

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева  
Уральского отделения Российской академии наук

На правах рукописи

Проценко Владимир Сергеевич

## **ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА И ПРОВОДИМОСТЬ СИСТЕМ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК**

01.04.07 — Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук,  
профессор РАН  
Катанин Андрей Александрович

Екатеринбург — 2020

## Оглавление

	Стр.
<b>Введение</b> . . . . .	4
<b>1 Модель и метод</b> . . . . .	14
1.1 Теоретическая модель систем квантовых точек . . . . .	14
1.1.1 Модельный гамильтониан . . . . .	15
1.1.2 Функция Грина при отсутствии взаимодействия . . . . .	17
1.2 Метод функциональной ренормгруппы . . . . .	23
1.2.1 РГ уравнения в 1ЧН формулировке . . . . .	25
1.2.2 Схемы усечения иерархии РГ уравнений . . . . .	32
1.2.3 Функции отсечки . . . . .	36
1.3 Система с одной квантовой точкой . . . . .	45
1.4 Детали численной реализации метода функциональной РГ . . . . .	56
<b>2 Ренормгрупповой анализ электронных свойств и проводимости системы двух квантовых точек</b> . . . . .	57
2.1 Модель и детали расчетов . . . . .	58
2.2 Ренормгрупповой анализ симметричной системы . . . . .	61
2.2.1 Результаты «стандартных» РГ схем . . . . .	61
2.2.2 Метод функциональной ренормгруппы с контрчленом . . . . .	66
2.3 Ренормгрупповой анализ асимметричной системы . . . . .	75
2.3.1 Асимметрия туннелирования через контакты . . . . .	75
2.3.2 Асимметрия туннелирования через квантовые точки . . . . .	77
2.3.3 Обобщение на случай произвольной асимметрии параметров перескока . . . . .	85
2.4 Основные результаты и выводы к главе 2 . . . . .	91
<b>3 Равновесные и неравновесные свойства системы четырех квантовых точек</b> . . . . .	93

3.1	Модель и детали расчетов . . . . .	93
3.2	Формирование магнитных моментов в равновесном режиме . . . . .	97
3.3	Линейная проводимость и эффекты спиновой фильтрации . . . . .	103
3.4	Магнитные и транспортные свойства при конечных напряжениях смещения . . . . .	110
3.5	Сравнение с системой двух квантовых точек . . . . .	123
3.6	Основные результаты и выводы к главе 3 . . . . .	127
<b>Заключение . . . . .</b>		<b>129</b>
<b>Список литературы . . . . .</b>		<b>132</b>

## Введение

**Актуальность и степень разработанности темы исследования.** В последнее десятилетие развитие технологий изготовления наноструктур сделало возможным создание систем упорядоченных квантовых точек [1–4]. Структурная единица данных систем – квантовая точка, представляет собой объект, движение электронов в котором ограничено во всех трех пространственных направлениях и характеризуется дискретным спектром энергии (по этой причине квантовые точки часто называют «искусственными атомами») [3–7]. В силу последнего обстоятельства, системы, включающие в себя несколько квантовых точек при возможности туннелирования электронов между ними, также обладают дискретным энергетическим спектром и представляют собой своего рода «искусственные молекулы».

Система квантовых точек может быть присоединена к макроскопическим проводящим контактам (электронным резервуарам) так, что становятся возможны процессы туннелирования электронов между контактами и квантовыми точками [1–9]. Получаемая при этом система по сути является наноэлектронным устройством и дает возможность исследования когерентного электронного транспорта. К настоящему моменту хорошо развиты экспериментальные техники изготовления данных структур [1;3;10;11], позволяющие создавать с высокой точностью системы с заданной конфигурацией и свойствами. Помимо возможности прикладного применения данных объектов в качестве устройств наноэлектроники, они также вызывают большой интерес с точки зрения исследования фундаментальных физических эффектов. Даже относительно простые системы, включающие лишь несколько квантовых точек, демонстрируют большое число квантовых эффектов, не всегда имеющих прямые аналоги в объемных материалах, например эффект Кондо в проводимости [12–14], эффекты кулоновской блокады [3;7;15] и квантовой интерференции [16–19], особых зарядовых и магнитных упорядочений [20–27], квантовых фазовых переходов [20–23;28;29] и «призрачных» Фано резонансов [30–32].

Особый интерес представляют геометрии систем, содержащие кольцевые включения квантовых точек. Прежде всего, наличие разных путей прохождения электронов в кольцевых структурах приводит к возможности конструктивной или деструктивной интерференции электронов, что выражается в появлении нетривиальных особенностей электронного транспорта (см. например [18; 30; 33; 34]). Учет кулоновского взаимодействия в таких системах является принципиально важным, поскольку оно может приводить к формированию особого состояния – сингулярной ферми-жидкости, связанного с формированием локальных магнитных моментов и возникающего уже при относительно слабом кулоновском взаимодействии [20; 21; 35; 36]. Например, система двух симметричным образом соединенных с контактами квантовых точек демонстрирует фазовый переход в состояние сингулярной ферми-жидкости при изменении напряжения запирающего электрода [20; 21]. Данный переход сопровождается скачком проводимости и среднего числа электронов в системе, а также сменой знака спин-спиновой корреляционной функции в точке фазового перехода [20]. Рассмотрение более сложных систем квантовых точек, имеющих замкнутые геометрии квантовых точек, также обнаруживает наличие фазы сингулярной ферми-жидкости, однако, их изучение на сегодняшний день ограничено рассмотрением простейших симметричных геометрий систем квантовых точек [20; 36], что напрямую связано с трудностью их теоретического анализа.

