Московский физико-технический институт
(государственный университет)
Факультет общей и прикладной физики
Кафедра "Проблемы теоретической физики"

Спиновая восприимчивость квантовой точки с анизотропным обменом

Выпускная квалификационная
работа на степень магистра
студента 628 гр. Шарафутдинова А.У.

Научный руководитель
к.ф.-м.н. Бурмистров И.С.

Содержание

1 Введение

Значительный прогресс в изучении квантовых точек (КТ) был достигнут с введением универсального гамильтониана [1]. Последний позволяет чрезвычайно просто описывать взаимодействие электронов на КТ. Все взаимодействие сводится к трем вкладам в гамильтониан: зарядовому, обменному и куперовскому. Однако учет уже первых двух вкладов приводит к неабелевому действию. Куперовский же вклад может приводить к сверхпроводящим корреляциям в трехмерном случае, но магнитное поле подавляющее эти корреляции пропорционально малому параметру $\sqrt{\frac{\delta}{E_{\text{th}}}}$ (где δ -расстояние между уровнями,E_{th}-энергия Таулесса) [2].

В случае изотропного и изинговского обмена можно найти точную статистическую сумму [3]. Также был проделан анализ по теории возмущений по анизотропии [4] . Заметим, однако, что характеристики системы в изинговском и изотропном случаях существенно отличаются. Например, в изотропном случае, в отличие от изинговского, мнимая часть частотной восприимчивости равна нулю. С мезоскопической стоунеровской неустойчивостью [5] ситуация обратная - в изинговском случае переход наступает лишь при $J = \delta$ (где J- обменное взаимодействие). Для того, чтобы отследить характерные масштабы проявления вышеуказанных явлений, желательно проанализировать систему в промежуточном между изинговским и изотропным случае.

Наша задача – вычислить и исследовать статистическую сумму и спиновую восприимчивость КТ при наличии осевой анизотропии. Ключевой шаг в вычислении – преобразование Вея-Нормана-Колоколова [6, 7] - позволяет расцепить некоммутирующие множители в статистической сумме и найти её точно.

Для экспериментальной проверки выводов работы нужна КТ с сильным беспорядком – таким, что $E_{\text{th}} \gg T, \delta$ Мезоскопическую стоунеровскую неустойчивость можно наблюдать в материалах с J близкими к δ.

2 Универсальный гамильтониан

При энергиях Таулесса много больших чем среднее расстояние между уровнями $E_{\text{Th}} \gg \delta$ квантовая точка описывается универсальным гамильтонианом

$$H_{QD} = H_0 + H_C + H_S, \tag{1}$$

где

$$H_0 = \sum_{\alpha\sigma} \epsilon_\alpha a^\dagger_{\alpha\sigma} a_{\alpha\sigma} \tag{2}$$

- гамильтониан невзаимодействующих частиц,

$$H_C = E_c(\hat{n} - N_0)^2 \tag{3}$$

- зарядовый гамильтониан,

$$H_S = -J_\perp(S_x^2 + \hat{S}_y^2) - J_z S_z^2 \tag{4}$$

-обменный гамильтониан,

$$\hat{n} \equiv \sum_{\alpha} \hat{n}_{\alpha} = \sum_{\alpha,\sigma} a^{\dagger}_{\alpha,\sigma} a_{\alpha,\sigma} \tag{5}$$

-полное число частиц на квантовой точке,

$$\hat{\boldsymbol{S}} \equiv \sum_{\sigma\sigma'} a^{\dagger}_{\alpha\sigma} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} a_{\alpha\sigma'} \tag{6}$$

- полный спин электронов на точке.

Параметры E_c и J флуктуируют от системе к системе. Также около нулевых средних значений флуктуируют и другие матричные элементы гамильтониана. Порядок этих флуктуаций $\frac{\delta^2}{E_{Th}}$ [8].

Вывод универсального гамильтониана подразумевает большое число электронов на КТ. Однако, бывают случаи, когда универсальный гамильтониан применим и для систем с малым числом электронов [9].

3 Мезоскопическая стоунеровская неустойчивость

С увеличением обменного взаимодействия состояния с большим спином становятся все выгоднее по энергии. В макроскопическом пределе стоунеровская неустойчивость приводит к тому, что все спины скачком становятся сонаправлены по достижении обменным взаимодействием определенного значения. На мезоскопическом уровне такой переход происходит постепенно.

Пусть спектр на квантовой точке эквидистантный со средним растоянием между уровнями δ. Тогда минимальной кинетической энергией среди состояний со спином S обладает состояние с минимальным числом распаренных электронов. Эта энергия равна δS^2 для целого S и $\delta(S^2 + S - \frac{3}{4})$ для полуцелого. Таким образом, полная энергия состояния, характеризуемого значениями S, S_z равна

$$\begin{cases} E = \delta S^2 - J_{\perp} S(S+1) - (J_z - J_{\perp}) S_z^2, & 2S = 0 \pmod 2, \\ E = \delta (S^2 - \frac{1}{4}) - J_{\perp} S(S+1) - (J_z - J_{\perp}) S_z^2, & 2S = 1 \pmod 2 \end{cases} \tag{7}$$

Ясно, что будет ли основным состояние $S_z = \pm S$ или $S_z = 0, 1/2$(в зависимости от четности S) определяется знаком $(J_z - J_{\perp})$.

Энергия основного состояния для эквидистантного спектра имеет следующий вид

$$\begin{cases} E_S = \delta S^2 - J_z S^2 - J_{\perp} S, & J_z > J_{\perp}, \\ E_S = \delta S^2 - J_{\perp} S(S+1), & J_z < J_{\perp} \end{cases} \tag{8}$$

при четных $2S$ и

$$\begin{cases} E_S = \delta (S^2 - \frac{1}{4}) - J_z S^2 - J_{\perp} S, & J_z > J_{\perp} \\ E_S = \delta (S^2 - \frac{1}{4}) - J_{\perp} S(S+1) - \frac{J_z - J_{\perp}}{4}, & J_z < J_{\perp} \end{cases} \tag{9}$$

при нечетных. Критерий Стоунера утверждает, что при $\delta < J$ спин становится пропорционален объему системы. Однако, спин может быть конечным и при $\delta > J$. Обменное взаимодействие приводит к тому, что основным состоянием становится состояние с ненулевым спином.

Чтобы отследить при каких параметрах $J_\perp, J_z$ основное состояние меняет спин запишем условие равенства энергий состояний со спином S и $S+1$:

$$\begin{cases} E^z_{S+1} - E^z_S = \delta(2S+1) - J_z(2S+1) - J_\perp = 0, & J_z > J_\perp \\ E^\perp_{S+1} - E^\perp_S = \delta(2S+1) - 2J_\perp(S+1) = 0, & J_z < J_\perp \end{cases} \tag{10}$$

Заметим, что условия для четных и нечетных S совпадают.

3.1 Изотропный случай($J_\perp = J_z = J$)

Условие (10) эквивалентно

$$S = \left[\frac{\delta}{2(\delta - J)}\right] \tag{11}$$

Зависимость спина от J/δ приведена слева на Рис.1

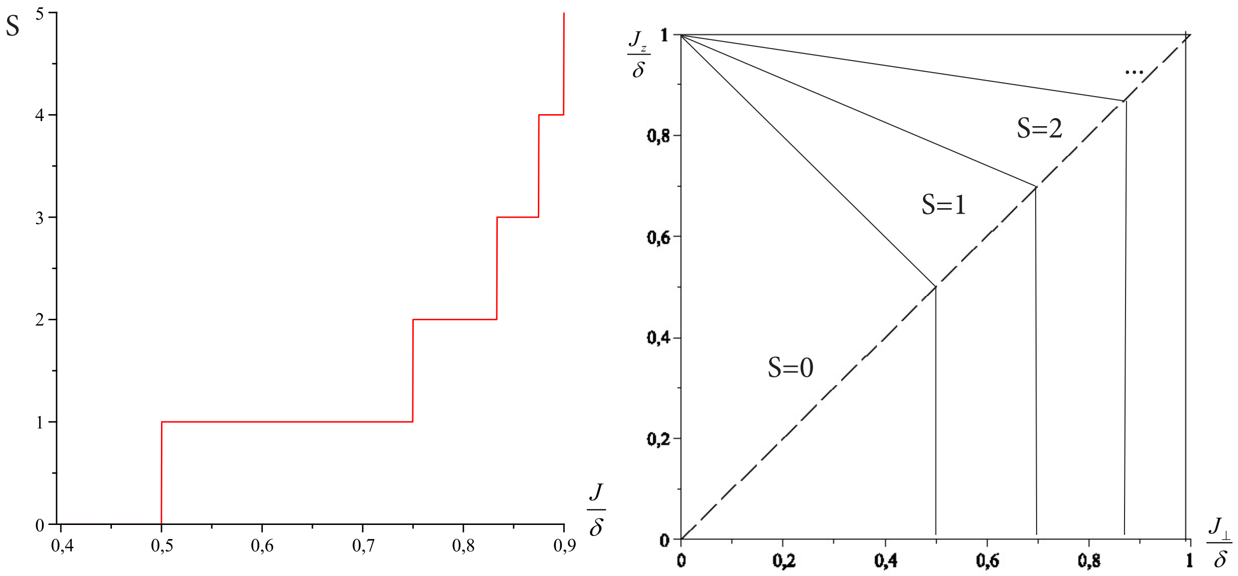

Рис. 1: График S от J в изотропном(слева) и анизотропном(справа) случаях

3.2 Изинговский случай($J_\perp = 0$)

Условие (10) эквивалентно

$$S = \left[\frac{J-\delta}{2(\delta - J)}\right] = 0 \tag{12}$$

и не выполняется при любых J. Это значит, что мезоскопическая стоунеровская неустойчивость исчезает в этом случае.

