Министерство образования и науки Российской Федерации

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования Московский физико-технический институт (государственный университет)

Магистерская диссертация

Об особенностях термализации в модели Амбегаокара-Экерна-Шона.

Студент 928 гр. Старков Григорий Андреевич

Научный руководитель: к.ф.-м.н., Семенов Андрей Георгиевич

Москва 2015

Содержание

1	Вве	дение	1
2	Гамильтониан AES и его связь с Гамильтонианом SET		4
3	Температурная техника		6
	3.1	Постановка задачи	6
	3.2	Вывод диаграммной техники	7
	3.3	Корреляционная функция бани	8
	3.4	Поправка первого порядка	10
	3.5	Предел $T \to +0$	12
4	Диаграммная техника для неравновесного стационарного		
	COC	гояния системы	13
	4.1	Построение диаграммной техники	13
	4.2	Корреляционная функция бани	15
	4.3	Уравнение Дайсона в частотном представлении	16
5	Вычисление поправок в неравновесной технике		18
	5.1	Собственная энергетическая часть в первом порядке	18
	5.2	Классификация диаграмм второго порядка	20
	5.3	Вычисление свёртки $\sum_{n'} P_{n'}^{(0)} \Sigma_{n',n}^{(2)}$	23
	5.4	Поправка первого порядка	27
6	Сра	авнение результатов	29
7	Зак	лючение	31

1 Введение

Одним из интереснейших явлений в современной физике является так называемый эффект Кулоновской блокады, который заключается в подавлении транспорта в нано-устройствах, содержащих туннельные контакты, при низких температурах, а также является ярким проявлением квантованием заряда. В режиме блокады транспорт осуществляется туннелированием единичных электронов, что важно с практической точки зрения, так как позволяет контролировать транспорт с беспрецедентной точностью. Одним из простейших примеров подобных устройств является Одноэлектронный Транзистор: изолированный проводящий остров, соединённый туннельным образом с двумя массивными электродами. Также можно рассмотреть остров, соединённый с произвольным числом электродов. Однако, если пренебречь когерентным туннелированием, то тогда контакты друг с другом не взаимодействуют, поэтому их число не принципиально, при этом для того, чтобы организовать транспорт в этой системе, нужно, как минимум, два контакта [1]. Такая система на практике реализуется в полупроводниковых гетероструктурах. В двумерном электронном газе легко создаются изолированные проводящие области нужной структуры с помощью контролирующих электродов.

Эффект Блокады обусловлен сильным Кулоновским взаимодействием электронов островка, в следствие чего изменение числа электронов на нём сопряжено с большими затратами энергии (обозначим соответсвующий энергетический масштаб за E_C). Таким образом, при $T \ll E_C$ туннелирование экспоненциально подавлено, что и приводит к блокаде.

Хорошо известно, что при не слишком низких температурах одноэлектронная система допускает описание в терминах коллективной переменной, соответствующей флуктуирующему потенциалу острова, причём эта переменная оказывается определена с точностью до $2\pi n$, где $n \in \mathbb{Z}$. Таким образом её можно рассматривать как угловую координату некой точечной частицы на кольце в присутствии диссипативного окружение, которое порождает эффективное нелокальное взаимодействие частицы с собой. Замечателен тот факт, что можно явно выписать форму окружения, приводящую к необходимому виду самодействия [5]. Таким образом получается модель, в которой уже упомянутая частица взаимодействует с бозонным окружением, которое также живёт на кольце. В дальнейшем я буду называть её моделью Амбегаокара-Экерна-Шона (сокращенно модель AES), так как интегрирование по бозонным переменным в функиональном интеграле для статистической суммы даёт соответствующее эффективное действие, известное в литературе под тем же именем [2, 3, 4].

Модель AES представляет большой интерес для изучения в связи с тем, что её можно связать сразу с несколькими направлениями исследования. Во-первых, как уже упомяналось, она является приближением при описании одноэлектронного транзистора. Во-вторых, подобная структура теории типична для физики незатухающих токов в мезоскопических кольцах [6, 7, 8]. Важной чертой этой модели является тот факт, что система как целая обладает симметрией относительно вращений вокруг оси кольца, поэтому полный момент частицы и бани есть сохраняющаяся величина. Можно показать, что этот полный момент соответствует квантующейся наблюдаемой, введённой Пруйскеным и Бурмистровым в своих работах [17, 18, 5].

Модель AES будет нас интересовать в контексте проблемы термализации. Как известно, наличие сохраняющихся квантовых величин серьезно меняет картину этого процесса: установление равновесия происходит независимо в подпространствах, соответствующих разным значениям сохраняющейся величины. Таким образом, если рассмотреть процесс, в котором частицу "подсоединяют" к бане, вполне возможно, что система будет эволюционировать к состоянию, отличному от Гиббсовского.

Стоит отметить, что зачастую при рассмотрении подсистемы с малым числом степеней свободы контакт с достаточно большим термостатом приводит к тому, что подсистема настолько отдаляется от исходного положения равновесия, что при расчёте поправок в рамках температурной техники появляются секулярные расходимости. В этом смысле рассмотрение в качестве подсистемы частицы на кольце имеет определенные удобства, связанные с тем, что при правильном подборе параметров (достаточно малые размеры кольца и малая температура) релаксация момента импульса частицы будет подавлена в связи с малостью величины T/E_K , где $E_K = \hbar^2/(2mR^2)$ — характерная кинетическая энергия частицы. За счёт этого даже подключение термостата не даёт системе забыть свои равновесные характеристики. Нас будет интересовать тот режим, в котором модель соответствует одноэлектронному транзистору. При этом $E_K = E_C$ и $T/E_C \ll 1$. Также не стоит забывать, что сохранение полного момента также характерно для рассмотрения токов в мезоскопических кольцах, однако в нашем случае структура бани и взаимодействия с нею выглядит намного проще. С учётом всего вышесказанного можно заключить, что модель AES является отличной "игрушечной" моделью для исследования нарушения термализации.

На практике вместо того, чтобы непосредственно сравнивать состояния системы, куда более осмыслено сравнивать характеристики системы, измеренные в разных состояниях. Типичной величиной для модели AES является момент частицы. В контексте одноэлектронного транзистора это есть число избыточных электронов на острове, а при изучении мезоскопических колец эта величина даёт незатухающий ток.

Работа устроена следующим образом. В разделе 2 я ввожу Гамильтониан модели AES и обсуждаю его связь с исходной моделью одноэлектронного транзистора. В разделе 3 я рассчитываю поправку первого порядка к моменту частицы в рамках температурной техники. В разделе 4 приводится построение диаграммной техники типа техники Шоллера-Шона [13, 14, 15] для исследования неравновесных процессов, а также формулируется в рамках данной техники уравнение на стационарное состояние. В разделе 5 оно решается с точностью до первого порядка включительно; в рамках того же приближения рассчитывается поправка первого порядка к моменту частицы. В разделе 6 результаты раздела 3 переписываются таким образом, что их можно непосредственно сравнить с результатами раздела 5. Наконец, анализ результатов и выводы приведены в разделе 7

2 Гамильтониан AES и его связь с Гамильтонианом SET

Гамильтониан одноэлектронного транзистора (SET) имеет следующий вид:

$$\mathcal{H}_{SET} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_c + \sum_{s=l,r} \mathcal{H}_T^{(s)}.$$
 (1)

Первая часть соответстует невзаимодействующим электронам острова и массивных контактов

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{k,s=l,r} \epsilon_k^{(s)} c_k^{(s)\dagger} c_k^{(s)} + \epsilon_\alpha d_\alpha^\dagger d_\alpha.$$
(2)

Индекс s нумерует контакты, левый (l) и правый (r) соответственно. Индекс k нумерует электронные состояния контакта, а индекс α — состояния острова. Энергии $\epsilon_k^{(a)}$ и ϵ_α отсчитываются относительно уровня Ферми.

Второй член учитывает Кулоновское взаимодействие между электронами на острове

$$\mathcal{H}_c = E_c \left(\sum_{\alpha} d_{\alpha}^{\dagger} d_{\alpha} - n_x \right)^2, \qquad (3)$$

где $E_c = e^2/[2(C_l + C_r + C_g)]$ определяет масштаб ёмкостной энергии острова, а $n_x = C_g V_g/e$ есть наведённый на острове заряд в безразмерных единицах.

Последняя часть формулы (1) описывает туннелирование электронов между контактами и островом

$$\mathcal{H}_T^{(s)} = \sum_{k,\alpha} t_{k\alpha}^{(s)} c_k^{(s)\dagger} d_\alpha + \text{h.c.}$$
(4)

При последовательном рассмотрении одноэлектронного транзистора эффектами мезоскопических флуктуаций пренебрегать, строго говоря, нельзя. Однако если считать, что энергия Таулеса E_{Th} ($E_{Th} = \hbar/\tau_D$, где τ время транспорта через остров) много больше остальных энергетических масштабов в системе (за исключение энергии Ферми), а также, что в туннельных контактах достаточно много транспортных каналов, то Гамильтониан приобритает универсальный вид, представленный в формуле (1). Первое означает, что с точки зрения транспортных процессов остров можно считать нуль-мерной системой. Второе приводит к эффективному усреднению при рассмотрению туннелирования [9].

Рассмотрим статистическую сумму этой системы, выраженную в виде функционального интеграла. Член в действии, соответствующий Кулоновской энергии оказывается четвёртого порядка по фермионным переменным. Его можно расцепить по Хаббарду-Стратоновичу ценой введения дополнительного поля $V(\tau)$, которое легко интерпретировать как флуктуирующий потенциал острова. После этого можно произвести интегрирование по фермионным переменным, после чего получится функциональный интеграл с эффективным действием [2, 3], выраженным в терминах поля $\varphi(\tau) = \int_0^{\tau} V(\tau) d\tau$. При условии, что $T \gg \delta$ (здесь δ — среднее расстояние между уровнями электронов острова вблизи энергии Ферми), интегрирование по фермионам острова приводит к граничному условию $\varphi(\beta) - \varphi(\tau) = 2\pi W, W \in \mathbb{Z}$, что порождает топологию окружности [4]. Это эффективное действие названо в честь Амбегаокара, Экерна и Шона:

$$\mathcal{Z} = \sum_{W} \int_{0}^{2\pi} d\varphi_0 \int_{\varphi(0)=\varphi_0}^{\varphi(\beta)=\varphi_0+2\pi W} \mathcal{D}\varphi(\tau) e^{-S_{AES}[\varphi]},$$
(5)

$$S_{AES} = -in_x \int_0^\beta d\tau \dot{\varphi} + \frac{1}{4E_C} \int_0^\beta d\tau \dot{\varphi}^2(\tau) + \frac{g}{4} \iint_0^\beta d\tau d\tau' \alpha_{CL}(\tau - \tau') e^{i\varphi(\tau) - i\varphi(\tau')},$$
(6)

$$\alpha_{CL}(\tau) = \frac{T}{\pi} \sum_{m} F[\omega_m] e^{-i\omega_m \tau}, \quad F[\omega_m] = |\omega_m|, \quad \omega_m = 2\pi m T.$$
(7)

Константа взаимодействия $g = g_l + g_r$, где g_s — это безразмерный кондактанс s-ого контакта соответственно.