Существующие на данный момент численные методы исследования систем квантовых точек имеют ограниченное применение. Метод численной ренормгруппы (NRG) [37] позволил получить ряд результатов для проводимости и магнитных корреляций простейших систем [20; 21; 38–44]. Являясь надежным методом учета электрон-электронного взаимодействия, NRG метод требует, однако, огромных компьютерных ресурсов, экспоненциально возрастающих с ростом числа взаимодействующих степеней свободы, и поэтому оказывается неприменимым к системам с достаточно большим числом квантовых точек. Другие методы, такие как метод квантового Монте-Карло (QMC) [45; 46], а также различные его вариации (например, СТ-QMC [47; 48]), метод ренормгруппы матрицы плотности (DMRG) [49], nano-DMFT [50] и ISPI [51] методы также бы-

ли использованы для исследований систем подобного типа. Однако, каждый из этих методов сталкивается с серьезными вычислительными ограничениями при описании электронных корреляций. В частности, из-за экспоненциального роста вычислительных затрат метод QMC неприменим в области низких температур,  $\text{mapo-DMFT}$  неприменим при описании систем с сильными нелокальными корреляциями, например, с сильным взаимодействием и туннелированием между квантовыми точками. Кроме того, большинство из перечисленных методов требует специальной адаптации к каждой изучаемой проблеме и не позволяют систематически исследовать даже простые системы в широком диапазоне параметров. Например, рассмотрение возможности асимметрии параметров перескока в данных системах методом NRG требует применение специальных техник усреднения [39;52]. Это обуславливает то обстоятельство, что исследование систем квантовых точек на сегодняшний день ограничено рассмотрением наиболее простых случаев. Распространение указанных методов на более сложные системы квантовых точек, а также исследование зависимости результатов от параметров систем, таких как геометрий параметров перескока, величин кулоновского взаимодействия и т.д. представляется важным дальнейшим направлением исследований и требует разработки альтернативных теоретических подходов.

В методологическом плане ситуация становится значительно сложнее при рассмотрении режимов, когда система квантовых точек выведена из состояния равновесия, например, путем приложения напряжения смещения между контактами. Применение большинства разработанных к настоящему времени методов, в том числе обобщения подхода QMC [53–57],  $t\text{DMRG}$  [58–60],  $\text{TD-NRG}$  [61] и метода ISPI [51] является чрезвычайно трудной в вычислительном плане задачей даже для систем, включающих лишь несколько квантовых точек. В частности, в силу этого остается открытым вопрос об эволюции локальных магнитных моментов, наблюдаемых для систем с кольцевыми геометриями квантовых точек в состоянии сингулярной ферми-жидкости, и ее связи с электронным транспортом при приложении напряжения между контактами.

Метод функциональной ренормализационной группы (ренормгруппы) [62–68] является одним из наиболее перспективных методов исследования

коррелированных электронных систем. Данный метод не требует больших вычислительных ресурсов и имеет обобщения для исследования неравновесных процессов [69–71], что позволяет рассматривать системы недоступные для анализа в рамках упомянутых выше численных методов. Указанные преимущества делают данный метод перспективным инструментом для исследования равновесных и неравновесных свойств широкого класса систем квантовых точек. Метод функциональной ренормгруппы уже применялся для исследования равновесных свойств ряда простых геометрий квантовых точек (систем одиночных и двойных квантовых точек, коротких цепочек квантовых точек) [34; 68; 72–75], а также исследования неравновесного транспорта через одиночную квантовую точку [70; 76; 77] и модели резонансного уровня [69; 78]. Метод функциональной ренормализационной группы надежно описывает электронные свойства систем квантовых точек и находит хорошее согласие с результатами других численных методов. Однако, его применение для исследования систем квантовых точек, содержащих кольцевые включения, наиболее интересных с точки зрения исследования влияния кулоновского взаимодействия на эффекты квантовой интерференции и магнитного упорядочения, требует существенной модификации стандартных ренормгрупповых схем. Это связано с тем, что стандартные схемы метода функциональной ренормгруппы обнаруживают нефизическое поведение вершин электрон-электронного взаимодействия, которое приводит в том числе к резкому подавлению проводимости [68], связанному с их неспособностью описать состояние сингулярной ферми-жидкости, в котором взаимодействие приводит к возможности спинового расщепления и формирования локальных магнитных моментов.

**Цель** данной работы заключается в выявлении особенностей формирования локальных магнитных моментов и электронного транспорта кольцевых систем двух и четырех квантовых точек, соединенных с электронными резервуарами (контактами), методом функциональной ренормгруппы.

В диссертационной работе были поставлены и решены следующие актуальные **задачи**:

1. Адаптировать метод функциональной ренормгруппы для описания эффектов электрон-электронного взаимодействия в системах квантовых точек в состоянии сингулярной ферми-жидкости.
2. Установить возможность формирования локальных магнитных моментов и выявить связанные с этим особенности электронного транспорта для систем двух и четырех квантовых точек при наличии различных типов асимметрии параметров перескока.
3. Для систем двух и четырех квантовых точек проанализировать формирование локальных магнитных моментов при приложении конечного напряжения к контактам, в частности, установить связь особенностей электронного транспорта и переходов между различными магнитными состояниями систем.

#### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Метод функциональной ренормализационной группы с контрчленом позволяет описать эффекты электрон-электронного взаимодействия в состоянии с локальным магнитным моментом (состоянии сингулярной ферми-жидкости).
2. Формирование локального магнитного момента в системе двух квантовых точек возможно для различных типов асимметрии параметров перескока между квантовыми точками и контактами. В зависимости от типа асимметрии системы переход в состояние с магнитным моментом может сопровождаться или разрывным поведением проводимости в точке фазового перехода, или ее непрерывным поведением, при котором проводимость имеет антисимметричный резонанс в окрестности фазового перехода.
3. Для системы четырех квантовых точек в режиме, когда в системе существует один локальный магнитный момент, и матричные элементы перескока электрона для противоположных квантовых точек, имеющих гибридизацию с контактами, ненулевые, имеет место подавление проводимости для одной из проекций спина, достигаемое в малом магнитном поле.



