \quad X_{Ji} = (1 + Y^2_{Ji})^{1/2}. \quad (31)$$

Таким образом, условие теплового состояния (9) для вакуума тепловых фононов приводит к появлению бозонных тепловых чисел заполнения. Фононные амплитуды зависят как от фермионных, так и от бозонных чисел заполнения. При этом прямые и обратные им тильда-сопряженные амплитуды (т. е. ψ и $\widetilde{\phi}$, $\widetilde{\psi}$ и ϕ, η и $\widetilde{\xi}$, $\widetilde{\eta}$ и ξ) выражаются друг через друга посредством эффективных амплитуд.

Поскольку мы используем сепарабельное мультипольное остаточное взаимодействие, для эффективных амплитуд можно получить аналитические выражения [15]:

$$\begin{pmatrix}\Psi\\ \Phi\end{pmatrix}^{Ji}_{j_1j_2} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}^{Ji}_\tau}}\frac{f^{(J)}_{j_1j_2}u^{(+)}_{j_1j_2}}{\varepsilon^{(+)}_{j_1j_2}\mp\omega_{Ji}}, \quad \begin{pmatrix}\mathrm{H}\\ \Xi\end{pmatrix}^{Ji}_{j_1j_2} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}^{Ji}_\tau}}\frac{f^{(J)}_{j_1j_2}v^{(-)}_{j_1j_2}}{\varepsilon^{(-)}_{j_1j_2}\mp\omega_{Ji}}. \tag{32}$$

Здесь $f^{(J)}_{j_1j_2}$ — приведенный матричный элемент мультипольного оператора, $\varepsilon^{(\pm)}_{j_1j_2} = \varepsilon_{j_1}\pm\varepsilon_{j_2}$. Кроме того, использованы следующие обозначения для комбинаций коэффициентов преобразования Боголюбова: $u^{(+)}_{j_1j_2} = u_{j_1}v_{j_2}+v_{j_1}u_{j_2}$, $v^{(-)}_{j_1j_2} = u_{j_1}u_{j_2}-v_{j_1}v_{j_2}$. Зависимость эффективных амплитуд от температуры содержится в зависящих от T энергиях тепловых квазичастиц и фононов, а также в коэффициентах $\mathcal{N}^{Ji}_\tau$, значение которых можно получить из условия нормировки [15]

$$\langle Q_{JMi}|Q_{JMi}\rangle = \frac{1}{2}\sum_\tau\sum_{j_1j_2}^{\tau}\Big\{\big(\Psi^{Ji}_{j_1j_2}\Psi^{Ji}_{j_1j_2}-\Phi^{Ji}_{j_1j_2}\Phi^{Ji}_{j_1j_2}\big)(1-y^2_{j_1}-y^2_{j_2})+ \\ +\big(\mathrm{H}^{Ji}_{j_1j_2}\mathrm{H}^{Ji}_{j_1j_2}-\Xi^{Ji}_{j_1j_2}\Xi^{Ji}_{j_1j_2}\big)(y^2_{j_2}-y^2_{j_1})\Big\} = 1. \tag{33}$$

Отметим, что приведенные выражения для эффективных амплитуд совпадают с выражениями для фононных амплитуд работы [40], где они были получены при помощи температурных функций Грина.

Подобно тому, как операторы тепловых и боголюбовских квазичастиц связаны тепловым преобразованием (25), операторы тепловых фононов можно представить как результат следующего теплового преобразования:

$$Q^\dagger_{JMi} = X_{Ji}q^\dagger_{JMi} - Y_{Ji}\widetilde{q}_{JMi}, \quad \widetilde{Q}^\dagger_{JMi} = X_{Ji}\widetilde{q}^\dagger_{JMi} - Y_{Ji}q_{JMi}, \tag{34}$$

где операторы q-фононов соответствуют значениям $X_{Ji}=1$, $Y_{Ji}=0$ в определении амплитуд (30). При помощи преобразования, обратного к (34), легко показать, что тепловой фононный вакуум $|\psi_0(T)\rangle$ содержит Y^2_{Ji} термически возбужденных q-фононов с энергией ω_{Ji}:

$$\langle\psi_0(T)|q^\dagger_{JMi}q_{JMi}|\psi_0(T)\rangle = Y^2_{Ji}. \tag{35}$$

Поэтому в определенном смысле q-фононы можно рассматривать как «холодные» фононы, а тепловое преобразование (34) как процесс их нагревания, т. е. переход к новым фононным операторам, для которых тепловой вакуум является вакуумным состоянием. При этом однофононная часть теплового гамильтониана диагональна как в терминах q-фононов, так и в терминах тепловых фононов, поскольку преобразование (34) унитарно

$$\mathcal{H}_{\mathrm{TQRPA}} = \sum_{JMi}\omega_{Ji}\big(Q^\dagger_{JMi}Q_{JMi}-\widetilde{Q}^\dagger_{JMi}\widetilde{Q}_{JMi}\big) = \sum_{JMi}\omega_{Ji}\big(q^\dagger_{JMi}q_{JMi}-\widetilde{q}^\dagger_{JMi}\widetilde{q}_{JMi}\big). \tag{36}$$

Вакуум q-фононов $|\psi_0\rangle$ связан с тепловым вакуумом $|\psi_0(T)\rangle$ унитарным преобразованием [13]. Следует отметить, что в работах [9, 10] именно q-фононы рассматривались в качестве тепловых, а их вакуум играл роль теплового вакуума. При таком подходе в теории не появляются бозонные числа заполнения.