Как уже упомяналось, нелокальный член можно расцепить обратно, но теперь в терминах других полей [5]. В ходе данной операции получается

модель, которой можно сопоставить следующий Гамильтониан:

$$\mathcal{H}_{AES} = E_0(\hat{n} - n_x)^2 + \sum_k \varepsilon_k (a_k^{\dagger} a_k + b_k^{\dagger} b_k) + \sqrt{g} e^{-i\hat{\theta}} \sum_k (a_k^{\dagger} + b_k), \quad (8)$$

здесь a и b — бозонные операторы, \hat{n} — число электронов на острове (он же момент частицы на кольце), $\hat{\theta}$ —флуктуирующий потенциал острова (оно же угловая координата частицы на кольце). В дальнейшем мы будем придерживаться интерпретации этого Гамильтониана в терминах частицы на кольце, взаимодействующей с бозонным окружением.

Последние два оператора действуют в отдельном пространстве и коммутируют с бозонными операторами. Операторы \hat{n} и $\hat{\theta}$ подчиняются следующим коммутационным соотношениям:

$$[\hat{n}, e^{\pm i\hat{\theta}}] = [-i\partial/\partial\hat{\theta}, e^{\pm i\hat{\theta}}] = \pm e^{i\hat{\theta}}.$$
(9)

Для удобства сделаем переобозначение $\Lambda^{\pm} = e^{\pm i\hat{\theta}}$ и, воспользуясь им, перепишем Гамильтониан и коммутационные соотношения:

$$\Lambda^{-}\hat{n}\Lambda^{+} = \hat{n} + 1, \quad \Lambda^{+}\hat{n}\Lambda^{-} = \hat{n} - 1.$$
(10)

$$\mathcal{H}_{AES} = \mathcal{H}_n + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_T = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_T.$$
(11)

$$\mathcal{H}_T = \sqrt{g} \sum_k (\Lambda^+ S_k^- + \Lambda^- S_k^+). \tag{12}$$

Как видим, операторы Λ^{\pm} меняют значение n на ± 1 .

При изучении модели AES мы будем полагать, что бозонное окружение имеет произвольную спектральную плотность. Если при этом записать функциональный интеграл для статистической суммы и выполнить интегрирование по бозонным переменным, то получится интеграл с эффективным действием, идентичным S_{AES} , однако теперь ядро нелокального члена будет иметь другой вид (см. формулу (7)). Соответствующая форма ядра восстанавливается, если рассмотреть баню типа Калдейра-Леггетта.

3 Температурная техника

3.1 Постановка задачи

Величина, которая нас интересует, есть среднее значение момента импульса частицы на кольце. Её можно элегантно выразить, воспользовавшись вариацией статистической суммы по параметру n_x :

$$\langle \hat{n} \rangle = n_x + \frac{1}{2\beta E_0} \frac{\delta \ln Z}{\delta n_x}.$$
 (13)

В реальности мы собираемся ограничится первыми двумя поправками по константе туннелирования g. Для этого можно явно подставить представление $Z = Z_0 + gZ_1 + g^2Z_2 + o(g^2)$ в формулу (13) и разложить логарифм. Как результат, с точностью до второго порядка включительно имеем:

$$\langle \hat{n} \rangle = n_x + \frac{1}{2\beta E_0} \left[\frac{1}{Z_0} \frac{\delta Z_0}{\delta n_x} + \frac{g}{Z_0} \left(\frac{\delta Z_1}{\delta n_x} - \frac{Z_1}{Z_0} \frac{\delta Z_0}{\delta n_x} \right) \right. \\ \left. + \frac{g^2}{Z_0} \left(\frac{\delta Z_2}{\delta n_x} - \frac{Z_1}{Z_0} \frac{\delta Z_1}{\delta n_x} + \left(\frac{Z_1^2}{Z_0^2} - \frac{Z_2}{Z_0} \right) \frac{\delta Z_0}{\delta n_x} \right) + o(g^2) \right].$$
(14)

3.2 Вывод диаграммной техники

Таким образом, всё сводится к вычислению поправок к статистической сумме. Для этого можно воспользоваться техникой Голубева-Заикина [10], выводу которой и посвящен этот раздел. В дальнейшем полную статистическую сумму удобно полагать нормированной на статистическую сумму теплового окружения.

$$Z = \frac{\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta\mathcal{H}}\right]}{\operatorname{Tr}_{B}\left[e^{-\beta\mathcal{H}_{B}}\right]} = \frac{1}{Z_{B}}\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta\mathcal{H}_{0}}\hat{T}e^{-\int_{0}^{\beta}\mathcal{H}(\tau)d\tau}\right] = Z_{0} + \sum_{l=1}^{+\infty}(-1)^{l}\int_{0}^{\beta}d\tau_{l}\int_{0}^{\tau_{l}}d\tau_{l-1}\dots\int_{0}^{\tau_{2}}d\tau_{1}\operatorname{Tr}_{n}\left[\langle e^{-\beta\mathcal{H}_{0}}e^{\tau_{l}\mathcal{H}_{0}}\mathcal{H}_{T}e^{-\tau_{l}\mathcal{H}_{0}}\dots e^{\tau_{1}\mathcal{H}_{0}}\mathcal{H}_{T}e^{-\tau_{1}\mathcal{H}_{0}}\rangle_{B}\right].$$

Здесь усреднение по бане определено как:

$$\langle \hat{X} \rangle_B = \frac{\operatorname{Tr}_B \left[e^{-\beta \mathcal{H}_B} \hat{X} \right]}{\operatorname{Tr}_B \left[e^{-\beta \mathcal{H}_B} \right]}.$$
 (15)

При взятии следа выживают только чётные члены разложения:

$$Z = Z_0 + \sum_{l=1}^{+\infty} g^l \int_0^\beta d\tau_{2l} \int_0^{\tau_{2l}} d\tau_{2l-1} \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \sum_{\{\sigma_i = \pm\}}^{\sum \sigma_i = 0} \sum_{n} \langle n | e^{-(\beta - \tau_{2l})\mathcal{H}_n} \Lambda^{\sigma_{2l}} e^{-(\tau_{2l} - \tau_{2l-1})\mathcal{H}_n} \dots \Lambda^{\sigma_1} e^{-\tau_1 \mathcal{H}_n} | n \rangle \cdot \langle \sum_{k_{2l}} S_{k_{2l}}^{\bar{\sigma}_{2l}}(\tau_{2l}) \dots \sum_{k_1} S_{k_1}^{\bar{\sigma}_1}(\tau_1) \rangle_B, \quad (16)$$

где $\bar{\sigma} = -\sigma$.

Чтобы выполнить это усреднение в формуле (16), можно воспользоваться теоремой Вика. При этом парный коррелятор имеет вид:

$$G(\tau - \tau') = -\langle \sum_{k} S_{k}^{\sigma}(\tau) \sum_{k'} S_{k'}^{\bar{\sigma}}(\tau') \rangle_{B} = \frac{1}{4} \alpha(\tau - \tau'), \qquad (17)$$

Слагаемым в формуле (16) легко сопоставить диаграммы следующей структуры. Слагаемому, соответствующему усреднению по состоянию $|n\rangle$, сопоставляется лестница, начинающаяся и заканчивающаяся на уровне n. Вершины Λ^{\pm} сопоставляются переходам на ступеньку выше или ниже. Корреляторы $G(\tau - \tau')$ сопоставляются волнистым линиям, соединяющим все точки перехода попарно между собой (что важно, волнистая линия всегда соединяет точки, в которых переход производится в противоположных направлениях). Общий множитель перед диаграммой k-ого порядка равен $(-g)^k$.

Каждой ступеньке приписывается множитель $e^{-\tau E_m}$, где m — уровень ступеньки, $E_m = E_0(m - n_x)^2 = \langle m | \mathcal{H}_n | m \rangle$, τ — длина ступеньки, то есть разница времён, соответствующих её началу и концу. Остаётся выполнить интегрирование по промежуточным временам (соответствующим точкам перехода), сохраняя их упорядоченность.

3.3 Корреляционная функция бани

$$\alpha(\tau) = -4\sum_{k} \langle \mathcal{T}(a_k(\tau) + b_k^{\dagger}(\tau))(a_k^{\dagger}(0) + b_k(0)) \rangle = 4\sum_{k} [G_k(\tau) + G_k(-\tau)]$$
$$= 4T\sum_{m} e^{-i\omega_m \tau} \sum_{k} [G_k(\omega_m) + G_k(-\omega_m)] = -8T\sum_{m} \frac{\varepsilon_k}{\omega_m^2 + \varepsilon_k^2}.$$
 (18)



Рис. 1: Диаграммы первого порядка

где $\omega_m = 2\pi Tm$ — бозонные частоты. Заметим, что в предыдущих формулах символ \mathcal{T} -упорядочения нигде не фигурировал. Его использование ничего не меняет в силу очевидной чётности функции $\alpha(\tau)$. Таким образом:

$$\alpha(\tau) = \frac{T}{\pi} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} F[\omega_m] e^{-i\omega_m \tau},$$

где

$$F[\omega_m] = -8\pi \sum_k \frac{\varepsilon_k}{\omega_m^2 + \varepsilon_k^2} = -8\pi \int_0^{+\infty} \frac{dz}{2\pi \omega_m^2 + z^2} = -2\int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{z\tilde{J}(z)}{\omega_m^2 + z^2}.$$
 (19)

Здесь $J(z) = 2\pi \sum_k \delta(z - \varepsilon_k)$ есть спектральная функция бани, $\tilde{J}(z)$ — она же, продолженная нечётным образом на всю вещественную ось. Заметим, что $F[\omega_m] = F[-\omega_m]$ независимо от выбора J(z).

Если рассмотреть баню, у которой спектральная плотность недостаточно быстро спадает на бесконечности, то интеграл в формуле (19) расходится. Чтобы получить физически разумный результат, необходимо сдвинуть все $F[\omega_m]$ на бесконечную константу, регуляризующую расходимость, что соответствует перенормировке свободной энергии:

$$F[\omega_m] = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left[C(z) - 2 \frac{z \tilde{J}(z)}{\omega_m^2 + z^2} \right].$$
(20)

Выбор регуляризующей функции C(z) зависит от поведения $\tilde{J}(z)$ на бесконечности. Например, для бани типа Калдейра-Леггетта $\tilde{J}(z) = z/(2\pi)$ и $C(z) = 1/(2\pi)$.

3.4 Поправка первого порядка

Соответствующие диаграммы приведены на рисунке 1. Прежде чем приступить к вычислению, удобно ввести обозначение для разности энергий на двух соседних уровнях:

$$\delta E_n^+ = E_{n+1} - E_n = [1 + 2(n - n_x)]E_0, \qquad (21)$$

$$\delta E_n^- = E_{n-1} - E_n = [1 - 2(n - n_x)]E_0.$$
(22)

Подобное обозначение, безусловно, избыточно, однако оно более предпочтительно, так как привязывает разности энергий к одному уровню n. Из самого определения δE_n^{σ} следует очевидное, но весьма полезное свойство:

$$\delta E_{n-1}^{+} = -\delta E_{n}^{-}, \quad \delta E_{n+1}^{-} = -E_{n}^{+}.$$
(23)

Формула для поправки к статистической сумме первого порядка имеет следующий вид:

$$Z_1 = -\frac{1}{4} \sum_n e^{-\beta E_n} \int_0^\beta d\tau (\beta - \tau) \alpha(\tau) \sum_{\sigma=\pm} e^{-\delta E_n^\sigma \tau}.$$
 (24)

Стоит отметить, что в общем случае Z_1 зависит от выбора C(z) (см. формулу (20)), однако впоследствии мы увидим, что в конечный ответ для физической наблюдаемой регуляризация не входит.