4. Возможно формирование состояний с локальными магнитными моментами в системах двух и четырех квантовых точек в широком диапазоне напряжений между контактами (напряжений смещения) вблизи равновесия. При дальнейшем росте напряжения смещения имеет место разрушение магнитных моментов, и, в зависимости от параметров систем, оно происходит в один или два этапа. При двухэтапном процессе промежуточная фаза обладает дробным значением магнитного момента.
5. Вольтамперные характеристики и дифференциальные проводимости систем двух и четырех квантовых точек обнаруживают резкие особенности при напряжениях, соответствующих переходам между различными магнитными состояниями. Для системы четырех квантовых точек выявлено наличие эффектов отрицательной дифференциальной проводимости и спиновой поляризации тока, вызванных наличием электрон-электронного взаимодействия в системе.

**Научная новизна:**

1. В данной работе метод функциональной ренормгруппы впервые был применен для описания квантовых фазовых переходов в системах квантовых точек.
2. Предложен оригинальный метод анализа возможности возникновения состояний с локальными магнитными моментами в системах двух и четырех квантовых точек. Проведен полуаналитический анализ влияния локального кулоновского взаимодействия на электронные свойства и проводимость для широкого диапазона параметров рассматриваемых систем.
3. Впервые была проанализирована эволюция магнитных моментов в системах квантовых точек при приложении конечного напряжения к контактам. Установлена связь особенностей электронного транспорта и переходов между различными магнитными состояниями систем.

**Научная и практическая значимость.** Результаты, представляемые в диссертации, вносят вклад в теорию квантовых фазовых переходов и позволяют глубже исследовать механизмы формирования магнитных моментов в

системах квантовых точек. Выявленные в данной работе взаимосвязи магнитных и транспортных свойств могут быть использованы при экспериментальном обнаружении теоретически предсказанных магнитных состояний систем квантовых точек. В практическом плане представленные результаты могут быть востребованы при проектировании устройств квантовой электроники.

**Методы исследования.** В качестве основного метода исследования применяется метод функциональной ренормализационной группы. Результаты данного метода комбинируются с полуаналитическим анализом. В целях сравнения используется также метод численной ренормализационной группы и приближение среднего поля.

**Степень достоверности** полученных результатов оценивается их сравнением с данными других работ и применением других методов, в том числе, сравнением с данными метода численной ренормализационной группы.

**Соответствие Паспорту научной специальности.** Изложенные в диссертации результаты соответствуют пункту 5 «Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения» Паспорта специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались и обсуждались на следующих научных мероприятиях: XVII Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектроники, С.-Петербург, 2015; Международная конференция «Ab-initio based modeling of advanced materials» (АММ-2016), Екатеринбург, 2016; XVIII Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектроники, С.-Петербург, 2016; Российская конференция по физике полупроводников «Полупроводники–2017», Екатеринбург, 2017; XXIII Международная конференция «Новое в магнетизме и магнитных материалах» (НМММ XXIII), Москва, 2018; семинарах ИФМ УрО РАН (г. Екатеринбург).

**Личный вклад.** Представленные в диссертационной работе результаты получены автором под научным руководством д.ф.-м.н., профессора РАН Андрея Александровича Катанина. Автором лично осуществлялась разработка программного обеспечения, реализующего метод функциональной ренормализационной группы, и проведение представленных в диссертационной работе численных и аналитических расчетов. Выбор объектов и методов исследования, анализ полученных результатов, работа над подготовкой публикаций проводились автором совместно с научным руководителем.

**Публикации.** Основные результаты, представленные в диссертации, изложены в 4 статьях в рецензируемых журналах, включённых в перечень ВАК и индексируемых в базе Web of Science.

1. Protsenko, V. S. Interaction-induced local moments in parallel quantum dots within the functional renormalization group approach / V. S. Protsenko, A. A. Katanin // *Phys. Rev. B.* – 2016. – Vol. 94, № 19. – P. 195148 (8).

2. Protsenko, V. S. Quantum phase transition and conductivity of parallel quantum dots with a moderate Coulomb interaction / V. S. Protsenko, A. A. Katanin // *J. Phys.: Conf. Ser.* – 2016. – Vol. 690, № 1. – P. 012028 (6).

3. Protsenko, V. S. Functional renormalization group study of parallel double quantum dots: Effects of asymmetric dot-lead couplings / V. S. Protsenko, A. A. Katanin // *Phys. Rev. B.* – 2017. – Vol. 95, № 24. – P. 245129 (10).

4. Protsenko, V. S. Local magnetic moments and electronic transport in closed loop quantum dot systems: A case of quadruple quantum dot ring at and away from equilibrium / V. S. Protsenko, A. A. Katanin // *Phys. Rev. B.* – 2019. – Vol. 99, № 16. – P. 165114 (18).

**Объем и структура работы.** Диссертационная работа состоит из введения, трёх глав, заключения и списка цитируемой литературы. Полный объём диссертации составляет 146 страниц, включая 42 рисунка. Список литературы содержит 127 наименований.

В ПЕРВОЙ ГЛАВЕ рассматривается общая квантово-механическая модель систем квантовых точек и приводится обзор метода функциональной ренормализационной группы. В разделе 1.1 формулируется общий гамильтониан

систем квантовых точек соединенных с двумя макроскопическими контактами (электронными резервуарами) и выводятся выражения для функций Грина при отсутствии электрон-электронного взаимодействия в системе. Раздел 1.2 посвящен краткому выводу основных уравнений метода функциональной ренормализационной группы, рассмотрению схем усечения иерархии ренормгрупповых уравнений и схем отсечки. В разделе 1.3 в качестве примера метод функциональной ренормгруппы применяется к системе, состоящей из одной квантовой точки, соединенной с двумя контактами. В разделе 1.4 приводятся детали численной реализации метода функциональной ренормгруппы.