Получим выражения для приведенной вероятности (силы) переходов с теплового вакуума на однофононные состояния. Для этого выразим одночастичный оператор перехода $\mathcal{T}_{JM}$ (20) через операторы тепловых фононов [15]:

$$\mathcal{T}_{JM} = \hat{J}^{-1} \sum_i \Gamma_{Ji} \Big\{ X_{Ji} \big(Q^\dagger_{JMi} + Q_{\overline{JM}i} \big) + Y_{Ji} \big(\widetilde{Q}^\dagger_{\overline{JM}i} + \widetilde{Q}_{JMi} \big) \Big\}, \tag{37}$$

где

$$\Gamma_{Ji} = \sum_\tau \sum_{j_1 j_2}^{\tau} t^{(J)}_{j_1 j_2} \Big\{ (1 - y^2_{j_1} - y^2_{j_2}) u^{(+)}_{j_1 j_2} (\Psi^{Ji}_{j_1 j_2} + \Phi^{Ji}_{j_1 j_2}) + (y^2_{j_2} - y^2_{j_1}) v^{(-)}_{j_1 j_2} (\mathrm{H}^{Ji}_{j_1 j_2} + \Xi^{Ji}_{j_1 j_2}) \Big\}. \tag{38}$$

Зависящие от температуры функции Γ_{Ji} определяют приведенные вероятности переходов на тепловые однофононные состояния:

$$\begin{aligned} B_{Ji}(\mathcal{T}_J) &= |\langle Q_{Ji} \| \, \mathcal{T}_J \, \| \psi_0(T) \rangle|^2 = X^2_{Ji} \Gamma^2_{Ji}, \\ \widetilde{B}_{Ji}(\mathcal{T}_J) &= |\langle \widetilde{Q}_{Ji} \| \, \mathcal{T}_J \, \| \psi_0(T) \rangle|^2 = Y^2_{Ji} \Gamma^2_{Ji}. \end{aligned} \tag{39}$$

Эти выражения вместе с энергией переходов $\pm\omega_{Ji}$ однозначно определяют силовые функции одночастичного оператора $\mathcal{T}_{JM}$ (20) в тепловом квазичастичном приближении случайной фазы. Поскольку тепловой вакуум ТКПСФ удовлетворяет условию теплового состояния (9), для силовой функции переходов на однофононные состояния справедлив принцип детального баланса (21).

Полученные выражения для силы переходов на однофононные состояния согласуются с интерпретацией q-фононов как «холодных». Действительно, найдем силу переходов на однофононные q-состояния:

$$\begin{aligned} b_{Ji}(\mathcal{T}_J) &= |\langle q_{Ji} \| \, \mathcal{T}_J \, \| \psi_0 \rangle|^2 = \Gamma^2_{Ji}, \\ \widetilde{b}_{Ji}(\mathcal{T}_J) &= |\langle \widetilde{q}_{Ji} \| \, \mathcal{T}_J \, \| \psi_0 \rangle|^2 = 0. \end{aligned} \tag{40}$$

Равенство нулю вероятности переходов на состояния с отрицательной энергией означает, что в системе q-фононов, как и для ядра в основном состоянии, возможен только процесс возбуждения. Это обстоятельство не учитывалось в работах [9, 10], что приводило к нарушению принципа детального баланса. Выше мы показали, что в ТКПСФ нагретое ядро содержит Y^2_{Ji} термически возбужденных q-фононов с энергией ω_{Ji}. Поэтому вероятность процесса девозбуждения, когда из системы удаляется фонон, пропорциональна Y^2_{Ji}, а вероятность обратного процесса — возбуждения, когда фонон в систему добавляется, пропорциональна $X^2_{Ji} = 1 + Y^2_{Ji}$.

3. ФРАГМЕНТАЦИЯ ОДНОФОНОННЫХ СОСТОЯНИЙ В НАГРЕТЫХ ЯДРАХ

Использование тепловых квазичастиц и фононов в качестве элементарных мод возбуждений нагретого ядра, а также тот факт, что тепловой гамильтониан наследует структуру исходного физического гамильтониана ядра, позволяют совершить выход за рамки однофононного приближения традиционным для КФМ способом — добавлением в волновую функцию двухфононных компонент [11]. Для этого, как и при $T = 0$, выразим тепловой гамильтониан через операторы рождения и уничтожения тепловых квазичастиц и фононов

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\mathrm{TQRPA}} + \mathcal{H}_{\mathrm{qph}}. \tag{41}$$

Слагаемое $\mathcal{H}_{\mathrm{qph}}$ описывает взаимодействие тепловых фононов и тепловых квазичастиц:

$$\mathcal{H}_{\mathrm{qph}} = -\frac{1}{2}\sum_{JMi}\sum_{\tau}\sum_{j_1j_2}^{\tau}\frac{f^{(J)}_{j_1j_2}}{\sqrt{\mathcal{N}^{Ji}_{\tau}}}\Big[\big\{X_{Ji}(Q^{\dagger}_{\overline{JM}i} + Q_{JMi}) + \\ + Y_{Ji}(\widetilde{Q}^{\dagger}_{JMi} + \widetilde{Q}_{\overline{JM}i})\big\}B_{JM}(j_1j_2) + (\mathrm{h.c.}) - (\mathrm{t.c.})\Big], \tag{42}$$

где для сокращения записи слагаемые, эрмитово- и тильда-сопряженные указанным, обозначены соответственно как (h. c.) и (t. c.). Оператор $B_{JM}(j_1j_2)$ выражается через операторы рождения и уничтожения тепловых квазичастиц

$$B_{JM}(j_1j_2) = -v^{(-)}_{j_1j_2}\big(x_{j_1}x_{j_2}\big[\beta^{\dagger}_{j_1}\beta_{\overline{j_2}}\big]_{JM} + y_{j_1}y_{j_2}\big[\widetilde{\beta}^{\dagger}_{\overline{j_1}}\widetilde{\beta}_{j_2}\big]_{JM}\big) + \\ + iu^{(+)}_{j_1j_2}\big(x_{j_1}y_{j_2}\big[\beta^{\dagger}_{j_1}\widetilde{\beta}_{j_2}\big]_{JM} + y_{j_1}x_{j_2}\big[\widetilde{\beta}^{\dagger}_{\overline{j_1}}\beta_{\overline{j_2}}\big]_{JM}\big). \tag{43}$$

Как и в случае холодного ядра, слагаемое $\mathcal{H}_{\mathrm{qph}}$ смешивает состояния с разным числом фононов, благодаря чему происходит фрагментация силы переходов, которая в ТКПСФ сконцентрирована на однофононных состояниях.

