Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»
Физтех-школа физики и исследований им. Ландау
Кафедра проблем теоретической физики

Направление подготовки / специальность: 03.03.01 Прикладные математика и физика (бакалавриат)
Направленность (профиль) подготовки: Фундаментальная и прикладная физика

КВАНТОВАЯ ДИНАМИКА СПИНОВОЙ ЦЕПОЧКИ, МОДЕЛИРУЮЩЕЙ ЗАДАЧУ ОПТИМИЗАЦИИ В ЦЕЛЫХ ЧИСЛАХ

(бакалаврская работа)

Студент:
Кишмар Николай Юрьевич

____
(подпись студента)

Научный руководитель:
Фейгельман Михаил Викторович,
д-р физ.-мат. наук, проф.

____
(подпись научного руководителя)

Консультант *(при наличии)*:
____
____
(подпись консультанта)

Москва 2020

Аннотация

В работе приведено исследование низколежащих уровней квантовой системы, представляющей из себя модель квантового алгоритма оптимизации в целых числах в двух частных случаях. В случае отсутствия беспорядка статистическая сумма была найдена двумя способами: по теории возмущений и при помощи преобразования Вея–Нормана–Колоколова с последующим вычислением возникающих функциональных интегралов. При наличии двух случайных параметров, приводящих к взаимодействию соответствующих групп спинов, задача была исследована в четвертом порядке теории возмущений по малости внешнего поперечного магнитного поля.

Оглавление

Глава 1

Введение

1.1 Квантовые алгоритмы и квантовые системы

В основе квантовых вычислений лежит применение динамики квантовых систем для реализации алгоритмов соответствующих задач. Особый интерес представляют NP-трудные задачи, одной из которых является задача разбиения множества целых чисел на группы с одинаковыми суммами (number partitioning problem). В работе [1] приведено строгое доказательство того факта, что низколежащие уровни квантового алгоритма, решающего данную задачу, ведут себя как независимые случайные величины. Иными словами, низкоэнергетический спектр задачи аналогичен модели, в которой все уровни — независимые случайные величины (quantum Random Energy Model или qREM).

В работе [2] показано, что в qREM существует фаза, в которой присутствует характерная для спиновых стекол вмороженная динамика. Это динамика позволяет, посредством эволюции системы, зная один низколежащий уровень энергии, найти все остальными. Таким образом, в теории, qREM может служить действующим квантовым алгоритмом, решающим задачу разбиения множества целых чисел.

Однако, воссоздание qREM в условиях эксперимента практически невозможно. Это связано с тем, что количество необходимых независимых случайных параметров равно размерности гильбертова пространства. Полное устранение корреляций нереализуемо в любом реальном эксперименте при термодинамически большом числе уровней. В связи с этим, для реализации квантового алгоритма, решающего задачу разбиения множества целых чисел, необходимо рассматривать системы с меньшим числом случайных параметров. Гамильтониан одной из таких систем и рассматривается в данной работе.

1.2 Общая постановка задачи

Интерес представляет рассмотрение спиновой цепочки, описываемой следующим гамильтонианом:

$$\hat{\mathcal{H}} = U\left(\sum_i \phi_i \hat{s}_i^z\right)^2 + \Gamma \sum_i \hat{s}_i^x. \tag{1.1}$$

Здесь $\hat{s}_i^x$ и $\hat{s}_i^z$ — операторы проекции спина 1/2 с номером i на оси x и z соответственно. ϕ_i — случайные безразмерные величины, описываемые функцией распределения $\mathcal{F}(\phi)$. U и Γ

— параметры задачи, имеющие размерность энергии. Данный гамильтониан соответствует цепочке спинов с дальнодействующим характером взаимодействия и встроенным беспорядком, помещенной в поперечное магнитное поле. Таким образом, параметр U характеризует взаимодействие спинов, а Γ — величину магнитного поля. В данной работе упрощения модели пусть количество спинов всегда будет четным числом, равным $2N$. Как можно заметить, количество случайных величин равно количеству спинов, в то время как размерность гильбертова пространства невозмущенного гамильтониана равна 2^{2N}.

Целью работы является изучение динамики низколежащих состояний данного гамильтониана. В частности, интересует вопрос, возможно ли, начиная эволюцию в одном из низкоэнергетических состояний, приблизиться к другим низколежащим состояниям. Также интересует термодинамика системы при низких температурах, при которых $\beta U \gg 1$ (здесь и далее $\beta = 1/T$, где T — температура. Данное условие также обеспечивает то, что состояния гамильтониана, энергия которых превышает энергию основного гамильтониана на величины порядка U будут давать экспоненциально малый вклад в статистическую сумму. Ожидается существование принципиально отличающихся друг от друга режимов поведения системы, в зависимости от вида распределения $\mathcal{F}$. Малость внешнего поля позволяет строить теорию возмущений по параметру Γ/U, однако для исследования зависимости поведения системы от распределения констант ϕ_i необходимо уметь точно решать задачу в первых ненулевых порядках теории возмущений. Для этой цели предлагается использовать преобразование Вея–Нормана–Колоколова (далее ВНК) [3].

В рамках данной работы задача рассматривается в двух упрощенных случаях. В первом случае беспорядок полностью отсутствует: все константы ϕ_i одинаковы по величине и равны ϕ_0. В этом тривиальном случае задача может быть полностью решена при помощи теории возмущений. Интерес представляет сравнение результатов, полученных различными способами. Во втором, менее тривиальном случае, константы могут принимать два различных значения с заданными вероятностями.

Глава 2

Случай одинаковых констант

В этой главе будет рассмотрен тривиальный случай, когда все константы ϕ_i принимают одинаковое значение, равное ϕ_0. Иными словами, гамильтониан имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}, \quad \hat{\mathcal{H}}_0 = U\phi_0^2 \left(\hat{S}^z\right)^2, \quad \hat{V} = \Gamma \hat{S}^x, \quad \hat{S}^\alpha = \sum_i \hat{s}_i^\alpha. \tag{2.1}$$

Беспорядок в такой постановке задачи отсутствует. В этой главе нас, в основном, будут интересовать термодинамические характеристики системы с таким гамильтонианом. В отсутствие внешнего поля основное состояние соответствует конфигурациям спинов, при которой сумма их проекций S^z равна нулю. То есть энергия основного состояния гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_0$ равна нулю и степень вырождения этого состояния равна $C_{2N}^N = (2N)!/(N!)^2$. Добавление поперечного поля приводит к снятию данного вырождения. Условие $\beta U \gg 1$ говорит о том, что основной вклад в статистическую сумму будет даваться состояниями, получившимися в результате расщепления основного состояния гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_0$ под действием возмущения.

2.1 Рассмотрение в рамках теории возмущений

Применимость теории возмущений будем проверять апостериори. Для дальнейшей работы с ней введем следующие обозначения. Будем обозначать состояния как $|n, \gamma\rangle$. Здесь n — число, определяющее номер состояния ($n = 0$ в случае основного состояния). γ — некоторый подуровень вырожденного состояния.

Поправки к уровням энергии вырожденных состояний определяются из секулярного уравнения

$$\det\left(\hat{\mathcal{H}}_{\alpha\beta}^{(eff)}[\phi_0] - E_n\right) = 0, \tag{2.2}$$

где $\hat{\mathcal{H}}_{\alpha\beta}^{(eff)}$ — эффективный гамильтониан. Будем искать поправки к основному состоянию и начнем с рассмотрения первого порядка. В этом порядке выполнено

$$\hat{\mathcal{H}}_{\alpha\beta}^{(1)}[\phi_0] = \langle 0, \alpha| \hat{V} |0, \beta\rangle = \frac{1}{2} \langle 0, \alpha| \left(\hat{S}^+ + \hat{S}^-\right) |0, \beta\rangle = 0. \tag{2.3}$$

Здесь $\hat{S}^\pm = \hat{S}^x \pm \hat{S}^y$. Равенство нулю этого выражения обусловлено следующим соображением: при действии операторов переворота спина $\hat{s}_i^\pm$ может возникнуть две ситуации. В первой ситуации этот оператор действует на основном состоянии нулем, так как $\hat{s}_i^+ \; |\uparrow\rangle_i = 0$ и

$\hat{s}_i^- \; |\downarrow\rangle_i = 0$. Во второй — происходит переворот спина и этот оператор переводит основное состояние в первое возбужденное, так как суммарный спин перестает быть равным нулю. Следовательно, в первом порядке поправки к энергии основного состояния отсутствуют.

Перейдем к рассмотрению второго порядка вырожденной теории возмущений. В нем эффективный гамильтониан равен

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)}_{\alpha\beta}[\phi_0] = \sum_{m\neq 0}\sum_{\gamma} \frac{\langle 0,\alpha|\, \hat{V}\, |m,\gamma\rangle \langle m,\gamma|\, \hat{V}\, |0,\beta\rangle}{E_0 - E_m}. \tag{2.4}$$

Рассмотрим матричный элемент $\langle 0,\alpha|\, \hat{V}\, |m,\gamma\rangle$. Он не равен нулю только в том случае, когда состояния, по которым он вычисляются, отличаются переворотом ровно одного спина. Так как переворот любого спина переводит основное состояние в первое возбужденное, этот матричный элемент не равен нулю тогда и только тогда, когда $m = 1$. Таким образом, разница энергий равна $E_0 - E_m = -U\phi_0^2$. Итак, мы уже выяснили, что

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)}_{\alpha\beta}[\phi_0] = -\frac{\Gamma^2}{4U\phi_0^2}\sum_{m\neq 0}\sum_{\gamma} \langle 0,\alpha|\, \hat{S}^+ + \hat{S}^-\, |m,\gamma\rangle \langle m,\gamma|\, \hat{S}^+ + \hat{S}^-\, |0,\beta\rangle \tag{2.5}$$

С эффективными гамильтонианами удобно работать, если удается выразить их через спиновые операторы. Это легко сделать, воспользовавшись следующим рассуждением: между операторами переворота спина стоит проектор на все состояния, кроме основного. Следовательно, в силу полноты базиса собственных состояний

$$\sum_{m\neq 0}\sum_{\gamma} |m,\gamma\rangle \langle m,\gamma| = \hat{\mathbb{I}} - \sum_{\gamma} |0,\gamma\rangle \langle 0,\gamma|\,. \tag{2.6}$$

Пользуясь тем, что $\langle 0,\alpha|\, \hat{S}^{\pm}\, |0,\beta\rangle = 0$ и $\langle 0,\alpha|\, (\hat{S}^{\pm})^2\, |0,\beta\rangle = 0$, находим

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)}[\phi_0] = -\frac{\Gamma^2}{4U\phi_0^2}\left(\hat{S}^+\hat{S}^- + \hat{S}^-\hat{S}^+\right). \tag{2.7}$$

Для нахождения спектра данного гамильтониана удобно вспомнить, что секулярное уравнение решается на подпространстве, на котором $S^z = 0$. Тогда

$$\left(\hat{S}^+\hat{S}^- + \hat{S}^-\hat{S}^+\right)\Bigg|_{S^z=0} = 2\left[(\hat{S}^x)^2 + (\hat{S}^y)^2\right]\Bigg|_{S^z=0} = 2\hat{\boldsymbol{S}}^2\Bigg|_{S^z=0}, \tag{2.8}$$

где при помощи вертикальной черты обозначено сужение оператора на соответствующее подпространство. После этого спектр данного гамильтониана находится тривиально:

$$E_k^{(2)} = -\kappa(N-k)(N-k+1), \quad \kappa = \frac{\Gamma^2}{2U\phi_0^2}, \quad n_k = C_{2N}^k - C_{2N}^{k-1}, \quad k = 0,1,\ldots,N. \tag{2.9}$$

Здесь n_k — кратности вырождения соответствующего уровня. Таким образом, статистическая сумма в этом приближении равна

$$Z = \sum_{k=0}^{N}\left[C_{2N}^k - C_{2N}^{k-1}\right] e^{\beta\kappa(N-k)(N-k+1)}. \tag{2.10}$$

Тут же можно заметить, что существуют два температурных режима, зависящих от того, как параметр $\beta\kappa N$ сравнивается с единицей.

2.1.1 Температурный режим $\beta\kappa N \gg 1$

Рассмотрим, для начала, случай, в котором $\beta\kappa N \gg 1$. В этом режиме температура настолько мала, что главный вклад в статистическую сумму приходит от основного состояния гамильтониана (2.7). С точки зрения вычислений это означает, что число в показателе экспоненты велико и с экспоненциальной точностью можно ограничиться первыми двумя членами ряда (2.10):

$$Z(\beta\kappa N \gg 1) \approx e^{\kappa\beta N(N+1)} + (2N-1)e^{\kappa\beta N(N-1)}. \tag{2.11}$$

Исходя из этого выражения, можно найти основные термодинамические величины, такие как свободную энергию и теплоемкость:

$$F(\beta\kappa N \gg 1) = -\kappa N(N+1) - \frac{1}{\beta}(2N-1)e^{-2\beta\kappa N}, \tag{2.12}$$

$$S(\beta\kappa N \gg 1) \approx 2\beta\kappa N e^{-2\beta\kappa N}, \tag{2.13}$$

$$C(\beta\kappa N \gg 1) \approx 4\beta^2\kappa^2 N^2(2N-1)e^{-2\beta\kappa N}. \tag{2.14}$$

Теплоемкость при низких температурах экспоненциально мала, так как в спектре гамильтониана (2.7) присутствует щель.