Здесь τ — это длина импульса. Префактор ($\beta - \tau$) показывает, как мы можем двигать импульс длины τ по отрезку от 0 до β . Фактически, вместо интегрирования по началу и концу ступеньки мы перешли к интегрированию по её длине и положению на отрезке.

Воспользовавшись свойством $\alpha(\tau) = \alpha(\beta - \tau)$, делаем замену $\tau \to (\beta - \tau)$:

$$Z_{1} = -\frac{1}{4} \sum_{n} \int_{0}^{\beta} d\tau \cdot \tau \alpha(\tau) [e^{-\beta E_{n+1}} e^{\delta E_{n}^{+}\tau} + e^{-\beta E_{n-1}} e^{\delta E_{n}^{-}\tau}].$$
(25)

Сдвигая переменную суммирования в каждом слагаемом по отдельности и использя свойства (23), мы получаем:

$$Z_1 = -\frac{1}{4} \sum_n e^{-\beta E_n} \int_0^\beta d\tau \cdot \tau \alpha(\tau) \sum_{\sigma=\pm} e^{-\delta E_n^{\sigma} \tau}.$$
 (26)

Наконец, взяв полусумму формул (24) и (26), мы можем избавиться от τ в префакторе. В итоге получаем:

$$Z_{1} = -\frac{1}{8\pi} \sum_{n} e^{-\beta E_{n}} \int_{0}^{\beta} d\tau \sum_{m} F[\omega_{m}] \sum_{\sigma=\pm} e^{-(\delta E_{n}^{\sigma} + i\omega_{m})\tau} =$$
$$= -\frac{1}{8\pi} \sum_{n} e^{-\beta E_{n}} \sum_{m} \sum_{\sigma=\pm} F[\omega_{m}] \frac{1 - e^{-\beta(\delta E_{n}^{\sigma} + i\omega_{m})}}{\delta E_{n}^{\sigma} + i\omega_{m}}.$$
 (27)

Снова применяя фокус со сдвигом переменной суммирования для второго слагаемого в скобках, получаем:

$$Z_1 = -\frac{1}{4\pi} \sum_n e^{-\beta E_n} \sum_m \sum_{\sigma=\pm} F[\omega_m] \frac{\delta E_n^{\sigma}}{(\delta E_n^{\sigma})^2 + \omega_m^2}.$$
 (28)

В этом месте всплывает проблема с расходимостью ряда по бозонным частотам, связанная с поведением $F[\omega_m]$ на бесконечности. Например, для бани типа Калдейра-Леггетта $F[\omega_m] = |\omega_m|$ и расходимость носит логарифмический характер. Для того, чтобы получить физически осмысленные результаты необходимо ввести обрезание на больших частотах. Однако более удобным является введение контр-члена, который бы сократил бесконечность:

$$Z_{1} = -\frac{1}{4\pi} \sum_{n} e^{-\beta E_{n}} \sum_{m} F[\omega_{m}] \left[\sum_{\sigma=\pm} \frac{\delta E_{n}^{\sigma}}{(\delta E_{n}^{\sigma})^{2} + \omega_{m}^{2}} - \frac{2E_{0}}{E_{0}^{2} + \omega_{m}^{2}} \right].$$
(29)

Со структурной точки зрения эту формулу можно представить в виде:

$$Z_{1} = \sum_{n} \gamma_{n} (A_{n}^{(M)} - C^{(M)}), \quad \gamma_{n} = e^{-\beta E_{n}},$$

$$A_{n}^{(M)} = -\frac{1}{4\pi} \sum_{m} F[\omega_{m}] \sum_{\sigma=\pm} \frac{\omega_{m} \delta E_{n}^{\sigma}}{(\delta E_{n}^{\sigma})^{2} + \omega_{m}^{2}}, \quad C^{(M)} = \frac{1}{4\pi} \sum_{m} F[\omega_{m}] \frac{2\omega_{m} E_{0}}{E_{0}^{2} + \omega_{m}^{2}}.$$
(30)

Чтобы получить явное выражение для поправки первого порядка $\langle \hat{n} \rangle^{(1)} = n^{(1)}$, необходимо подставить (29) в формулу (14). В результате получается:

$$n^{(1)} = \frac{gT}{2E_0Z_0} \sum_{n} \left[\left(\frac{\delta\gamma_n}{\delta n_x} - \frac{\sum_{m} \delta\gamma_m / \delta n_x}{\sum_{m} \gamma_m} \cdot \gamma_n \right) \cdot (A_n^{(M)} - C^{(M)}) + \gamma_n \frac{\delta(A_n^{(M)} - C^{(M)})}{\delta n_x} \right]$$

Наконец, можно воспользоваться тем, что $\delta \gamma_n / \delta n_x = \beta (n - n_x) \gamma_n$:

$$n^{(1)} = \frac{g}{2E_0 Z_0} \sum_{n} \gamma_n (n - n^{(0)}) (A_n^{(M)} - C^{(M)}) + \frac{gT}{2E_0 Z_0} \sum_{n} \gamma_n \frac{\delta(A_n^{(M)} - C^{(M)})}{\delta n_x},$$
$$n^{(0)} = \frac{\sum_{n} n\gamma_n}{\sum_{n} n\gamma_n}.$$
(31)

При вычислении в рамках температурной техники необходимость проводить регуляризацию возникает целых два раза. Покажем, что (31) от неё не зависит. Иной выбор $C(\omega)$ в формуле (20) приводит к сдвигу всех $F[\omega_m]$ на фиксированную конечную константу. При этом $\Delta \alpha(\tau) \sim \sum_n \delta(\tau - \beta n)$. Подставляя это в (24), находим, что $\Delta Z_1 \sim const \cdot Z_0$, т.е. $\Delta(A_n - C^{(M)}) \equiv const$. То же самое получается, если сдвинуть $C^{(M)}$. Наконец, подстановка в (31) даёт тождественный ноль, так как член с варьированием исчезает, а $\sum_n \gamma_n (n - n^{(0)}) = 0$.

3.5 Предел $T \to +0$

В качестве проверки имеет смысл рассмотреть предел нулевой температуры для бани Калдейра-Леггетта. Мы должны получить известный результат для среднего числа электронов на острове для SET.

Без ограничения общности, зафиксируем n_x в пределах $-1/2 < n_x < 1/2$. При $T \to +0$ сумма по n вырождается в одно слагаемое с n = 0. Формула (31) переходит в

$$n^{(1)} = \frac{gT}{2E_0} \cdot \frac{\delta(A_0 - C)}{\delta n_x}.$$
(32)

$$\frac{gT}{2E_0}(A_0 - C) = \\
= \frac{gT}{4\pi E_0} \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{2E_0\omega_m}{E_0^2 + \omega_m^2} - \frac{E_0(1 - 2n_x)\omega_m}{E_0^2(1 - 2n_x)^2} - \frac{E_0(1 + 2n_x)\omega_m}{E_0^2(1 + 2n_x)^2} \right] \xrightarrow[T \to +0]{} \\
\xrightarrow[T \to +0]{} \frac{g}{16\pi^2} \int_0^{\infty} \left[\frac{2dy}{1 + y} - \frac{(1 - 2n_x)dy}{(1 - 2n_x)^2 + y} - \frac{(1 + 2n_x)dy}{(1 + 2n_x)^2 + y} \right] = \\
= \frac{g}{8\pi^2} \left[(1 - 2n_x) \ln (1 - 2n_x) + (1 + 2n_x) \ln (1 + 2n_x) \right]. \quad (33)$$

$$n^{(1)} = -\frac{g}{4\pi^2} \ln \frac{1 - 2n_x}{1 + 2n_x},\tag{34}$$

что повторяет известный результат.

4 Диаграммная техника для неравновесного стационарного состояния системы

4.1 Построение диаграммной техники

При выводе техники мы используем идеи, разработанные Шоллером и Шоном в ряде своих работ [13, 14, 15]. Мы рассматриваем тот же самый Гамильтониан AES:

$$\mathcal{H} = E_0(\hat{n} - n_x)^2 + \sum_k \varepsilon_k (a_k^{\dagger} a_k + b_k^{\dagger} b_k) + \sqrt{g} e^{i\hat{\theta}} \sum_k (a_k + b_k^{\dagger}) + \sqrt{g} e^{-i\hat{\theta}} \sum_k (a_k^{\dagger} + b_k), \quad (35)$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_n + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_T = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_T.$$
(36)

$$\mathcal{H}_T = \sqrt{g} \sum_k (\Lambda^+ S_k^- + \Lambda^- S_k^+). \tag{37}$$

$$\Lambda^{-}\hat{n}\Lambda^{+} = \hat{n} + 1, \quad \Lambda^{+}\hat{n}\Lambda^{-} = \hat{n} - 1.$$
(38)

Эволюция стартует с состояния системы с факторизованной матрицей плотности:

$$\hat{\rho}^{i} = \hat{\rho}_{n}^{i} \otimes \hat{\rho}_{B}^{i}, \quad \hat{\rho}_{B}^{i} = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}_{B}}}{\operatorname{Tr}_{B} \left[e^{-\beta \mathcal{H}_{B}} \right]}, \quad \hat{\rho}_{n}^{i} = \sum_{n} P_{0}(n) |n\rangle \langle n|.$$
(39)

Здесь $\hat{\rho}_B^i$ — равновесная матрица плотности для бани, а $\hat{\rho}^i = \hat{\rho}_n^i$ — матрица плотности, задающая для частицы начальное распределение по состояниям с различными моментами, при этом нам важно, что она имеет диагональный вид. В ходе эволюции матрица плотности принимает вид:

$$\hat{\rho}^f = e^{-i(t_f - t_i)\mathcal{H}} \hat{\rho}^i e^{+i(t_f - t_i)\mathcal{H}} = e^{-i(t_f - t_i)\mathcal{H}_0} \hat{U}(t_f, t_i) \hat{\rho}_i \hat{U}^{\dagger}(t_f, t_i) e^{+i(t_f - t_i)\mathcal{H}_0}.$$
 (40)

Здесь $\hat{U}(t_f, t_i) = e^{i(t_f - t_i)\mathcal{H}_0} e^{-i(t_f - t_i)\mathcal{H}}$ стандартный оператор эволюции в представлении взаимодействия, который допускает следующее разложение:

$$\hat{U}(t_f, t_i) = \mathcal{T}e^{-i\int_{t_i}^{t_f} \mathcal{H}_T(t')dt'} = \sum_{l=0}^{+\infty} (-i)^l \int_{t_i}^{t_f} dt_l \int_{t_i}^{t_l} dt_{l-1} \dots \int_{t_i}^{t_2} dt_1 \mathcal{H}_T(t_l) \mathcal{H}_T(t_{l-1}) \dots \mathcal{H}_T(t_1).$$
(41)

Аналогичное представление существует и для сопряженного оператора:

$$\hat{U}^{\dagger}(t_f, t_i) = \sum_{m=0}^{+\infty} (i)^l \int_{t_i}^{t_f} dt_m \int_{t_i}^{t_m} dt_{m-1} \dots \int_{t_i}^{t_2} dt_1 \mathcal{H}_T(t_1) \dots \mathcal{H}_T(t_{m-1}) \mathcal{H}_T(t_m).$$