3.3 Планарный случай $J_z = 0$

$$S = \left[\frac{\delta}{2(\delta - J_\perp)}\right]. \tag{13}$$

Заметим, что зависимость спина от $J_\perp/\delta$ такая же, как и в изотропном двумерном случае.

3.4 Общий случай

В общем случае спин основного состояния зависит как от J_z, так и от $J_\perp$. График зависимости приведен справа на Рис. 1

4 Разделение заряда и спина

Лагранжиан соответствующий гамильтониану (1) имеет следующий вид

$$\mathcal{L} = \sum_\alpha \overline{\Psi}_\alpha \left[\partial_\tau - \epsilon_\alpha - \frac{g\mu_B}{2}\sigma_z + \mu + i\phi + \frac{\boldsymbol{\sigma}\theta}{2}\right]\Psi_\alpha + \frac{\theta_z^2}{4J_z} + \frac{\theta_\perp^2}{4J_\perp} + \frac{\phi^2}{4E_c} - iN_0\phi. \tag{14}$$

Зададимся целью вычислить функцию Грина при конечной температуре

$$G_{\alpha,\sigma_1,\sigma_2}(\tau_1,\tau_2) = -Z^{-1}\int \mathcal{D}[a^\dagger a\phi\overrightarrow{\theta}]a_{\alpha,\sigma_1}(\tau_1)a^\dagger_{\alpha,\sigma_2}(\tau_2)e^{-\mathcal{S}}, \tag{15}$$

где

$$Z = \int \mathcal{D}[a^\dagger a\phi\overrightarrow{\theta}]e^{-\mathcal{S}} \tag{16}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{S} \;&=\; \int_0^\beta \sum_{\alpha,\sigma,\sigma'} a^\dagger_{\alpha\sigma}(\tau)\left[\partial_\tau + \epsilon_\alpha - \mu + i\phi(\tau) + \frac{1}{2}\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{\theta}(\tau)\right]a_{\alpha,\sigma'}(\tau) + \frac{1}{4J_z}\int_0^\beta d\tau\theta_z^2 \\ &+\; \frac{1}{4J_\perp}\int_0^\beta d\tau\theta_\perp^2 + \frac{1}{4E_c}\int_0^\beta d\tau\phi^2(\tau) - iN_0\int_0^\beta d\tau\phi(\tau).\end{aligned} \tag{17}$$

Представим поле ϕ в виде

$$\phi(\tau) = \widetilde{\phi}(\tau) + 2\pi mT + \phi_0, \quad |\phi_0| \le \pi T, \quad \int_0^\beta d\tau\widetilde{\phi}(\tau) = 0. \tag{18}$$

Сделав преобразование

$$a_\alpha \to e^{-i\int_0^\tau(\widetilde{\phi}+2\pi mT)d\tau'}a_\alpha \tag{19}$$

и использовав следующие соотношения

$$\left[\int \mathcal{D}[\widetilde{\phi}]e^{-\frac{1}{4E_c}\int_0^\beta d\tau\widetilde{\phi}^2(\tau)}\right]^{-1}\int \mathcal{D}[\widetilde{\phi}]e^{-\frac{1}{4E_c}\int_0^\beta d\tau\widetilde{\phi}^2(\tau)}e^{-i\int_{\tau_1}^{\tau_2}d\tau\widetilde{\phi}(\tau)} = \exp[-E_c|\tau_{12}|(1-T|\tau_{12}|)] \quad (20)$$

$$\sum_{m\in Z} e^{-\frac{\pi^2 T}{E_c}(m+\frac{\beta\phi_0}{2\pi})^2}e^{2\pi i N_0(m+\frac{\beta\phi_0}{2\pi})}e^{-i2\pi mT\tau_{12}} = \sqrt{\frac{E_c}{\pi T}}\sum_{k\in Z}e^{i\beta\phi_0 k}e^{i\phi_0\tau_{12}}e^{-\beta E_c(k-N_0+T\tau_{12})^2} \quad (21)$$

получим

$$G_{\alpha,\sigma_1,\sigma_2}(\tau_1,\tau_2) = Z^{-1}\int_{-\pi T}^{\pi T}d\phi_0 Z[\phi_0]\mathcal{D}(\tau_1,\tau_2|\phi_0)\mathcal{G}_{\alpha,\sigma_1,\sigma_2}(\tau_1,\tau_2|\phi_0), \quad Z = \int_{-\pi T}^{\pi T}d\phi_0\mathcal{D}(\tau_1,\tau_2|\phi_0)Z[\phi_0] \quad (22)$$

где

$$\mathcal{D}(\tau_1,\tau_2|\phi_0) = \sqrt{\frac{E_c}{\pi T}}e^{-E_c|\tau_{12}|}\sum_{k\in Z}e^{i\beta\phi_0 k}e^{i\phi_0\tau_{12}}e^{-\beta E_c(k-N_0)^2}e^{-2E_c(k-N_0)\tau_{12}} \quad (23)$$

$$\mathcal{G}_{\alpha,\sigma_1,\sigma_2}(\tau_1,\tau_2|\phi_0) = -Z^{-1}[\phi_0]\int\mathcal{D}[a^\dagger a\theta]a_{\alpha,\sigma_1}(\tau_1)a^\dagger_{\alpha,\sigma_2}(\tau_2)e^{-\mathcal{S}}, \quad Z[\phi_0] = \int\mathcal{D}[a^\dagger a\overrightarrow{\theta}]e^{-\mathcal{S}} \quad (24)$$

$$S = \int_0^\beta\sum_{\alpha,\sigma,\sigma'}a^\dagger_{\alpha\sigma}(\tau)\left[\partial_\tau+\epsilon_\alpha-\mu+i\phi_0+\frac{1}{2}\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{\theta}(\tau)\right]a_{\alpha,\sigma'}(\tau)+\frac{1}{4J_z}\int_0^\beta d\tau\theta_z^2+\frac{1}{4J_\perp}\int_0^\beta d\tau\theta_\perp^2. \quad (25)$$

Видно, что функция Грина при наличии кулоновского взаимодействия выражается через функцию Грина гамильтониана без зарядовой части. Таким образом, необходимо вычислить функцию Грина и статистическую сумму системы со сдвинутыми уровнями $\epsilon_\alpha \to \epsilon_\alpha + i\phi_0$.

4.1 Спин-зарядовое взаимодействие

Взаимодействие зарядовых и спиновых степеней свободы устроено следующим образом.

Если КТ слабо связана с окружением, то при температурах $T \ll E_c$ система находится в режиме кулоновской блокады. Число электронов на КТ с подавляющей вероятностью принимает только два значения $N = [N_0]$ и $N = [N_0] + 1$. Ясно, что намагниченность КТ не может быть больше $N/2$.

Таким образом, фиксируя число частиц на точке, зарядовая часть гамильтониана влияет на спиновую.

Ясно, что вдали от стоунеровской неустойчивости вероятность большой намагниченности системы мала. Поэтому спин-зарядовое взаимодействие становится существенным только вблизи стоунеровской неустойчивости.