2.1.2 Температурный режим $\beta\kappa N \ll 1$

Теперь рассмотрим случай $\beta\kappa N \ll 1$, $\beta U \gg 1$. В нем температура достаточно велика для того, чтобы все уровни гамильтониана (2.7) давали значительный вклад в статистическую сумму. В этом случае для ее оценки можно заменить суммирование в (2.10) интегрированием. Эта оценка справедлива, так как коэффициент в показателе экспоненты мал, из-за чего члены суммы с соседними номерами слабо отличаются между собой.

$$Z(\beta\kappa N \ll 1) \approx e^{\beta\kappa N(N+1)} \int\limits_0^N dk \left(C_{2N}^k - C_{2N}^{k-1}\right) e^{\beta\kappa k[k-(2N+1)]}. \tag{2.15}$$

В этой формуле под биномиальным коэффициентом понимается его обобщение на множество действительных чисел

$$C_n^k = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n-k+1)\Gamma(k+1)}. \tag{2.16}$$

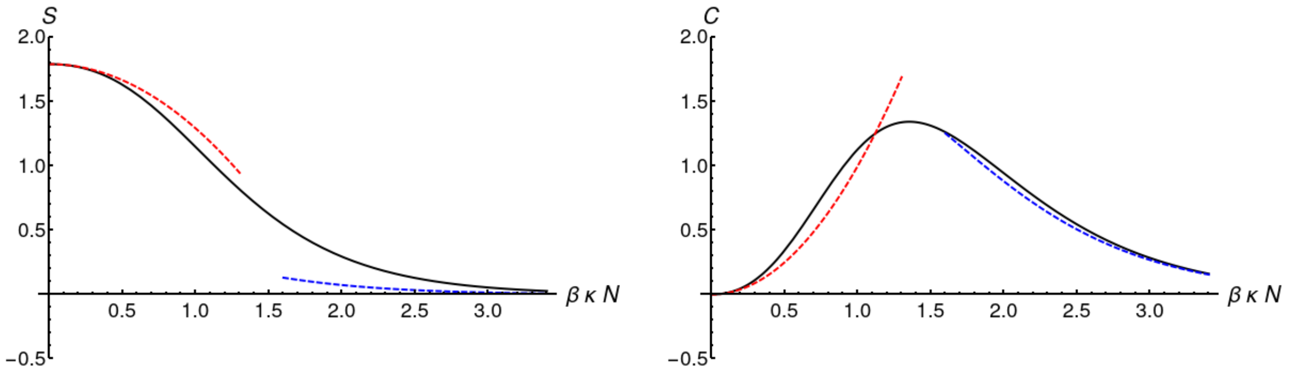
Разложение данного интеграла в асимптотический ряд легко получить, заметив, что он представляет из себя разность двух интегралов перевального вида со смещенными максимумами. Используя это, можем найти

$$Z(\beta\kappa N \ll 1) \approx C_{2N}^N \left[1 + \beta\kappa N + (\beta\kappa N)^2\right], \tag{2.17}$$

$$F(\beta\kappa N \ll 1) \approx -\frac{1}{\beta}\ln C_{2N}^N - \kappa N + \frac{1}{2}\beta\kappa^2 N^2, \tag{2.18}$$

$$S(\beta\kappa N \ll 1) \approx \ln C_{2N}^N - \frac{1}{2}\beta^2\kappa^2 N^2. \tag{2.19}$$

$$C(\beta\kappa N \ll 1) \approx (\beta\kappa N)^2. \tag{2.20}$$



(a) (b)

Рис. 2.1: Зависимость энтропии (a) и теплоемкости (b) параметра $\beta\kappa N$. На обоих графиках $N = 2$. Черная сплошная линия — точная зависимость, полученная из (2.10). Синяя пунктирная линия — приближение в режиме $\beta\kappa N \gg 1$. Красная пунктирная линия — приближение в режиме $\beta\kappa N \ll 1$.

Сравнение полученных приближений с зависимостями, полученными из выражения (2.10) для статистической суммы, приведено на Рис. 2.1. Так как формулы (2.13) и (2.14) получены с экспоненциальной точностью, найденные асимптотики достаточно хорошо приближают точное выражение даже при небольших значениях параметров N и $\beta\kappa N$. Как видно из графиков, при малых температурах из-за того, что щель между основным и первым возбужденным состояниями, становится существенно большой, энтропия и теплоемкость экспоненциально малы. При больших температурах все состояния гамильтониана (2.7) вносят одинаковый вклад в статистическую сумму, из-за чего энтропия выходит на константу, равную $\ln C_{2N}^{N}$, а теплоемкость стремится к нулю.

2.2 Рассмотрение при помощи преобразования Вея–Нормана–Колоколова

Изложим здесь кратко теорию преобразования ВНК перед ее применением. Пусть имеется упорядоченная экспонента общего вида

$$\hat{A}(t) = \mathcal{T} \exp\left(\int_0^t dt' \, \boldsymbol{\psi}(t') \, \hat{\boldsymbol{s}}\right). \tag{2.21}$$

Она может быть однозначно определена уравнением первого порядка с начальными условиями

$$\dot{\hat{A}}(t) = (\boldsymbol{\psi}(t)\hat{\boldsymbol{s}}) \, \hat{A}(t), \quad \hat{A}(0) = 1. \tag{2.22}$$

Задача состоит в том, чтобы представить $\mathcal{T}$-упорядоченную экспоненту в виде произведения обычных экспонент. Рассмотрим оператор следующего вида:

$$\hat{B}(t) = \exp\left(\hat{s}^{+}\theta^{-}(t)\right)\,\exp\left(\hat{s}^{z}\int_{0}^{t} dt'\rho(t')\right)\times$$
$$\times\exp\left(\hat{s}^{-}\int_{0}^{t} dt'\,\theta^{+}(t')\exp\left(\int_{0}^{t'} dt''\rho(t'')\right)\right)\,\exp\left(-\hat{s}^{+}\theta^{-}(0)\right). \tag{2.23}$$

Здесь $\theta^{\pm}(t)$ и $\rho(t)$ — некоторые функции, вид которых будет определен из того условия, что оператор $\hat{B}(t)$ удовлетворяет системе (2.22). Заметим, что благодаря последнему множителю в (2.23) оператор $\hat{B}$ удовлетворяет начальному условию автоматически. Производная оператора $\hat{B}$ удовлетворяет следующему соотношению [см. приложение A]:

$$\dot{\hat{B}}(t) = \left\{\hat{s}^{+}\left(\dot{\theta}^{-} - \rho\,\theta^{-} - \theta^{+}\left(\theta^{-}\right)^{2}\right) + \hat{s}^{-}\theta^{+} + \hat{s}^{z}\left(\rho + 2\theta^{+}\theta^{-}\right)\right\}\hat{B}(t). \tag{2.24}$$

Отсюда находим замену функций, которая переводит оператор $\hat{A}$ в оператор $\hat{B}$:

$$\psi^{z} = \rho + 2\theta^{+}\theta^{-}, \quad \psi^{+} = \theta^{+},$$
$$\psi^{-} = \dot{\theta}^{-} - \rho\theta^{-} - \theta^{+}(\theta^{-})^{2},$$

где $\psi^{\pm} = \frac{1}{2}(\psi^{x} \pm i\psi^{y})$. Заметим, что в выражение (2.24) входит производная $\dot{\theta}^{-}$. Для избежания неоднозначности необходимо поставить дополнительное краевое условие на функцию $\theta^{-}(t)$. Можно показать [4], что наиболее правильным вариантом здесь является требование выполнения начального условия

$$\theta^{-}(0) = 0. \tag{2.25}$$

Применим преобразование ВНК для нашей задачи в случае одинаковых констант. Для этого произведем вычисление статистической суммы спинового гамильтониана с анизотропией [5], после чего сведем задачу к интересующей нас предельным переходом. Рассмотрим гамильтониан

$$\hat{\mathcal{H}}_{J} = -\kappa\left[(\hat{S}^{x})^{2} + (\hat{S}^{y})^{2} + \frac{1}{J}(\hat{S}^{z})^{2}\right]. \tag{2.26}$$

Добиться выполнения условия $S^{z} = 0$ можно взяв предел $J \longrightarrow -0$. Проводить вычисление будем в действительном времени:

$$Z_{J} = \mathrm{Tr}\, e^{i\int_{0}^{t_{+}} dt\hat{\mathcal{H}}_{J}} e^{-i\int_{0}^{t_{-}} dt\hat{\mathcal{H}}_{J}} = \mathrm{Tr}\prod_{p=\pm} e^{ip\int_{0}^{t_{p}} dt\hat{\mathcal{H}}_{J}}. \tag{2.27}$$

Для того, чтобы найти статистическую сумму, зависящую от температуры, в конце произведем замену $t_{+} - t_{-} = -i\beta$. Выполним преобразование Хаббарда–Стратоновича для каждой из экспонент:

$$e^{-ip\kappa\int_{0}^{t_{p}} dt\left[(\hat{S}^{x})^{2}+(\hat{S}^{y})^{2}+\frac{1}{J}(\hat{S}^{z})^{2}\right]} = \int \mathcal{D}[\psi_{x}^{p}, \psi_{y}^{p}, \psi_{z}^{p}] e^{-\frac{ip}{4\kappa}\int_{0}^{t_{p}} dt\left[(\psi_{x}^{p})^{2}+(\psi_{y}^{p})^{2}+J(\psi_{z}^{p})^{2}\right]}\mathcal{T}e^{ip\int_{0}^{t_{p}} dt\sum_{\alpha}\psi_{\alpha}^{p}\hat{S}^{\alpha}}. \tag{2.28}$$

Теперь перепишем упорядоченные экспоненты через обычные, применяя преобразование ВНК:

$$\mathcal{T}e^{ip\int_{0}^{t_{p}} dt\sum_{\alpha}\psi_{\alpha}^{p}\hat{S}^{\alpha}} = e^{p\hat{S}^{-p}\theta_{p}^{p}} e^{i\hat{S}^{z}\int_{0}^{t_{p}} dt\rho_{p}}\exp\left(i\hat{S}^{p}\int_{0}^{t_{p}} dt\theta_{p}^{-p}(t)e^{-ip\int_{0}^{t} dt'\rho_{p}(t')}\right). \tag{2.29}$$

Таким образом, искомая замена функций имеет вид

$$\frac{1}{2}(\psi_x^p - ip\psi_y^p) = \theta_p^{-p}, \quad \frac{1}{2}(\psi_x^p + ip\psi_y^p) = -ip\dot{\theta}_p^p + \rho_p\theta_p^p - \theta_p^{-p}(\theta_p^p)^2, \quad \psi_z^p = \rho_p - 2\theta_p^{-p}\theta_p^p. \tag{2.30}$$

Данная замена имеет нетривиальный якобиан:

$$J[\theta_p^p, \theta_p^{-p}, \rho_p] = e^{\frac{ip}{2}\int_0^{t_p} dt\,\rho_p}. \tag{2.31}$$

Вычислим выражение в экспоненте:

$$(\psi_x^p)^2 + (\psi_y^p)^2 + J(\psi_z^p)^2 = -4ip\theta_p^{-p}\dot{\theta}_p^p + J\rho_p^2 + 4c\rho_p\theta_p^p\theta_p^{-p} - 4c(\theta_p^p\theta_p^{-p})^2, \tag{2.32}$$

Где введено обозначение

$$c(J) = 1 - J. \tag{2.33}$$

Перепишем выражение для статистической суммы после перехода к интегрированию по новым полям:

$$Z_J = \mathrm{Tr}\prod_{p=\pm}\int \mathcal{D}[\theta_p^p, \theta_p^{-p}, \rho_p] e^{-\frac{ip}{\kappa}\int_0^{t_p} dt\left[\frac{J}{4}\rho_p^2 - \frac{\kappa}{2}\rho_p - ip\theta_p^{-p}\dot{\theta}_p^p + c\rho_p\theta_p^p\theta_p^{-p} - c(\theta_p^p\theta_p^{-p})^2\right]} \times$$
$$\times\, e^{p\hat{S}^{-p}\theta_p^p} e^{i\hat{S}^z\int_0^{t_p} dt\rho_p} \exp\left(i\hat{S}^p\int_0^{t_p} dt\,\theta_p^{-p}(t)e^{-ip\int_0^t dt'\rho_p(t')}\right). \tag{2.34}$$

Чтобы избавиться от слагаемого четвертой степени по полям в экспоненте, выполним еще одно преобразование Хаббарда–Стратоновича:

$$e^{\frac{ipc}{\kappa}\int_0^{t_p} dt(\theta_p^p\theta_p^{-p})^2} = \int \mathcal{D}[\lambda_p] e^{\frac{ip}{\kappa}\int_0^{t_p} dt\left[\frac{c}{4}\lambda_p^2 + c\lambda_p\theta_p^p\theta_p^{-p}\right]}. \tag{2.35}$$