Строго говоря, тепловой гамильтониан $\mathcal{H}$, будучи записанным в терминах тепловых квазичастиц и фононов, содержит слагаемые типа $B^{\dagger}B$, которые описывают неучтенное в ТКПСФ взаимодействие тепловых квазичастиц. Эти слагаемые, как и в КФМ при нулевой температуре, мы отбрасываем [11, 28]. Кроме того, учитывая взаимодействие тепловых квазичастиц и фононов, мы будем пренебрегать принципом Паули, т. е. будем считать операторы тепловых фононов «истинными» бозонами. Помимо этого мы будем использовать еще одно приближение, а именно — будем считать, что

$$[B_{JM}(j_1j_2), \widetilde{q}^{\dagger}_{J'M'}] = [B_{JM}(j_1j_2), \widetilde{q}_{J'M'}] = 0. \tag{44}$$

Чтобы пояснить смысл этого приближения, рассмотрим оператор взаимодействия тепловых квазичастиц и фононов $\mathcal{H}_{\mathrm{qph}}$, написанный через q-фононы:

$$\mathcal{H}_{\mathrm{qph}} = -\frac{1}{2}\sum_{JMi}\sum_{\tau}\sum_{j_1j_2}^{\tau}\frac{f^{(J)}_{j_1j_2}}{\sqrt{\mathcal{N}^{Ji}_{\tau}}}\Big[(q^{\dagger}_{\overline{JM}i} + q_{JMi})B_{JM}(j_1j_2) + (\mathrm{h.c.}) - (\mathrm{t.c.})\Big]. \tag{45}$$

Сравнение этого выражения с выражением (42) для $\mathcal{H}_{\mathrm{qph}}$ показывает, что приближение (44) выключает взаимодействие «холодных» $q^{\dagger}, q$ и $\widetilde{q}^{\dagger}, \widetilde{q}$ фононов теплового гамильтониана. Взаимодействие возникает лишь после «нагревания» (34).

Чтобы удовлетворить условию теплового состояния (9), будем искать собственные состояния теплового гамильтониана (41) в следующем виде:

$$
\begin{aligned}
|\mathcal{Q}_{JM\nu}\rangle &= \mathcal{Q}^{\dagger}_{JM\nu}\,|\Psi_0(T)\rangle = \\
&= \Big[\sum_i \big\{R_i(J\nu)Q^{\dagger}_{JMi} + \widetilde{R}_i(J\nu)\widetilde{Q}^{\dagger}_{\overline{JM}i} - N_i(J\nu)Q_{\overline{JM}i} - \widetilde{N}_i(J\nu)\widetilde{Q}_{JMi}\big\} + \\
&\quad + \sum_{\substack{\lambda_1 i_1\\ \lambda_2 i_2}} \Big\{ P^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\big[Q^{\dagger}_{\lambda_1 i_1}Q^{\dagger}_{\lambda_2 i_2}\big]_{JM} + \widetilde{P}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\big[\widetilde{Q}^{\dagger}_{\overline{\lambda_1} i_1}\widetilde{Q}^{\dagger}_{\overline{\lambda_2} i_2}\big]_{JM} + \\
&\quad + 2S^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\big[Q^{\dagger}_{\lambda_1 i_1}\widetilde{Q}^{\dagger}_{\overline{\lambda_2} i_2}\big]_{JM} - T^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\big[Q_{\overline{\lambda_1} i_1}Q_{\overline{\lambda_2} i_2}\big]_{JM} - \\
&\quad - \widetilde{T}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\big[\widetilde{Q}_{\lambda_1 i_1}\widetilde{Q}_{\lambda_2 i_2}\big]_{JM} - 2Z^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\big[Q_{\overline{\lambda_1} i_1}\widetilde{Q}_{\lambda_2 i_2}\big]_{JM} \Big\}\Big]\,|\Psi_0(T)\rangle.
\end{aligned}
\tag{46}
$$

Волновая функция (46) должна быть нормирована,

$$
\begin{aligned}
\langle \mathcal{Q}_{JM\nu}|\mathcal{Q}_{JM\nu}\rangle &= \sum_i \Big\{[R_i(J\nu)]^2 + [\widetilde{R}_i(J\nu)]^2 - [N_i(J\nu)]^2 - [\widetilde{N}_i(J\nu)]^2\Big\} + \\
&\quad + 2\sum_{\substack{\lambda_1 i_1\\ \lambda_2 i_2}} \Big\{ \big[P^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\big]^2 + \big[\widetilde{P}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\big]^2 + 2\big[S^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\big]^2 - \\
&\quad - \big[T^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\big]^2 - \big[\widetilde{T}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\big]^2 - 2\big[Z^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\big]^2\big]^2 \Big\} = 1.
\end{aligned}
\tag{47}
$$

Как и ранее, будем считать, что состояние (46) без символа «тильда» соответствует положительной энергии $E_{J\nu}$. Тогда тильда-сопряженное состояние $|\widetilde{\mathcal{Q}}_{JM\nu}\rangle = \widetilde{\mathcal{Q}}^{\dagger}_{JM\nu}|\Psi_0(T)\rangle$ соответствует отрицательной энергии $-E_{J\nu}$. Новый тепловой вакуум определим как вакуум относительно операторов уничтожения

$$
\mathcal{Q}_{JM\nu}\,|\Psi_0(T)\rangle = \widetilde{\mathcal{Q}}_{JM\nu}\,|\Psi_0(T)\rangle = 0. \tag{48}
$$

Подчеркнем, что присутствие в (46) операторов уничтожения тепловых фононов подразумевает переопределение теплового вакуума при учете связи одно- и двухфононных конфигураций. Напомним, что в стандартной КФМ при включении взаимодействия фононов волновая функция основного состояния не переопределяется, а остается тождественной фононному вакууму квазичастичного ПСФ. Аналогичное предположение при $T \neq 0$ использовалось и в работах [9, 14, 15].