Нас интересует только функция распределения подсистемы, соответствующей частице на кольце:

$$\langle n_{1} | \hat{\rho}_{n}^{f} | n_{2} \rangle =$$

$$\sum_{k=0}^{+\infty} g^{k} \sum_{m=0}^{+\infty} (-1)^{k-m} \int_{t_{2k-m}^{+} \geqslant \dots \geqslant t_{1}^{+}} d\Omega_{+}^{(2k-m)} \int_{t_{m}^{-} \geqslant \dots \geqslant t_{1}^{-}} d\Omega_{-}^{(m)} \sum_{n} \sum_{\substack{\{\sigma_{i}^{+} = \pm\}_{i=1}^{2k-m}, \{\sigma_{j}^{-} = \pm\}_{j=1}^{m}}} \sum_{\lambda_{i} \sigma_{i}^{+} + \sum_{j} \sigma_{j}^{-} = 0}$$

$$\langle n_{1} | e^{-i(t_{f} - t_{2k-m}^{+})\mathcal{H}_{n}} \Lambda^{\sigma_{2k-m}^{+}} e^{-i(t_{2k-m}^{+} - t_{2k-m-1}^{+})\mathcal{H}_{n}} \dots \Lambda^{\sigma_{1}^{+}} e^{-i(t_{1} - t_{i})\mathcal{H}_{n}} | n \rangle P_{0}(n)$$

$$\langle n | e^{i(t_{1}^{-} - t_{i})\mathcal{H}_{n}} \Lambda^{\sigma_{1}^{-}} e^{i(t_{2}^{-} - t_{1}^{-})\mathcal{H}_{n}} \dots \Lambda^{\sigma_{m}^{-}} e^{i(t_{f} - t_{m}^{-})\mathcal{H}_{n}} | n_{2} \rangle$$

$$\cdot \langle \sum_{q_{1}^{-}} S_{q_{1}^{-}}^{\overline{\sigma_{1}^{-}}}(t_{1}^{-}) \dots \sum_{q_{m}^{-}} S_{q_{m}^{-}}^{\overline{\sigma_{m}^{-}}}(t_{m}^{-}) \sum_{q_{2k-m}^{+}} S_{q_{2k-m}^{+}}^{\overline{\sigma_{2k-m}^{+}}}(t_{2k-m}^{+}) \dots \sum_{q_{1}^{+}} S_{q_{1}^{+}}^{\overline{\sigma_{1}^{+}}}(t_{1}^{+}) \rangle_{B}.$$

$$(43)$$

Здесь мы учли, что взятие частичного следа по состояниям бани будет давать ненулевой результат только при чётном числе операторов \mathcal{H}_T . Упорядочение промежуточных времён уже забито, поэтому мы можем в усреднение по бане вставить символ упорядочения на Келдышевском контуре и воспользоваться соответствующей теоремой Вика. Стоит также заметить, что, так как число повышающих операторов и число понижающих операторов Λ^- должно быть одинаковым, то $\hat{\rho}_n^f$ тоже оказывается диагональным, как и начальное распределение.

Построение диаграмм напоминает подобную процедуру в технике Голубева-Заикина. Только теперь мы рисуем две горизонтальных линии. Верхняя соответствует прямой ветви контура Келдыша, а нижняя — обратной ветви. Участку между вершинами приписывается фактор $e^{\pm i(t_2-t_1)E_n}$, где $t_2 > t_1$, верхний знак соответствует прямой ветви, а нижний — обратной. В вершинах происходит изменение n на ± 1 , они попарно соединяются волнистыми линиями, соответствующими корреляторам бани, причём соединяться могут только те вершины, в которых изменение n происходит в разных направлениях, если обходить их как на Келдышевском контуре. Общий множитель диаграммы есть $g^k(-1)^{k-m}$, где k — порядок диаграммы (число волнистых линий), а m — число вершин на нижней ветви.

Для последующих вычислений удобно все промежуточные времена упорядочить на обыкновенной временной оси, а произвольную диаграмму разделить на части вертикальными линиями, проходящими, через каждую из вершин. При этом любой структурный элемент определяется между двумя временами, упорядоченными на одной временой оси (причём вершины на концах элемента могут быть расположены как сверху, так снизу).

4.2 Корреляционная функция бани

Во-первых, необходимо упомянуть, что корреляторы бани симметризованы:

$$\langle S_k^+(t)S_k^-(t')\rangle = \langle S_k^-(t)S_k^+(t')\rangle_B.$$

Во-вторых, так как мы фиксируем порядок всех промежуточных времён, то остаётся только два типа корреляционных функций из четырёх: когда \mathcal{T} -упорядочение и \mathcal{T}_c -упорядочение совпадают или когда они противоположны. Если они противоположны:

$$\alpha_{K}^{+}(t-t') = \sum_{k} \langle S_{k}^{-}(t')S_{k}^{+}(t) \rangle = \sum_{k} \left[(n_{k}+1)e^{i\varepsilon_{k}(t-t')} + n_{k}e^{-i\varepsilon_{k}(t-t')} \right] =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{+\infty} dz J(z) \left[\frac{1}{e^{\beta z} - 1} e^{-iz(t-t')} + \frac{e^{\beta z}}{e^{\beta z} - 1} e^{iz(t-t')} \right] =$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{\tilde{J}(z)}{e^{\beta z} - 1} e^{-iz(t-t')} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \cdot \alpha_K(z) e^{-iz(t-t')}, \quad (44)$$

где $t \ge t', J(\omega)$ — спектральная функция бани, а $\tilde{J}(\omega)$ — она же, продолженная нечётным образом на всю вещественную ось.

Аналогичным образом, в случае совпадения упорядочения получаем:

$$\alpha_{K}^{-}(t-t') = \sum_{k} \langle S_{k}^{-}(t)S_{k}^{+}(t') \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \cdot \alpha_{K}(-z)e^{-iz(t-t')}.$$
 (45)

4.3 Уравнение Дайсона в частотном представлении

Нас интересует установившееся распределение в системы, поэтому мы полагаем $t_i \to -\infty$ и $t_f = 0$. Рассмотрим диаграмму, которая 2k вершинами делится на 2k + 1 элемент. Обозначим за x_l разницу энергий нижней и верхней линий элемента, начинающегося с l-ой по порядку вершины, а за ω_l — суммарную частоту, которую несут волнистые линии, присутствующие в данном элементе. Соответственно $\Delta x_l = (x_l - \omega_l) - (x_{l-1} - \omega_{l-1})$. При этом всегда $x_0 = 0, \omega_0 = 0$. Теперь мы можем вычислить интегралы по времени:

$$\int_{-\infty}^{0} dt_{2k} \int_{-\infty}^{t_{2k-1}} dt_{2k-1} \dots \int_{-\infty}^{t_{2}} dt_{1} e^{-i(\Delta x_{1}+i\eta)t_{1}} e^{-i\Delta x_{2}t_{2}} \dots e^{-i\Delta x_{2k}t_{2k}}$$

$$= \int_{-\infty}^{0} dt_{2k} \int_{-\infty}^{t_{2k-1}} dt_{2k-1} \dots \int_{-\infty}^{t_{3}} dt_{2} \frac{-i}{-\Delta x_{1}-i\eta} e^{-i(\Delta x_{1}+\Delta x_{2}+i\eta)t_{2}} \dots e^{-i\Delta x_{2k}t_{2k}}$$

$$= (-i)^{2k} \frac{1}{-\Delta x_{1}-i\eta} \cdot \frac{1}{-\Delta x_{1}-\Delta x_{2}-i\eta} \cdot \dots \cdot \frac{1}{-\sum_{l=1}^{2k} \Delta x_{l}-i\eta}$$

$$= (-1)^{k} \frac{1}{\omega_{1}-x_{1}-i\eta} \cdot \frac{1}{\omega_{2}-x_{2}-i\eta} \cdot \dots \cdot \frac{1}{\omega_{2k}-x_{2k}-i\eta}, \quad (46)$$

Здесь $\eta \to +0$ добавлено для сходимости и соответствует адиабатическому включению возмущения. Общий знак перед диаграммой $(-1)^k \cdot (-1)^{k-m} = (-1)^m$ в частотном представлении зависит только от числа вершин на нижней ветви. Таким образом при работе в частотном представлении мы каждому структурному элементу приписываем "линейный" пропагатор $(-1)^m/(\omega_{\Sigma} - x - i\eta)$ (здесь m — это уже число вершин на нижней ветви для данной структуры). Затем каждой волнистой линии приписывается "бозонный" пропагатор $\alpha_K(\pm \omega)/(2\pi)$. Общий множитель опеределяется числом волнистых линий и равен g^k . Остаётся выполнить интегрирование по частотам.

В качестве неприводимого элемента уместно определить такой элемент, что любая вертикальная линия, разделяющая его, обязана пересечь хотя бы одну волнистую линию. Собственная энергетическая часть $\hat{\Sigma} = \Sigma_{n,n'}$ определяется как сумма всех неприводимых элементов. С помощью собственной энергетической части удобно выразить установившуюся функцию распределения:

$$\bar{P} = \bar{P}_0 \left(\hat{I} + \frac{1}{-i\eta} \hat{\Sigma} + \frac{1}{(-i\eta)^2} \hat{\Sigma}^2 + \dots \right) = \bar{P}_0 \hat{G},$$
$$\bar{P} = \bar{P}_0 \hat{G} = \bar{P}_0 \left(\hat{I} + \frac{1}{-i\eta} \hat{G} \hat{\Sigma} \right) = \bar{P}_0 + \frac{1}{-i\eta} \bar{P} \hat{\Sigma}.$$
(47)

Здесь операторы понимаются как счётномерные бесконечные матрицы, действующие налево.

Остаётся только обе части последнего равенства умножить на $i\eta$ и устремить $\eta \to +0$. В итоге получаем:

$$\bar{P}\hat{\Sigma} = 0. \tag{48}$$

Заметим, что из определений (44) и (45) следует, что $\alpha_K^{\sigma}(\omega) = \alpha_K(\sigma\omega)$. Так как по всем частотам ведётся интегрирование, то вместо того. чтобы рассматривать два типа пропагаторов, удобнее любой волнистой линии приписывать пропагатор $\alpha_K^+(\omega) = \alpha_K(\omega)$, меняя знак переменной интегрирования, если возникает необходимость.



Рис. 2: Пример симметрии диаграмм

5 Вычисление поправок в неравновесной технике

5.1 Собственная энергетическая часть в первом порядке

Порядок диаграммы определяется числом волнистых линий в ней. При построении разложения по константе туннелирования собственная энергетическая часть разделяется на вклады различных порядков.

$$\hat{\Sigma} = g\hat{\Sigma}^{(1)} + g^2\hat{\Sigma}^{(2)} + \dots$$
 (49)

При вычислении диаграмм, дающих вклад в Σ , нужно помнить следующее свойство: отражение диаграммы относительно горизонтальной оси, равноудалённой от верхней и нижней фермионных линий соответствует изменению знака и комплексному сопряжению (любое слагаемое в Σ состоит из нечётного числа структурных элементов, а подобная симметрия изменяет знаки x и ω_{Σ} во всех линейных пропагаторах); для каждой диаграммы найдётся симметричная ей диаграмма того же порядка (см. рис. 2). Поэтому реально достаточно рассмотреть только половину диаграмм, а в соответствующих выражениях оставить только мнимую часть (и умножить её на 2).