Это приводит к выражению

$$Z_J = \mathrm{Tr}\prod_{p=\pm}\int \mathcal{D}[\theta_p^p, \theta_p^{-p}, \rho_p, \lambda_p] e^{-\frac{ip}{\kappa}\int_0^{t_p} dt\left[-\frac{c}{4}\lambda_p^2 + \frac{J}{4}\rho_p^2 - \frac{\kappa}{2}\rho_p - ip\theta_p^{-p}\dot{\theta}_p^p + c(\rho_p - \lambda_p)\theta_p^p\theta_p^{-p}\right]} \times$$
$$\times\, e^{p\hat{S}^{-p}\theta_p^p} e^{i\hat{S}^z\int_0^{t_p} dt\rho_p} \exp\left(i\hat{S}^p\int_0^{t_p} dt\,\theta_p^{-p}(t)e^{-ip\int_0^t dt'\rho_p(t')}\right). \tag{2.36}$$

В экспоненте содержится слагаемое третьей степени по полям. Его можно убрать следующей заменой переменных θ_p^{-p} и θ_p^p:

$$\theta_p^p \longrightarrow \theta_p^p e^{-ipc\int_0^t dt(\rho_p - \lambda_p)}, \quad \theta_p^{-p} \longrightarrow \theta_p^{-p} e^{ipc\int_0^t dt(\rho_p - \lambda_p)}. \tag{2.37}$$

Такая замена, однако, имеет нетривиальный якобиан, равный

$$J[\theta_p^p, \theta_p^{-p}] = e^{-\frac{ipc}{2}\int_0^{t_p}(\rho_p - \lambda_p)}. \tag{2.38}$$

С учетом всего вышесказанного, находим:

$$Z_J = \mathrm{Tr}\prod_{p=\pm}\int \mathcal{D}[\theta_p^p, \theta_p^{-p}, \rho_p, \lambda_p] e^{-\frac{ip}{\kappa}\int_0^{t_p} dt\left[-\frac{c}{4}\lambda_p^2 + \frac{J}{4}\rho_p^2 - \frac{\kappa}{2}\rho_p - ip\theta_p^{-p}\dot{\theta}_p^p + \frac{\kappa c}{2}(\rho_p - \lambda_p)\right]} \times$$
$$\times \exp\left(p\hat{S}^{-p}\theta_p^p e^{-ipc\int_0^t dt(\rho_p - \lambda_p)}\right) e^{i\hat{S}^z\int_0^{t_p} dt\rho_p} \exp\left(i\hat{S}^p\int_0^{t_p} dt\,\theta_p^{-p}(t)e^{-ip\int_0^t dt'[(1-c)\rho_p(t') + c\lambda_p(t')]}\right). \tag{2.39}$$

Вычислим теперь след. Так как операторы, относящиеся к различным спинам, коммутируют, достаточно вычислить след для одного спина, а после — возвести в степени $2N$. Используя то, что для спинов $1/2$ $(\hat{s}^p)^2$ действует нулем на любое состояние, находим:

$$\mathrm{Tr}\prod_{p=\pm}\left(1+p\hat{s}^{-p}\theta_p^p e^{-ipc\int_0^t dt(\rho_p-\lambda_p)}\right)e^{i\hat{s}^z\int_0^{t_p}dt\rho_p}\left(1+i\hat{s}^p\int_0^{t_p}dt\,\theta_p^{-p}(t)e^{-ip\int_0^t dt'[(1-c)\rho_p(t')+c\lambda_p(t')]}\right)=$$
$$=1+2\cos\left[\frac{1}{2}\sum_{p=\pm}\int_0^{t_p}dt\rho_p(t)\right]+\prod_{p=\pm}e^{\frac{ip}{2}\int_0^{t_p}dt\,\rho_p(t)}\left[p\theta_p^p(t_p)e^{-ipc\int_0^t+dt(\rho_p-\lambda_p)}+\right.$$
$$\left.+\,i\int_0^{t_{-p}}dt\theta_{-p}^p(t)e^{ip\int_0^t dt'[(1-c)\rho_p(t')+c\lambda_p(t')]}\right]. \tag{2.40}$$

В силу особенностей вида корреляционной функции $\left\langle\theta_p^p(t_1)\theta_p^{-p}(t_2)\right\rangle$ интеграл по этим полям может быть вычислен точно [см. приложение B]. Это приводит к выражению

$$Z_J=(2N)!\oint\frac{dz}{z^{2N+1}}e^{-2z}\int\limits_0^{+\infty}dy\,e^{-y}\prod_{p=\pm}\int\mathcal{D}[\rho_p,\lambda_p]e^{-\frac{ip}{\kappa}\int_0^{t_p}dt\left[-\frac{c}{4}\lambda_p^2+\frac{J}{4}\rho_p^2-\frac{\kappa}{2}\rho_p-\frac{\kappa}{2}[(1-c)\rho_p+c\lambda_p]\right]}\times$$
$$\times\exp\left\{-2z\cos\left[\frac{1}{2}\sum_{p=\pm}\int_0^{t_p}dt\,\rho_p(t)\right]-i\kappa zy\left(\prod_{p=\pm}e^{\frac{ip}{2}\int_0^{t_p}dt\rho_p(t)}\right)\times\right.$$
$$\left.\times\left(\sum_{p=\pm}pe^{-ipc\int_0^{t_p}dt(\rho_p-\lambda_p)}\int_0^{t_p}dte^{-ip\int_0^t dt'[(1-c)\rho_p(t')+c\lambda_p(t')]}\right)\right\}. \tag{2.41}$$

Далее введем новую переменную

$$x_p(t)=ip\int_0^t[(1-c)\rho_p(t')+c\lambda_p]+x_p(0). \tag{2.42}$$

Выражение принимает следующий вид:

$$Z_J=(2N)!\oint\frac{dz}{z^{2N+1}}e^{-2z}\int_0^{+\infty}dy\,e^{-y}\prod_{p=\pm}\int\mathcal{D}[x_p,\lambda_p]e^{[x_p(t_p)-x_p(0)]/2}e^{-\frac{ipJ}{4\kappa}\int dt\left(\frac{(ip\dot{x}_p+c\lambda_p)^2}{(1-c)^2}+\frac{c\lambda_p^2}{1-c}\right)}\times$$
$$\times\exp\left\{-2z\cosh\left[\frac{1}{2(1-c)}\sum_{p=\pm}p\left(x_p(t_p)-x_p(0)-ipc\int_0^{t_p}dt\lambda_p(t)\right)\right]-\right.$$
$$\left.-\,i\kappa zy\left(\prod_{p=\pm}e^{\frac{1}{2(1-c)}\left[x_p(t_p)-x_p(0)-ipc\int_0^{t_p}dt\lambda_p(t)\right]}\right)\times\sum_{p=\pm}p\,e^{\frac{1}{1-c}\left[x_p(0)-cx_p(t_p)+ipc\int_0^{t_p}dt\lambda_p(t)\right]}\int_0^{t_p}dte^{-x_p(t)}\right\}. \tag{2.43}$$

Имеется свобода выбора начальных условий для полей x_p. В данном случае их удобно выбрать следующим образом:

$$\sum_{p=\pm}x_p(t_p)+2\ln(4zy)=0,\quad \sum_{p=\pm}p\left[x_p(0)-cx_p(t_p)+ipc\int_0^{t_p}dt\,\lambda_p(t)\right]=0. \tag{2.44}$$

Добиться выполнения этих начальных условий можно при помощи вставки двух соответствующих дельта-функций. Сразу же распишем одну из дельта-функций через ее интегральное представление как

$$\delta\left\{\sum_{p=\pm} p\left[x_p(0)-cx_p(t_p)+ipc\int_0^{t_p}dt\,\lambda_p(t)\right]\right\}=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\zeta e^{\sum_{p=\pm}\frac{i\zeta p}{1-c}\left[x_p(0)-cx_p(t_p)+ipc\int_0^{t_p}dt\lambda_p(t)\right]}. \quad (2.45)$$

После этого, интеграл по полям λ_p становится Гауссовым и тривиально вычисляется:

$$Z_J=(2N)!\oint\frac{dz}{z^{2N+1}}e^{-2z}\int_0^{+\infty}dy\,\frac{e^{-y}}{4yz}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\zeta\prod_{p=\pm}e^{-\frac{ipc\kappa\zeta^2t_p}{J}}\int\mathcal{D}[x_p]e^{ip\int_0^{t_p}dt\mathcal{L}_p}e^{-(1-2ip\zeta)x_p(0)/2}\times$$
$$\times\exp\left(-2z\cosh\left[\frac{1}{2}\sum_{p=\pm}px_p(t_p)\right]\right)\times\delta\left(\sum_{p=\pm}x_p(t_p)+2\ln(4yz)\right). \quad (2.46)$$

Интеграл по полям x_p описывает лиувиллевскую квантовую механику с лагранжианом

$$\mathcal{L}_p=\frac{1}{4\kappa}\dot{x}_p^2-\frac{\kappa}{4}e^{-x_p}. \quad (2.47)$$

Соответствующий гамильтониан и собственные функции:

$$\mathcal{H}=-\kappa\partial_x^2+\frac{\kappa}{4}e^{-x},\quad \hat{\mathcal{H}}\Psi_\nu(x)=\kappa\nu^2\Psi_\nu(x),\quad \Psi_\nu(x)=\frac{2}{\pi}\sqrt{\nu\sinh(2\pi\nu)}K_{2i\nu}\left(e^{-x/2}\right), \quad (2.48)$$

где K — модифицированная функция Бесселя. Матричный элемент, соответствующий интегралу по x_p равен

$$Z_J=(2N)!\oint\frac{dz}{z^{2N+1}}e^{-2z}\int_0^{+\infty}dy\,\frac{e^{-y}}{4yz}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\zeta e^{-\frac{i\kappa c\zeta^2}{J}(t_+-t_-)}\times$$
$$\times\prod_{p=\pm}\left\{\int\limits_0^{+\infty}d\nu_p\iint dx_pdx'_pe^{-(1-2ip\zeta)x'_p/2}e^{-ip\kappa\nu_p^2t_p}\,\nu_p\sinh(2\pi\nu_p)K_{2i\nu_p}\left(e^{-x_p/2}\right)K_{2i\nu_p}\left(e^{-x'_p/2}\right)\right\}\times$$
$$\times\exp\left(-2z\cosh\left[\frac{1}{2}\sum_{p=\pm}px_p(t_p)\right]\right)\times\delta\left(\sum_{p=\pm}x_p(t_p)+2\ln(4yz)\right). \quad (2.49)$$

Далее вычислим интеграл по y и применим формулу 6.794.11 на странице 787 [6]:

$$\int_0^{+\infty}d\nu\,\nu\sinh(2\pi\nu)K_{2i\nu}(2z)K_{2i\nu}\left(e^{-x_+/2}\right)K_{2i\nu}\left(e^{-x_-/2}\right)=$$
$$=\frac{\pi^2}{16}\exp\left(-\frac{1}{4z}e^{-\frac{x_++x_-}{2}}-2z\cosh\frac{x_+-x_-}{2}\right). \quad (2.50)$$

Затем, используя свойство ортогональности собственных функций гамильтониана (2.48), можем выполнить интегрирование по x_p и ν_+:

$$Z_J=(2N)!\oint\frac{dz}{z^{2N+1}}e^{-2z}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\zeta e^{-\frac{i\kappa c\zeta^2}{J}(t_+-t_-)}\int\limits_0^{+\infty}\frac{d\nu}{z}e^{-i\kappa\nu^2(t_+-t_-)}\times$$
$$\times\nu\sinh(2\pi\nu)K_{2i\nu}(2z)\iint dx'_+dx'_-e^{-2x'_++4i\zeta x'_-}K_{2i\nu}\left(e^{-x'_+-x'_-}\right)K_{2i\nu}\left(e^{-x'_++x'_-}\right). \quad (2.51)$$

Интегрирование по x'_+ можно выполнить, воспользовавшись формулой 6.521.3 на странице 686 [6]:

$$\int_0^{+\infty} dx\, x\, K_\nu(ax)K_\nu(bx) = \frac{\pi}{2}\frac{(ab)^{-\nu}}{\sin(\pi\nu)}\frac{a^{2\nu}-b^{2\nu}}{a^2-b^2}. \tag{2.52}$$

Поскольку подынтегральное выражение является четным по ν, интегрирование можно распространить вдоль всей оси. Это приводит к следующему выражению:

$$Z_J = (2N)! \oint \frac{dz}{z^{2N+1}} e^{-2z} \int_{-\infty}^{+\infty} d\zeta e^{-\frac{i\kappa c\zeta^2}{J}(t_+-t_-)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{z} e^{-i\kappa\nu^2(t_+-t_-)} \times \\ \times \nu\, K_{2i\nu}(2z) \int dx'_- e^{4i\zeta x'_-} \frac{\sinh\left(4x'_-\nu\right)}{\sinh(2x'_-)}. \tag{2.53}$$