5 Точное решение

5.1 Преобразование Вея - Нормана - Колоколова

Зная оператор эволюции системы

$$e^{it[J_\perp S_\perp^2 + J_z S_z^2]} = \prod_\alpha \int \prod_{n=1}^{N} d\theta_n \mathcal{T} e^{-\frac{it}{4N}[\frac{\theta_{n\perp}^2}{J_\perp} + \frac{\theta_{nz}^2}{J_z}]} e^{it\boldsymbol{\theta}_n \boldsymbol{s}_\alpha/N} \tag{26}$$

можно вычислить статистическую сумму. В переменных θ с оператором эволюции работать неудобно, так как он содержит T-экспоненту от суммы некоммутирующих операторов. Если сделать замену

$$\begin{gathered}
\theta_{1z,n} = \rho_{1,n} - \Psi_{1,n}^-(\Psi_{1,n}^\dagger + \Psi_{1,n-1}^\dagger) \\
\theta_{1,n}^- = \Psi_{1,n}^- \\
\theta_{1,n}^\dagger = -i\frac{\Psi_{1,n}^\dagger - \Psi_{1,n-1}^\dagger}{\Delta} + \frac{\rho_{1,n}(\Psi_{1,n}^\dagger + \Psi_{1,n-1}^\dagger)}{2} - \Psi_{1,n}^\dagger \Psi_{1,n-1}^\dagger \Psi_{1,n}^- \\
\theta_{2z,n} = \rho_{2n} - \Psi_{2,n}^\dagger(\Psi_{2,n}^- + \Psi_{2,n-1}^-) \\
\theta_{2,n}^\dagger = \Psi_{2,n}^\dagger \\
\theta_{2,n}^- = i\frac{\Psi_{2,n}^- - \Psi_{2,n-1}^-}{\Delta} + \frac{\rho_{2,n}(\Psi_{2,n}^- + \Psi_{2,n-1}^-)}{2} - \Psi_{2,n}^- \Psi_{2,n-1}^- \Psi_{2,n}^\dagger
\end{gathered} \tag{27}$$

T-экспонента сведется к произведению экспонент и статистическая сумма примет удобный для вычислений вид

$$\begin{aligned}
Z &= \operatorname{tr} \prod_{n_1,n_2} \int d\Psi_{1,n}^\dagger d\Psi_{1,n}^- d\rho_{1,n} d\Psi_{2,n}^\dagger d\Psi_{2,n}^- d\rho_{2n} e^{-i\sum \epsilon_\alpha n_\alpha t_1} e^{S^- \Psi_{1,n}^\dagger} e^{iS^z \sum \rho_{1,n}\Delta} e^{iS^\dagger \sum \Psi_{1,n}^- \Delta \exp(-\sum i\rho_{1,i}\Delta)} \\
&\times \; e^{-S^-\Psi_{1,1}^\dagger} e^{\frac{i\Delta}{2}\sum \rho_{1,n}} e^{i\sum \epsilon_\beta n_\beta t_2} e^{-S^\dagger \Psi_{2,n}^-} e^{iS^z \sum \rho_{2,n}\Delta} e^{iS^- \sum \Psi_{2,n}^\dagger \Delta \exp(\sum i\rho_{2,i}\Delta)} e^{S^\dagger \Psi_{2,1}^-} e^{-\frac{i\Delta}{2}\sum \rho_{2,n}} \\
&\times \; \exp(-i\frac{\Delta}{4}\sum[\frac{\rho_{1,n}^2}{J_z} - \frac{4i\Psi_{1,n}^-(\Psi_{1,n}^\dagger - \Psi_{1,n-1}^\dagger)}{\Delta J_\perp} + \frac{\kappa}{J_\perp}(2\rho_{1,n}\Psi_{1,n}^-(\Psi_{1,n}^\dagger + \Psi_{1,n-1}^\dagger) - 4(\Psi_{1,n}^-\Psi_{1,n}^\dagger)^2)]) \\
&\times \; \exp(i\frac{\Delta}{4}\sum[\frac{\rho_{2,n}^2}{J_z} + \frac{4i\Psi_{2,n}^\dagger(\Psi_{2,n}^- - \Psi_{2,n-1}^-)}{\Delta J_\perp} + \frac{\kappa}{J_\perp}(2\rho_{2,n}\Psi_{2,n}^\dagger(\Psi_{2,n}^- + \Psi_{2,n-1}^-) - 4(\Psi_{2,n}^-\Psi_{2,n}^\dagger)^2)])
\end{aligned} \tag{28}$$

где $\kappa = 1 - \frac{J_\perp}{J_z}$, $\Delta = \frac{t}{N}$.

Заметим, что $(\Psi_{1,n}^\dagger + \Psi_{1,n-1}^\dagger)/2$ в преобразовании (27) в непрерывном пределе дает $\Psi^\dagger(t)$. Казалось бы, дискретных выражений дающих $\Psi^\dagger(t)$ в пределе очень много, например вида $\mu\Psi_{1,n}^\dagger + (1-\mu)\Psi_{1,n-1}^\dagger$. Однако, если дискретизация $\Psi^\dagger(t)$ в первом порядке по Δ не равна $(\Psi_{1,n}^\dagger + \Psi_{1,n-1}^\dagger)/2$ приходится учитывать вклады порядка Δ^2. Такого рода затруднения приводят к тому, что проводить вычисления удобнее в дискретном представлении.

5.2 Вычисление Z

Введем интегрирование по дополнительной переменной η чтобы избавиться от слагаемых четвертой степени по Ψ:

$$\exp(-\frac{i\Delta\kappa}{J_\perp}(\Psi_n^\dagger\Psi_n^-)^2) = \int d\eta_n \exp(-\frac{i\Delta\kappa}{4J_\perp}[-\eta_n^2 + 4\eta_n\Psi_n^\dagger\Psi_n^-]) \tag{29}$$

Вычислим функциональный интеграл

$$\int \mathcal{D}\psi \exp\{\sum_0^\infty[\psi_n^+\frac{\psi_n^- - \psi_{n-1}^-}{\Delta} - (i\eta_n - i\rho_n)\psi_n^+(\psi_n^- + \psi_{n-1}^-)/2])]\Delta\}. \tag{30}$$

Для этого сделаем следующее преобразование

$$\psi_n^+ = \chi_n^+ \exp[\alpha_n] \tag{31}$$

$$\psi_n^- = \chi_n^- \exp[\beta_n] \tag{32}$$

Получим

$$\int \mathcal{D}\eta\mathcal{D}\rho\mathcal{D}\chi J \exp\{\sum_0^\infty e^{\alpha_n+\beta_n}[\chi_n^+\frac{\chi_n^- - \chi_{n-1}^-}{\Delta}](1 - (i\rho_n - i\eta_n)\Delta/2) \quad + \tag{33}$$

$$+\chi_n^+\frac{\chi_{n-1}^-}{\Delta}(e^{\alpha_n+\beta_n} - e^{\alpha_n+\beta_{n-1}} - (i\eta_n - i\rho_n)\Delta(e^{\alpha_n+\beta_n} + e^{\alpha_n+\beta_{n-1}})/2)]\Delta\}$$

где $J = e^{\sum_0^\infty(\alpha_n+\beta_n)}$.

Чтобы нелинейность исчезла, нужно наложить наложить следующие условия на α_n, β_n :

$$\alpha_n + \beta_n = -\ln(1 - (i\rho_n - i\eta_n)\Delta/2) \tag{34}$$

$$\beta_n - \beta_{n-1} = \ln(\frac{1 + i\eta_n/2 - i\rho_n/2}{1 - i\eta_n/2 + i\rho_n/2}) \tag{35}$$

В главном порядке по Δ

$$\alpha_n = i\kappa\Delta\sum(\rho_n - \eta_n) \tag{36}$$

$$\beta_n = -i\kappa\Delta\sum(\rho_n - \eta_n) \tag{37}$$

Якобиан преобразования

$$J = e^{i\frac{\kappa}{2}\sum(\rho_n - \eta_n)} \tag{38}$$

Заметим, что можно легко потерять этот Якобиан, если рассматривать задачу в непрерывном пределе.

Распишем явно tr в выражении (28)

$$\begin{aligned}
Z \;&\propto\; \int\prod_n d\chi^\dagger_{1,n}d\chi^-_{1,n}d\chi^\dagger_{2,n}d\chi^-_{2,n}d\rho_{1,n}d\rho_{2,n}d\eta_{1,n}d\eta_{2,n}\prod_\gamma(1+e^{-2i\epsilon_\gamma(t_1-t_2)}\\
&+\; 2e^{-i\epsilon_\gamma(t_1-t_2)}\cos(\frac{1}{2}\sum\Delta\rho_{1,n_1}+\frac{1}{2}\sum\Delta\rho_{2,n_2})\\
&+\; e^{-i\epsilon_\gamma(t_1-t_2)}e^{\frac{i}{2}\sum\Delta\rho_{1,n_1}-\frac{i}{2}\sum\Delta\rho_{2,n_2}}(-\chi^\dagger_{1,n_1}\chi^-_{2,n_2}e^{i\kappa\Delta\sum(\rho_{2n_2}-\eta_{2,n_2}-\rho_{1,n_1}+\eta_{1,n_1})}\\
&-\; i\chi^-_{2,n_2}e^{i\kappa\Delta\sum(\rho_{2,n_2}-\eta_{2,n_2})}\sum\chi^\dagger_{2,n_2}e^{i\sum\Delta\rho_{2,n_2}-i\kappa\Delta\sum(\rho_{2,n_2}-\eta_{2,n_2})}\\
&+\; i\chi^\dagger_{n_1}e^{-i\kappa\Delta\sum(\rho_{1,n_1}-\eta_{1,n_1})}\sum\chi^-_{n_1}e^{-i\sum\Delta\rho_{1,n_1}+i\kappa\Delta\sum(\rho_{1,n_1}-\eta_{1,n_1})}\\
&-\; \sum\chi^-_{1,n_1}e^{i\kappa\Delta\sum(\rho_{1,n_1}-\eta_{1,n_1})-\sum i\Delta\rho_{1,n_1}}\\
&\times\; \sum\chi^\dagger_{2,n_2}e^{-i\kappa\Delta\sum(\rho_{2,n_2}-\eta_{2,n_2})+i\sum\Delta\rho_{2,n_2}})\\
&\times\; \exp(-\frac{i\Delta}{4J_z}\sum\rho^2_{1,n_1}-\sum\frac{i\chi^-_{1,n}(\chi^\dagger_{1,n}-\chi^\dagger_{1,n-1})}{\Delta J_\perp}+\frac{i\Delta}{4J_z}\sum\rho^2_{2,n_2}+\sum\frac{i\chi^\dagger_{2,n}(\chi^-_{2,n}-\chi^-_{2,n-1})}{\Delta J_\perp}\\
&+\; \frac{i\kappa\Delta}{4J_\perp}(-\sum\eta^2_{1,n_1}+\sum\eta^2_{2,n_2})+\frac{i}{2}(1-\kappa)\sum\Delta\rho_{1,n_1}-\frac{i}{2}(1-\kappa)\sum\Delta\rho_{2,n_2}\\
&+\; \frac{i}{2}\kappa\sum\Delta\eta_{1,n_1}-\frac{i}{2}\kappa\sum\Delta\eta_{2,n_2})
\end{aligned} \tag{39}$$

Здесь мы не следим за множителями не зависящими от спектра уровней на точке. Этот множитель мы восстановим позже вычислив статистическую сумму для простейшей системы.