ВО ВТОРОЙ ГЛАВЕ метод функциональной ренормализационной группы применяется для анализа электронных свойств и проводимости системы двух квантовых точек. По логическому содержанию главу можно разделить на две основные части. В первой части (раздел 2.2) демонстрируется, что имеющиеся в настоящее время схемы метода функциональной ренормгруппы не позволяют исследовать состояние сингулярной ферми-жидкости рассматриваемой системы. Для решения данной проблемы предлагается модификация «стандартных» схем метода функциональной ренормгруппы, заключающаяся во включении дополнительного члена в функцию Грина системы – контрчлена. Демонстрируется, что предложенный метод позволяет рассматривать состояние сингулярной ферми-жидкости, описывая возможность формирования локального магнитного момента в системе. Во второй части главы (раздел 2.3) описано применение предложенной модификации метода к исследованию влияния асимметрии параметров перескока между квантовыми точками и контактами. Производится детальный анализ возможности формирования локального магнитного момента в системе и особенностей электронного транспорта при различных типах асимметрии системы, включая случай произвольной асимметрии параметров перескока. Демонстрируется возможность осуществления непрерывного квантового фазового перехода в состояние сингулярной ферми-жидкости системы, при котором проводимость имеет асимметричный резонанс вблизи точки фазового перехода.

В ТРЕТЬЕЙ ГЛАВЕ для систем двух и четырех квантовых точек методом функциональной ренормгруппы, обобщенной на формализм неравновесных функций Грина, анализируется устойчивость и эволюция локальных магнитных моментов при приложении напряжения смещения между контактами. В качестве основной изучаемой системы выбрана система четырех квантовых точек. В начале главы (раздел 3.2) производится анализ формирования локальных магнитных моментов в системе четырех квантовых точек для равновесного режима. В разделе 3.3 для системы четырех квантовых точек исследуются линейная проводимость и эффекты спиновой фильтрации. В разделе 3.4 приводится анализ неравновесных режимов в системе четырех квантовых точек. Изучаются процессы разрушения локальных магнитных моментов в системе с ростом напряжения смещения. Рассматриваются вольтамперные характеристики и дифференциальные проводимости, анализируется их связь с фазовыми переходами и приводится полуаналитический анализ эффектов отрицательной дифференциальной проводимости. В заключительной части главы (раздел 3.5) производится сравнение систем двух и четырех точек и обсуждаются их качественные отличия.

В ЗАКЛЮЧЕНИИ формулируются основные результаты диссертационной работы.

## 1 Модель и метод

### 1.1 Теоретическая модель систем квантовых точек

На данный момент существуют два основных подхода к описанию систем квантовых точек. Первый заключается в описании данных систем из «первых принципов» (см. например [79–82]) как правило на основе теории функционала электронной плотности [83;84]. Однако, несмотря на возможность реалистичного моделирования, данный подход имеет существенные ограничения при описании эффектов электронных корреляций в низкоразмерных системах [82;85–88]. Другой способ заключается в построении модельного гамильтониана, учитывающего наиболее важные электронные состояния рассматриваемой системы и его последующий анализ в рамках надежных с точки зрения описания корреляционных эффектов многочастичных методов. В представленной работе выбран последний подход. Общий вид модельного гамильтониана системы квантовых точек приводится в разделе 1.1.1.

В данной работе рассматриваются свойства систем квантовых точек при температуре  $T$  равной нулю, в предположении, что каждая  $j$ -я квантовая точка характеризуется только одним уровнем энергии  $\epsilon_{j,\sigma}$ , где спиновый индекс  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ . Также будем полагать, что кулоновское отталкивание электронов с противоположными проекциями спина на одном и том же уровне, характеризуемое параметром  $U_j$ , представляет наиболее существенный вклад и другими механизмами электронных корреляций в системе можно пренебречь. Система квантовых точек присоединена к левому (L) и правому (R) контактам (электронным резервуарам; рисунок 1.1) с химическими потенциалами  $\mu_L$  и  $\mu_R$ , соответственно. Полагаем, что эффекты электронных корреляций не существенны в контактах. Последнее приближение не связано с ограниченностью применяемого теоретического метода и принято в данной работе для того, чтобы выделить основные эффекты, возникающие именно благодаря наличию электрон-электронного взаимодействия в подсистеме квантовых точек. В совокупности,

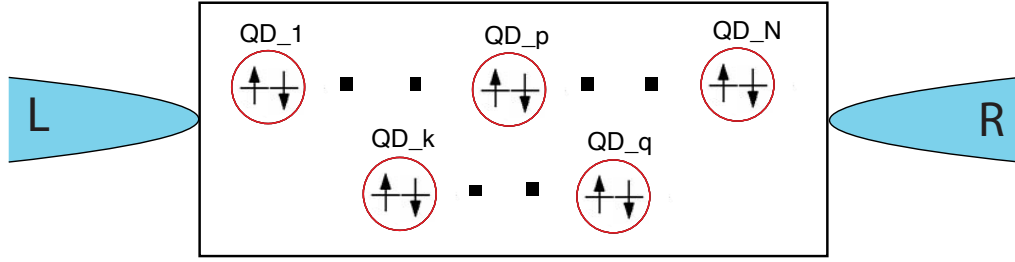


Рисунок 1.1 — Схематическое изображение системы, состоящей из  $N$  квантовых точек (отмечены окружностями) и левого (L) и правого (R) контактов.

указанные выше приближения отвечают большинству экспериментальных ситуаций (см. например [7–9; 39]).

Уровень каждой квантовой точки может быть заполнен максимум двумя электронами (см. рисунок 1.1). В силу этого, заполнение рассматриваемых уровней всей системы может варьироваться от 0 до  $2N$ , где  $N$  – число квантовых точек. Позиция уровней квантовых точек относительно уровня Ферми и, следовательно, заполнение системы может контролироваться при помощи приложения запирающего напряжения  $V_g$  к внешнему, подведенному к системе, электроду, а также при помощи внешнего магнитного поля  $H$ .