Далее воспользуемся интегральным представлением для функции Макдональда:

$$K_{2i\nu}(2z) = \int_0^{+\infty} dh\, e^{-2z\cosh h + 2i\nu h}. \tag{2.54}$$

С его помощью вычислим интеграл по ν. Интеграл по ζ гауссов и тоже может быть легко вычислен. Также выполним аналитическое продолжение $t_+ - t_- \to -i\beta$. Находим:

$$Z_J = \frac{2e^{-\beta\kappa/4}}{\pi\beta\kappa\,|1-1/J|^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dh\, \sinh h\, e^{-\frac{h^2}{\beta\kappa}} \left[2(1+\cosh h)\right]^{2N} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\frac{4x^2}{c\kappa\beta}} \frac{\sinh\frac{4xh}{\beta\kappa}}{\sinh(2x)}. \tag{2.55}$$

Здесь множитель был восстановлен из сравнения со статистической суммой для $N = 0$. Теперь получим более наглядное представление в виде ряда. Для этого напишем

$$\left[2(1+\cosh h)\right]^{2N} = \prod_\sigma \left(1+e^{\sigma h}\right)^{2N} = \prod_\sigma \left(\sum_{k=0}^{2N} C_{2N}^k e^{kh\sigma}\right). \tag{2.56}$$

Подставляя это разложение, находим:

$$Z_J = \sum_{k=-N}^{N} C_{2N}^{N-k} \frac{2e^{-\beta\kappa/4}}{\pi\,|1-1/J|^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dh \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\sinh h \sinh\frac{4xh}{\beta\kappa}}{\sinh(2x)} e^{-\frac{h^2}{\beta\kappa}+hk-\frac{4x^2}{c\beta\kappa}}.2N^{k_2} \tag{2.57}$$

Вычисление интеграла по h дает

$$Z_J = \sum_{k=-N}^{N} C_{2N}^{N-k} e^{\beta\kappa k(k+1)} \frac{2e^{-\beta\kappa/4}}{\sqrt{\pi}\,|1-1/J|^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\sinh\left[x(2k+1)\right]}{\sinh(x)} e^{-\frac{x^2}{c\beta\kappa}}. \tag{2.58}$$

Наконец, воспользуемся соотношением

$$\frac{\sinh\left[x(2k+1)\right]}{\sinh x} = \sum_{s=-k}^{k} e^{2xs}. \tag{2.59}$$

Используя его, находим интеграл по x. После взятия предела $J \longrightarrow -0$ остается только слагаемое, соответствующее $s = 0$. Ответ принимает форму

$$Z = \sum_{k=-N}^{N} C_{2N}^{N-k} \operatorname{sign}(2k+1) e^{\beta\kappa k(k+1)}. \tag{2.60}$$

Выделяя попарно слагаемые с $k = N - m$ и слагаемые с $k = -N + m + 1$, приходим к

$$Z = \sum_{m=0}^{N} \left[C_{2N}^{m} - C_{2N}^{m-1} \right] e^{\beta\kappa m(m+1)}, \tag{2.61}$$

что в точности совпадает с (2.10).

Глава 3

Случай двух различных констант

Рассмотрим теперь случай, когда функция $\mathcal{F}$ имеет вид дискретного распределения

$$\mathcal{F}(\phi) = p\delta(\phi - \phi_1) + (1-p)\delta(\phi - \phi_2). \tag{3.1}$$

Иными словами, пусть с вероятностью p константа ϕ_i принимает значение ϕ_1 и с вероятностью $1-p$ принимает значение ϕ_2. Для анализа данного случая легче всего рассматривать определенную реализацию данного случайного распределения. Для простоты потребуем, чтобы все реализации гарантировали то, что число спинов в каждой из групп констант будет четным, то есть

$$2N = 2N_1 + 2N_2, \tag{3.2}$$

где $2N_j$ — количество констант ϕ_j в рассматриваемой реализации. Полный гамильтониан может быть записан как

$$\hat{\mathcal{H}} = U\left(\sum_{i_1}\phi_1\hat{s}^z_{i_1} + \sum_{i_2}\phi_2\hat{s}^z_{i_2}\right)^2 + \Gamma\sum_i \hat{s}^x_i. \tag{3.3}$$

Здесь суммирование по индексу i_j обозначает суммирование тех спиновых операторов, перед которыми стоит константа ϕ_j. Далее для упрощения записи будем обозначать

$$\sum_{i_j}\hat{s}^\alpha_{i_j} = \hat{S}^\alpha_j. \tag{3.4}$$

Важным требованием является то, что $\phi_1 \neq \pm\phi_2$. При $\phi_1 = \phi_2$ рассматриваемый случай совпадает с изученным в прошлой главе. При $\phi_1 = -\phi_2$ можно ввести новые операторы

$$\hat{S}^x_{2,new} = \hat{S}^x_2, \quad \hat{S}^y_{2,new} = -\hat{S}^y_2, \quad \hat{S}^z_{2,new} = -\hat{S}^z_2. \tag{3.5}$$

Нетрудно убедиться, что новые операторы имеют те же самые коммутационные соотношения, что и старые, а гамильтониан, переписанный через них, имеет вид (2.1). Таким образом, случай $\phi_1 = -\phi_2$ также является тривиальным. Здесь стоит отметить, что такая замена возможна благодаря тому, что оператор $\hat{S}^y$ не входит в гамильтониан.

В данной постановке задачи также имеются различные температурные режимы. Как и раньше, они определяются величиной щели, отделяющей основное состояние невозмущенного гамильтониана от первого возбужденного. Основное состояние невозмущенного гамильтониана, как и в тривиальном случае, имеет нулевую энергию и достигается тогда, когда суммарный спин в каждой группе равен нулю. Поскольку на все реализации случайного распределения было наложено условие четности спинов в каждой группе, такое состояние всегда достигается.

Каждое состояние невозмущенного гамильтониана может быть задано двумя квантовыми числами, которыми являются суммарные спины в группах 1 и 2. Основному состоянию, очевидно, отвечает пара $(0,0)$. Энергия первого возбужденного состояния зависит от соотношения между константами ϕ_1 и ϕ_2. В зависимости от этого соотношения, энергия следующего по энергии состояния может быть равна $U\phi_1^2$, $U\phi_2^2$, $U(\phi_1-\phi_2)^2$ или $U(\phi_1+\phi_2)^2$. Следовательно, для того, чтобы основной вклад в статистическую сумму давался состоянием $(0,0)$, необходимо потребовать, чтобы все эти энергии были достаточно велики, а именно:

$$\min\left\{\beta U\phi_1^2, \beta U\phi_2^2, \beta U(\phi_1-\phi_2)^2, \beta U(\phi_1+\phi_2)^2\right\} \gg 1. \tag{3.6}$$

Если это условие не выполнено хотя бы для одной из величин, необходимо рассматривать вклад состояний, помимо основного. В такой постановке задачи нас будет интересовать взаимодействие двух групп спинов. Следует ожидать появление члена в эффективном гамильтониане, отвечающем за это самое взаимодействие.

3.1 Вклад состояний с $S_1^z = S_2^z = 0$

Начнем с рассмотрения более простого случая, когда условие (3.6) выполнено. Действовать будем как и ранее, по теории возмущений. По тем же причинам, что были изложены при рассмотрении тривиального случая, вклад в поправку к энергии состояния $(0,0)$ в первом порядке $E^{(1)}$ равен нулю. Начнем вычислять эффективный гамильтониан второго порядка для расщепления этого рассматриваемого состояния:

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)}_{\alpha\beta}[\phi_1,\phi_2] = \frac{\Gamma^2}{4}\sum_{m\neq 0}\sum_{\gamma}\frac{\langle 0,\alpha|\sum_{i=1,2}\sum_{p=\pm}\hat{S}_i^p|m,\gamma\rangle\langle m,\gamma|\sum_{i=1,2}\sum_{p=\pm}\hat{S}_i^p|0,\beta\rangle}{E_0-E_m}. \tag{3.7}$$

Здесь нам также хотелось бы выразить этот гамильтониан через спиновые операторы. В данном случае это легко сделать, раскрыв слагаемые и выкинув нулевые. В случае $\phi_1 \neq \pm\phi_2$ невозможно совершить перевороты одного спина в каждой из групп и вернуться в исходное состояние. Следовательно, в гамильтониане второго порядка нет членов, отвечающих за взаимодействие двух групп спинов. Более того, если переписать все ненулевые слагаемые, воспользовавшись тем, что действие операторов $\hat{S}_i^+$ и $\hat{S}_i^-$ переводит состояние $(0,0)$ в состояние с энергией $U\phi_i^2$. Отсюда находим

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)}_{\alpha\beta}[\phi_1,\phi_2] = -\sum_{i=1,2}\sum_{p=\pm}\frac{\Gamma^2}{4U\phi_i^2}\langle 0,\alpha|\hat{S}_i^p\hat{S}_i^{-p}|0,\beta\rangle. \tag{3.8}$$

В этом выражении можно увидеть сумму двух гамильтонианов (2.7). Окончательное выражение компактно переписывается как

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)}[\phi_1,\phi_2] = \sum_{i=1,2}\hat{\mathcal{H}}_i^{(2)}[\phi_i], \quad \hat{\mathcal{H}}_i[\phi_i] = -\frac{\kappa_i}{2}\left(\hat{S}_i^+\hat{S}_i^- + \hat{S}_i^-\hat{S}_i^+\right), \quad \kappa_i = \frac{\Gamma^2}{2U\phi_i^2}. \tag{3.9}$$

Спектр этого гамильтониана тривиально находится из спектра (2.9):

$$E^{(2)}_{k_1,k_2} = -\sum_{i=1,2} \kappa_i (N_i - k_i)(N_i - k_i + 1), \quad n_{k_1,k_2} = \prod_{i=1,2} \left[C^{k_i}_{2N_i} - C^{k_i - 1}_{2N_i} \right], \quad k_i = 0, 1, \ldots, N_i. \tag{3.10}$$

Так как операторы с разными индексами коммутируют, статистическая сумма представляет из себя произведение статистических сумм двух подсистем: первой и второй групп спинов. Следовательно, в данном приближении их взаимодействие отсутствует. Это приводит к необходимости изучения следующих порядков теории возмущений. Поправки к энергии третьего порядка $E^{(3)}$ равны нулю по тем же причинам, по которым равны нулю поправки первого порядка. Действительно, слагаемые, входящие в эффективный гамильтониан третьего порядка, содержат оператор возмущения в третьей степени. Однако, как уже было выяснено, невозможно совершить нечетное количество переворотов и вернуться в исходное состояние. Следовательно, минимальный порядок эффективного гамильтониана, в котором могут содержаться слагаемые, отвечающие за взаимодействие групп спинов с одинаковыми константами — четвертый.

Соответствующие формулы весьма громоздки в общем виде. В случае данной задачи они упрощаются за счет того, что в силу особенности вида оператора возмущения, $E^{(1)} = 0$ и $V_{\alpha\beta} = 0$, где $V_{\alpha\beta}$ — сокращенная запись для $\langle 0, \alpha | \hat{V} | 0, \beta \rangle$. В нужном порядке гамильтониан, дающий расщепление вырожденного уровня n имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{\alpha\beta} = \sum_{m,l,k \neq n} \frac{V_{\alpha m} V_{mk} V_{kl} V_{l\beta}}{\omega_{nl} \omega_{nk} \omega_{nm}} - \sum_{m,l \neq n} \frac{V_{\alpha m} V_{mn}}{\omega_{nm}} \frac{V_{nl} V_{l\beta}}{\omega^2_{nl}}, \quad \omega_{nm} = E_n - E_m. \tag{3.11}$$

Рассмотрим, для начала, второе слагаемое. Эффективный гамильтониан, как известно, необходим для того, чтобы найти поправки к энергии из соответствующего секулярного уравнения:

$$\sum_{\mu} \hat{\mathcal{H}}^{(p)}_{\alpha\mu} c^{(0)}_{n,\mu} = E^{(p)}_n c^{(0)}_{n,\alpha}. \tag{3.12}$$

Замечая, что во втором слагаемом содержится выражение для эффективного гамильтониана во втором порядке и используя секулярное уравнение во втором порядке, можем найти, что

$$-\sum_{m,l \neq n} \frac{V_{\alpha m} V_{mn}}{\omega_{nm}} \frac{V_{nl} V_{l\beta}}{\omega^2_{nl}} = -E^{(2)}_n \sum_{m \neq n} \frac{V_{\alpha m} V_{m\beta}}{\omega^2_{nm}}. \tag{3.13}$$

Теперь рассмотрим конкретный случай $n = 0$. Это выражение также легко выразить через спиновые операторы, действуя аналогично выводу для второго порядка. Действительно, выражение в правой части (3.13) отличается от гамильтониана (3.7) только множителем ω_{nm}, значение которого известно для каждого из ненулевых слагаемых. Это дает нам

$$-\sum_{m,l \neq 0} \frac{V_{\alpha m} V_{m0}}{\omega_{0m}} \frac{V_{0l} V_{l\beta}}{\omega^2_{0l}} = \sum_{i=1,2} \frac{E^{(2)}}{U \phi_i^2} \hat{\mathcal{H}}^{(2)}_{\alpha\beta}[\phi_i]. \tag{3.14}$$

Следовательно, данное слагаемое гамильтониана четвертого порядка приводит к перенормировке коэффициентов перед гамильтонианами второго порядка для отдельных групп спинов.