Диаграммы первого порядка представлены на рисунках 3 и 4. Диаграммы, изображенные на рисунке 3, дают диагональную часть $\hat{\Sigma}^{(1)}$:

$$\Sigma_{n,n} = 2i \cdot \sum_{\sigma} \frac{1}{2\pi} \operatorname{Im} \left\{ \int d\omega \frac{\alpha_K(\omega)}{\omega - \delta E_n^{\sigma} - i\eta} \right\} = i \sum_{\sigma} \alpha_K(\delta E_n^{\sigma}).$$
(50)



Рис. 3: Диаграммы первого порядка, сохраняющие *n*



Рис. 4: Диаграммы первого порядка, изменяющие n на ± 1

Диаграммы, представленные на рисунке 4, в свою очередь дают внедиагональные элементы:

$$\Sigma_{n-1,n} = -i\alpha_K(\delta E_{n-1}^+), \quad \Sigma_{n+1,n} = -i\alpha_K(\delta E_{n+1}^-).$$
(51)

Отдельные матричные элементы можно собрать в компактную общую формулу:

$$\Sigma_{n',n}^{(1)} = i \cdot \left[\alpha_K(\delta E_{n'}^+) (\delta_{n',n} - \delta_{n',n-1}) + \alpha_K(\delta E_{n'}^-) (\delta_{n',n} - \delta_{n',n+1}) \right].$$
(52)

Зная $\Sigma_{n',n}^{(1)}$, можно решить уравнение Дайсона (формула (48)) в нулевом приближении:

$$\sum_{n'} P_{n'}^{(0)} \Sigma_{n',n}^{(1)} \equiv 0, \tag{53}$$

Существование стационарного состояния, к которому система приходит в ходе своей эволюции, подразумевает вырожденность $\Sigma_{n',n}^{(1)}$. При этом в нашем случае это условие действительно выполняется. Из определения $\alpha_K(\omega)$ (см. формулу (44)) выводятся следующие свойства этой функции:

$$\alpha_K(-\omega)e^{-\beta\omega} = \alpha_K(\omega), \tag{54}$$

$$\alpha'_{K}(-\omega)e^{-\beta\omega} = -\alpha'_{K}(\omega) - \beta\alpha_{K}(\omega), \quad \alpha'_{K}(\omega) = \frac{d\alpha_{K}(\omega)}{d\omega}.$$
 (55)

Используя первое свойство, а также соотношения (23), легко показать, что уравнению (53) удовлетворяет равновесное распределение:

$$P_n^{(0)} = \frac{e^{-\beta E_n}}{\sum_m e^{-\beta E_m}}.$$
(56)

Учёт следующего порядка разложения в 48 даёт уравнение для вычисления первой поправки к функции распределения:

$$\sum_{n'} P_{n'}^{(1)} \Sigma_{n',n}^{(1)} = -g \sum_{n'} P_{n'}^{(0)} \Sigma_{n',n}^{(2)}.$$
(57)

Заметим, что к $P_{n'}^{(1)}$ в левой части можно добавить член вида $\zeta \cdot P_{n'}^{(0)}$, который при свёртке с $\Sigma_{n',n}^{(1)}$ уходит из уравнения. Однако никакого произвола в этом нет, так как константа ζ однозначно определяется из условия нормировки суммарной вероятности на единицу. Таким образом, в действительности поправка первого порядка имеет вид:

$$\sum_{n} (P_n^{(1)} + \zeta \cdot P_n^{(0)}) = 0, \quad P_n^{(1)f} = P_n^{(1)} - \frac{\sum_{m} P_m^{(1)}}{\sum_{m} P_m^{(0)}} \cdot P_n^{(0)}.$$
 (58)

5.2 Классификация диаграмм второго порядка

Формула X, которая сопоставляется произвольной диаграмме второго порядка, всегда может быть записана в виде:

$$X = 2\pi i (-1)^m \cdot \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \cdot \tilde{X}.$$
(59)

Четыре вершины в такой диаграмме можно спарить волнистыми линиями двумя принципиально различными способами: соединить первую вершину

с третьей, вторую с четвёртой: одной волнистой линией соединить граничные вершниы, а другой — внутренние. Диаграммы первого типа мы будем называть сцепленными (см. рис. 2), а диаграммы второго — вложенными.

Прежде чем перейти непосредственно к вычислениям, имеет смысл получить упрощённые выражения в общем виде для всех типов диаграмм. Начнём со сцепленных диаграмм. Соответствующая общая формула имеет вид:

$$\tilde{X}^{b} = \frac{1}{\pi} \cdot \operatorname{Im}\left\{ \iint \frac{d\omega_{1}\alpha_{K}^{\sigma}(\omega_{1})}{\omega_{1} - x_{1} - i\eta} \cdot \frac{d\omega_{2}\alpha_{K}^{\sigma'}(\omega_{2})}{\omega_{2} - x_{2} - i\eta} \cdot \frac{1}{\omega_{1} + \omega_{2} - x - i\eta} \right\} = \\ = \frac{1}{\pi} \cdot \operatorname{Im}\left\{ \iint \frac{d\omega_{1}\alpha_{K}(\omega_{1})}{\sigma\omega_{1} - x_{1} - i\eta} \cdot \frac{d\omega_{2}\alpha_{K}(\omega_{2})}{\sigma'\omega_{2} - x_{2} - i\eta} \cdot \frac{1}{\sigma\omega_{1} + \sigma'\omega_{2} - x - i\eta} \right\}.$$
(60)

Здесь x_1 есть разность энергий в первом структурном элементе, x_2 — разность энергий в последнем структурном элементе, а x — в среднем; ω_i есть частота i-ой волнистой линии; множители $\sigma, \sigma' = \pm 1$. При $x \neq x_1 + x_2$ произведение трёх пропагаторов можно "разбить" на парные произведения пропагаторов:

$$\frac{1}{\sigma\omega_{1}-x_{1}-i\eta} \cdot \frac{1}{\sigma'\omega_{2}-x_{2}-i\eta} \cdot \frac{1}{\sigma\omega_{1}+\sigma'\omega_{2}-x-i\eta} = \frac{1}{x-x_{1}-x_{2}} \left[\frac{1}{\sigma\omega_{1}-x_{1}-i\eta} \cdot \frac{1}{\sigma\omega_{1}+\sigma'\omega_{2}-x-i\eta} + \frac{1}{\sigma'\omega_{2}-x_{2}-i\eta} \cdot \frac{1}{\sigma\omega_{1}+\sigma'\omega_{2}-x-i\eta} - \frac{1}{\sigma\omega_{1}-x_{1}-i\eta} \cdot \frac{1}{\sigma'\omega_{2}-x_{2}-i\eta} \right]. \quad (61)$$

Далее остаётся только воспользоваться формулой Сохоцкого и применить операцию взятия мнимой части в формуле (60):

$$\tilde{X}_{neq}^{b} = \alpha_{K}(\sigma x_{1}) \oint \frac{\alpha_{K}(\omega)d\omega}{(\sigma'\omega - x_{2})(\sigma'\omega + x_{1} - x)} + \alpha_{K}(\sigma' x_{2}) \oint \frac{\alpha_{K}(\omega)d\omega}{(\sigma\omega - x_{1})(\sigma\omega + x_{2} - x)} - \oint \frac{\alpha_{K}(\omega)\alpha_{K}(\sigma' x - \sigma\sigma'\omega)d\omega}{(\sigma\omega - x_{1})(\sigma\omega + x_{2} - x)}, \quad (62)$$

где ƒ есть интеграл в смысле главного значения, получающийся естествен-

ным образом при взятии вещественной части:

$$\int \frac{\alpha_K(\omega)d\omega}{\omega - x} = \operatorname{Re}\left\{\int \frac{\alpha_K(\omega)d\omega}{\omega - x \pm i\eta}\right\}.$$
(63)

Если же $x = x_1 + x_2$, то произведение трёх пропагаторов нужно представлять в ином виде:

$$\frac{1}{\sigma\omega_{1} - x_{1} - i\eta} \cdot \frac{1}{\sigma'\omega_{2} - x_{2} - i\eta} \cdot \frac{1}{\sigma\omega_{1} + \sigma'\omega_{2} - x_{1} - x_{2} - i\eta} = \frac{1}{(\sigma\omega_{1} + \sigma'\omega_{2} - x_{1} - x_{2} - i\eta)^{2}} \cdot \left[\frac{1}{\sigma\omega_{1} - x_{1} - i\eta} + \frac{1}{\sigma'\omega_{2} - x_{2} - i\eta}\right], \quad (64)$$

где множитель перед скобками нужно понимать как обобщённую функцию вида

$$\frac{1}{(\sigma\omega - x - i\eta)^2} = -\sigma \frac{\partial}{\partial\omega} \left[\mathcal{P} \frac{1}{\sigma\omega - x} + \pi i \delta(\omega - \sigma x) \right].$$
(65)

Подставляя всё это в формулу (60), находим:

$$\tilde{X}_{eq}^{b} = \sigma' \alpha_{K}(\sigma x_{1}) \oint \frac{\alpha_{K}'(\omega)d\omega}{\sigma'\omega - x_{2}} + \sigma \alpha_{K}(\sigma' x_{2}) \oint \frac{\alpha_{K}'(\omega)d\omega}{\sigma\omega - x_{1}} + \sigma' \oint \frac{\alpha_{K}(\omega)\alpha_{K}'(\sigma' x - \sigma\sigma'\omega)d\omega}{\sigma\omega - x_{1}} + \sigma \oint \frac{\alpha_{K}(\omega)\alpha_{K}'(\sigma x - \sigma\sigma'\omega)d\omega}{\sigma'\omega - x_{2}}.$$
 (66)

Далее, общая формула для вложенных диаграмм имеет вид:

$$\tilde{X}^{i} = \frac{1}{\pi} \cdot \operatorname{Im}\left\{ \iint \frac{1}{\sigma\omega_{1} - x_{1} - i\eta} \cdot \frac{d\omega_{1}\alpha_{K}(\omega_{1})}{\sigma\omega_{1} - x_{2} - i\eta} \cdot \frac{d\omega_{2}\alpha_{K}(\omega_{2})}{\sigma\omega_{1} + \sigma'\omega_{2} - x - i\eta} \right\}.$$
(67)

Соответственно, при $x_1 \neq x_2$ используется следующее разложение

$$\frac{1}{\sigma\omega_1 - x_1 - i\eta} \cdot \frac{1}{\sigma\omega_1 - x_2 - i\eta} \cdot \frac{1}{\sigma\omega_1 + \sigma'\omega_2 - x - i\eta} = \frac{1}{x_1 - x_2} \cdot \frac{1}{\sigma\omega_1 + \sigma'\omega_2 - x - i\eta} \cdot \left[\frac{1}{\sigma\omega_1 - x_1 - i\eta} - \frac{1}{\sigma\omega_1 - x_2 - i\eta}\right], \quad (68)$$

а общая формула (67) принимает вид

$$\tilde{X}_{neq}^{i} = \frac{\alpha_{K}(\sigma x_{1})}{x_{1} - x_{2}} \oint \frac{\alpha_{K}(\omega)d\omega}{\sigma'\omega + x_{!} - x} - \frac{\alpha_{K}(\sigma x_{2})}{x_{1} - x_{2}} \oint \frac{\alpha_{K}(\omega)d\omega}{\sigma'\omega + x_{2} - x} + \int \frac{\alpha_{K}(\omega)\alpha_{K}(\sigma'x - \sigma\sigma'\omega)d\omega}{(\sigma\omega - x_{1})(\sigma\omega - x_{2})}.$$
 (69)

В противном случае, если $x_1 = x_2$, нужно задействовать определение (65), и тогда формула (67) даёт

$$\tilde{X}_{eq}^{i} = \sigma \alpha_{K}^{\prime}(\sigma x_{1}) \oint \frac{\alpha_{K}(\omega)d\omega}{\sigma^{\prime}\omega + x_{1} - x} - \sigma^{\prime}\alpha_{K}(\sigma x_{1}) \oint \frac{\alpha_{K}^{\prime}(\omega)}{\sigma^{\prime}\omega + x_{1} - x} - \sigma \int \frac{\alpha_{K}(\omega)\alpha_{K}^{\prime}(\sigma x - \sigma\sigma^{\prime}\omega)d\omega}{\sigma^{\prime}\omega + x_{1} - x} - \sigma^{\prime} \int \frac{\alpha_{K}(\omega)\alpha_{K}^{\prime}(\sigma^{\prime}x - \sigma\sigma^{\prime}\omega)d\omega}{\sigma\omega - x_{1}}.$$
 (70)

В заключение этого пункта добавим одно немаловажное замечание: если мы, например, рассмотрим баню Калдейра-Леггетта, то с удивлением обнаружим, что все указанные интегралы расходятся. В реальности нужно вводить обрезание $J(\omega)$ на бесконечности, причём выведение упрощённых формул, указанных в данном пункте, само по себе подразумевает наличие обрезания. К обсуждению правильной регуляризации мы ещё вернёмся после того, как получим некоторые результаты.