В зависимости от того, приложено или нет напряжение смещения  $V_b$  между контактами, рассматриваемая система может находиться в равновесном ( $V_b = 0$ ) или неравновесном ( $V_b \neq 0$ ) режимах. Для дальнейшего теоретического анализа каждого из режимов методом функциональной ренормгруппы в разделе 1.1.2 будет рассмотрен общий вид функции Грина систем квантовых точек при  $U = 0$  в формализмах Мацубары и Келдыша.

### 1.1.1 Модельный гамильтониан

В общем случае гамильтониан системы  $N$  квантовых точек, соединенных с двумя электронными резервуарами (см. рисунок 1.1), может быть представлен в виде [68]:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{dots}} + \mathcal{H}_{\text{leads}} + \mathcal{H}_{\text{coupl.}} \quad (1.1)$$

Слагаемое  $\mathcal{H}_{\text{dots}}$  – гамильтониан изолированных от контактов квантовых точек:

$$\mathcal{H}_{\text{dots}} = \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^N \epsilon_{j,\sigma} n_{j,\sigma} + \sum_{j=1}^N U_j \left( n_{j,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left( n_{j,\downarrow} - \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{i \neq j}^{N,N} t_{ij} \left( d_{i,\sigma}^{\dagger} d_{j,\sigma} + \text{H.c.} \right), \quad (1.2)$$

где  $d_{j,\sigma}^{\dagger}$  и  $d_{j,\sigma}$  обозначают ферми-операторы рождения и уничтожения электрона на квантовой точке  $j$  ( $j \in \{1, N\}$ ) с проекцией спина  $\sigma \in \{\uparrow (1/2), \downarrow (-1/2)\}$ ,  $n_{j,\sigma} = d_{j,\sigma}^{\dagger} d_{j,\sigma}$  – оператор числа электронов,  $\epsilon_{j,\sigma}$  и  $U_j$  – уровень энергии и параметр локального кулоновского взаимодействия на  $j$ -й квантовой точке,  $t_{ij}$  – матричный элемент перескока между  $i$ -й и  $j$ -й квантовыми точками и H.c. – операция эрмитового сопряжения. При дальнейшем рассмотрении квантовые точки будут считаться идентичными:  $\epsilon_{j,\sigma} = \epsilon_{\sigma}$  и  $U_j = U$ . Положение уровней энергии квантовых точек может быть изменено приложением напряжения  $V_g$  к запирающему электроду (запирающего напряжения) или внешнего магнитного поля  $H$ :  $\epsilon_{\sigma} = V_g - \sigma H$ . Отметим, что здесь и далее величины  $V_g$  и  $H$  приводятся в энергетических единицах.

Гамильтониан  $H_{\text{leads}}$  в (1.1) определяет два макроскопических контакта, каждый из которых моделируется полубесконечной цепочкой атомов (как будет показано в дальнейшем, их конкретная структура не является принципиальной):

$$\mathcal{H}_{\text{leads}} = - \sum_{\alpha=L,R} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \left[ \mu_{\alpha} c_{\alpha,k,\sigma}^{\dagger} c_{\alpha,k,\sigma} + \tau (c_{\alpha,k+1,\sigma}^{\dagger} c_{\alpha,k,\sigma} + \text{H.c.}) \right], \quad (1.3)$$

где  $c_{\alpha,k,\sigma}^{\dagger}$  ( $c_{\alpha,k,\sigma}$ ) – соответствующие ферми-операторы рождения (уничтожения) электрона на левом ( $\alpha = L$ ) или правом ( $\alpha = R$ ) контакте,  $\tau$  – матричный элемент перескока между ближайшими узлами контактов,  $\mu_{\alpha}$  – химический потенциал контакта  $\alpha$ . В (1.3) предполагается, что оба контакта характеризуются одним и тем же матричным элементом  $\tau$ .



Последнее слагаемое в гамильтониане (1.1) учитывает связь между квантовыми точками и контактами и имеет следующий вид:

$$\mathcal{H}_{\text{coupl}} = - \sum_{\alpha=L,R} \sum_j \sum_{\sigma} (t_j^{\alpha} c_{\alpha,0,\sigma}^{\dagger} d_{j,\sigma} + \text{H.c.}), \quad (1.4)$$

где  $t_j^{\alpha}$  – матричный элемент перескока между контактом  $\alpha$  и  $j$ -й квантовой точкой.

### 1.1.2 Функция Грина при отсутствии взаимодействия

Как будет видно из дальнейшего, учет электрон-электронного взаимодействия  $U$  методом функциональной ренормализационной группы требует задания одночастичной функции Грина (ФГ) системы при отсутствии электрон-электронного взаимодействия, т.е. при  $U = 0$ . Поскольку взаимодействие рассматривается только на квантовых точках, то перенормируются вершины электрон-электронного взаимодействия относящиеся только к подсистеме квантовых точек. В этом случае требуемая ФГ при отсутствии взаимодействия  $\mathcal{G}_0$  – функция Грина квантовых точек в присутствии контактов при  $U = 0$ . При получении ФГ  $\mathcal{G}_0$  состояния контактов могут быть «отынтегрированы» [68] и в конечном итоге  $\mathcal{G}_0$  представляет матрицу конечной размерности, включающей в себя информацию о бесконечной подсистеме – контактах.