Эта перенормировка зависит от поправок к энергии основного состояния невозмущенного гамильтониана во втором порядке. Теперь рассмотрим внимательнее первое слагаемое в (3.11) (суммирование по вырожденным подуровням γ_k далее не пишется отдельно, но подразумевается):

$$\sum_{m,l,k\neq 0} \frac{\langle 0,\alpha|\,\hat{V}\,|m,\gamma_m\rangle\,\langle m,\gamma_m|\,\hat{V}\,|l,\gamma_l\rangle\,\langle l,\gamma_l|\,\hat{V}\,|k,\gamma_k\rangle\,\langle k,\gamma_k|\,\hat{V}\,|0,\beta\rangle}{\omega_{0l}\omega_{0k}\omega_{0m}} \tag{3.15}$$

Его также хотелось бы выразить через спиновые операторы. Для этого подставим выражение для возмущения V и разобьем на отдельные слагаемые интересующую нас часть гамильтониана. Это приведет к появлению 256 слагаемых и нам необходимо выяснить, какие из них не равны нулю. Для каждого из них необходимо также найти значение знаменателя, а потом воспользоваться тем же приемом, где мы заменяли суммирование по состояниям вставкой проектора.

Из структуры выражения (3.15) легко заметить, что не равны нулю слагаемые, которые отвечают за процессы переворотов спина определенного вида. Допускаются процессы, в результате которых происходит переворот четырех спинов. Эти процессы должны переводить один из подуровней состояния $(0,0)$ в другой подуровень состояния $(0,0)$. Среди допустимых процессов можно выделить два принципиально отличающихся вида. В первом перевороты происходят в двух различных группах, во втором — только в одной. При вычислении вклада от процессов второго вида, необходимо иметь ввиду, что $l \neq 0$. Выделяя отдельно вклады процессов каждого вида, получаем выражение

$$\begin{aligned}
&-\sum_{\substack{i,j=1,2\\ i\neq j}}\sum_{p,q=\pm}\sum_{m,l,k\neq 0}\frac{\Gamma^4}{16}\frac{\langle 0,\alpha|\,\hat{S}_i^{-q}\,|m,\gamma_m\rangle\,\langle m,\gamma_m|\,\hat{S}_j^{-p}\,|l,\gamma_l\rangle\,\langle l,\gamma_l|\,\hat{S}_j^{p}\,|k,\gamma_k\rangle\,\langle k,\gamma_k|\,\hat{S}_i^{q}\,|0,\beta\rangle}{U^3\phi_i^4(q\phi_i+p\phi_j)^2}-\\
&-\sum_{\substack{i,j=1,2\\ i\neq j}}\sum_{p,q=\pm}\sum_{m,l,k\neq 0}\frac{\Gamma^4}{16}\frac{\langle 0,\alpha|\,\hat{S}_j^{-q}\,|m,\gamma_m\rangle\,\langle m,\gamma_m|\,\hat{S}_i^{-p}\,|l,\gamma_l\rangle\,\langle l,\gamma_l|\,\hat{S}_j^{p}\,|k,\gamma_k\rangle\,\langle k,\gamma_k|\,\hat{S}_i^{q}\,|0,\beta\rangle}{U^3\phi_i^2\phi_j^2(q\phi_i+p\phi_j)^2}-\\
&-\sum_{i=1,2}\sum_{p=\pm}\sum_{m,l,k\neq 0}\frac{\Gamma^4}{64}\frac{\langle 0,\alpha|\,\hat{S}_i^{-q}\,|m,\gamma_m\rangle\,\langle m,\gamma_m|\,\hat{S}_i^{-p}\,|l,\gamma_l\rangle\,\langle l,\gamma_l|\,\hat{S}_i^{p}\,|k,\gamma_k\rangle\,\langle k,\gamma_k|\,\hat{S}_i^{q}\,|0,\beta\rangle}{U^3\phi_i^6}.
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Теперь, когда знаменатели в каждом слагаемом не зависят от номера уровня, можно снять суммирование по состояниям. Значит, (3.15) переписывается через операторы переворота спина следующим образом:

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{2}w_1\kappa_1^2\left\{\hat{S}_1^-\hat{S}_1^-\hat{S}_1^+\hat{S}_1^+ + \hat{S}_1^+\hat{S}_1^+\hat{S}_1^-\hat{S}_1^-\right\} - \frac{1}{2}w_2\kappa_2^2\left\{\hat{S}_2^-\hat{S}_2^-\hat{S}_2^+\hat{S}_2^+ + \hat{S}_2^+\hat{S}_2^+\hat{S}_2^-\hat{S}_2^-\right\} -\\
&-\frac{1}{2}w_-(\kappa_1+\kappa_2)^2\left\{\hat{S}_1^+\hat{S}_1^-\hat{S}_2^-\hat{S}_2^+ + \hat{S}_1^-\hat{S}_1^+\hat{S}_2^+\hat{S}_2^-\right\} - \frac{1}{2}w_+(\kappa_1+\kappa_2)^2\left\{\hat{S}_1^-\hat{S}_1^+\hat{S}_2^-\hat{S}_2^+ + \hat{S}_1^+\hat{S}_1^-\hat{S}_2^+\hat{S}_2^-\right\}.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Здесь были введены следующие обозначения:

$$w_i = \frac{1}{8U\phi_i^2}, \quad w_\pm = \frac{1}{2U(\phi_1\pm\phi_2)^2}. \tag{3.18}$$

Теперь у нас имеются все компоненты, необходимые для того,чтобы переписать эффективный гамильтониан во втором и четвертом порядках теории возмущений через операторы $\hat{S}$.

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)}[\phi_1,\phi_2] + \hat{\mathcal{H}}^{(4)}[\phi_1,\phi_2] = \\ = \sum_{i=1,2}\left[1+8w_iE^{(2)}\right]\hat{\mathcal{H}}_i^{(2)}[\phi_i] - \sum_{i=1,2} w_i\kappa_i^2\left\{\left[(\hat{S}_i^x)^2-(\hat{S}_i^y)^2\right]^2+\left[\hat{S}_i^x\hat{S}_i^y+\hat{S}_i^y\hat{S}_i^x\right]^2\right\} - \\ - \sum_{p=\pm} w_p(\kappa_1+\kappa_2)^2\left\{\left[(\hat{S}_1^x)^2+(\hat{S}_1^y)^2\right]\times\left[(\hat{S}_2^x)^2+(\hat{S}_2^y)^2\right]+p\hat{S}_1^z\hat{S}_2^z\right\}. \quad (3.19)$$

Обратим теперь внимание на то, что в выражении (3.19) только последняя сумма содержит слагаемые, в которых присутствуют спиновые операторы, относящиеся к обеим группам. Также можно заметить, что коэффициенты в этих слагаемых увеличиваются по мере приближения $(\phi_1 \pm \phi_2)$ к нулю. Более того, при $\phi_1 \longrightarrow \pm\phi_2$ эти коэффициенты становятся сколь угодно большими. В данном рассмотрении отсутствует плавный предельный переход случая разных констант в тривиальный случай при взятии такого предела.

Это связано с тем, что в выражениях теории возмущений содержатся матричные элементы, которые часто бывают равны нулю за счет ортогональности собственных состояний гамильтониана. В связи с этим, многие процессы переворота спинов в четвертом порядке не равны нулю только при $\phi_1 = \phi_2$. Их наличие приводит к сокращению замеченной расходимости, однако они не вносят вклада при $\phi_1 \neq \phi_2$.

Как уже обсуждалось ранее, нас интересуют эффекты, связанные с взаимодействием групп спинов. Рассмотрим выражение (3.19) при значениях параметров, при которых эти эффекты лучше всего проявляются. Без ограничения общности рассуждений будем рассматривать случай, когда мала разность $\phi_1-\phi_2$. Сперва необходимо определить соответствующую область параметров, границы которой задаются тремя условиями. Во-первых, слагаемые, отвечающие за взаимодействие должны быть больше других слагаемых в четвертом порядке, откуда следует, что $w_- \gg w_i$. Во-вторых, коэффициенты должны проходить апостериорную проверку теории возмущений. Сравнение со вторым порядком дает условие $w_-(\kappa_1+\kappa_2)^2 \ll \kappa_i$. В-третьих, должно быть выполнено условие (3.6). Объединяя все три условия, находим:

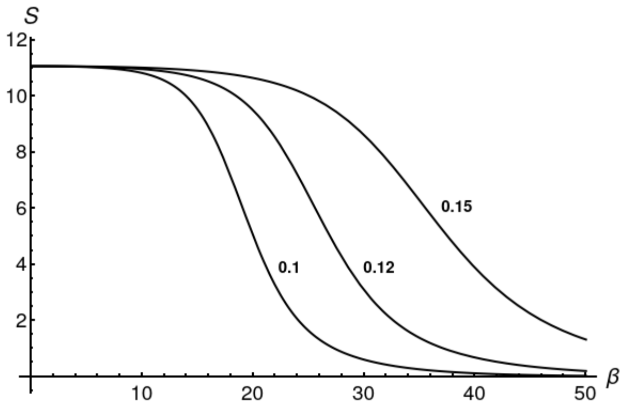
$$\frac{\max\{1/\beta,\kappa_1,\kappa_2\}}{U} \ll (\phi_1-\phi_2)^2 \ll \min\{\phi_1,\phi_2\}. \quad (3.20)$$

Если существует область параметров, удовлетворяющая этому неравенству, гамильтониан (3.19) упрощается к виду

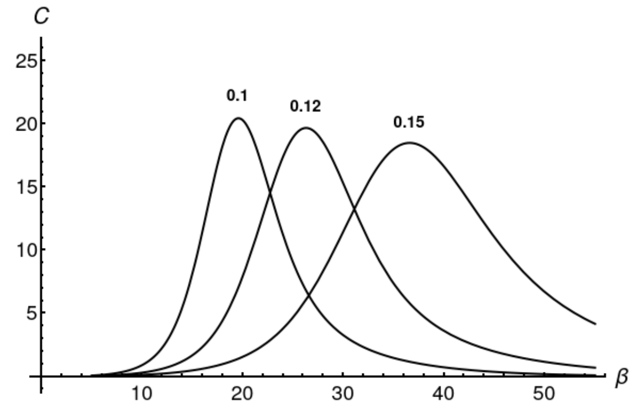
$$\hat{\mathcal{H}}_0^{int}[\phi_1,\phi_2] = -\kappa_1\left[(\hat{S}_1^x)^2+(\hat{S}_1^y)^2\right] - \kappa_2\left[(\hat{S}_2^x)^2+(\hat{S}_1^y)^2\right] - \\ - w_-(\kappa_1+\kappa_2)^2\left[(\hat{S}_1^x)^2+(\hat{S}_1^y)^2\right]\times\left[(\hat{S}_2^x)^2+(\hat{S}_2^y)^2\right] + w_-(\kappa_1+\kappa_2)^2\hat{S}_1^z\hat{S}_2^z. \quad (3.21)$$

Здесь мы подставили выражения для $\hat{\mathcal{H}}_i^{(2)}[\phi_i]$. Статистическую сумму гамильтониана (3.21) можно искать, применяя преобразование ВНК. Однако, в данном случае такой подход является избыточным. Действительно, ведь данный гамильтониан был выведен для подпространства, в котором суммарный спин в каждой группе равен нулю, так как выполнено условие (3.6). На этом подпространстве оператор $\hat{S}_1^z\hat{S}_2^z$ действует нулем. Опять используя выражения для $\hat{\mathcal{H}}^{(2)}[\phi_i]$, найдем:

$$\hat{\mathcal{H}}_0^{int}[\phi_1,\phi_2] = \hat{\mathcal{H}}_1^{(2)}[\phi_1] + \hat{\mathcal{H}}_2^{(2)}[\phi_2] - w_-\frac{(\kappa_1+\kappa_2)^2}{\kappa_1\kappa_2}\hat{\mathcal{H}}_1^{(2)}[\phi_1]\hat{\mathcal{H}}_2^{(2)}[\phi_2]. \quad (3.22)$$



(a)



(b)

Рис. 3.1: Зависимость энтропии (a) и теплоемкости (b) от обратной температуры β в случае различных констант ϕ_1 и ϕ_2. Для всех графиков справедливы следующие значения параметров: $N = 10$, $N_1 = 4$, $\Gamma = 0.3$, $U = 2$, $\phi_1 = 3$. На Рис. (3.1a) и Рис. (3.1b) соответствующие зависимости изображены при трех разных значениях ϕ_2, равным 3.1, 3.12 и 3.15. Графики подписаны соответствующей им разностью $(\phi_2 - \phi_1)$.