Получим дополнительные условия на структуру оператора $\mathcal{Q}^{\dagger}_{JM\nu}$, потребовав, чтобы новый вакуум удовлетворял условию (9). Для этого в качестве оператора A, как и при рассмотрении структуры теплового вакуума ТКПСФ, используем двухквазичастичные операторы $[\alpha^{\dagger}_{j_1}\alpha^{\dagger}_{j_2}]_{JM}$, $[\alpha^{\dagger}_{j_1}\alpha_{\overline{j}_2}]_{JM}$ и эрмитово-сопряженные им. Выражая двухквазичастичные операторы через операторы тепловых фононов, легко показать, что амплитуды при однофононных слагаемых в (46) должны удовлетворять условию

$$
\begin{pmatrix} \widetilde{N} \\ \widetilde{R} \end{pmatrix}_i (J\nu) = \frac{X_{Ji}\,\mathrm{e}^{-E_{J\nu}/2T} - Y_{Ji}}{X_{Ji} - Y_{Ji}\,\mathrm{e}^{-E_{J\nu}/2T}} \begin{pmatrix} R \\ N \end{pmatrix}_i (J\nu), \tag{49}
$$

где $E_{J\nu}$ — собственное значение теплового гамильтониана (41), соответствующее волновой функции (46). Таким образом, мы получили важный результат относительно структуры волновой функции (46): если мы требуем выполнения условия теплового состояния для вакуума операторов $\mathcal{Q}_{JM\nu}$, то в волновой функции (46) должны присутствовать как прямые однофононные слагаемые, т. е. слагаемые, состоящие из оператора рождения фонона, так и обратные тильда-сопряженные слагаемые, состоящие из оператора уничтожения фонона. В связи с этим логичным представляется включение в волновую функцию (46) и обратных двухфононных слагаемых.

По аналогии с ТКПСФ в определение волновой функции (46) удобно ввести эффективные амплитуды

$$\begin{pmatrix}\mathbb{R}\\ \mathbb{N}\end{pmatrix}_i (J\nu) = \big[X_{J\nu}X_{Ji} - Y_{J\nu}Y_{Ji}\big]^{-1}\begin{pmatrix}R\\ N\end{pmatrix}_i (J\nu) = \\ = \big[Y_{J\nu}X_{Ji} - X_{J\nu}Y_{Ji}\big]^{-1}\begin{pmatrix}\widetilde{N}\\ \widetilde{R}\end{pmatrix}_i (J\nu), \tag{50}$$

где $X^2_{J\nu} - Y^2_{J\nu} = 1$ и $X_{J\nu}/Y_{J\nu} = \mathrm{e}^{-E_{J\nu}/2T}$. При помощи равенства

$$[R_i(J\nu)]^2 + [\widetilde{R}_i(J\nu)]^2 - [N_i(J\nu)]^2 - [\widetilde{N}_i(J\nu)]^2 = [\mathbb{R}_i(J\nu)]^2 - [\mathbb{N}_i(J\nu)]^2 \tag{51}$$

условие нормировки (47) можно записать через эффективные амплитуды.

Для нахождения собственных состояний теплового гамильтониана (41) и их энергий мы вновь воспользуемся уравнением движения (13) в виде

$$\langle\psi_0(T)|[\delta O, \mathcal{H}, \mathcal{Q}^\dagger_{JM\nu}]|\psi_0(T)\rangle = E_{J\nu}\langle\psi_0(T)|[\delta O, \mathcal{Q}^\dagger_{JM\nu}]|\psi_0(T)\rangle, \tag{52}$$

где $|\psi_0(T)\rangle$ — фононный вакуум ТКПСФ, а в качестве δO рассматриваются операторы, эрмитово-сопряженные к операторам в правой части (46), т. е. $\delta O = Q_{JM}$, $[Q_{\lambda_1 i_1}, Q_{\lambda_2 i_2}]_{JM}$ и т. д. В результате приходим к следующей системе линейных уравнений:

$$R_i(J\nu)(\omega_{Ji} - E_{J\nu}) + \sum_{\substack{\lambda_1 i_1\\ \lambda_2 i_2}} \Big[P^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)U^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) + \widetilde{P}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\widetilde{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) + \\ + 2S^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)W^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - T^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)V^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - \widetilde{T}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\widetilde{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - \\ - 2Z^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)G^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)\Big] = 0,$$

$$\widetilde{R}_i(J\nu)(\omega_{Ji} + E_{J\nu}) + \sum_{\substack{\lambda_1 i_1\\ \lambda_2 i_2}} \Big[P^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\widetilde{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) + \widetilde{P}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)U^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) + \\ + 2S^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\widetilde{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - T^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\widetilde{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - \widetilde{T}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)V^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - \\ - 2Z^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\widetilde{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)\Big] = 0,$$

$$N_i(J\nu)(\omega_{Ji}+E_{J\nu})+\sum_{\substack{\lambda_1 i_1\\ \lambda_2 i_2}}\Big[P^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)V^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)+\widetilde{P}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\widetilde{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)+$$
$$+\,2S^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)G^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-T^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)U^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-\widetilde{T}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\widetilde{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-$$
$$-\,2Z^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)W^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)\Big]=0,$$

$$\widetilde{N}_i(J\nu)(\omega_{Ji}-E_{J\nu})+\sum_{\substack{\lambda_1 i_1\\ \lambda_2 i_2}}\Big[P^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\widetilde{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)+\widetilde{P}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)V^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)+$$
$$+\,2S^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\widetilde{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-T^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\widetilde{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-\widetilde{T}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)U^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-$$
$$-\,2Z^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)\widetilde{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)\Big]=0, \tag{53}$$

$$2P^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)(\omega_{\lambda_1 i_1}+\omega_{\lambda_2 i_2}-E_{J\nu})+\sum_i\Big[R_i(J\nu)U^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-\widetilde{R}_i(J\nu)\widetilde{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-$$
$$-\,N_i(J\nu)V^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)+\widetilde{N}_i(J\nu)\widetilde{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)\Big]=0,$$

$$2\widetilde{P}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)(\omega_{\lambda_1 i_1}+\omega_{\lambda_2 i_2}+E_{J\nu})-\sum_i\Big[R_i(J\nu)\widetilde{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-\widetilde{R}_i(J\nu)U^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-$$
$$-\,N_i(J\nu)\widetilde{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)+\widetilde{N}_i(J\nu)V^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)\Big]=0,$$

$$2S^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)(\omega_{\lambda_1 i_1}-\omega_{\lambda_2 i_2}-E_{J\nu})+\sum_i\Big[R_i(J\nu)W^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-\widetilde{R}_i(J\nu)\widetilde{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-$$
$$-\,N_i(J\nu)G^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)+\widetilde{N}_i(J\nu)\widetilde{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)\Big]=0,$$