Рассмотрение равновесного режима системы квантовых точек, когда  $\mu_L = \mu_R$  и, следовательно, отсутствует ток, идущий через квантовые точки, наиболее удобно проводить в формализме мацубаровских функций Грина [89; 90]. Рассмотрение неравновесных ситуаций требует работы в технике неравновесных функций Грина-Келдыша [91–93]. В дальнейшем неравновесный режим устанавливается ненулевой разностью химических потенциалов контактов:  $\mu_L = -\mu_R = V_b/2$  ( $\mu_L - \mu_R = V_b$ ,  $V_b \neq 0$ ), где  $V_b$  – напряжение смещения. Здесь и далее мы полагаем, что элементарный заряд электрона  $e$  включен в определение  $V_b$ , так что  $V_b$  имеет размерность энергии. В этом случае описание равновесно-

го режима системы может быть получено посредством предельного перехода:  $V_b \rightarrow 0$ .

Рассмотрим общий вид функций ФГ  $\mathcal{G}_0$  для каждой техники.

### а) ФГ в формализме Мацубары

Одночастичная мацубаровская функция Грина определяется выражением [90; 94]:

$$\mathcal{G}_{k_1, k_2}(\tau_1, \tau_2) = -\langle T_\tau d_{k_1}(\tau_1) d_{k_2}^\dagger(\tau_2) \rangle, \quad (1.5)$$

где  $d_{k_1}(\tau_1) = e^{\mathcal{H}\tau_1} d_{k_1} e^{-\mathcal{H}\tau_1}$  и  $d_{k_2}^\dagger(\tau_2) = e^{\mathcal{H}\tau_2} d_{k_2}^\dagger e^{-\mathcal{H}\tau_2}$  – операторы уничтожения и рождения электрона в представлении Гейзенберга ( $k_1, k_2 \in \{j, \sigma\}$ ),  $T_\tau$  – оператор хронологического упорядочения, угловые скобки обозначают статистическое усреднение. Для систем ферми-частиц  $T_\tau d_{k_1}(\tau_1) d_{k_2}^\dagger(\tau_2) = d_{k_1}(\tau_1) d_{k_2}^\dagger(\tau_2)$  в случае  $\tau_1 > \tau_2$  и  $T_\tau d_{k_1}(\tau_1) d_{k_2}^\dagger(\tau_2) = -d_{k_2}^\dagger(\tau_2) d_{k_1}(\tau_1)$  при  $\tau_1 \leq \tau_2$ .

Функция Грина  $\mathcal{G}_0(i\omega)$  подсистемы квантовых точек в присутствии контактов при  $U = 0$  в энергетическом представлении (после преобразования Фурье по  $\tau = \tau_2 - \tau_1$ ) может быть получена при помощи техники проекционных операторов [95]. В этом случае введение проекционных операторов на подпространство одноэлектронных состояний квантовых точек ( $\hat{P}$ ) и контактов ( $\hat{Q}$ ),  $\hat{P} + \hat{Q} = \hat{1}$ , позволяет записать  $\mathcal{G}_0$  в виде [68]:

$$\mathcal{G}_0(i\omega) = \left( i\omega \hat{P} - \hat{P} \mathcal{H}_0 \hat{P} - \Sigma_0 \right)^{-1}, \quad (1.6)$$

где  $\mathcal{H}_0$  – гамильтониан системы (1.1) при отсутствии взаимодействия  $U = 0$ , т.е.  $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_{\text{dots}}^{U=0} + \mathcal{H}_{\text{leads}} + \mathcal{H}_{\text{coupl}}$  и

$$\Sigma_0 = \hat{P} \mathcal{H}_0 \hat{Q} \left( i\omega \hat{Q} - \hat{Q} \mathcal{H}_0 \hat{Q} \right)^{-1} \hat{Q} \mathcal{H}_0 \hat{P}. \quad (1.7)$$

Подстановка  $\mathcal{H}_0$  в выражение (1.6) приводит к общему выражению для матричных элементов обратной мацубаровской функции Грина  $\mathcal{G}_{0, \sigma}^{-1}(i\omega)$  при  $U = 0$ :

$$\left[ \mathcal{G}_{0, \sigma}^{-1}(i\omega) \right]_{ij} = (i\omega - \epsilon_\sigma) \delta_{ij} + t_{ij} - \sum_{\alpha=L, R} t_i^\alpha t_j^\alpha g_{\alpha, \sigma}(i\omega), \quad (1.8)$$

где  $g_{\alpha,\sigma}(i\omega)$  - мацубаровская функция Грина для узла контакта  $\alpha$ , который имеет ненулевую амплитуду перехода на квантовые точки (последний узел контакта). В случае не магнитных контактов  $g_{\alpha,\sigma}(i\omega) = g_\alpha(i\omega)$ , где  $g_\alpha(i\omega)$  [68]:

$$g_\alpha(i\omega) = \frac{i\omega + \mu_\alpha}{2\tau^2} \left[ 1 - \left( 1 - \frac{4\tau^2}{(i\omega + \mu_\alpha)^2} \right)^{1/2} \right]. \quad (1.9)$$

В равновесном случае  $\mu_{L(R)} = \epsilon_F$ , следовательно контакты идентичны:  $g_L = g_R$  (здесь и далее выбираем  $\epsilon_F$  в качестве начала отсчета энергии, полагая  $\epsilon_F = 0$ ).

Поскольку в данной работе непосредственный интерес представляет рассмотрение общих физических эффектов, связанных с наличием электронных корреляций на дискретных энергетических уровнях, которые в свою очередь определены исключительно подсистемой квантовых точек, конкретные детали электронной структуры контактов не очень важны. Поэтому при дальнейшем рассмотрении предполагается, что для контактов выполнено так называемое приближение широкой зоны [8; 68; 96], которое может быть определено посредством предельных переходов  $\tau \rightarrow \zeta\tau$  и  $t_i^\alpha \rightarrow \zeta^{1/2}t_i^\alpha$ , при  $\zeta \rightarrow \infty$  [68]. После перехода к указанным пределам компоненты  $\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(i\omega)$  (1.8) запишутся как:

$$\begin{aligned} [\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(i\omega)]_{ij} &= (i\omega - \epsilon_\sigma) \delta_{ij} + t_{ij} + i [\Gamma_{ij}^L + \Gamma_{ij}^R] \text{sign}(\omega) \\ &= (i\omega - \epsilon_\sigma) \delta_{ij} + t_{ij} + i \left( \sqrt{\Gamma_{ii}^L \Gamma_{jj}^L} + \sqrt{\Gamma_{ii}^R \Gamma_{jj}^R} \right) \text{sign}(\omega), \end{aligned} \quad (1.10)$$