Введем следующие обозначения

$$b_\gamma = 1+e^{-2i\epsilon_\gamma(t_1-t_2)}+2e^{-i\epsilon_\gamma(t_1-t_2)}\cos(\frac{1}{2}\sum\Delta\rho_{1,n_1}+\frac{1}{2}\sum\Delta\rho_{1,n_2}) \tag{40}$$

$$\tilde{d}_\gamma = -e^{-i\epsilon_\gamma(t_1-t_2)}e^{\frac{i}{2}\sum\Delta\rho_{1,n_1}-\frac{i}{2}\sum\Delta\rho_{2,n_2}}e^{-i\kappa\Delta\sum(\rho_{2n_2}-\eta_{2,n_2}-\rho_{1,n_1}+\eta_{1,n_1})} \tag{41}$$

$$Y_1 = e^{i\kappa\Delta\sum(\rho_{2,n_2}-\eta_{2,n_2})}\sum e^{-i\kappa\Delta\sum(\rho_{1,n_1}-\eta_{1,n_1})-i\sum\Delta\rho_{1,n_1}} \tag{42}$$

$$Y_2 = e^{-i\kappa\Delta\sum(\rho_{1,n_1}-\eta_{1,n_1})}\sum e^{i\kappa\Delta\sum(\rho_{2,n_2}-\eta_{2,n_2})+i\sum\Delta\rho_{2,n_2}} \tag{43}$$

Тогда после интегрирования по χ_+,χ_-

$$\begin{aligned}
&Z \propto\\
&\int\prod d\rho_{1,n}d\rho_{2,n}d\eta_{1,n}d\eta_{2,n}\exp(-\frac{i\Delta}{4J_z}\sum\rho^2_{1,n_1}+\frac{i\Delta}{4J_z}\sum\rho^2_{2,n_2}+\frac{i\kappa\Delta}{4J_\perp}(-\sum\eta^2_{1,n_1}+\sum\eta^2_{2,n_2}) +\\
&+\frac{i}{2}(1-\kappa)\sum\Delta\rho_{1,n_1}-\frac{i}{2}(1-\kappa)\sum\Delta\rho_{2,n_2} +\\
&\frac{i}{2}\kappa\sum\Delta\eta_{1,n_1}-\frac{i}{2}\kappa\sum\Delta\eta_{2,n_2})\prod_\gamma(-\int_{|z|=1}\frac{dz_\gamma}{2\pi i z^2_\gamma})e^{-b} \times\\
&\int_0^\infty dy\exp[-y-iJ_\perp\tilde{d}(Y_1-Y_2)y]
\end{aligned} \tag{44}$$

Выполним следующую замену:

$$\xi_{1,m} = -i\kappa\sum\Delta(\rho_{1,m}-\eta_{1,m})+i\sum\rho_{1,m}\Delta+\frac{i}{2}\sum\rho_{2,n_2}\Delta-\frac{i}{2}\sum\rho_{1,n_1}\Delta+i\kappa\sum\Delta(\rho_{1,n_1}-\eta_{1,n_1}) \tag{45}$$

$$\xi_{2,m} = i\kappa\sum\Delta(\rho_{2,m}-\eta_{2,m}) - i\sum\rho_{2,m}\Delta + \frac{i}{2}\sum\rho_{2,n_2}\Delta - \frac{i}{2}\sum\rho_{1,n_1}\Delta - i\kappa\sum\Delta(\rho_{2,n_2}-\eta_{2,n_2}) \tag{46}$$

$$\begin{aligned}
Z &\propto \int dk\prod_n d\xi_{1,n}d\xi_{2,n}d\eta_{1,n}d\eta_{2,n}\prod_\gamma(-\int_{|z|=1}\frac{dz_\gamma}{2\pi i z_\gamma^2})\exp(\frac{i\Delta}{4J_z}\sum\frac{(\dot\xi_{1,n_1}-i\kappa\eta_{1,n_1})^2}{(1-\kappa)^2}\\
&- \frac{i\Delta}{4J_z}\sum\frac{(\dot\xi_{2,n_2}+i\kappa\eta_{2,n_2})^2}{(1-\kappa)^2} - \frac{i\kappa\Delta}{4J_\perp}(\sum(-\eta_{2,n_2}^2+\eta_{1,n_1}^2)\\
&+ \frac{\Delta}{2}(1-\kappa)\sum\frac{(\dot\xi_{1,n_1}-i\kappa\eta_{1,n_1})}{(1-\kappa)} + \frac{\Delta}{2}(1-\kappa)\sum\frac{(\dot\xi_{2,n_2}+i\kappa\eta_{2,n_2})}{(1-\kappa)}\\
&+ \frac{i}{2}\kappa\sum\Delta\eta_{1,n_1} - \frac{i}{2}\kappa\sum\Delta\eta_{2,n_2}\\
&+ ik\Delta(\xi_{10}-\xi_{20}-\kappa(\xi_{1n1}-\xi_{2n2}) + i\kappa\sum(\eta_{1n1}+\eta_{2n2})))\\
&\times \int_0^\infty dy\exp[-y - iJ_\perp d(\sum\Delta e^{-\xi_{1,n_1}} - \sum\Delta e^{-\xi_{2,n_2}})y]e^{-b},
\end{aligned}$$

где $\dot\xi_n = \frac{\xi_n-\xi_{n-1}}{\Delta}$. Здесь мы учли граничные условия по ξ с помощью δ-функции(интеграл по k).

Возьмем интеграл по η

$$\begin{aligned}
Z &\propto \int dk\prod d\xi_{1,n}d\xi_{2,n}\prod_\gamma(-\int_{|z|=1}\frac{dz_\gamma}{2\pi i z_\gamma^2})\exp(\frac{i\Delta}{4J_\perp}\sum\dot\xi^2{}_{1,n1} - \frac{i\Delta}{4J_\perp}\sum\dot\xi^2{}_{2,n2}\\
&+ \frac{1}{2}(1+2ik\kappa)\sum\dot\xi_{1,n1} + \frac{1}{2}(1-2ik\kappa)\sum\dot\xi_{2,n2})\\
&\times \exp(ik(\xi_{10}-\xi_{20}-\kappa(\xi_{1n1}-\xi_{2n2})))\\
&\times \exp(-iJ_z\kappa k^2(1-\kappa)^2 t_{12})\\
&\times \int_0^\infty dy\exp[-y - iJ_\perp d(\sum\Delta e^{-\xi_{1,n_1}} - \sum\Delta e^{-\xi_{2,n_2}})y]e^{-b}
\end{aligned}$$

Проинтегрируем по $\xi_{1,1},\xi_{2,1}..\xi_{1,N-1},\xi_{2,N-1}$ и обозначим $\xi_{1,N},\xi_{2,N}$ за ξ_1,ξ_2

$$\begin{aligned}
Z &\propto \prod_\gamma(-\int_{|z|=1}\frac{dz_\gamma}{2\pi i z_\gamma^2})e^{-b}\int_0^\infty\frac{dy}{4yd}e^{-y}\int_{-\infty}^\infty dkd\xi_1 d\xi_2 d\xi_{01}d\xi_{02}\delta(\xi_1+\xi_2+2\ln 4yd)e^{-2d\operatorname{ch}\frac{\xi_1-\xi_2}{2}}\\
&\times \langle\xi_1|e^{-iH_J t_1}e^{(-1/2+ik(1-\kappa))\xi}|\xi_{01}\rangle\langle\xi_{02}|e^{(-1/2-ik(1-\kappa))\xi}e^{iH_J t_2}|\xi_2\rangle\\
&\times \exp(-iJ_z\kappa k^2(1-\kappa)^2 t_{12})
\end{aligned}$$

где гамильтониан

$$H_J = -J_\perp\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{J_\perp}{4}e^{-\xi} \tag{47}$$