5.3 Вычисление свёртки $\sum_{n'} P_{n'}^{(0)} \Sigma_{n',n}^{(2)}$

В силу некторых причин (а именно чудесного сокращени множества слагаемых), которые станут ясны по ходу изложения, удобнее сразу вычислять свёртку с функцией распределения в нулевом приближении, нежели собственную энергетическую часть отдельно.

 $\hat{\Sigma}^{(n)}$ порядка *n* является 2n + 1-диагональной матрицей. Так, если мы зафиксируем второй индекс матрицы $\hat{\Sigma}^{(2)}$, то единственные члены, отличные от нуля, будут $\Sigma_{n,n}^{(2)}$, $\Sigma_{n+\sigma,n}^{(2)}$ и $\Sigma_{n+\sigma,n}^{(2)}$, где $\sigma = \pm 1$. Все диаграммы, дающие вклад в одну фиксированную компоненту $\Sigma_{n',n}^{(2)}$, имеют один и тот же общий префактор и знак. Поэтому осмысленным является введение приведённой собственной энергетической части $\tilde{\Sigma}_{n',n}^{(2)}$:

$$\Sigma_{n',n}^{(2)} = 2\pi i (-1)^m \cdot \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \cdot \tilde{\Sigma}_{n',n}^{(2)}.$$
(71)

Задействуя новое обозначение, переписываем формулу свёртки

$$\sum_{n'} P_{n'}^{(0)} \Sigma_{n',n}^{(2)} = \frac{2\pi i e^{-\beta E_n}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \cdot \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \cdot \left[\tilde{\Sigma}_{n,n}^{(2)} - \sum_{\sigma=\pm 1} e^{-\beta \delta E_n^{\sigma}} \tilde{\Sigma}_{n+\sigma,n}^{(2)} + \sum_{\sigma=\pm 1} e^{-\beta (\delta E_n^{\sigma} + \delta E_{n+\sigma}^{\sigma})} \tilde{\Sigma}_{n+2\sigma,n}^{(2)}\right]$$
(72)

На рисунке 5 представлены все диаграммы, дающие вклад в $\tilde{\Sigma}_{n,n}^{(2)}$ (на самом деле диаграмм больше, но остальные симметричны уже рассмотренным). Теперь, используя формулы (62), (66), (69) и (70), мы можем сопоставить рисункам упрощённые выражения:

$$\begin{split} \tilde{\Sigma}_{n,n}^{(2)} &= \sum_{\sigma} \left\{ \alpha_{K}(\delta E_{n}^{\sigma}) \oint d\omega \alpha_{K}(\omega) \left[\frac{2}{(\omega - \delta E_{n}^{\sigma})(\omega - \delta E_{n+\sigma}^{\sigma})} + \frac{2}{(\omega - \delta E_{n}^{\bar{\sigma}})(\omega + \delta E_{n}^{\sigma})} \right] + \\ &+ \alpha_{K}(\delta E_{n}^{\sigma}) \oint d\omega \alpha_{K}'(\omega) \left[\frac{1}{\omega - \delta E_{n}^{\sigma}} + \frac{1}{\omega - \delta E_{n}^{\bar{\sigma}}} - \frac{1}{\omega - \delta E_{n+\sigma}^{\sigma}} \right] - \\ &- \alpha_{K}'(\delta E_{n}^{\sigma}) \oint d\omega \alpha_{K}(\omega) \left[\frac{1}{\omega - \delta E_{n}^{\sigma}} + \frac{1}{\omega - \delta E_{n}^{\bar{\sigma}}} - \frac{1}{\omega - \delta E_{n+\sigma}^{\bar{\sigma}}} - \frac{1}{\omega - \delta E_{n+\sigma}^{\sigma}} \right] + \\ &+ \alpha_{K}(-\delta E_{n}^{\sigma}) \oint \frac{\alpha_{K}'(\omega)d\omega}{\omega - \delta E_{n}^{\sigma}} - \int \frac{\alpha_{K}(\omega)\alpha_{K}(\delta E_{n}^{\sigma} + \delta E_{n+\sigma}^{\sigma} - \omega)d\omega}{(\omega - \delta E_{n}^{\sigma})(\omega - \delta E_{n+\sigma}^{\sigma})} \\ &- \int d\omega \alpha_{K}(\omega)\alpha_{K}'(\delta E_{n}^{\sigma} + \delta E_{n+\sigma}^{\sigma} - \omega) \left[\frac{1}{\omega - \delta E_{n}^{\sigma}} + \frac{1}{\omega - \delta E_{n+\sigma}^{\sigma}} \right] \right\}.$$
(73)

Аналогичным образом, на рисунках 6 и 7 изображены все диаграммы, дающие вклад в $\tilde{\Sigma}_{n-1,n}^{(2)}$ и $\tilde{\Sigma}_{n-2,n}^{(2)}$ соответственно. Если во всех диаграммах заменить $\pm 1 \rightarrow \mp 1$ и $\pm 2 \rightarrow \mp 2$, то получатся выражения для $\tilde{\Sigma}_{n+1,n}^{(2)}$ и $\tilde{\Sigma}_{n+2,n}^{(2)}$:

$$-\sum_{\sigma} e^{-\beta\delta E_{n}^{\sigma}} \tilde{\Sigma}_{n+\sigma,n}^{(2)} = -\sum_{\sigma} e^{-\beta\delta E_{n}^{\sigma}} \left\{ \alpha_{K}(-\delta E_{n}^{\sigma}) \int d\omega \alpha_{K}(\omega) \left[\frac{2}{(\omega+\delta E_{n}^{\sigma})(\omega-\delta E_{n}^{\bar{\sigma}})} + \frac{2}{(\omega-\delta E_{n+\sigma}^{\sigma})(\omega-\delta E_{n}^{\sigma})} \right] + \alpha_{K}^{\prime}(-\delta E_{n}^{\sigma}) \int d\omega \alpha_{K}(\omega) \left[\frac{1}{\omega-\delta E_{n}^{\bar{\sigma}}} + \frac{1}{\omega-\delta E_{n}^{\sigma}} - \frac{1}{\omega-\delta E_{n+\sigma}^{\bar{\sigma}}} - \frac{1}{\omega-\delta E_{n+\sigma}^{\bar{\sigma}}} \right] + \alpha_{K}^{\prime}(-\delta E_{n}^{\sigma}) \int \frac{\alpha_{K}^{\prime}(\omega)d\omega}{\omega+\delta E_{n}^{\sigma}} + \alpha_{K}^{\prime}(\delta E_{n}^{\bar{\sigma}}) \int \frac{\alpha_{K}^{\prime}(\omega)d\omega}{\omega+\delta E_{n}^{\sigma}} + \alpha_{K}^{\prime}(\delta E_{n}^{\bar{\sigma}}) \int \frac{\alpha_{K}^{\prime}(\omega)d\omega}{\omega+\delta E_{n}^{\sigma}} + \alpha_{K}^{\prime}(\delta E_{n+\sigma}^{\bar{\sigma}} - \delta E_{n+\sigma}^{s} + \omega)d\omega} \right\} + \alpha_{K}^{\prime}(\delta E_{n+\sigma}^{\sigma}) \int \frac{\alpha_{K}^{\prime}(\omega)d\omega}{\omega+\delta E_{n}^{\sigma}} + \sigma \sum_{s=\pm 1} s \int \frac{\alpha_{K}(\omega)\alpha_{K}(\delta E_{n+\sigma}^{\bar{s}} - \delta E_{n+\sigma}^{s} + \omega)d\omega}{(\omega-\delta E_{n+\sigma}^{s})(\omega-\delta E_{n+\sigma}^{\bar{s}})} \right\}.$$

$$(74)$$

$$\sum_{\sigma} e^{-\beta(\delta E_n^{\sigma} + \delta E_{n+\sigma}^{\sigma})} \tilde{\Sigma}_{n+2\sigma,n}^{(2)} = \sum_{\sigma} e^{-\beta(\delta E_n^{\sigma} + \delta E_{n+\sigma}^{\sigma})} \left\{ \alpha_K(-\delta E_{n+\sigma}^{\sigma}) \oint \frac{\alpha'_K(\omega)d\omega}{\omega + \delta E_n^{\sigma}} + \alpha_K(-\delta E_n^{\sigma}) \oint \frac{\alpha'_K(\omega)d\omega}{\omega + \delta E_{n+\sigma}^{\sigma}} + \int d\omega \alpha_K(\omega) \alpha'_K(-\delta E_{n+\sigma}^{\sigma} - \delta E_n^{\sigma} - \omega) \left[\frac{1}{\omega + \delta E_{n+\sigma}^{\sigma}} + \frac{1}{\omega + \delta E_n^{\sigma}} \right] + \int \frac{\alpha_K(\omega)\alpha_K(-\delta E_{n+\sigma}^{\sigma} - \delta E_n^{\sigma} - \omega)d\omega}{(\omega + \delta E_{n+\sigma}^{\sigma})(\omega + \delta E_n^{\sigma})} \right\}.$$
(75)

Обратимся к формуле (74). Если вспомнить свойства (54) и (55), то становится очевидным, что

$$-e^{-\beta\delta E_n^{\sigma}}\alpha_K(-\delta E_n^{\sigma}) = -\alpha_K(\delta E_n^{\sigma}),\tag{76}$$

$$-e^{-\beta\delta E_n^{\sigma}}\alpha_K'(-\delta E_n^{\sigma}) = \alpha_K'(\delta E_n^{\sigma}) + \beta\alpha_K(\delta E_n^{\sigma}).$$
(77)

Теперь, если сложить (74) и (73), то мы увидим, что некоторые члены сократятся. Также легко можно показать, что последний член в (74) сокращается при взятии суммы по s: один интеграл получается из другого при сдвиге переменной интегрирования на константу, при этом интегралы вычитаются друг из друга.