$$2T^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)(\omega_{\lambda_1 i_1}+\omega_{\lambda_2 i_2}+E_{J\nu})+\sum_i\Big[R_i(J\nu)V^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-\widetilde{R}_i(J\nu)\widetilde{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-$$
$$-\,N_i(J\nu)U^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)+\widetilde{N}_i(J\nu)\widetilde{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)\Big]=0,$$

$$2\widetilde{T}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)(\omega_{\lambda_1 i_1}+\omega_{\lambda_2 i_2}-E_{J\nu})-\sum_i\Big[R_i(J\nu)\widetilde{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-\widetilde{R}_i(J\nu)V^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-$$
$$-\,N_i(J\nu)\widetilde{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)+\widetilde{N}_i(J\nu)U^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)\Big]=0,$$

$$2Z^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(J\nu)(\omega_{\lambda_1 i_1}-\omega_{\lambda_2 i_2}+E_{J\nu})+\sum_i\Big[R_i(J\nu)G^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-\widetilde{R}_i(J\nu)\widetilde{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)-$$
$$-\,N_i(J\nu)W^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)+\widetilde{N}_i(J\nu)\widetilde{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)\Big]=0,$$

где введены следующие обозначения для матричных элементов оператора $\mathcal{H}_{\rm qph}$:

$$\begin{aligned}
U^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= \langle\psi_0(T)|[Q_{JMi}, \mathcal{H}_{\rm qph}, [Q^\dagger_{\lambda_1 i_1} Q^\dagger_{\lambda_2 i_2}]_{JM}]|\psi_0(T)\rangle,\\
\widetilde{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= \langle\psi_0(T)|[Q_{JMi}, \mathcal{H}_{\rm qph}, [\widetilde{Q}^\dagger_{\overline{\lambda_1 i_1}} \widetilde{Q}^\dagger_{\overline{\lambda_2 i_2}}]_{JM}]|\psi_0(T)\rangle,\\
V^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= \langle\psi_0(T)|[Q_{JMi}, \mathcal{H}_{\rm qph}, [Q_{\overline{\lambda_1 i_1}} Q_{\overline{\lambda_2 i_2}}]_{JM}]|\psi_0(T)\rangle,\\
\widetilde{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= \langle\psi_0(T)|[Q_{JMi}, \mathcal{H}_{\rm qph}, [\widetilde{Q}_{\lambda_1 i_1} \widetilde{Q}_{\lambda_2 i_2}]_{JM}]|\psi_0(T)\rangle,\\
W^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= \langle\psi_0(T)|[Q_{JMi}, \mathcal{H}_{\rm qph}, [Q^\dagger_{\lambda_1 i_1} \widetilde{Q}^\dagger_{\overline{\lambda_2 i_2}}]_{JM}]|\psi_0(T)\rangle,\\
\widetilde{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= \langle\psi_0(T)|[Q_{JMi}, \mathcal{H}_{\rm qph}, [\widetilde{Q}^\dagger_{\overline{\lambda_1 i_1}} Q^\dagger_{\lambda_2 i_2}]_{JM}]|\psi_0(T)\rangle,\\
G^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= \langle\psi_0(T)|[Q_{JMi}, \mathcal{H}_{\rm qph}, [Q_{\overline{\lambda_1 i_1}} \widetilde{Q}_{\lambda_2 i_2}]_{JM}]|\psi_0(T)\rangle,\\
\widetilde{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= \langle\psi_0(T)|[Q_{JMi}, \mathcal{H}_{\rm qph}, [\widetilde{Q}_{\lambda_1 i_1} Q_{\overline{\lambda_2 i_2}}]_{JM}]|\psi_0(T)\rangle.
\end{aligned}\tag{54}$$

Можно показать, что в приближении (44) перечисленные матричные элементы удовлетворяют равенствам

$$\begin{aligned}
X_{Ji}U^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - Y_{Ji}\widetilde{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= X_{\lambda_1 i_1}X_{\lambda_2 i_2}\mathbb{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji),\\
X_{Ji}\widetilde{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - Y_{Ji}U^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= -Y_{\lambda_1 i_1}Y_{\lambda_2 i_2}\mathbb{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji),\\
X_{Ji}V^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - Y_{Ji}\widetilde{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= X_{\lambda_1 i_1}X_{\lambda_2 i_2}\mathbb{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji),\\
X_{Ji}\widetilde{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - Y_{Ji}V^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= -Y_{\lambda_1 i_1}Y_{\lambda_2 i_2}\mathbb{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji),\\
X_{Ji}W^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - Y_{Ji}\widetilde{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= X_{\lambda_1 i_1}Y_{\lambda_2 i_2}\mathbb{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji),\\
X_{Ji}\widetilde{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - Y_{Ji}W^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= -Y_{\lambda_1 i_1}X_{\lambda_2 i_2}\mathbb{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji),\\
X_{Ji}G^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - Y_{Ji}\widetilde{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= X_{\lambda_1 i_1}Y_{\lambda_2 i_2}\mathbb{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji),\\
X_{Ji}\widetilde{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) - Y_{Ji}G^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= -Y_{\lambda_1 i_1}X_{\lambda_2 i_2}\mathbb{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji),
\end{aligned}\tag{55}$$

где величины $\mathbb{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)$, $\mathbb{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)$, $\mathbb{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)$ и $\mathbb{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)$ имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
\mathbb{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= \hat\lambda_1\hat\lambda_2\big[\mathbb{B}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) + (-1)^{\lambda_1+\lambda_2+J}\mathbb{A}^{\lambda_1 i_1}_{Ji}(\lambda_2 i_2) + \mathbb{A}^{\lambda_2 i_2}_{Ji}(\lambda_1 i_1)\big],\\
\mathbb{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= -\hat\lambda_1\hat\lambda_2\big[\mathbb{B}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) + (-1)^{\lambda_1+\lambda_2+J}\mathbb{B}^{\lambda_1 i_1}_{Ji}(\lambda_2 i_2) + \mathbb{B}^{\lambda_2 i_2}_{Ji}(\lambda_1 i_1)\big],\\
\mathbb{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= \hat\lambda_1\hat\lambda_2\big[\mathbb{A}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) + (-1)^{\lambda_1+\lambda_2+J}\mathbb{B}^{\lambda_1 i_1}_{Ji}(\lambda_2 i_2) + \mathbb{A}^{\lambda_2 i_2}_{Ji}(\lambda_1 i_1)\big],\\
\mathbb{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) &= -\hat\lambda_1\hat\lambda_2\big[\mathbb{A}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) + (-1)^{\lambda_1+\lambda_2+J}\mathbb{A}^{\lambda_1 i_1}_{Ji}(\lambda_2 i_2) + \mathbb{B}^{\lambda_2 i_2}_{Ji}(\lambda_1 i_1)\big],
\end{aligned}\tag{56}$$