После интегрирования по y

$$\begin{aligned}
Z &\propto \prod_\gamma(-\int_{|z|=1}\frac{dz_\gamma}{2\pi i z_\gamma^2})\frac{e^{-b}}{d}\int_{-\infty}^\infty dkd\xi_1 d\xi_2 d\xi_{01}d\xi_{02}F(\eta_1,\eta_2)\\
&\times \langle\xi_1|e^{-iH_J t_1}e^{(-1/2+ik(1-\kappa))\xi}|\xi_{01}\rangle\langle\xi_{02}|e^{(-1/2-ik(1-\kappa))\xi}e^{iH_J t_2}|\xi_2\rangle\\
&\times \exp(-iJ_z\kappa k^2(1-\kappa)^2 t_{12})
\end{aligned}$$

$$\eta_{1,2} = e^{-\xi_{1,2}/2} \tag{48}$$

$$F(\eta_1, \eta_2) = \frac{16}{\pi^2} \int_0^\infty d\nu\nu\,\mathrm{sh}(2\pi\nu) K_{2i\nu}(\eta_1) K_{2i\nu}(\eta_2) K_{2i\nu}(2d) \Rightarrow \tag{49}$$

$$\begin{aligned} Z &\propto \prod_\gamma (-\int_{|z|=1} \frac{dz_\gamma}{2\pi i z_\gamma^2}) \frac{e^{-b}}{d} \int_{-\infty}^\infty dk d\xi_{01} d\xi_{02} d\nu \\ &\times K_{2i\nu}(2d) \langle \xi_{02} | e^{(-1/2 - ik(1-\kappa))\xi} e^{iH_J t_2} | \nu \rangle \langle \nu | e^{-iH_J t_1} e^{(-1/2+ik(1-\kappa))\xi} | \xi_{01} \rangle \\ &\times \exp(-iJ_z \kappa k^2 (1-\kappa)^2 t_{12}) \end{aligned}$$

где $t_{12} = t_1 - t_2$

$$\begin{aligned} Z &\propto \prod_\gamma (-\int_{|z|=1} \frac{dz_\gamma}{2\pi i z_\gamma^2}) \frac{e^{-b}}{d} \int_{-\infty}^\infty d\xi_+ d\xi_- d\nu dq \\ &\times K_{2i\nu}(2d) e^{-iJ_\perp \nu^2 t_{12}} \langle \xi_{02} | \nu \rangle \langle \nu | \xi_{01} \rangle \\ &\times \exp(-iJ_z \kappa q^2 t_{12}) e^{4iq\xi_-} e^{-2\xi_+} \end{aligned}$$

где $\xi_+ = \frac{\xi_{01}+\xi_{02}}{4}$, $\xi_- = \frac{\xi_{01}-\xi_{02}}{4}$,$q = (1-\kappa)k$.

$$\begin{aligned} Z &\propto \prod_\gamma (-\int_{|z|=1} \frac{dz_\gamma}{2\pi i z_\gamma^2}) \frac{e^{-b}}{d} \int_{-\infty}^\infty d(e^{-\xi_+}) d\xi_- d\nu dq \\ &\times K_{2i\nu}(2d) e^{-iJ_\perp \nu^2 t_{12}} \nu\,\mathrm{sh}\,2\pi\nu K_{2i\nu}(e^{-\xi_+ - \xi_-}) K_{2i\nu}(e^{-\xi_+ + \xi_-}) \\ &\times \exp(-iJ_z \kappa q^2 t_{12}) e^{4iq\xi_-} e^{-\xi_+} \end{aligned}$$

Пользуясь следующими соотношениями

$$(\mathrm{GR}6.521(3)) \qquad \int_0^\infty x K_l(ax) K_l(bx) dx = \frac{\pi (ab)^{-l} (a^{2l} - b^{2l})}{2\sin(l\pi)(a^2 - b^2)}, \tag{50}$$

$$(\mathrm{GR}8.432) \qquad K_l(x) = \int_0^\infty e^{-x\,\mathrm{ch}\,t} \mathrm{ch}(lt) dt, \tag{51}$$

получим

$$\begin{aligned} Z &\propto \prod_\gamma (-\int_{|z|=1} \frac{dz_\gamma}{2\pi i z_\gamma^2}) \frac{e^{-b}}{d} \int_{-\infty}^\infty d\xi_- d\nu dy dq \\ &\times e^{-iJ_\perp \nu^2 t_{12}} \frac{\mathrm{sh}(4i\nu\xi_-)}{\mathrm{sh}(2\xi_-)} \\ &\times \exp(\frac{i(2\xi_-)^2}{\kappa J_z t_{12}}) \exp(-2d\,\mathrm{ch}\,y) \frac{\partial}{\partial y} \exp(2i\nu y) \exp(-iJ_z \kappa q^2 t_{12}) e^{4iq\xi_-}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z &\propto \int_{-\infty}^\infty \prod_{\gamma,\sigma} (1 + e^{-\beta\epsilon_\gamma + y\sigma}) d\xi_- d\nu dy dq\,\mathrm{sh}(y) \\ &\times e^{-iJ_\perp \nu^2 t_{12}} \frac{\mathrm{sh}(4i\nu\xi_-)}{\mathrm{sh}(2\xi_-)} \\ &\times \exp(\frac{i(2\xi_-)^2}{\kappa J_z t_{12}}) \exp(2i\nu y) \exp(-iJ_z \kappa q^2 t_{12}) e^{4iq\xi_-} \end{aligned}$$

Чтобы получить получить стат.сумму нужно положить $t_{12} = -i\beta$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dhd\xi_- \prod_{\gamma,\sigma}(1+e^{-\beta\epsilon_\gamma+\beta h\sigma})\frac{\operatorname{sh}(\beta h)\operatorname{sh}(\frac{4\xi_- h}{J_\perp})}{\operatorname{sh}(2\xi_-)}\exp(\frac{-\beta h^2}{J_\perp} - \frac{4\xi_-^2}{\beta}(\frac{J_z}{(J_z-J_\perp)J_\perp}) \tag{52}$$

Статистическую сумму для системы с магнитным полем B вдоль оси z

$$\begin{aligned} Z &\propto \prod_\gamma(-\int_{|z|=1}\frac{dz_\gamma}{2\pi i z_\gamma^2})\frac{e^{-b}}{d}\int_{-\infty}^{\infty} de^{-\xi_+}d\xi_- d\nu dq \\ &\times K_{2i\nu}(2d)e^{-\beta J_\perp \nu^2}\nu \operatorname{sh} 2\pi\nu K_{2i\nu}(e^{-\xi_+-\xi_-})K_{2i\nu}(e^{-\xi_++\xi_-}) \\ &\times \exp(-\beta J_z \kappa q^2)e^{4iq\xi_-+i\beta q\Delta_B}e^{-\xi_+}, \end{aligned}$$

(где $\Delta B = -\mu_B g_l B$ -зеемановское расщепление, связанное с полем B) легко получить сдвинув $S_z \to S_z + \frac{B}{2J_z}$ в выражении для оператора эволюции (26) и домножив его на $e^{-\frac{it\Delta_B^2}{4J_z}}$. Это приведет к появлению фактора $e^{\frac{iB}{2J_z}\sum\rho_{1,n}\Delta}e^{\frac{i\Delta_B}{2J_z}\sum\rho_{2,n}\Delta}e^{-\frac{it_{12}\Delta_B^2}{4J_z}}$ в выражении (28) и повлияет на граничные условия по ξ в (47).

$$Z \propto \int_{-\infty}^{\infty} dhd\xi_- \prod_{\gamma,\sigma}(1+e^{-\beta\epsilon_\gamma+\beta h\sigma})\frac{\operatorname{sh}(\beta h)\operatorname{sh}(\frac{4\xi_- h}{J_\perp})}{\operatorname{sh}(2\xi_-)}\exp(\frac{-\beta h^2}{J_\perp} - \frac{4\xi_-^2}{\beta}\frac{1}{J_\perp} - \frac{4(\xi_- + \frac{\beta\Delta_B}{4})^2}{\beta}\frac{1}{J_z-J_\perp}) \tag{53}$$

Нормировочный множитель вычисляется в системе без уровней.

$$\begin{aligned} Z &= \frac{2\exp(-\frac{\beta J_\perp}{4})}{\pi\sqrt{J_\perp(J_z-J_\perp)}}\int_{-\infty}^{\infty} dhd\xi_- \prod_{\gamma,\sigma}(1+e^{-\beta\epsilon_\gamma+\beta h\sigma})\frac{\operatorname{sh}(\beta h)\operatorname{sh}(\frac{4\xi_- h}{J_\perp})}{\operatorname{sh}(2\xi_-)}\exp(\frac{-\beta h^2}{J_\perp} - \frac{4\xi_-^2}{\beta}\frac{1}{J_\perp} \\ &- \frac{4(\xi_- + \frac{\beta\Delta_B}{4})^2}{\beta}\frac{1}{J_z-J_\perp}) \end{aligned} \tag{54}$$

Заменив $\epsilon_\alpha \to \epsilon_\alpha + i\phi_0$ получим $Z[\phi_0]$

Статистическая сумма имеет наглядное представление в виде сумм

$$Z = \sum_{n_\uparrow n_\downarrow}\sum_{s=-m}^{m} Z_{n_\uparrow}Z_{n_\downarrow}\exp(\beta\mu n + \beta J_\perp m(m+1) - \beta E_c(n-N_0)^2 - \beta\Delta_B s + \beta(J_z-J_\perp)s^2) \tag{55}$$

где $m = (n_\uparrow - n_\downarrow)/2$.