где  $\Gamma_{ij}^\alpha = \pi t_i^\alpha t_j^\alpha \rho_{\text{lead}}(0)$  - параметры гибридизации,  $\rho_{\text{lead}}(\omega) = -\pi^{-1} \text{Im} [g_\alpha(\omega + i0^+)]$  - локальная плотность состояний на последнем узле контакта. Данное приближение сводится к предположению, что квантовые точки имеют постоянные, не зависящие от частоты  $\omega$ , параметры гибридизации с контактами, и по сути рассматриваемая система эквивалентна системе квантовых точек, гибридизованными с «бесструктурными» электронными резервуарами, имеющими постоянную плотность состояний  $\tilde{\rho}_{\text{lead}}(\omega) = \rho_{\text{lead}}(0)$ .

Таким образом, функция Грина  $\mathcal{G}_{0,\sigma}$  может быть получена путем обращения выражения (1.10) и представляет собой матрицу размерности  $N \times N$ , где

$N$  – число квантовых точек. Альтернативный способ получения  $\mathcal{G}_{0,\sigma}$  состоит в рассмотрении цепочки уравнений для функции Грина [94], однако данный способ по сути полностью эквивалентен описанному выше подходу.

Для одной соединенной с контактами квантовой точки ( $N = 1$ ) выражение (1.10) приводит к функции Грина:

$$\mathcal{G}_{0,\sigma}(i\omega) = \frac{1}{i\omega - \epsilon_\sigma + i\Gamma \text{sign}(\omega)}, \quad (1.11)$$

где  $\Gamma = \Gamma^L + \Gamma^R$ ,  $\Gamma^{L(R)} = \Gamma_{11}^{L(R)}$ . Соответственно, для запаздывающей/опережающей функций Грина  $\mathcal{G}_{0,\sigma}^{r/a}(\omega)$  [94] при  $U = 0$ , имеем:

$$\mathcal{G}_{0,\sigma}^{r/a}(\omega) = \mathcal{G}_{0,\sigma}(i\omega \rightarrow \omega \pm 0i) = \frac{1}{\omega - \epsilon_\sigma \pm i\Gamma}. \quad (1.12)$$

## б) ФГ в формализме Келдыша

В неравновесном случае необходимость упорядочения временных аргументов функций Грина на контуре Келдыша приводит к их более сложной структуре [91; 92]:

$$\mathcal{G}_{k_1, k_2}^{\nu_1, \nu_2}(\tau_1, \tau_2) = -i \langle T_C d_{k_1}^{\nu_1}(\tau_1) d_{k_2}^{\nu_2 \dagger}(\tau_2) \rangle, \quad (1.13)$$

где  $\nu_1, \nu_2 = \pm$  – индексы Келдыша,  $d_{k_1}^{\nu_1}(\tau_1) = e^{i\mathcal{H}\tau_1} d_{k_1}^{\nu_1} e^{-i\mathcal{H}\tau_1}$ ,  $d_{k_2}^{\nu_2 \dagger}(\tau_2) = e^{i\mathcal{H}\tau_2} d_{k_2}^{\nu_2 \dagger} e^{-i\mathcal{H}\tau_2}$  и  $T_C$  – оператор упорядочения на контуре Келдыша [92]. Функция Грина  $\mathcal{G}$  системы квантовых точек представляет собой матрицу вида [70; 71; 78]:

$$\mathcal{G} \equiv \begin{pmatrix} \mathcal{G}^{--} & \mathcal{G}^{-+} \\ \mathcal{G}^{+-} & \mathcal{G}^{++} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{G}_{11}^{--} & \cdots & \mathcal{G}_{1N}^{--} \\ \vdots & \ddots & \\ \mathcal{G}_{N1}^{--} & & \mathcal{G}_{NN}^{--} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \mathcal{G}_{11}^{-+} & \cdots & \mathcal{G}_{1N}^{-+} \\ \vdots & \ddots & \\ \mathcal{G}_{N1}^{-+} & & \mathcal{G}_{NN}^{-+} \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \mathcal{G}_{11}^{+-} & \cdots & \mathcal{G}_{1N}^{+-} \\ \vdots & \ddots & \\ \mathcal{G}_{N1}^{+-} & & \mathcal{G}_{NN}^{+-} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \mathcal{G}_{11}^{++} & \cdots & \mathcal{G}_{1N}^{++} \\ \vdots & \ddots & \\ \mathcal{G}_{N1}^{++} & & \mathcal{G}_{NN}^{++} \end{bmatrix} \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

и в пространстве индексов Келдыша является «суперматрицей»  $2 \times 2$ , с матричными элементами  $\mathcal{G}^{\nu_1\nu_2}$  – матрицами размерности  $N \times N$ .