а $\mathbb{A}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)$ и $\mathbb{B}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji)$ выражаются через эффективные ТКПСФ-амплитуды (30) и фермионные тепловые числа заполнения:

$$\mathbb{A}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) = \sum_\tau \sum_{j_1 j_2 j_3}{}^\tau \frac{f^{(J)}_{j_1 j_2}}{\sqrt{\mathcal{N}^{Ji}_\tau}} \begin{Bmatrix} J & \lambda_1 & \lambda_2 \\ j_3 & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \times$$
$$\times \Big\{ v^{(-)}_{j_1 j_2} \big[(\Psi^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \Psi^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1} + \Phi^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \Phi^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1})(x^2_{j_1} x^2_{j_2} x^2_{j_3} - y^2_{j_1} y^2_{j_2} y^2_{j_3}) -$$
$$- (\mathrm{H}^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \Xi^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1} + \Xi^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \mathrm{H}^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1})(x^2_{j_1} x^2_{j_2} y^2_{j_3} - y^2_{j_1} y^2_{j_2} x^2_{j_3}) \big] +$$
$$+ u^{(+)}_{j_1 j_2} \big[(\Psi^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \mathrm{H}^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1} + \Phi^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \Xi^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1})(x^2_{j_1} y^2_{j_2} y^2_{j_3} - y^2_{j_1} x^2_{j_2} x^2_{j_3}) +$$
$$+ (\mathrm{H}^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \Phi^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1} + \Xi^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \Psi^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1})(x^2_{j_1} y^2_{j_2} x^2_{j_3} - y^2_{j_1} x^2_{j_2} x^2_{j_3}) \big] \Big\}, \qquad (57)$$

$$\mathbb{B}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) = \sum_\tau \sum_{j_1 j_2 j_3}{}^\tau \frac{f^{(J)}_{j_1 j_2}}{\sqrt{\mathcal{N}^{Ji}_\tau}} \begin{Bmatrix} J & \lambda_1 & \lambda_2 \\ j_3 & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \times$$
$$\times \Big\{ v^{(-)}_{j_1 j_2} \big[(\Psi^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \Phi^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1} + \Phi^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \Psi^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1})(x^2_{j_1} x^2_{j_2} x^2_{j_3} - y^2_{j_1} y^2_{j_2} y^2_{j_3}) -$$
$$- (\mathrm{H}^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \mathrm{H}^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1} + \Xi^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \Xi^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1})(x^2_{j_1} x^2_{j_2} y^2_{j_3} - y^2_{j_1} y^2_{j_2} x^2_{j_3}) \big] +$$
$$+ u^{(+)}_{j_1 j_2} \big[(\Psi^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \Xi^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1} + \Phi^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \mathrm{H}^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1})(x^2_{j_1} y^2_{j_2} y^2_{j_3} - y^2_{j_1} x^2_{j_2} x^2_{j_3}) +$$
$$+ (\mathrm{H}^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \Psi^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1} + \Xi^{\lambda_1 i_1}_{j_2 j_3} \Phi^{\lambda_2 i_2}_{j_3 j_1})(x^2_{j_1} y^2_{j_2} x^2_{j_3} - y^2_{j_1} x^2_{j_2} x^2_{j_3}) \big] \Big\}. \qquad (58)$$

Размерность системы уравнений (53) можно значительно сократить путем исключения из нее двухфононных амплитуд. После этого, воспользовавшись определением (50), получаем систему линейных однородных уравнений относительно эффективных амплитуд $\mathbb{R}_i$ и $\mathbb{N}_i$:

$$\begin{pmatrix} \mathbb{M}^{(1)}(E) & \mathbb{M}^{(2)}(E) \\ \mathbb{M}^{(2)}(-E) & \mathbb{M}^{(1)}(-E) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{R} \\ \mathbb{N} \end{pmatrix} = 0. \qquad (59)$$

Выражение для матричных элементов $\mathbb{M}^{(1,2)}_{ii'}$ следующее:

$$\mathbb{M}^{(1)}_{ii'}(E) = \delta_{ii'}(\omega_{Ji} - E) -$$
$$- \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda_1 i_1 \\ \lambda_2 i_2}} \Bigg\{ \left(\frac{\mathbb{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) \mathbb{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji')}{\omega_{\lambda_1 i_1} + \omega_{\lambda_2 i_2} - E} + \frac{\mathbb{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) \mathbb{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji')}{\omega_{\lambda_1 i_1} + \omega_{\lambda_2 i_2} + E} \right) (1 + Y^2_{\lambda_1 i_1} + Y^2_{\lambda_2 i_2}) +$$
$$+ \left(\frac{\mathbb{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) \mathbb{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji')}{\omega_{\lambda_1 i_1} - \omega_{\lambda_2 i_2} - E} + \frac{\mathbb{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) \mathbb{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji')}{\omega_{\lambda_1 i_1} - \omega_{\lambda_2 i_2} + E} \right) (Y^2_{\lambda_2 i_2} - Y^2_{\lambda_1 i_1}) \Bigg\}, \qquad (60)$$

$$\mathbb{M}^{(2)}_{ii'}(E) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda_1 i_1 \\ \lambda_2 i_2}} \Bigg\{ \left(\frac{\mathbb{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) \mathbb{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji')}{\omega_{\lambda_1 i_1} + \omega_{\lambda_2 i_2} - E} + \frac{\mathbb{V}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) \mathbb{U}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji')}{\omega_{\lambda_1 i_1} + \omega_{\lambda_2 i_2} + E} \right) (1 + Y^2_{\lambda_1 i_1} + Y^2_{\lambda_2 i_2}) +$$
$$+ \left(\frac{\mathbb{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) \mathbb{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji')}{\omega_{\lambda_1 i_1} - \omega_{\lambda_2 i_2} - E} + \frac{\mathbb{G}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji) \mathbb{W}^{\lambda_1 i_1}_{\lambda_2 i_2}(Ji')}{\omega_{\lambda_1 i_1} - \omega_{\lambda_2 i_2} + E} \right) (Y^2_{\lambda_2 i_2} - Y^2_{\lambda_1 i_1}) \Bigg\}. \qquad (61)$$