Оно получается из (54) следующим образом. Заменим

$$\prod_{\gamma,\sigma}(1+e^{-\beta\epsilon_\gamma+\beta h\sigma}) \to \sum_{N=0}^{\infty} Z_N e^{N\beta h\sigma} \tag{56}$$

где

$$Z_n = \oint \frac{dz}{2\pi i}z^{-n-1}\prod_\gamma(1+ze^{-\beta\epsilon_\gamma}) \tag{57}$$

и получим

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{n_\uparrow n_\downarrow} Z_{n_\uparrow} Z_{n_\downarrow} e^{\beta\mu n - \beta E_c(n-N_0)^2} \frac{\beta \exp(-\frac{\beta J_\perp}{4})}{2\pi\sqrt{J_\perp(J_z - J_\perp)}} \int_{-\infty}^{\infty} dh d\xi \frac{\operatorname{sh}(\beta h)\operatorname{sh}(\frac{\beta\xi h}{J_\perp})}{\operatorname{sh}(\beta\xi/2)} \\
&\times \exp(\frac{-\beta h^2}{J_\perp} + \beta h(n_\uparrow - n_\downarrow) - \frac{\beta\xi^2}{4}\frac{1}{J_\perp} - \beta(\xi+\Delta_B)^2 \frac{1}{4(J_z - J_\perp)}). \qquad (58)
\end{aligned}
$$

Возьмем интеграл по h

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{n_\uparrow n_\downarrow} Z_{n_\uparrow} Z_{n_\downarrow} e^{\beta\mu n - \beta E_c(n-N_0)^2 + \beta J_\perp m(m+1)} \frac{\sqrt{\beta}\exp(-\frac{\beta J_\perp}{4})}{2\sqrt{\pi}\sqrt{J_z - J_\perp}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\operatorname{sh}(\beta\xi(2m+1)/2)}{\operatorname{sh}(\beta\xi/2)} \\
&\times \exp(-\beta(\xi+\Delta_B)^2 \frac{1}{4(J_z - J_\perp)}). \qquad (59)
\end{aligned}
$$

Так как

$$
\frac{\operatorname{sh} x(2m+1)}{\operatorname{sh} x} = \sum_{s=-m}^{m} e^{2xs} \qquad (60)
$$

взяв интеграл по ξ придем к (55)

5.3 Спиновая восприимчивость

Определим продольную спиновую восприимчивость как

$$
\chi_{zz} = T \frac{\partial^2}{\partial \Delta_B^2} \ln Z. \qquad (61)
$$

Такое определение отличается от обычного

$$
\chi_{zz} = T \frac{\partial^2}{\partial B^2} \ln Z \qquad (62)
$$

только фактором $\mu_B^2 g_l^2$.

Используя выражения для статистической суммы находим, что

$$
\begin{aligned}
\chi_{zz} &= \frac{1}{Z}\sum_{n} e^{\beta\mu n - \beta E_c(n-N_0)^2} \frac{\beta\exp(-\frac{\beta J_\perp}{4})}{2\pi\sqrt{J_\perp(J_z - J_\perp)}} \int_{-\infty}^{\infty} dh d\xi_- \prod_{\gamma,\sigma}(1 + e^{-\beta\epsilon_\gamma + \beta h\sigma}) \frac{\operatorname{sh}(\beta h)\operatorname{sh}(\frac{\beta\xi h}{J_\perp})}{\operatorname{sh}(\beta\xi/2)} \\
&\times (\frac{-1}{2(J_z - J_\perp)} + \frac{\beta(\xi+\Delta_B)^2}{4(J_z - J_\perp)^2}) \exp(\frac{-\beta h^2}{J_\perp} - \frac{\beta(\xi)^2}{4}\frac{1}{J_\perp} - (\xi+\Delta_B)^2 \frac{\beta}{4(J_z - J_\perp)}) \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{n_\uparrow n_\downarrow} Z_{n_\uparrow} Z_{n_\downarrow} \exp(\beta\mu n + \beta J_\perp m(m+1) - \beta E_c(n-N_0)^2) \\
&\times \sum_{s=-m}^{m} s^2 \exp(-\beta B s + \beta(J_z - J_\perp)s^2) \qquad (63)
\end{aligned}
$$

Недиагональные компоненты

$$
\chi_{xz} \propto \langle \hat{S}_x \hat{S}_z \rangle \propto \operatorname{Tr}(\hat{S}_x \hat{S}_z e^{-\beta\hat{H}}) = 0, \qquad (64)
$$

так как $\hat{S}_z e^{-\beta\hat{H}}$ диагонально по спиновым индексам, а $\hat{S}_x$ не имеет диагональных компонент.

Поперечная спиновая восприимчивость

$$\chi_{+-}(t) = \frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}([S^+(t), S^-(0)]e^{-\beta H}), \tag{65}$$

где $S_+ = S_x + iS_y, S_- = S_x - iS_y$, зависит от времени, так как S_x, S_y не коммутируют с гамильтонианом.

Решение уравнений движения для спина при осевой анизотропии без магнитного поля

$$\hat{S}_z(t) = \hat{S}_z(0) \tag{66}$$

$$\hat{S}^+(t) = e^{2(J_\perp - J_z)i\hat{S}_z t}\hat{S}^+(0)e^{-i(J_\perp - J_z)t} \tag{67}$$

$$\hat{S}^-(t) = e^{-2(J_\perp - J_z)i\hat{S}_z t}\hat{S}^-(0)e^{-i(J_\perp - J_z)t}. \tag{68}$$

позволяет найти

$$\chi_{+-} = \frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}([S_+(t), S_-(0)]e^{-\beta H}) = 2\,\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_+}[\cos(\kappa J_z t)S_z + i\sin(\kappa J_z t)(S_x S_x + S_y S_y)], \tag{69}$$

где $\hat{H}_+ = \hat{H} + \frac{2\kappa i t J_z}{\beta}\hat{S}_z = \hat{H} + \Delta_B^{\mathrm{eff}}\hat{S}_z$.

$$\chi_{+-} = \frac{2T}{Z}[\cos(\kappa J_z t)\frac{\partial}{\partial\Delta_B} + i\sin(\kappa J_z t)\frac{\partial}{\partial J_\perp}]Z_+ \tag{70}$$

где Z_+ статистическая сумма системы с гамильтонианом $\hat{H}_+$.

В представлении через суммы

$$\begin{aligned}
\chi_{+-}(\omega) &= \frac{2}{Z}\int dt\, e^{i(\omega+\Delta_B)t}\sum_{n_\uparrow n_\downarrow}\sum_{s=-m}^{m} Z_{n_\uparrow}Z_{n_\downarrow}\exp(\beta\mu n + \beta J_\perp m(m+1) - \beta E_c(n-N_0)^2 \\
&- \beta\Delta_B s + 2i(J_z - J_\perp)ts + \beta(J_z - J_\perp)s^2)[-s\cos(J_z - J_\perp)t \\
&+ i(m(m+1) - s^2)\sin(J_z - J_\perp)t] \\
&= -\frac{1}{Z}\sum_{n_\uparrow n_\downarrow}\sum_{s=-m}^{m} Z_{n_\uparrow}Z_{n_\downarrow}\exp(\beta\mu n + \beta J_\perp m(m+1) - \beta E_c(n-N_0)^2 \\
&+ \beta(J_z - J_\perp)s^2)(m(m+1) - s^2 - s)[e^{\beta\Delta_B s}(\omega + \Delta_B + (2s+1)(J_z - J_\perp) + i0)^{-1} \\
&- e^{-\beta\Delta_B s}(\omega + \Delta_B - (2s+1)(J_z - J_\perp) + i0)^{-1}]
\end{aligned} \tag{71}$$

Для поперечной спиновой восприимчивости есть также выражение через стат. сумму в мнимом магнитном поле

$$\chi_{+-}(\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{s=\pm}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{d\lambda}{2\pi}\sum_n e^{-i\lambda n}\frac{1}{\omega - (J_z - J_\perp)(n+s) + i0}[s\frac{\partial}{\beta\partial J_\perp} - \frac{n}{2}]Z[2i\lambda], \tag{72}$$

где

$$Z[2i\lambda] = \frac{1}{2\sqrt{\pi\beta(J_z - J_\perp)}}\Big(\frac{\delta}{\delta - J_\perp}\Big)^{1/2} e^{\frac{\beta J_\perp^2}{4(\delta - J_\perp)}} e^{\frac{\lambda^2}{\beta J_*}}\sum_{p=\pm} I_0(\frac{\delta}{\delta - J_\perp} + 2ip\lambda\frac{1}{\beta(J_z - J_\perp)}; \sqrt{\beta J_*}) \tag{73}$$

и

$$I_0(a,b)=\int_{-\infty}^{\infty}dx\frac{\operatorname{sh}ax}{\operatorname{sh}x}e^{-\frac{x^2}{b^2}} \tag{74}$$

Заметим, что у χ_{+-} есть нетривиальная мнимая часть. Это означает, что в системе появилась диссипация.