Так как гамильтонианы $\hat{\mathcal{H}}_i^{(2)}[\phi_i]$ коммутируют, их спектр мгновенно дает спектр (3.22):

$$E^{int}_{k_1,k_2} = -\sum_{i=1,2} \kappa_i (N_i - k_i)(N_i - k_1 + 1) - w_-(\kappa_1 + \kappa_2)^2 \prod_{i=1,2} (N_i - k_i)(N_i - k_i + 1);$$
$$n_{k_1,k_2} = \prod_{i=1,2} \left[C^{k_i}_{2N_i} - C^{k_i-1}_{2N_i}\right], \quad k_i = 0, 1, \ldots, N_i. \tag{3.23}$$

Выражение для статистической суммы записывается соответственно:

$$Z_0^{int} = \sum_{k_1=0}^{N_1} \sum_{k_2=0}^{N-N_1} n_{k_1,k_2} e^{-\beta E^{int}_{k_1,k_2}} \tag{3.24}$$

Используя выражение (3.24) для статистической суммы, можно вычислить энтропию и теплоемкость. Зависимость этих величин от температуры изображена на Рис. 3.1. Как видно из графиков, качественная картина не изменилась, по сравнению с Рис. 2.1. Это справедливо для всей области параметра $\phi_2 - \phi_1$, в которой выполнено условие (3.20). Этого следовало ожидать, так как гамильтониан (3.22) не содержит слагаемых, нарушающих инвариантность относительно независимых вращений в каждой из групп спинов. Для получения более нетривиальной зависимости, следует изучить область параметров, в которой существенный вклад вносит не только состояния, образовавшиеся в результате расщепления основного состояния невозмущенного гамильтониана, но и все состояния с $S^z = 0$.

3.2 Вклад состояний с $S^z = 0$, но $S_i^z \neq 0$

Как и в прошлом разделе, будем рассматривать случай близких констант ϕ_1 и ϕ_2. Как будет показано ниже, для того, чтобы все состояния с $S^z = 0$ давали существенный вклад, необходимо теперь потребовать выполнение условия

$$\beta U(\phi_1 - \phi_2)^2 \min\{N_1, N_2\} \ll 1. \tag{3.25}$$

При таком соотношении параметров состояния, дающие вклад, определяется одним квантовым числом — суммарным спином, например, в первой группе, так как из $S^z = 0$ следует $S_1^z = -S_2^z = n$. При этом, n пробегает значения от $-n_{max}$ до n_{max}, где $n_{max} = \min\{N_1, N_2\}$. Нетрудно заметить, что энергия такого состояния равна

$$E_{|n|}^{(0)} = Un^2(\phi_1 - \phi_2)^2 \tag{3.26}$$

Важно заметить, что состояния с квантовыми числами n и $-n$ имеют одинаковую энергию и, фактически, являются подуровнями вырожденного состояния. Казалось бы, их независимое рассмотрение не является вполне корректным. Тем не менее, далее будет показано, что при определенных условиях, такие состояния удобно рассматривать по-отдельности. При применении теории возмущений, для каждого уровня с заданным $|n|$ имеется свой эффективный гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}_{|n|}^{(eff)}$, определяющий его расщепление. Пусть $H_{S^z=0}$ — подпространство, на котором суммарный спин $S_1^z + S_2^z$ равен нулю. Гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}_{|n|}^{(eff)}$ действует на подпространстве $H_{|n|}$, на котором суммарный спин S^z равен нулю, а спин в первой группе равен n или $-n$. Из определения следует, что

$$H_{S^z=0} = \bigoplus_{|n|=0}^{n_{max}} H_{|n|}. \tag{3.27}$$

Таким образом, задача сводится к диагонализации каждого гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_{|n|}^{(eff)}$ на соответствующем ему подпространстве. Пусть известен спектр $E_{|n|,i}$ гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_{|n|}^{(eff)}$. Обозначим

$$Z_{|n|} = \sum_i e^{-\beta E_{|n|,i}}. \tag{3.28}$$

Так как $E_{|n|,i}$ — поправки к уровню энергии, которому соответствует $|S^z| = |n|$, используя выражение (3.26), находим полную статистическую сумму:

$$Z_{total} = \sum_{|n|=0}^{n_{max}} Z_{|n|} e^{-\beta U n^2(\phi_1 - \phi_2)^2}. \tag{3.29}$$

Однако, при $\beta U n_{max}^2(\phi_1 - \phi_2)^2 \ll 1$ каждый из экспоненциальных множителей в (3.29) приблизительно равен единице. Следовательно, при выполнении условия (3.25) статистическая сумма, вычисленная на подпространстве $H_{S^z=0}$ равна

$$Z_{total}\left[\beta U n_{max}^2(\phi_1 - \phi_2)^2 \ll 1\right] = \sum_{|n|=0}^{n_{max}} Z_{|n|}. \tag{3.30}$$

Выражение (3.30) и означает, что все состояния с $S^z = 0$ дают одинаковый вклад. Стоит отметить, что для того, чтобы другие состояния, помимо $S^z = 0$ давали несущественный вклад, необходимо, чтобы было выполнено условие

$$\min\left\{\beta U \phi_1^2, \beta U \phi_2^2, \beta U (\phi_1 + \phi_2)^2\right\} \gg 1. \tag{3.31}$$

3.2.1 Второй порядок теории возмущений

Перейдем к вычислению эффективных гамильтонианов $\hat{\mathcal{H}}_{|n|}^{(eff)}$. Начнем со второго порядка теории возмущений.

Отметим теперь важное свойство второго порядка теории возмущений в данной задаче. Вклад в эффективный гамильтониан второго порядка вносят процессы, содержащие две операции переворота спина, которые переводят один подуровень состояния $|n|$ в другой подуровень состояния с этой же энергией. Отсюда следует очевидный вывод, что при $|n| \geq 1$

$$\langle -n, \alpha| \hat{V} |m, \gamma_m\rangle \langle m, \gamma_m| \hat{V} |n, \beta\rangle = 0 \tag{3.32}$$

для любых $|m, \gamma_m\rangle$ (обозначение следует понимать как $|S_1^z, \alpha\rangle$). Это приводит к отсутствию членов, содержащих одновременно состояния $|n, \alpha\rangle$ и $|-n, \beta\rangle$ в выражениях для эффективных гамильтонианов во втором порядке, так как между этими уровнями нет переходов. Это означает, что состояния n и $-n$ можно рассматривать отдельно и для каждого из них составлять свой эффективный гамильтониан. Во втором порядке он запишется как

$$\left(\hat{\mathcal{H}}_n^{(2)}\right)_{\alpha\beta} = \sum_{m\neq n} \frac{\langle n, \alpha| \hat{V} |m, \gamma_m\rangle \langle m, \gamma_m| \hat{V} |n, \beta\rangle}{Un^2(\phi_1 - \phi_2)^2 - E_m}. \tag{3.33}$$

В выражении (3.33) тривиально выделяются ненулевые слагаемые из того условия, что процессы переворота спина, дающие вклад во втором порядке, должны начинаться и заканчиваться в состоянии n. В результате выражение переписывается как

$$\left(\hat{\mathcal{H}}_n^{(2)}\right)_{\alpha\beta} = \sum_{i=1,2} \sum_{m\neq n} \sum_{q=\pm} \frac{\Gamma^2}{4} \frac{\langle n, \alpha| \hat{S}_i^q |m, \gamma_m\rangle \langle m, \gamma_m| \hat{S}_i^{-q} |n, \beta\rangle}{Un^2(\phi_1 - \phi_2)^2 - E_m}. \tag{3.34}$$

Теперь необходимо определить, чему равен коэффициент для каждого ненулевого слагаемого. Подставляя значения для энергий E_m, получим

$$\left(\hat{\mathcal{H}}_n^{(2)}\right)_{\alpha\beta} = \sum_{i=1,2} \sum_{m\neq n} \sum_{q=\pm} \frac{\Gamma^2}{4U} \frac{\langle n, \alpha| \hat{S}_i^q |m, \gamma_m\rangle \langle m, \gamma_m| \hat{S}_i^{-q} |n, \beta\rangle}{n^2(\phi_1 - \phi_2)^2 - \left[n(\phi_1 - \phi_2) - q\phi_i\right]^2}. \tag{3.35}$$

Теперь, когда коэффициент не зависит от номера состояния m, гамильтониан можно переписать через спиновые операторы следующим образом:

$$\hat{\mathcal{H}}_n^{(2)} = \frac{\Gamma^2}{4U} \sum_{i=1,2} \sum_{q=\pm} \frac{\hat{S}_i^q \hat{S}_i^{-q}}{n^2(\phi_1 - \phi_2)^2 - \left[n(\phi_1 - \phi_2) - q\phi_i\right]^2}. \tag{3.36}$$

Используя то, что $q^2 = 1$, выражение можно упростить к виду

$$\hat{\mathcal{H}}_n^{(2)} = -\frac{\Gamma^2}{4U} \sum_{i=1,2} \sum_{q=\pm} \frac{\hat{S}_i^q \hat{S}_i^{-q}}{\phi_i^2 - 2qn\phi_i(\phi_1 - \phi_2)}. \tag{3.37}$$

Выполняя суммирование по q, распишем выражение для гамильтониана:

$$\hat{\mathcal{H}}_n^{(2)} = -\frac{\Gamma^2}{4U} \sum_{i=1,2} \left[\frac{\hat{S}_i^+ \hat{S}_i^-}{\phi_i^2 - 2n\phi_i(\phi_1 - \phi_2)} + \frac{\hat{S}_i^- \hat{S}_i^+}{\phi_i^2 + 2n\phi_i(\phi_1 - \phi_2)}\right]. \tag{3.38}$$

Наконец, перепишем выражение через компоненты спинов

$$\hat{\mathcal{H}}_n^{(2)} = -\sum_{i=1,2} \frac{\Gamma^2}{2U\left[\phi_i^2 - 4n^2(\phi_1 - \phi_2)^2\right]} \left[(\hat{S}_i^x)^2 + (\hat{S}_i^y)^2 + n\hat{S}_i^z(\phi_1 - \phi_2)/\phi_i\right]. \quad (3.39)$$

Заметим, что при $n = 0$ полученное выражение совпадает с (3.8).

С точностью до слагаемого, содержащего параметр $n(\phi_1 - \phi_2)/\phi_i$ в коэффициенте, полученный гамильтониан равен гамильтониану (3.8), однако действует на подпространстве, в котором суммарный спин в первой группе равен n. Без дополнительных предположений нельзя утверждать, что параметр $n_{max}(\phi_1 - \phi_2)/\phi_i$ является малым, так как при $\beta U \ll 1$ существует такая область параметров ϕ_1 и ϕ_2, что условие, записанное в 3.30 и условие 3.31 выполнены одновременно.

Как и следовало ожидать, во втором порядке отсутствуют слагаемые, отвечающие за взаимодействие двух групп спинов, поэтому необходимо рассматривать четвертый порядок. При вычислении сразу будем оставлять только большие слагаемые, то есть только те, которые имеют $(\phi_1 - \phi_2)^2$ в знаменателе. Это уже позволяет отбросить второе слагаемое в (3.11), так как, как было показано раньше, оно отвечает за перенормировку коэффициентов в слагаемых второго порядка. Особенность вычисления в четвертом порядке теории возмущений заключается в том, что эффективный гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}_{|n|}^{(4)}$ содержит перекрестные члены при $n = 1$. Это приводит к необходимости рассматривать данный случай отдельно.