Далее обратим наше внимание к преобразованию формулы (75). Вопервых,

$$e^{-\beta(\delta E_n^{\sigma} + \delta E_{n+\sigma}^{\sigma})} \alpha_K(-\delta E_{n+\sigma}^{\sigma}) = e^{-\beta\delta E_n^{\sigma}} \alpha_K(\delta E_{n+\sigma}^{\sigma}).$$
(78)

Во-вторых, расммотрим последний член в (75):

$$\alpha_{K}(\omega)\alpha_{K}(-\delta E^{\sigma}_{n+\sigma} - \delta E^{\sigma}_{n} - \omega) = \\ = \alpha_{K}(-\omega)e^{-\beta\omega}\alpha_{K}(\delta E^{\sigma}_{n+\sigma} + \delta E^{\sigma}_{n} + \omega)e^{\beta(\delta E^{\sigma}_{n+\sigma} + \delta E^{\sigma}_{n} + \omega)}, \quad (79)$$

после этого остаётся поменять знак переменной интегрирования:

$$e^{-\beta(\delta E_n^{\sigma} + \delta E_{n+\sigma}^{\sigma})} \oint \frac{\alpha_K(\omega)\alpha_K(-\delta E_{n+\sigma}^{\sigma} - \delta E_n^{\sigma} - \omega)d\omega}{(\omega + \delta E_{n+\sigma}^{\sigma})(\omega + \delta E_n^{\sigma})} = \int \frac{\alpha_K(\omega)\alpha_K(\delta E_{n+\sigma}^{\sigma} + \delta E_n^{\sigma} - \omega)d\omega}{(\omega - \delta E_{n+\sigma}^{\sigma})(\omega - \delta E_n^{\sigma})}$$
(80)

Аналогичные операции можно проделать с предпоследним слагаемым:

$$e^{-\beta(\delta E_{n}^{\sigma}+\delta E_{n+\sigma}^{\sigma})} \oint d\omega \alpha_{K}(\omega) \alpha_{K}'(-\delta E_{n+\sigma}^{\sigma}-\delta E_{n}^{\sigma}-\omega) \left[\frac{1}{\omega+\delta E_{n+\sigma}^{\sigma}}+\frac{1}{\omega+\delta E_{n}^{\sigma}}\right] = \\ = -e^{-\beta(\delta E_{n}^{\sigma}+\delta E_{n+\sigma}^{\sigma})} \oint d\omega \alpha_{K}(-\omega) \alpha_{K}'(-\delta E_{n+\sigma}^{\sigma}-\delta E_{n}^{\sigma}+\omega) \left[\frac{1}{\omega-\delta E_{n+\sigma}^{\sigma}}+\frac{1}{\omega-\delta E_{n}^{\sigma}}\right] = \\ = -\int d\omega \alpha_{K}(-\omega) e^{-\beta\omega} \alpha_{K}'(-(\delta E_{n+\sigma}^{\sigma}+\delta E_{n}^{\sigma}-\omega)) e^{-\beta(\delta E_{n+\sigma}^{\sigma}+\delta E_{n}^{\sigma}-\omega)} [\ldots] = \\ = \int d\omega \alpha_{K}(\omega) (\alpha_{K}'(\delta E_{n+\sigma}^{\sigma}+\delta E_{n}^{\sigma}-\omega)+\beta \alpha_{K}(\delta E_{n+\sigma}^{\sigma}+\delta E_{n}^{\sigma}-\omega)) [\ldots].$$
(81)

Рассмотрим интеграл, порождённый вторым слагаемым. Он имеет вид:

$$\int d\omega \alpha_K(\omega) \alpha_K(x_1 + x_2 - \omega) \left[\frac{1}{\omega - x_1} + \frac{1}{\omega - x_2} \right] =$$

$$= \int d\omega \left[\frac{\alpha_K(\omega + x_1)\alpha_K(x_2 - \omega)}{\omega} + \frac{\alpha_K(x_2 + \omega)\alpha_K(x_1 - \omega)}{\omega} \right] =$$

$$= \int d\omega \frac{\alpha_K(\omega + x_1)\alpha_K(x_2 - \omega) - \alpha_K(x_2 - \omega)\alpha_K(x_1 + \omega)}{\omega} = 0. \quad (82)$$

Таким образом, два последних слагаемых в (75) на самом деле сокращаются с соответствующими членами в (73).

Принимая во внимание всё вышесказанное, мы можем существенно упростить выражение (72) для свёртки

$$\sum_{n'} P_{n'}^{(0)} \Sigma_{n',n}^{(2)} = \frac{2\pi i e^{-\beta E_n}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \cdot \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \sum_{\sigma=\pm 1} \left\{ \int d\omega \alpha'_K(\omega) \left[\frac{e^{-\beta \delta E_{n+\sigma}^{\bar{\sigma}}}}{\omega + \delta E_{n+\sigma}^{\bar{\sigma}}} + \frac{e^{-\beta \delta E_{n+\sigma}^{\sigma}}}{\omega + \delta E_{n+\sigma}^{\sigma}} - \frac{e^{-\beta \delta E_n^{\bar{\sigma}}}}{\omega + \delta E_n^{\bar{\sigma}}} - \frac{e^{-\beta \delta E_n^{\bar{\sigma}}}}{\omega + \delta E_n^{\bar{\sigma}}} \right] - \int d\omega (\alpha'_K(\omega) + \beta \alpha_K(\omega)) \left[\frac{1}{\omega - \delta E_{n+\sigma}^{\bar{\sigma}}} + \frac{1}{\omega - \delta E_{n+\sigma}^{\sigma}} - \frac{1}{\omega - \delta E_{n+\sigma}^{\bar{\sigma}}} - \frac{1}{\omega - \delta E_n^{\bar{\sigma}}} \right] \right\}. \quad (83)$$

5.4 Поправка первого порядка

Решение уравнения (57) будем искать в виде

$$P_n^{(1)} = \frac{e^{-\beta E_n}}{\sum\limits_m e^{-\beta E_m}} \cdot f_n.$$
(84)

В этом случае левая часть уравнения (57) принимает форму

$$\sum_{n'} P_{n'}^{(1)} \Sigma_{n',n}^{(1)} =$$

$$= \frac{2\pi i e^{-\beta E_n}}{\sum_{m} e^{-\beta E_m}} \cdot \frac{1}{2\pi} \cdot \left[\alpha_K (\delta E_n^+) (f_n - f_{n+1}) + \alpha_K (\delta E_n^-) (f_n - f_{n-1}) \right]. \quad (85)$$

Сравнивая (85) с (83), приходим к выводу, что

$$P_n^{(1)} = -\frac{e^{-\beta E_n}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \cdot \frac{\beta g}{2\pi} \oint d\omega \alpha_K(\omega) \left[\frac{1}{\omega - \delta E_n^+} + \frac{1}{\omega - \delta E_n^-} \right] - \frac{1}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \cdot \frac{g}{2\pi} \oint d\omega \alpha'_K(\omega) \left[\frac{e^{-\beta E_n}}{\omega - \delta E_n^+} + \frac{e^{-\beta E_n}}{\omega - \delta E_n^-} - \frac{e^{-\beta E_{n+1}}}{\omega - \delta E_{n+1}^-} - \frac{e^{-\beta E_{n-1}}}{\omega - \delta E_{n-1}^+} \right] = \frac{g}{\sum_m \gamma_m} \cdot \left[\gamma_n A_n^{(K)} + \delta_n \right], \quad (86)$$

где

$$\gamma_n = e^{-\beta E_n}, \qquad A_n^{(K)} = -\frac{\beta}{2\pi} \oint d\omega \alpha_K(\omega) \left[\frac{1}{\omega - \delta E_n^+} + \frac{1}{\omega - \delta E_n^-} \right], \quad (87)$$

$$\delta_n = \frac{1}{2\pi} \oint d\omega \alpha'_K(\omega) \left[\frac{e^{-\beta E_{n+1}}}{\omega - \delta E_{n+1}^-} + \frac{e^{-\beta E_{n-1}}}{\omega - \delta E_{n-1}^+} - \frac{e^{-\beta E_n}}{\omega - \delta E_n^+} - \frac{e^{-\beta E_n}}{\omega - \delta E_n^-} \right]. \tag{88}$$

Наконец, подставим (86) в (58):

$$\sum_{n} \delta_{n} = 0, \qquad P_{n}^{(1)f} = \frac{g}{\sum_{m} \gamma_{m}} \left[\gamma_{n} A_{n}^{(K)} - \frac{\sum_{m} \gamma_{m} A_{m}^{(K)}}{\sum_{m} \gamma_{m}} \cdot \gamma_{n} \right] + \frac{g \delta_{n}}{\sum_{m} \gamma_{m}}.$$
 (89)

Полученный результат можно использовать для вычисления первой поправки к среднему числу частиц.

$$n_{K}^{(1)} = \frac{g}{\sum_{m} \gamma_{m}} \sum_{n} \left[\frac{1}{2\beta E_{0}} \frac{\delta \gamma_{n}}{\delta n_{x}} A_{n}^{(K)} - \frac{\sum_{m} \gamma_{m} A_{m}^{(K)}}{\sum_{m} \gamma_{m}} \frac{1}{2\beta E_{0}} \frac{\delta \gamma_{n}}{\delta n_{x}} \right] + \frac{g \sum_{n} n \delta_{n}}{\sum_{m} \gamma_{m}} =$$
$$= \frac{g}{2\beta E_{0}} \sum_{m} \gamma_{m}} \sum_{n} \left[\frac{\delta (\gamma_{n} A_{n}^{(K)})}{\delta n_{x}} - \frac{\sum_{m} \gamma_{m} A_{m}^{(K)}}{\sum_{m} \gamma_{m}} \frac{\delta \gamma_{n}}{\delta n_{x}} \right] +$$
$$+ \frac{g}{\sum_{m} \gamma_{m}} \sum_{n} \left[n \delta_{n} - \frac{\gamma_{n}}{2\beta E_{0}} \frac{\delta A_{n}^{(K)}}{\delta n_{x}} \right]. \quad (90)$$

$$\sum_{n} n\delta_{n} = -\sum_{n} \frac{e^{-\beta E_{n}}}{2\pi} \oint d\omega \alpha_{K}'(\omega) \left[\frac{n - (n+1)}{\omega - \delta E_{n}^{+}} + \frac{n - (n-1)}{\omega - \delta E_{n}^{-}} \right] =$$

$$= \sum_{n} \frac{e^{-\beta E_{n}}}{2\pi} \cdot \operatorname{Re} \left\{ \int d\omega \alpha_{K}'(\omega) \left(\frac{1}{\omega - \delta E_{n}^{+} - i\eta} - \frac{1}{\omega - \delta E_{n}^{-} - i\eta} \right) \right\} =$$

$$= \sum_{n} \frac{e^{-\beta E_{n}}}{2\pi} \cdot \operatorname{Re} \left\{ \int d\omega \alpha_{K}(\omega) \left[\frac{1}{(\omega - \delta E_{n}^{+} - i\eta)^{2}} - \frac{1}{(\omega - \delta E_{n}^{-} - i\eta)^{2}} \right] \right\}. \quad (91)$$

$$-\sum_{n} \frac{\gamma_{n}}{2\beta E_{0}} \frac{\delta A_{n}^{(K)}}{\delta n_{x}} = \sum_{n} \frac{\beta e^{-\beta E_{n}}}{2\pi} \cdot \frac{1}{2\beta E_{0}} \frac{\delta}{\delta n_{x}} \operatorname{Re} \left\{ \int d\omega \alpha_{K}(\omega) \left(\frac{1}{\omega - \delta E_{n}^{+} - i\eta} + \frac{1}{\omega - \delta E_{n}^{-} - i\eta} \right) \right\} = \sum_{n} \frac{e^{-\beta E_{n}}}{2\pi} \cdot \operatorname{Re} \left\{ \int d\omega \alpha_{K}(\omega) \left[\frac{1}{(\omega - \delta E_{n}^{-} - i\eta)^{2}} - \frac{1}{(\omega - \delta E_{n}^{+} - i\eta)^{2}} \right] \right\}. \quad (92)$$

Сравнивая (91) и (92) с (90), приходим к выводу, что второй член в (90) сокращается.