$\operatorname{Im}\chi_{+-}$ представляет из себя сумму дельта функций следующего вида

$$\begin{aligned}\operatorname{Im}\chi_{+-}(\omega) &= \frac{\pi\operatorname{sgn}(\omega+\Delta_B)}{Z}\sum_n \delta(\omega+\Delta_B-(2n+1)\delta J)\exp(-\beta(\delta-J_z)x^2) \\ &\times\; e^{-\beta\Delta_B x\operatorname{sgn}(\omega+\Delta_B)}(1-\exp(\beta(\omega\operatorname{sgn}(\omega+\Delta_B)))F(x)\end{aligned} \tag{75}$$

где $x=\frac{|\omega+\Delta_B|}{2|\delta J|}-\frac{1}{2}$, $\delta J=J_z-J_\perp$,

$$F(x)=\sum_{k=1}^{+\infty}[(k^2+k+2kx)e^{\beta J_\perp(x+k)}+(k^2-k+2(k-1)x)e^{-\beta J_\perp(x+k)}]\exp(-\beta(\delta-J_\perp)k^2+k(-2\beta(\delta-J_\perp)x)) \tag{76}$$

6 Предельные случаи.

6.1 Статистическая сумма и χ_{zz}

При температуре $\delta\ll T\ll\mu(\ln\overline{J}_\perp/T)^{-1}$ произведение $\prod_{\gamma,\sigma}(1+e^{-\beta\epsilon_\gamma+\beta h\sigma})\sim e^{-2\beta\Omega_0(\mu)+\frac{\beta h^2}{\delta}}$. После подстановки интеграл по h берется

$$\begin{aligned}Z &= \frac{2\sqrt{\overline{J}_\perp}e^{-2\beta\Omega_0(\mu)}}{\sqrt{\pi\beta}\sqrt{J_\perp(J_z-J_\perp)}}\int_{-\infty}^{\infty}d\xi_-\frac{\operatorname{sh}(2\xi_-\frac{\overline{J}_\perp}{J_\perp})}{\operatorname{sh}(2\xi_-)}\exp(\frac{\beta(\overline{J}_\perp-J_\perp)}{4}+\frac{4\xi_-^2}{\beta}\frac{\overline{J}_\perp-J_\perp}{J_\perp^2} \\ &- \frac{4(\xi_-+\frac{\beta\Delta_B}{4})^2}{\beta}\frac{1}{J_z-J_\perp})\end{aligned} \tag{77}$$

где $\overline{J}_\perp=\frac{\delta J_\perp}{\delta-J_\perp}$.

Введем новую величину обратно пропорциональную коэффициенту при ξ_-^2

$$J^*=(\frac{1}{J_z-J_\perp}-\frac{\overline{J}_\perp-J_\perp}{J_\perp^2})^{-1}=(\frac{1}{J_z-J_\perp}-\frac{1}{\delta-J_\perp})^{-1}=\frac{(J_z-J_\perp)(J_\perp-\delta)}{(J_z-\delta)} \tag{78}$$

Таким образом (77) перепишется следующим образом

$$Z=\frac{\sqrt{\delta}e^{-2\beta\Omega_0(\mu)}}{\sqrt{\pi\beta(\delta-J_\perp)(J_z-J_\perp)}}\exp(\frac{\beta J_\perp^2}{4(\delta-J_\perp)})\exp(\frac{\beta\Delta_B^2}{4(\delta-J_z)})I(a,b,c), \tag{79}$$

где

$$I(a,b,c)=\int dx\frac{\operatorname{sh}(ax)}{\operatorname{sh}(x)}\exp(-\frac{1}{b^2}(x+c)^2) \tag{80}$$

есть функция трех независимых параметров

$$\begin{aligned}a &= \frac{\delta}{\delta-J_\perp} \\ b &= \sqrt{\beta J^*} \\ c &= \frac{\beta(\delta-J_\perp)\Delta_B}{2(\delta-J_z)}\end{aligned} \tag{81}$$

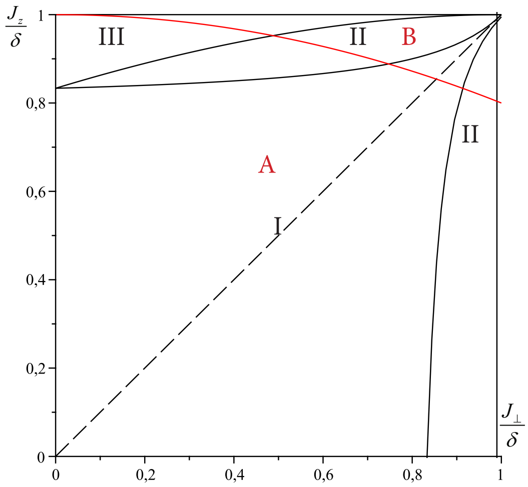

Рис. 2: Области соотвествующие различным предельным случаям. $T/\delta = 5$

Есть несколько предельных случаев по соотношению этих параметров друг с другом. Области по параметрам соотвествующие этим предельным случаям приведены на Рис. 6.1
При $b \ll 1, 1/a$ (область I)

$$I = \sqrt{\pi} b \frac{\text{sh}(ac)}{\text{sh}(c)} \tag{82}$$

$$\begin{aligned} \chi_{zz} &= \frac{1}{2(\delta - J_z)} + \frac{\beta(\delta - J_\perp)}{(\delta - J_z)}(a^2 - 2a \,\text{cth}\, ac \,\text{cth}\, c - 1 + 2\,\text{cth}^2\, c) \\ &- \frac{\Delta_B}{(\delta - J_z)^2}\left(\frac{a \,\text{ch}\, ac}{\text{sh}\, ac} - \frac{\text{ch}\, c}{\text{sh}\, c}\right) + \frac{\beta \Delta_B^2}{4(\delta - J_z)^2} \end{aligned} \tag{83}$$

При $B \to 0$

$$\chi_{zz} = \frac{1}{2(\delta - J_z)} + \left[\frac{\delta^2}{(\delta - J_\perp)^2} - 1\right] \frac{\beta(\delta - J_\perp)}{12(\delta - J_z)} \tag{84}$$

При $1/a \ll b \ll 1$ (область II)
При $|c| < b^2 a/4$

$$I = \sqrt{\pi} b e^{\frac{a^2 b^2}{4}} \left(\frac{e^{ac}}{\text{sh}(c + ab^2/2)} - \frac{e^{-ac}}{\text{sh}(c - ab^2/2)}\right) \tag{85}$$

$$\chi_{zz} = \frac{\beta \Delta_B^2}{4(\delta - J_z)^2} + \frac{\beta \delta^2}{4(\delta - J_z)^2} + \frac{\beta \delta \Delta_B}{2(\delta - J_z)^2} \frac{e^{ac}\,\text{sh}(c - \frac{ab^2}{2}) + e^{-ac}\,\text{sh}(c + \frac{ab^2}{2})}{e^{ac}\,\text{sh}(c - \frac{ab^2}{2}) - e^{-ac}\,\text{sh}(c + \frac{ab^2}{2})} \tag{86}$$

При $|c| > b^2 a/4$

$$I = \sqrt{\pi} b e^{\frac{a^2 b^2}{4}} \frac{e^{a|c|}}{\text{sh}(|c| + ab^2/2)} \tag{87}$$

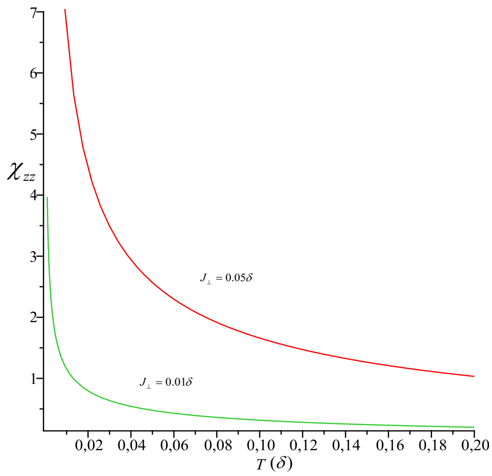

Рис. 3: График зависимости χ_{zz} от температуры для $J_\perp = 0.01\delta$ и $J_\perp = 0.05\delta$.

$$\chi_{zz} = \frac{\beta\Delta_B^2}{4(\delta-J_z)^2} + \frac{\beta\delta^2}{4(\delta-J_z)^2} + \frac{\beta\delta\Delta_B}{2(\delta-J_z)^2}\operatorname{sgn} c \tag{88}$$