3.2.2 Четвертый порядок теории возмущений, случай $|S_i^z| > 1$

Сперва рассмотрим случай, в котором $|S_i^z| > 1$. Тогда, как и во втором порядке, перекрестные слагаемые в гамильтонианах отсутствуют и их можно рассматривать отдельно для состояний с $S_1^z < 0$ и $S_1^z > 0$.

$$\left(\hat{\mathcal{H}}_n^{(4)}\right)_{\alpha\beta} = \sum_{m,l,k\neq n} \frac{\langle n,\alpha|\,\hat{V}\,|m,\gamma_m\rangle\,\langle m,\gamma_m|\,\hat{V}\,|l,\gamma_l\rangle\,\langle l,\gamma_l|\,\hat{V}\,|k,\gamma_k\rangle\,\langle k,\gamma_k|\,\hat{V}\,|n,\beta\rangle}{\omega_{nl}\omega_{nk}\omega_{nm}} \quad (3.40)$$

Легко догадаться, что для того, чтобы получить нужный коэффициент, процессы переворота спинов должны происходить внутри разных групп. Более того, если в одной группе, в результате этих процессов, спин поднимается, внутри другой группы он должен опуститься. Слагаемые, удовлетворяющие таком требованию, можно записать в виде

$$\sum_{\substack{i,j=1,2\\ i\neq j}} \sum_{q=\pm} \sum_{m,l,k\neq n} \frac{\Gamma^4}{16} \frac{\langle n,\alpha|\,\hat{S}_j^q\,|m,\gamma_m\rangle\,\langle m,\gamma_m|\,\hat{S}_i^{-q}\,|l,\gamma_l\rangle\,\langle l,\gamma_l|\,\hat{S}_j^{-q}\,|k,\gamma_k\rangle\,\langle k,\gamma_k|\,\hat{S}_i^q\,|n,\beta\rangle}{U^3 P_{ij}^q(n)} +$$

$$+ \sum_{\substack{i,j=1,2\\ i\neq j}} \sum_{q=\pm} \sum_{m,l,k\neq 0} \frac{\Gamma^4}{16} \frac{\langle n,\alpha|\,\hat{S}_i^q\,|m,\gamma_m\rangle\,\langle m,\gamma_m|\,\hat{S}_j^{-q}\,|l,\gamma_l\rangle\,\langle l,\gamma_l|\,\hat{S}_j^q\,|k,\gamma_k\rangle\,\langle k,\gamma_k|\,\hat{S}_i^{-q}\,|n,\beta\rangle}{U^3 Q_{ij}^q(n)}$$

Здесь через $P_{ij}^q(n)$ и $Q_{ij}^q(n)$ обозначены знаменатели соответствующих выражений. Из тех же соображений, что были применены во втором порядке, они могут быть вычислены как

$$P_{ij}^q(n) = \left\{n^2[\phi_1 - \phi_2]^2 - [n(\phi_1 - \phi_2) - q\phi_j]^2\right\} \times$$
$$\left\{n^2[\phi_1 - \phi_2]^2 - [n(\phi_1 - \phi_2) + q\phi_i]^2\right\} \times \left\{n^2[\phi_1 - \phi_2]^2 - [n(\phi_1 - \phi_2) + q(\phi_i - \phi_j)]^2\right\} \quad (3.41)$$

$$Q_{ij}^q(n) = \left\{n^2[\phi_1 - \phi_2]^2 - [n(\phi_1 - \phi_2) - q\phi_i]^2\right\}^2 \times \\ \times \left\{n^2[\phi_1 - \phi_2]^2 - [n(\phi_1 - \phi_2) - q(\phi_i - \phi_j)]^2\right\} \quad (3.42)$$

Выражение приведены в полной форме, так как по такой записи легко восстанавливаются промежуточные состояния. Формулы (3.41) и (3.42) можно упростить к виду

$$P_{ij}^q(n) = \left[2qn\phi_j(\phi_1 - \phi_2) - \phi_j^2\right] \times \left[2qn\phi_i(\phi_1 - \phi_2) + \phi_i^2\right] \times \left[2qn(i\sigma^y)_{ij} + 1\right](\phi_1 - \phi_2)^2, \quad (3.43)$$

$$Q_{ij}^q(n) = \left[2qn\phi_i(\phi_1 - \phi_2) - \phi_i^2\right]^2 \times [2qn\,(i\sigma^y)_{ij} - 1](\phi_1 - \phi_2)^2. \quad (3.44)$$

Здесь σ^y — матрица Паули. То есть

$$i\sigma_{ij}^y = \begin{cases} 1, & i = 1,\ j = 2; \\ -1, & i = 2,\ j = 1; \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (3.45)$$

Используя эти выражения, находим:

$$\hat{\mathcal{H}}_n^{(4)} = \frac{1}{(\phi_1 - \phi_2)^2}\frac{\Gamma^4}{16U^3}\sum_{\substack{i,j=1,2\\ i\neq j}}\sum_{q=\pm}\left[\frac{\hat{S}_i^q\hat{S}_i^{-q}\hat{S}_j^{-q}\hat{S}_j^q}{[2qn\phi_i(\phi_1 - \phi_2) - \phi_i^2]^2[2qn\,(i\sigma^y)_{ij} - 1]} + \right. \\ \left. + \frac{\hat{S}_i^{-q}\hat{S}_i^q\hat{S}_j^q\hat{S}_j^{-q}}{[2qn\phi_j(\phi_1 - \phi_2) - \phi_j^2][2qn\phi_i(\phi_1 - \phi_2) + \phi_i^2][2qn(i\sigma^y)_{ij} + 1]}\right]. \quad (3.46)$$

Собирая коэффициенты, перед подобными слагаемыми, найдем:

$$\hat{\mathcal{H}}_n^{(4)} = \frac{1}{2}w_-\kappa_1\kappa_2\left[\frac{\hat{S}_1^+\hat{S}_1^-\hat{S}_2^-\hat{S}_2^+}{2n - 1}\frac{[\phi_1^2 - 2n(\phi_1 - \phi_2)^2 + \phi_2^2]^2}{[2n(\phi_1 - \phi_2) + \phi_2]^2[2n(\phi_1 - \phi_2) - \phi_1]^2} - \right. \\ \left. - \frac{\hat{S}_1^-\hat{S}_1^+\hat{S}_2^+\hat{S}_2^-}{2n + 1}\frac{[\phi_1^2 + 2n(\phi_1 - \phi_2)^2 + \phi_2^2]^2}{[2n(\phi_1 - \phi_2) - \phi_2]^2[2n(\phi_1 - \phi_2) + \phi_1)]^2}\right]. \quad (3.47)$$

Заметим, что если величина $n_{max}(\phi_1 - \phi_2)/\phi_i$ является малой, выражение значительно упрощается

$$\hat{\mathcal{H}}_n^{(4)} = \frac{1}{2}w_-(\kappa_1 + \kappa_2)^2\left[\frac{\hat{S}_1^+\hat{S}_1^-\hat{S}_2^-\hat{S}_2^+}{2n - 1} - \frac{\hat{S}_1^-\hat{S}_1^+\hat{S}_2^+\hat{S}_2^-}{2n + 1}\right]. \quad (3.48)$$

Данное приближение справедливо в области параметров

$$\frac{n_{max}(\phi_1 - \phi_2)}{\min\{\phi_1, \phi_2\}} \ll 1. \quad (3.49)$$

Заметим, что при $n = 0$ полученный гамильтониан совпадает с гамильтонианом, вычисленным ранее. Приближенный гамильтониан (3.48) можно переписать в терминах компонент операторов спина:

$$\hat{\mathcal{H}}_n^{(4)} = w_-\frac{(\kappa_1 + \kappa_2)^2}{4n^2 - 1}\left\{2n\hat{S}_1^z\left[(\hat{S}_2^x)^2 + (\hat{S}_2^y)^2\right] - 2n\hat{S}_2^z\left[(\hat{S}_1^x)^2 + (\hat{S}_1^y)^2\right] + \right. \quad (3.50)$$

$$\left. + \left[(\hat{S}_1^x)^2 + (\hat{S}_1^y)^2\right] \times \left[(\hat{S}_2^x)^2 + (\hat{S}_2^y)^2\right] - \hat{S}_1^z\hat{S}_2^z\right\}. \quad (3.51)$$

Так как оператор $\hat{S}_1^z$ действует на указанном подпространстве умножением на n, а $\hat{S}_2^z$ — на $-n$, спектр гамильтониана (3.47) выражается через спектры гамильтонианов отдельных групп. То есть нарушения инвариантности по отношению к вращениям отдельных групп спинов также не происходит.

3.2.3 Четвертый порядок теории возмущений, случай $|S_i^z| = 1$

Начнем с записи общей формулы, в четвертом порядке, пренебрегая перенормировками:

$$\left(\mathcal{H}^{(4)}_{|n|=1}\right)^{p,q}_{\alpha\beta} = \sum_{m,l,k\neq n} \frac{\langle p1,\alpha|\,\hat{V}\,|m,\gamma_m\rangle\,\langle m,\gamma_m|\,\hat{V}\,|l,\gamma_l\rangle\,\langle l,\gamma_l|\,\hat{V}\,|k,\gamma_k\rangle\,\langle k,\gamma_k|\,\hat{V}\,|q1,\beta\rangle}{\omega_{nl}\omega_{nk}\omega_{nm}}$$

Все процессы, дающие ненулевой вклад, могут быть описаны следующим образом

$$\left(\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{|n|=1}\right)^{p,p}_{\alpha\beta} = \sum_{\substack{i,j=1,2\\ i\neq j}} \sum_{q=\pm} \sum_{m,l,k\neq n} \frac{\Gamma^4}{16} \frac{\langle p1,\alpha|\,\hat{S}_j^q\,|m,\gamma_m\rangle\,\langle m,\gamma_m|\,\hat{S}_i^{-q}\,|l,\gamma_l\rangle\,\langle l,\gamma_l|\,\hat{S}_j^{-q}\,|k,\gamma_k\rangle\,\langle k,\gamma_k|\,\hat{S}_i^{q}\,|p1,\beta\rangle}{U^3 P^q_{ij}(p1)} +$$

$$+ \sum_{\substack{i,j=1,2\\ i\neq j}} \sum_{q=\pm} \sum_{m,l,k\neq 0} \frac{\Gamma^4}{16} \frac{\langle p1,\alpha|\,\hat{S}_i^q\,|m,\gamma_m\rangle\,\langle m,\gamma_m|\,\hat{S}_j^{-q}\,|l,\gamma_l\rangle\,\langle l,\gamma_l|\,\hat{S}_j^{q}\,|k,\gamma_k\rangle\,\langle k,\gamma_k|\,\hat{S}_i^{-q}\,|p1,\beta\rangle}{U^3 Q^q_{ij}(p1)}$$

$$\left(\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{|n|=1}\right)^{p,-p}_{\alpha\beta} = \sum_{i,j,i',j'} \sum_{m,l,k\neq 0} \frac{\Gamma^4}{16} \frac{\langle p1,\alpha|\,\hat{S}_i^{p_i}\,|m,\gamma_m\rangle\,\langle m,\gamma_m|\,\hat{S}_j^{p_j}\,|l,\gamma_l\rangle\,\langle l,\gamma_l|\,\hat{S}_{j'}^{p_{j'}}\,|k,\gamma_k\rangle\,\langle k,\gamma_k|\,\hat{S}_{i'}^{p_{i'}}\,|-p1,\beta\rangle}{U^3 R^{i'j'}_{ij}(p1)}.$$

Здесь тензоры P, Q — как и ранее, знаменатели соответствующих слагаемых. Для них справедливы выражения (3.41) и (3.42). Отличие заключается в наличии перекрестного слагаемого, приводящего к появлению недиагональных членов. Суммирование в нем выполняется по следующим правилам: из четырех индексов i, j, i' и j' два равны 1 и два равны 2. При этом, знак определяется как

$$p_i = \begin{cases} p, & i = 1; \\ -p, & i = 2. \end{cases} \tag{3.52}$$

Из шести слагаемых два могут быть отброшены, так как не содержат $(\phi_1 - \phi_2)^2$ в знаменателе (т. е. среди промежуточных состояний процесса нет состояния с $n = 0$). Рассмотрение остальных четырех случаев приводит к выражению

$$\left(\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{|n|=1}\right)^{p,-p}_{\alpha\beta} = \frac{\Gamma^4}{16U^3} \frac{\left[(\phi_1-\phi_2)^2 - 2\phi_1\phi_2\right]^2}{(\phi_1-\phi_2)^2(\phi_1^2 - 2\phi_1\phi_2)(\phi_2^2 - 2\phi_1\phi_2)} \langle p1,\alpha|\,(\hat{S}_1^p)^2(\hat{S}_2^{-p})^2\,|-p1,\beta\rangle \tag{3.53}$$

Расписывая выражение через компоненты спиновых операторов, найдем:

$$\left(\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{|n|=1}\right)^{p,-p}_{\alpha\beta} = \frac{\Gamma^4}{8U^2} \frac{w_-\left[(\phi_1-\phi_2)^2 - 2\phi_1\phi_2\right]^2}{(\phi_1^2 - 2\phi_1\phi_2)(\phi_2^2 - 2\phi_1\phi_2)} \langle p1,\alpha| \prod_{i=1,2}\left[(\hat{S}_i^x)^2 - (\hat{S}_i^y)^2\right] + \prod_{i=1,2}\left[\hat{S}_i^x, \hat{S}_i^y\right]_+ -$$

$$- ip\left[(\hat{S}_1^x)^2 - (\hat{S}_1^y)^2\right] \times \left[\hat{S}_2^x, \hat{S}_2^y\right]_+ + ip\left[(\hat{S}_2^x)^2 - (\hat{S}_2^y)^2\right] \times \left[\hat{S}_1^x, \hat{S}_1^y\right]_+ |-p1,\beta\rangle\,. \tag{3.54}$$

Для диагональных по p компонент гамильтониана справедлива формула (3.47). Для нахождения $\left(\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{|n|=1}\right)^{p,p}_{\alpha\beta}$, достаточно подставить в нее $n = 1p$. При этом, легко заметить, что в силу симметрии относительно замены знака n в формуле (3.47), зависимость от p пропадает. Итоговый гамильтониан может быть записан в виде

$$\left(\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{|n|=1}\right)^{p,q}_{\alpha\beta} = \delta_{p,q}\left(\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{diag}\right)_{\alpha\beta} + \delta_{p,1}\delta_{q,-1}\left(\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{off,+}\right)_{\alpha\beta} + \delta_{p,-1}\delta_{q,1}\left(\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{off,-}\right)_{\alpha\beta}. \tag{3.55}$$

Здесь мы определили гамильтонианы $\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{off}$ и $\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{diag,p}$ следующим образом:

$$\left(\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{diag}\right)_{\alpha\beta} = \left(\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{|n|=1}\right)^{p,p}_{\alpha\beta}, \quad \left(\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{off,p}\right)_{\alpha\beta} = \left(\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{|n|=1}\right)^{p,-p}_{\alpha\beta}. \tag{3.56}$$

Заметим, что спектр гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}^{(4)}_{off,p}$ не может быть тривиальным образом найден из спектров гамильтонианов, соответствующих отдельным группам спинов. Важно подчеркнуть, что это выполнено вне зависимости от выполнения условия (3.49).