Отметим, что матричные элементы $\mathbb{M}^{(1,2)}_{ii'}$ зависят не только от квазичастичных (фермионных), но и от фононных (бозонных) тепловых чисел заполнения. В этом смысле полученные уравнения перекликаются с результатами работы [6], где бозонные числа заполнения возникают благодаря специальным свойствам температурных функций Грина.

Условие существования нетривиального решения системы (59) приводит к секулярному уравнению $\det\|\mathbb{M}\| = 0$ для собственных значений $E_{J\nu}$ теплового гамильтониана (41). Решая для каждого положительного собственного значения $E_{J\nu}$ систему (59), мы найдем ненормированные эффективные амплитуды $\mathbb{R}_i(J\nu)$ и $\mathbb{N}_i(J\nu)$. Нормировка осуществляется при помощи уравнений (53) и условий (47), (51). Тем самым мы полностью определим структуру оператора $\mathcal{Q}^\dagger_{JM\nu}$. Структура оператора $\widetilde{\mathcal{Q}}^\dagger_{JM\nu}$, соответствующего отрицательному собственному значению $-E_{J\nu}$, находится при помощи операции тильда-сопряжения, т. е. замены фононов без символа «тильда» в выражении (46) на таковые с символом «тильда» и наоборот.

После того как определена структура собственных состояний теплового гамильтониана (41), мы можем вычислить приведенные амплитуды перехода для одночастичного мультипольного оператора $\mathcal{T}_{JM}$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_{J\nu}(\mathcal{T}_J) &= |\langle \mathcal{Q}_{J\nu}\| \,\mathcal{T}_J \,\|\Psi_0(T)\rangle|^2 = X^2_{J\nu}\Big|\sum_i \Gamma_{Ji}\big[\mathbb{R}_i(J\nu) + \mathbb{N}_i(J\nu)\big]\Big|^2,\\
\widetilde{\mathcal{B}}_{J\nu}(\mathcal{T}_J) &= |\langle \widetilde{\mathcal{Q}}_{J\nu}\| \,\mathcal{T}_J \,\|\Psi_0(T)\rangle|^2 = Y^2_{J\nu}\Big|\sum_i \Gamma_{Ji}\big[\mathbb{R}_i(J\nu) + \mathbb{N}_i(J\nu)\big]\Big|^2.
\end{aligned} \tag{62}$$

Полученные выражения для приведенных вероятностей удовлетворяют принципу детального баланса (12). Таким образом, требуя для теплового вакуума выполнения условия теплового состояния на каждом этапе диагонализации, нам удалось построить термодинамически последовательный способ описания фрагментации однофононных состояний в нагретых ядрах. В работе [9] условие теплового состояния выполнялось лишь в приближении ТБКШ, а уже на уровне ТКПСФ принцип детального баланса нарушался, так как силовая функция не имела слагаемого, допускающего переходы с энергией $E < 0$. В последующих работах [14, 15] последовательное построение теплового вакуума и тепловых фононов обеспечило выполнение принципа детального баланса в ТКПСФ. Однако при учете взаимодействия одно- и двухфононных конфигураций в качестве теплового вакуума был использован вакуум ТКПСФ, в результате чего принцип детального баланса выполнялся лишь в среднем, т. е. после усреднения силовой функции по некоторому энергетическому интервалу.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На примере квазичастично-фононной модели ядра, используя формализм термополевой динамики, мы разработали последовательную процедуру вычисления силовой функции для нагретых ядер. На всех этапах процедуры выполнялся принцип детального баланса. Показано, что термодинамически последовательное рассмотрение связи одно- и двухфононных конфигураций в нагретом ядре требует согласованного переопределения теплового вакуума. Это — главный результат настоящей работы. Согласно полученным уравнениям, матричные элементы эффективного взаимодействия фононов нагретого ядра зависят как от квазичастичных (фермионных), так и фононных (бозонных) тепловых чисел заполнения. Представленную здесь процедуру легко обобщить на случай спин-изоспиновых возбуждений нагретого ядра (магнитных дипольных, гамов-теллеровских и т. п.), что актуально с точки зрения астрофизических приложений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Di Toro M. et al.* The Nuclear Giant Dipole Resonance under Extreme Conditions // Part. Nucl. 2000. V. 31, Iss. 4. P. 875–904.
2. *Shlomo S., Kolomietz V. M.* Hot Nuclei // Rep. Prog. Phys. 2005. V. 68. P. 1–76.
3. *Langanke K., Martínez-Pinedo G.* Nuclear Weak-Interaction Processes in Stars // Rev. Mod. Phys. 2003. V. 75. P. 819–862.
4. *Martínez-Pinedo G., Liebendörfer M., Frekers F.* Nuclear Input for Core-Collapse Models // Nucl. Phys. A. 2006. V. 777. P. 395–423.
5. *Balasi K. G., Langanke K., Martínez-Pinedo G.* Neutrino–Nucleus Reactions and Their Role for Supernova Dynamics and Nucleosynthesis // Prog. Part. Nucl. Phys. 2015. V. 85. P. 33–81.
6. *Bortignon P. F. et al.* Damping of Nuclear Excitations at Finite Temperature // Nucl. Phys. A. 1986. V. 460. P. 149–163.
7. *Бунатян Г. Г.* К статистическому описанию компаунд-состояний ядер // ЯФ. 1977. Т. 26, вып. 5. С. 979–990.
8. *Камерджиев С. П.* О микроскопическом описании «нагретых» ядер. Препринт ФЭИ-1860. Обнинск, 1987. 16 с.
9. *Kosov D. S., Vdovin A. I.* The TFD Treatment of the Quasiparticle–Phonon Interaction at Finite Temperature // Mod. Phys. Lett. A. 1994. V. 9. P. 1735–1743.
10. *Вдовин А. И., Косов Д. С.* Однофононные состояния в нагретых ядрах // ЯФ. 1995. Т. 58, вып. 5. С. 829–836.
11. *Соловьев В. Г.* Теория атомного ядра: квазичастицы и фононы. М.: Энергоатомиздат, 1989.
12. *Умэдзава Х., Мацумото Х., Татики М.* Термополевая динамика и конденсированные состояния. М.: Мир, 1985.
13. *Takahashi Y., Umezawa H.* Thermo Field Dynamics // Intern. J. Mod. Phys. B. 1996. V. 10. P. 1755–1805.
14. *Vdovin A. I., Dzhioev A. A.* Thermal Bogoliubov Transformation in Nuclear Structure Theory // Phys. Part. Nucl. 2010. V. 41. P. 1127–1131.
15. *Dzhioev A. A., Vdovin A. I.* On the TFD Treatment of Collective Vibrations in Hot Nuclei // Intern. J. Mod. Phys. E. 2009. V. 18. P. 1535–1560.
16. *Litvinova E., Wibowo H.* Finite-Temperature Relativistic Nuclear Field Theory: An Application to the Dipole Response // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 121. P. 082501.
17. *Litvinova E., Wibowo H.* Nuclear Response in a Finite-Temperature Relativistic Framework // Eur. Phys. J. A. 2019. V. 55. P. 223.
18. *Langanke K., Martínez-Pinedo G.* Shell-Model Calculations of Stellar Weak Interaction Rates: II. Weak Rates for Nuclei in the Mass Range $A = 45$–65 in Supernovae Environments // Nucl. Phys. A. 2000. V. 673. P. 481–508.
19. *Langanke K., Martínez-Pinedo G.* The Role of Giant Resonances in Nuclear Astrophysics: An Overview // Eur. Phys. J. A. 2019. V. 55. P. 226.