При $1/a, 1 \ll b$ (область III)

$$I = \frac{\sqrt{\pi}b}{2}\exp(\frac{(a-1)^2b^2}{4})[e^{c(a-1)/2}\operatorname{erfc}(-(a-1)b/2-c/b) + e^{-c(a-1)/2}\operatorname{erfc}(-(a-1)b/2+c/b)] \tag{89}$$

$$\begin{aligned}\chi_{zz} &= \frac{1}{2(\delta-J_z)} + \frac{\beta\Delta_B^2}{4(\delta-J_z)^2} + \frac{\beta J_\perp^2}{4(\delta-J_z)^2} \\ &+ [e^{c(a-1)/2}\operatorname{erfc}(-(a-1)b/2-c/b) + e^{-c(a-1)/2}\operatorname{erfc}(-(a-1)b/2+c/b)]^{-1} \\ &\times [e^{c(a-1)/2}(\frac{\beta\Delta_B J_\perp}{2(\delta-J_z)}\operatorname{erfc}(-(a-1)b/2-c/b) \\ &+ (c/b^2-(a-1)/2)\frac{(\delta-J_\perp)^2}{(\delta-J_z)^2}\exp(-((a-1)b/2+c/b)^2)) \\ &- e^{-c(a-1)/2}(\frac{\beta\Delta_B J_\perp}{2(\delta-J_z)}\operatorname{erfc}(-(a-1)b/2+c/b) \\ &+ (c/b^2+(a-1)/2)\frac{(\delta-J_\perp)^2}{(\delta-J_z)^2}\exp(-((a-1)b/2+c/b)^2))]\end{aligned} \tag{90}$$

При $B \to 0$

$$\chi_{zz} = \frac{1}{2(\delta-J_z)} + \frac{\beta J_\perp}{4(\delta-J_z)^2}(J_\perp + \frac{2\sqrt{(\delta-J_z)(\delta-J_\perp)}}{\sqrt{\pi}\sqrt{\beta(J_z-J_\perp)}})e^{-\frac{\beta J_\perp^2(J_z-J_\perp)}{4(\delta-J_\perp)(\delta-J_z)}}\operatorname{erfc}^{-1}(\sqrt{\frac{\beta J_\perp^2(J_z-J_\perp)}{4(\delta-J_\perp)(\delta-J_z)}}) \tag{91}$$

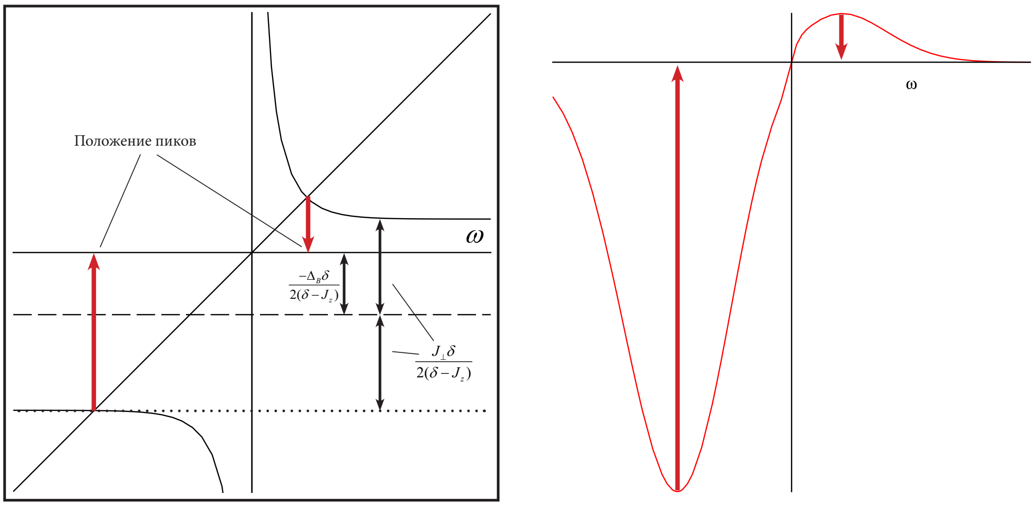

Рис. 4: Условие на положение пиков.

Заметим, последнее выражение в пределе $J_\perp \to 0$ стремится к $\frac{1}{2(\delta-J_z)}$ и температурная зависимость исчезает. Связано это с "вымораживанием" вращательных степеней свободы при низких температурах в анизотропном случае.

6.2 $\mathbf{Im}\,\chi_{+-}(\omega)$

Кривая для $\operatorname{Im}\chi_{+-}(\omega)$ представляет собой два пика шириной $\frac{\delta J}{\sqrt{\beta(\delta-J_z)}}$. Условие того, что расстояние между пиками много больше их ширины эквивалентно $\beta J_\perp^2 \gg (\delta - J_z)$. Это соответствует области B на Рис. 6.1.

В изотропном пределе, при $J_z - J_\perp \ll \delta - J_z$ кривая для мнимой части спиновой восприимчивости имеет два пика $\omega = -B \pm \frac{J_\perp \delta J}{\delta - J_z}$ высотой $(\operatorname{Im}\chi_{+-})_{max} = \frac{\pi T \delta^{3/2}\operatorname{sh}\frac{\beta\Delta_B}{2}}{(\delta-J_z)^{5/2}|J_z-J_\perp|\operatorname{sh}\frac{\beta\Delta_B\delta}{2(\delta-J_z)}}(1-e^{-\beta\Delta_B\operatorname{sgn}(\omega+B)}(1+\frac{\beta J_\perp}{2(\delta-J_z)}))$. Видно, что с приближением к изотропному случаю ширина пиков стремится к нулю. При исчезновении магнитного поля бесконечно малой становится и площадь пиков, что соотвествует исчезновению спиновой динамики в системе. В изинговском пределе, в области III при $J_\perp \ll \delta$ положение пика определяется следующим уравнением

$$|\omega + \Delta_B| = \frac{J_\perp \delta}{2(\delta - J_z)} - \frac{\Delta_B \delta \operatorname{sgn}(\omega + \Delta_B)}{2(\delta - J_z)} + \frac{\delta^2(\operatorname{cth}\beta\delta J x - 1)}{2(\delta - J_z)} - \frac{\delta^2}{\delta - J_z} g(x) \tag{92}$$

где

$$g(x) = \begin{cases} e^{-2\beta|\omega+\Delta_B|}, & |\omega + \Delta_B| \gg T \\ \frac{2}{\sqrt{\pi\beta\delta}}\operatorname{erfc}(2\sqrt{\beta\delta}|\omega+\Delta_B|), & |\omega+\Delta_B| \ll \sqrt{T\delta} \end{cases} \tag{93}$$

Масштабы, определяющие положение пика, приведены на графике Рис. 6.2.

7 Заключение

В данной работе вычислена точная статистическая сумма и спиновая восприимчивость для квантовой точки с осевой анизотропией обменного взаимодействия и произвольным распределением уровней. Установлено, что преобразование Вея-Нормана-Колоколова позволяет вычислить статистическую сумму в квадратурах для неабелева гамильтониана. Из конечного ответа можно получить простое и заранее очевидное выражение через сумму по числу частиц, полному спину и его проекции на ось z. Это позволило проверить все переходы связанные с вычислением по дискретному времени, например, появление якобиана (38).

Проанализированы асимптотики для случая большого числа электронов на точке. Обнаружено подавление температурной зависимости продольной спиновой восприимчивости по сравнению с изотропным случаем, связанное с "вымораживанием" вращательных степеней свободы при низких температурах из-за анизотропии.

Список литературы

[1] L.I.Glazman and M.Pustilnik in New Directionsin Mesoscopic Physics (Towards to Nanoscience,eds. R. Fazio, G. F.Gantmakher and Y. Imry (Kluwer, Dordrecht,2003).

[2] I. L. Aleiner, P.W. Brouwer, L. I. Glazman, *Quantum effects in Coulomb blockade*, Phys. Rep. **358**, 309 (2002).

[3] I. S. Burmistrov, Y. Gefen, and M. N. Kiselev, JETP Lett.,**92**, 3 (2010);

[4] M. Kiselev and Y. Gefen, Phys. Rev. Lett., **96**, 66805(2006)

[5] I. L. Kurland, I. L. Aleiner, and B. L. Altshuler, Phys. Rev. B **62**, 14886–14897 (2000)

[6] J. Wei, E. Norman, *Lie algebraic solution of linear differential equations*, J. Math. Phys. **4**, 575 (1963).

[7] I. V. Kolokolov, *Functional representation for the partition function of the quantum Heisenberg ferromagnet*, Phys. Lett. A **114**, 99 (1986).

[8] B. L. Altshuler, Y. Gefen, A. Kamenev, L. S. Levitov, *Quasiparticle Lifetime in a Finite System: A Nonperturbative Approach*, Phys. Rev. Lett. **78**, 2803 (1997).

[9] A. U. Sharafutdinov and I. S. Burmistrov, J. Phys.: Condens. Matter, **24**, 155301 (2012)