Обратимся к определению $A_n^{(K)}$ в формуле (87). В общем случае требуется обрезание интеграла на больших частотах. Вместо этого можно ввести контр-член, сокращающий бесконечность, по аналогии с температурной техникой:

$$A_n^{(K)} \to \left(A_n^{(K)} - C^{(K)}\right) = \frac{\beta}{2\pi} \oint d\omega \alpha_K(\omega) \left[\frac{1}{\omega - \delta E_n^+} + \frac{1}{\omega - \delta E_n^-} - \frac{2}{\omega - E_0}\right]. \tag{93}$$

6 Сравнение результатов

Структура ответа для $\langle n \rangle^{(1)}$ в обоих подходах одна и та же:

$$\langle n \rangle_{K/M}^{(1)} = \frac{g}{2\beta E_0 \mathcal{Z}_0} \left[\frac{\delta \mathcal{Z}_1^{(K/M)}}{\delta n_x} - \frac{\mathcal{Z}_1^{(K/M)}}{\mathcal{Z}_0} \frac{\delta \mathcal{Z}_0}{\delta n_x} \right],$$
$$\langle n \rangle_{K/M}^{(1)} = \frac{g}{2\beta E_0 \sum_m \gamma_m} \sum_n \left[\frac{\delta (\gamma_n A_n^{(K/M)})}{\delta n_x} - \frac{\sum_m \gamma_m A_m^{(K/M)}}{\sum_m \gamma_m} \frac{\delta \gamma_n}{\delta n_x} \right] =$$
$$= \frac{g}{2\beta E_0 \sum_m \gamma_m} \sum_n \left[2\beta E_0 \gamma_n (n - \langle n \rangle^{(0)}) \cdot A_n^{(K/M)} + \gamma_n \frac{\delta A_n^{(K/M)}}{\delta n_x} \right], \quad (94)$$

где

$$\langle n \rangle^{(0)} = \frac{1}{\sum_{n} \gamma_n} \cdot \sum_{n} n \gamma_n.$$
(95)

Стоит ещё раз отметить, что конечный ответ не зависит от выбора регуляризации. В этом легко можно убедиться, если сдвинуть все $A_n^{(K/M)}$ на конечную константу.

Поправка к статсумме в мацубаре может быть записана как

$$\mathcal{Z}_{1}^{M} = \frac{1}{4\pi} \sum_{n} e^{-\beta E_{n}} \sum_{m} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left[\frac{2\omega \tilde{J}(\omega)}{\omega_{m}^{2} + \omega^{2}} - C(\omega) \right] \cdot \left[\sum_{\sigma} \frac{\delta E_{n}^{\sigma}}{\omega_{m}^{2} + (\delta E_{n}^{\sigma})^{2}} - \frac{2E_{0}}{\omega_{m}^{2} + E_{0}^{2}} \right]$$
$$\mathcal{Z}_{1}^{M} = \frac{1}{8\pi} \sum_{n} e^{-\beta E_{n}} \sum_{m} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega g_{n}(\omega, i\omega_{m}).$$
(96)

Если избегать полюсы $g_n(z_1, z_2)$, то эта функция, в действительности, сходится на бесконечности. Поменяем порядок суммирования и интегрирования и рассмотрим общую ситуацию, когда $\omega \neq \pm \delta E_n^{\sigma}$ и $\omega \neq \pm E_0$. Тогда все полюса функции g по второму аргументу простые. Теперь мы можем перейти от суммы по $i\omega_m$ к интегралу на комплексной плоскости, воспользовавшись теоремой о вычетах.

$$\sum_{m} g_n(\omega, i\omega_m) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} dz h(z) g_n(\omega, z) - \sum_{z_0 \in \{\pm\omega, \pm\delta E_n^{\sigma}, \pm E_0\}} \operatorname{res}_{z=z_0} h(z) g_n(\omega, z),$$
(97)

$$h(z) = \frac{\beta}{e^{\beta z} - 1}.$$
(98)

Здесь C - это удалённый контур, размер которого стремится к бесконечности, при этом интеграл по нему стремится к нулю. Вычисляя сумму вычетов, находим:

$$\mathcal{Z}_{1}^{M} = \mathcal{Z}_{1}^{K} + \frac{\beta}{4\pi} \sum_{n} \gamma_{n} \oint d\omega \left\{ \sum_{\sigma} \left[\frac{\omega \tilde{J}(\omega)}{\omega^{2} - (\delta E_{n}^{\sigma})^{2}} - \frac{C(\omega)}{2} \right] \cdot \operatorname{cth} \frac{\beta \delta E_{n}^{\sigma}}{2} - 2 \left[\frac{\omega \tilde{J}(\omega)}{\omega^{2} - E_{0}^{2}} - \frac{C(\omega)}{2} \right] \cdot \operatorname{cth} \frac{\beta E_{0}}{2} \right\} - \frac{\beta}{4\pi} \sum_{n} \gamma_{n} \oint d\omega \cdot \omega \tilde{J}(\omega) \left[\sum_{\sigma} \frac{1}{\omega^{2} - (\delta E_{n}^{\sigma})^{2}} - \frac{2}{\omega^{2} - E_{0}^{2}} \right]. \quad (99)$$

Подставляя это в формулу (94), получаем

$$\langle n \rangle_{K}^{(1)} = -\frac{\beta g}{2\pi \mathcal{Z}_{0}} \cdot \sum_{n} (n - \langle n \rangle^{(0)}) \gamma_{n} \oint d\omega \alpha_{K}(\omega) \left[\sum_{\sigma} \frac{1}{\omega - \delta E_{n}^{\sigma}} - \frac{2}{\omega - E_{0}} \right] + \frac{g}{2\pi \mathcal{Z}_{0}} \cdot \sum_{n} \gamma_{n} \operatorname{Re} \left\{ \int d\omega \alpha_{K}(\omega) \left[\frac{1}{(\omega - \delta E_{n}^{+} + i\eta)^{2}} - \frac{1}{(\omega - \delta E_{n}^{-} + i\eta)^{2}} \right] \right\}.$$
(100)

$$\begin{split} \delta\langle n \rangle^{(1)} &= \langle n \rangle_{M}^{(1)} - \langle n \rangle_{K}^{(1)} = \\ &= \frac{\beta g}{4\pi \mathcal{Z}_{0}} \sum_{n} \gamma_{n} (n - \langle n \rangle^{(0)}) \cdot \left\{ \sum_{\sigma} \oint d\omega \left[\frac{\omega \tilde{J}(\omega)}{\omega^{2} - (\delta E_{n}^{\sigma})^{2}} - \frac{C(\omega)}{2} \right] \operatorname{cth} \frac{\beta \delta E_{n}^{\sigma}}{2} - \\ &- \oint d\omega \cdot \omega \tilde{J}(\omega) \left[\sum_{\sigma} \frac{1}{\omega^{2} - (\delta E_{n}^{\sigma})^{2}} - \frac{2}{\omega^{2} - E_{0}^{2}} \right] \right\} + \\ &+ \frac{\beta g}{8\pi \mathcal{Z}_{0}} \sum_{n} \gamma_{n} \sum_{\sigma} \frac{\sigma}{\operatorname{sh}^{2} \frac{\beta \delta E_{n}^{\sigma}}{2}} \oint d\omega \left[\frac{\omega \tilde{J}(\omega)}{\omega^{2} - \delta(E_{n}^{\sigma})^{2}} - \frac{C(\omega)}{2} \right] + \\ &+ \frac{g}{8\pi \mathcal{Z}_{0}} \sum_{n} \gamma_{n} \sum_{\sigma} \sigma \operatorname{(cth} \frac{\beta \delta E_{n}^{\sigma}}{2} - 1) \cdot \\ &\cdot \operatorname{Re} \left\{ \int d\omega \tilde{J}(\omega) \left[\frac{1}{(\omega + \delta E_{n}^{\sigma} + i\eta)^{2}} - \frac{1}{(\omega - \delta E_{n}^{\sigma} + i\eta)^{2}} \right] \right\}. \quad (101) \end{split}$$

7 Заключение

Таким образом, в рамках данной работы мы получили выражение для поправки первого порядка к среднему моменту частицы в модели AES, в рамках температурной техники, а также при рассмотрении процесса термализации (более того, во стором случае получено выражение для поправки первого порядка к функции распределения частицы по состояниям с различными моментами).

Как видим, в случае произвольной тепловой бани, два подхода дают разные результаты, то есть термализация в системе приводит к распределению, отличному от Гиббсовского. Из формулы (101) можно сделать два важных вывода. Во-первых, в пределе $T \rightarrow +0$ разница между подходами исчезает, что находится в согласии с адиабатической теоремой: при нулевой температуре система находится в основном состоянии, что не может измениться в процессе адиабатического включения взаимодействия. Вовторых, баня типа Калдейра-Леггетта представляет особый интерес, так как в этом случае выражения для поправки первого порядка совпадают в обоих подходах. При этом баня именно такого типа соответствует исходной модели одноэлектронного транзистора.

В свете вышесказанного можно обозначить следующие проблемы, решение которых является логическим продолжением этой работы. Дополнительный закон сохранения, существующий для Гамильтониана AES, в исходной модели не имеет места. Учет фермионных петель старших порядков при выводе действия AES может его разрушить. Однако при этом вознкает вопрос, что из себя представляет стационарное состояние, изученной в этой работе. Возможно, учет дополнительных членов в действии приведет к конечному времени жизни этого состояния, то есть сделает его метастабильным.

Список литературы

- [1] Single Charge Tunneling, edited by H. Grabert and M. Devoret.
- [2] V. Ambegaokar, U. Eckern, G. Schön, Phys. Rev. Lett. 48, 1745 (1982).
- [3] A. Altland, L. I. Glazman, A. Kamenev, and J. S. Meyer, Ann. Phys. (N.Y.), 321, 2566 (2006).
- [4] K. B. Efetov and A. Tschersich, Phys. Rev. B 67, 174205 (2003).
- [5] Andrew G. Semenov, arXiv:1307.6615, (2013).
- [6] Dmitry S. Golubev, Carlos P. Herrero and Andrei D. Zaikin, arXiv:condmat/0205549v1.
- [7] Andrew G. Semenov and Andrei D. Zaikin, Phys. Rev. B 80, 155312.
- [8] Andrew G. Semenov and Andrei D. Zaikin, Phys. Rev. B 84, 045416.
- [9] I. L. Aleiner, P. W. Brouwer, L. I. Glazman, arXiv:cond-mat/0103008v2.
- [10] D. Golubev, A. Zaikin, Phys. Rev. B 50, 8736.
- [11] H. Grabert, Phys. Rev. B 50, 17364.
- [12] G. Göppert, H. Grabert, Phys. Rev. B 63, 125307.
- [13] H. Schoeller, G. Schön, Phys. Rev. B 50, 18436.
- [14] J. König, H. Schoeller, G. Schön, Europhys. Lett. **31**, pp. 31-36.
- [15] J. König, H. Schoeller, G. Schön, Phys. Rev. B 58, 7882.
- [16] G. Schön in Quantum Transport and Dissipation, edited by Dittrich et al.



Рис. 5: Диаграммы, дающие вклад в $\tilde{\Sigma}_{n,n}^{(2)}$



Рис. 7: Диаграммы, дающие вклад в $\tilde{\Sigma}_{n-2,n}^{(2)}$



[17] A. M. M. Pruisken and I. S. Burmistrov, Phys. Rev. Lett. **95**, 189701 (2005).

[18] A. M. M. Pruisken and I. S. Burmistrov, Phys. Rev. B 81, 085428 (2010).