Глава 4

Заключение

В данной работе было проведено исследование термодинамики спиновой цепочки, низкоэнергетический спектр которой схож со спектром квантового алгоритма, соответствующего задаче о разбиении множества целых чисел на группы с равными суммами.

В тривиальном случае, когда все константы ϕ_i равны между собой, было выявлено существование двух температурных режимов. В режиме $\beta\kappa N \gg 1$ главный вклад в статистическую сумму дается только одним состоянием с наименьшей энергией. В случае же $\beta\kappa N \ll 1$ вклад обусловлен всеми состояниями, возникшими в результате расщепления основного состояния невозмущенного гамильтониана во втором порядке, вызванного внешним полем. В учебных целях задача была решена также при помощи функционального интегрирования и применения преобразования Вея–Нормана–Колоколова. На примере простой задачи были изучены все сопутствующие технические приемы. Мотивация данного вычисления заключается в изучении метода, позволяющего находить статистическую сумму спинового гамильтониана более общего вида.

В случае существования двух различных констант ϕ_1 и ϕ_2 термодинамика спиновой цепочки была исследована в четвертом порядке теории возмущений. В области, в которой константы не близки между собой и не малы, основной вклад обеспечивался состояниями, в которых суммарный спин равен нулю в каждой группе. В работе было показано, что в этом случае взаимодействие между группами спинов тривиально, так как спектр соответствующего эффективного гамильтониана находится из спектров гамильтонианов подсистем.

Во второй области константы были достаточно близки для того, чтобы вклад обеспечивался всеми состояниями, в которых суммарный спин равен нулю. Эффективный гамильтониан, соответствующий произвольному уровню, удовлетворяющему этому условию, был найден в общем виде. Было показано, что в силу наличия процессов, меняющих знак суммарных спинов в обоих группах, в эффективном гамильтониане, определяющем расщепление состояния $|S_i^z| = 1$ появляются перекрестные компоненты. Эти компоненты приводят к нарушении инвариантности относительно независимых вращений и, как следствие, к нетривиальному взаимодейству двух групп спинов.

В дальнейшем планируется применить технику функционального интегрирования и преобразование Вея–Нормана–Колоколова для исследования термодинамики эффективного гамильтониана в четвертом порядке.

Приложение A

Производная оператора $\hat{\boldsymbol{B}}$

Дифференцирование оператора $\hat{B}$ дает

$$\dot{\hat{B}}(t) = \hat{s}^+\dot{\theta}^-(t)\hat{B}(t) + \exp\left(\hat{s}^+\theta^-(t)\right)\exp\left(\hat{s}^z\int_0^t dt'\rho(t')\right)\left(\hat{s}^z\rho(t) + \hat{s}^-\theta^+(t)\exp\left(\int_0^t dt'\rho(t')\right)\right)\times$$
$$\times\exp\left(\hat{s}^-\int_0^t dt'\theta^+(t')\exp\left(\int_0^{t'} dt''\rho(t'')\right)\right)\exp\left(-\hat{s}^+\theta^-(0)\right). \tag{A.1}$$

Далее нам потребуется вспомогательное утверждение. Пусть $\hat{s}$ — спиновый оператор, а F — функция разложимая в ряд Тейлора в окрестности нуля. Тогда справедливы следующие соотношения:

1. $[\hat{s}^-, F(\hat{s}^+)] = -2\hat{s}^z F'(\hat{s}^+) + \hat{s}^+F''(\hat{s}^+)$;
2. $F(\hat{s}^z)\hat{s}^- = \hat{s}^-F(\hat{s}^z - 1)$;
3. $[F(\hat{s}^+), \hat{s}^z] = -F'(\hat{s}^+)\hat{s}^+$.

1. Докажем, для начала, первую часть утверждения. Произвольная функция от оператора определяется через разложение этой функции в ряд Тейлора в окрестности нуля. Достаточно приравнять слагаемые перед нулями производных одинакового порядка:
$F(0)$ содержится только в левой части и является скалярной величиной и при взятии коммутатора с $\hat{s}^-$ дает нуль. Для первой производной получаем:

$$F'(0)\left[\hat{s}^-, \hat{s}^+\right] = -2\hat{s}^z F'(0).$$

Далее, для нуля производной порядка $k \geq 2$:

$$\left(\hat{s}^-(\hat{s}^+)^k - (\hat{s}^+)^k\hat{s}^-\right) = -2k\hat{s}^z(\hat{s}^+)^{k-1} + (k-1)k(\hat{s}^+)^{k-1}. \tag{A.2}$$

Подействуем левой и правой частью на вектор $|s, m\rangle$. Для левой имеем

$$\left(\hat{s}^-(\hat{s}^+)^k - (\hat{s}^+)^k\hat{s}^-\right)|s, m\rangle = [m(m-1) - (m+k)(m+k-1)]\sqrt{\ldots}\,|s, m+k-1\rangle. \tag{A.3}$$

Для правой получим:

$$k\left((\hat{s}^+)^{k-1} - 2(k-1)\hat{s}^z(\hat{s}^+)^{k-1}\right)|s, m\rangle = k\left[(k-1) - 2(m+k-1)\right]\sqrt{\ldots}\,|s, m+k-1\rangle. \tag{A.4}$$

Получили равенство левой и правой части. Следовательно, операторы слева и справа одинаково действуют на любой вектор, так как любой вектор из гильбертова пространства может быть разложен по базису.
2. Докажем теперь второе утверждение. Оно мгновенно следует из того, что

$$\hat{s}^z\hat{s}^- = \hat{s}^-(\hat{s}^z - 1) \Longrightarrow (\hat{s}^z)^n\hat{s}^- = (\hat{s}^z)^{n-1}\hat{s}^-(\hat{s}^z - 1) = (\hat{s}^z)^{n-2}\hat{s}^-(\hat{s}^z - 1)^2 = \dots . \tag{A.5}$$

Наконец, докажем третье утверждение аналогично первому:
3. Приравнивая слагаемые с одинаковыми $F^{(k)}(0)$. Для левой части:

$$\left((\hat{s}^+)^k\hat{s}^z - \hat{s}^z(\hat{s}^+)^k\right)|s,m\rangle = [m-(m+k)]\sqrt{\dots}\,|s,m\rangle . \tag{A.6}$$

Для правой:

$$-k\hat{s}^+(\hat{s}^+)^k\,|s,m\rangle = -k\sqrt{\dots}\,|s,m\rangle . \tag{A.7}$$

Все три тождества доказаны. Используем их для того, чтобы упростить выражение для производной оператора $\hat{B}(t)$. Используя второе утверждение, имеем:

$$\exp\left(\hat{s}^z\int_0^t dt'\rho(t')\right)\hat{s}^-\theta^+(t)\exp\left(\int_0^t dt'\rho(t')\right) = \hat{s}^-\theta^+(t)\exp\left((\hat{s}^z-1))\int_0^t dt'\rho(t')\right)\times \tag{A.8}$$

$$\times\exp\left(\int_0^t dt'\rho(t')\right) = \hat{s}^-\theta^+(t)\exp\left(\hat{s}^z\int_0^t dt'\rho(t')\right). \tag{A.9}$$

Теперь, применяя первое утверждение, находим:

$$\exp\left(\hat{s}^+\theta^-(t)\right)\hat{s}^-\theta^+(t) = \left\{\hat{s}^-\theta^+(t) + 2\hat{s}^z\theta^+(t)\theta^-(t) - \hat{s}^+\theta^+(t)\left(\theta^-(t)\right)^2\right\}\exp\left(\hat{s}^+\theta^-(t)\right) \tag{A.10}$$

Наконец, применяя третье тождество, находим:

$$\exp\left(\hat{s}^+\theta^-(t)\right)\hat{s}^z\rho(t) = \rho(t)\left(\hat{s}^z - \hat{s}^+\theta^-(t)\right)\exp\left(\hat{s}^+\theta^-(t)\right). \tag{A.11}$$

Собирая вместе найденные выражения, приходим к соотношению (2.24).

Приложение B

Вычисление интеграла по полям $\theta_p^{\pm p}$

Рассмотрим вычисление интеграла [7].

$$\prod_{p=\pm}\int \mathcal{D}[\theta_p^p,\theta_p^{-p}]e^{-\frac{1}{\kappa}\int_0^{t_p}dt\theta_p^{-p}\dot\theta_p^p}\exp\left\{z\prod_{p=\pm}e^{\frac{ip}{2}\int_0^{t_p}dt\rho_p(t)}\times\right.$$
$$\left.\times\left[ip\theta_p^p(t_p)-\int_0^{t_{-p}}dt\,\theta_{-p}^p(t)e^{ip\int_0^t dt'\rho_{-p}(t')}\right]\right\}. \quad \text{(B.1)}$$

Парная корреляционная функция равна

$$\left\langle\theta_p^-(t)\theta_p^+(t')\right\rangle=\frac{\int\mathcal{D}[\theta_p^{\pm p}]\theta_p^-(t)\theta_p^+(t')e^{-\frac{1}{\kappa}\int_0^{t_p}dt\theta_p^{-p}\dot\theta_p^p}}{\int\mathcal{D}[\theta_p^{\pm p}]e^{-\frac{1}{\kappa}\int_0^{t_p}dt\theta_p^{-p}\dot\theta_p^p}}=\kappa\Theta(t-t'), \quad \text{(B.2)}$$

где Θ — функция Хэвисайда, определенная таким образом, что $\Theta(0)=1$. Так как в процессе вычисления Z_J множитель, не зависящий от N, будет восстановлен в конце, интеграл ($B.1$) можно рассматривать как усреднение предэкспоненциальной функции с указанным гауссовским весом. Используя разложение этой функции в ряд Тейлора, приходим к тому, что каждое слагаемое ряда сводится к усреднению выражений вида

$$\left\langle\left(\theta_p^p(t_p)\int_0^{t_p}dt\,f(t)\theta_p^{-p}(t)\right)^n\right\rangle. \quad \text{(B.3)}$$

Используя теорему Вика это среднее может быть представлено в виде суммы попарных средних. Результат ($B.2$) означает, что корреляционные функции, возникающие в результате применения теоремы Вика отличны от нуля только в одной точке. Наконец, замечая, что при усреднении $\left(\theta_p^p(t_p)\theta_p^{-p}(t_p)\right)^n$ существует ровно $n!$ способов разбиения на пары, находим:

$$\left\langle\left(\theta_p^p(t_p)\int_0^{t_p}dt\,f(t)\theta_p^{-p}(t)\right)^n\right\rangle=n!\left(\kappa\int_0^{t_p}dt\,f(t)\right)^n=\frac{d\theta_p d\theta_p^* e^{-|\theta_p|^2/\kappa}\left(\theta_p\int_0^{t_p}dt\,f(t)\theta_p^*\right)^n}{\int d\theta_p d\theta_p^* e^{-|\theta_p|^2/\kappa}}. \quad \text{(B.4)}$$

Иными словами, интегрирование по полям $\theta_p^{\pm p}$ может быть заменено на интегрирование по комплексно сопряженным переменным.

Список литературы

[1] S. Franz H. Bauke и S. Mertens. «Number partitioning as a random energy model». В: *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2004.04 (апр. 2004), P04003.

[2] L. Faoro, M.V. Feigel'man и L. Ioffe. «Non-ergodic extended phase of the Quantum Random Energy model». В: *Annals of Physics* 409 (2019), с. 167916.

[3] I.V. Kolokolov. «A functional integration method for quantum spin systems and one-dimensional localization». В: *International Journal of Modern Physics B* 10.18-19 (1996), с. 2189—2215.

[4] I.V. Kolokolov. «Functional integration for quantum magnets: New method and new results». В: *Annals of Physics* 202.1 (1990), с. 165—185.

[5] D. S. Lyubshin A. U. Sharafutdinov и I. S. Burmistrov. «Spin fluctuations in quantum dots». В: *Phys. Rev. B* 90.195308 (2014).

[6] И. М. Рыжик И. С. Градштейн. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений (Физматгиз)*. Государственное Издательство Физико-математической литературы, 1963.

[7] I. S. Burmistrov, Yuval Gefen и M. N. Kiselev. «Exact solution for spin and charge correlations in quantum dots: Effect of level fluctuations and Zeeman splitting». В: *Phys. Rev. B* 85 (15 апр. 2012), с. 155311.