20. *Dzhioev A. A. et al.* Gamow–Teller Strength Distributions at Finite Temperatures and Electron Capture in Stellar Environments // Phys. Rev. C. 2010. V. 81. P. 015804.
21. *Dzhioev A. A. et al.* Inelastic Neutrino Scattering off Hot Nuclei in Supernova Environments // Phys. Rev. C. 2014. V. 89. P. 035805.
22. *Dzhioev A. A. et al.* Thermal Quasiparticle Random-Phase Approximation with Skyrme Interactions and Supernova Neutral-Current Neutrino–Nucleus Reactions // Phys. Rev. C. 2016. V. 94. P. 015805.
23. *Dzhioev A. A., Vdovin A. I., Stoyanov Ch.* Thermal Quasiparticle Random-Phase Approximation Calculations of Stellar Electron Capture Rates with the Skyrme Effective Interaction // Phys. Rev. C. 2019. V. 100. P. 025801.
24. *Paar N. et al.* Calculation of Stellar Electron-Capture Cross Sections on Nuclei Based on Microscopic Skyrme Functionals // Phys. Rev. C. 2009. V. 80. P. 055801.
25. *Niu Y. F. et al.* Stellar Electron-Capture Rates Calculated with the Finite-Temperature Relativistic Random-Phase Approximation // Phys. Rev. C. 2011. V. 83. P. 45807.
26. *Fantina A. F. et at.* Stellar Electron-Capture Rates on Nuclei Based on a Microscopic Skyrme Functional // Phys. Rev. C. 2012. V. 86. P. 035805.
27. *Dzhioev A. A., Vdovin A. I., Stoyanov Ch.* The Skyrme-TQRPA Calculations of Electron Capture on Hot Nuclei in Pre-Supernova Environment // Phys. At. Nucl. 2016. V. 79, No. 6. P. 1019–1029.
28. *Воронов В. В., Соловьёв В. Г.* Квазичастично-фононная модель ядра. IV. Фрагментация однофононных и двухквазичастичных состояний в сферических ядрах // ЭЧАЯ. 1983. Т. 14, вып. 6. С. 1380–1442.
29. *Schmutz M.* Real-Time Green's Functions in Many Body Problems // Z. Phys. B. 1978. V. 30. P. 97–106.
30. *Dzhioev A. A., Kosov D. S.* Nonequilibrium Perturbation Theory in Liouville–Fock Space for Inelastic Electron Transport // J. Phys.: Condens. Matter. 2012. V. 24. P. 225304.
31. *Dzhioev A. A., Kosov D. S.* Nonequilibrium Configuration Interaction Method for Transport in Correlated Quantum Systems // J. Phys. A: Math. Theor. 2014. V. 47. P. 095002.
32. *Ojima I.* Gauge Fields at Finite Temperatures — «Thermo Field Dynamics» and the KMS Condition and Their Extension to Gauge Theories // Ann. Phys. 1981. V. 137. P. 1–32.
33. *Rowe D. J.* Nuclear Collective Motion: Models and Theory. World Sci., 2010.
34. *Suhonen J.* From Nucleons to Nucleus. Berlin: Springer, 2007.
35. *Brack M., Quentin P.* Selfconsistent Calculations of Highly Excited Nuclei // Phys. Lett. B. 1974. V. 52. P. 159–162.
36. *Bonche P., Levit S., Vautherin D.* Properties of Highly Excited Nuclei // Nucl. Phys. A. 1984. V. 427. P. 278–296.
37. *Goodman A. L.* Finite-Temperature HFB Theory // Nucl. Phys. A. 1981. V. 352. P. 30–44.
38. *Civitarese O., Dussel G. G., Perazzo R. P. J.* Thermal Aspects of the Pairing Correlations in Finite Nuclei // Nucl. Phys. A. 1983. V. 404. P. 15–28.
39. *Civitarese O., DePaoli A. L.* Thermo Field Dynamics in the Treatment of the Nuclear Pairing Problem at Finite Temperature // Z. Phys. A. 1992. V. 344. P. 243–249.
40. *Dussel G. G. et al.* Temperature Dependent Resonant Random Phase Approximation // Phys. Rev. C. 1992. V. 46. P. 558–564.

Получено 4 июня 2021 г.