Несмотря на более сложную структуру функции Грина, вывод одночастичной функции Грина  $\mathcal{G}_0$ , отвечающей  $U = 0$ , техникой проекционных операторов полностью аналогичен представленному при рассмотрении ФГ для формализма Мацубары. В данном случае подстановка гамильтониана  $\mathcal{H}$  (1.1) при  $U = 0$  в соотношение (1.6) с учетом различия состояний по индексам Келдыша и переходу к действительной оси  $i\omega \rightarrow \omega$  приводит к следующим выражениям для матричных элементов обратной функции Грина  $\mathcal{G}_0^{-1}$  (далее для позиций матричных элементов в «суперматрице» используем те же обозначения, что и в (1.14)):

$$[\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(\omega)]_{ij}^{--} = (\omega - \epsilon_\sigma) \delta_{ij} + t_{ij} - \sum_{\alpha=L,R} t_i^\alpha t_j^\alpha g_{\alpha,\sigma}^{--}(\omega), \quad (1.15)$$

$$[\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(\omega)]_{ij}^{++} = (-\omega + \epsilon_\sigma) \delta_{ij} - t_{ij} - \sum_{\alpha=L,R} t_i^\alpha t_j^\alpha g_{\alpha,\sigma}^{++}(\omega), \quad (1.16)$$

$$[\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(\omega)]_{ij}^{-+} = \sum_{\alpha=L,R} t_i^\alpha t_j^\alpha g_{\alpha,\sigma}^{-+}(\omega), \quad (1.17)$$

$$[\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(\omega)]_{ij}^{+-} = \sum_{\alpha=L,R} t_i^\alpha t_j^\alpha g_{\alpha,\sigma}^{+-}(\omega), \quad (1.18)$$

где  $g_{\alpha,\sigma}^{\nu_1\nu_2}(\omega)$  – локальная функция Грина-Келдыша на последнем узле контакта  $\alpha$  [70; 71; 78]:

$$\begin{pmatrix} g_{\alpha,\sigma}^{--} & g_{\alpha,\sigma}^{-+} \\ g_{\alpha,\sigma}^{+-} & g_{\alpha,\sigma}^{++} \end{pmatrix} = -i\pi\rho_{\text{lead}}(0) \begin{pmatrix} 1 - 2f(\omega - \mu_\alpha) & -2f(\omega - \mu_\alpha) \\ 2f(-(\omega - \mu_\alpha)) & 1 - 2f(\omega - \mu_\alpha) \end{pmatrix} \quad (1.19)$$

и  $f(\omega - \mu_\alpha) = [1 + e^{(\omega - \mu_\alpha)/T}]^{-1}$  – функция Ферми. Отметим, что выражения (1.15)–(1.19) были получены с учетом приближения широкой зоны.

Переходя в (1.19) к параметрам гибридизации  $\Gamma_{ij}^\alpha = \pi t_i^\alpha t_j^\alpha \rho_{\text{lead}}(0)$  и учитывая, что при  $T = 0$  функция Ферми  $f(\omega - \mu_\alpha) = \theta(\mu_\alpha - \omega)$ , где  $\theta(x)$  – функция Хевисайда, выражения (1.15)–(1.18) для матричных элементов обратной функ-

ции Грина  $\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(\omega)$  окончательно могут быть записаны в следующем виде:

$$[\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(\omega)]_{ij}^{--} = (\omega - \epsilon_\sigma) \delta_{ij} + t_{ij} + i \sum_{\alpha=L,R} \Gamma_{ij}^\alpha \text{sign}(\omega - \mu_\alpha), \quad (1.20)$$

$$[\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(\omega)]_{ij}^{++} = (-\omega + \epsilon_\sigma) \delta_{ij} - t_{ij} + i \sum_{\alpha=L,R} \Gamma_{ij}^\alpha \text{sign}(\omega - \mu_\alpha), \quad (1.21)$$

$$[\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(\omega)]_{ij}^{-+} = i \sum_{\alpha=L,R} \Gamma_{ij}^\alpha [1 - \text{sign}(\omega - \mu_\alpha)], \quad (1.22)$$

$$[\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(\omega)]_{ij}^{+-} = -i \sum_{\alpha=L,R} \Gamma_{ij}^\alpha [1 + \text{sign}(\omega - \mu_\alpha)]. \quad (1.23)$$

Для системы с одной квантовой точкой ( $N = 1$ ), имеем:

$$\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(\omega) = \begin{pmatrix} \omega - \epsilon_\sigma + iZ(\omega) & i\Gamma - iZ(\omega) \\ -i\Gamma - iZ(\omega) & -\omega + \epsilon_\sigma + iZ(\omega) \end{pmatrix}, \quad (1.24)$$

где  $Z(\omega) = \sum_{\alpha=L,R} \Gamma^\alpha \text{sign}(\omega - \mu_\alpha)$  и  $\Gamma = \sum_{\alpha=L,R} \Gamma^\alpha$ .

Обращение матрицы (1.24) дает функцию Грина квантовой точки [70]:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{0,\sigma}(\omega) &= \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{0,\sigma}^{--}(\omega) & \mathcal{G}_{0,\sigma}^{-+}(\omega) \\ \mathcal{G}_{0,\sigma}^{+-}(\omega) & \mathcal{G}_{0,\sigma}^{++}(\omega) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\Delta_\sigma(\omega)} \begin{pmatrix} \omega - \epsilon_\sigma - iZ(\omega) & i\Gamma - iZ(\omega) \\ -i\Gamma - iZ(\omega) & -\omega + \epsilon_\sigma - iZ(\omega) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.25)$$

где  $\Delta_\sigma(\omega) = (\omega - \epsilon_\sigma)^2 + \Gamma^2$ .

Переход в (1.25) к равновесному случаю  $\mu_{L(R)} \rightarrow 0$  дает:

$$\mathcal{G}_{0,\sigma}^{\mp\mp}(\omega) = \pm \frac{1}{\omega - \epsilon_\sigma \pm \Gamma \text{sign}(\omega)} \quad (1.26)$$

и

$$\mathcal{G}_{0,\sigma}^{\mp\pm}(\omega) = \pm \frac{i\Gamma (1 \mp \text{sign}(\omega))}{(\omega - \epsilon_\sigma)^2 + \Gamma^2}. \quad (1.27)$$

Таким образом, переход к запаздывающей/опережающей функции Грина  $\mathcal{G}_{0,\sigma}^{r/a} = \mathcal{G}_{0,\sigma}^{--} - \mathcal{G}_{0,\sigma}^{\mp\pm}$  дает (1.12).

## 1.2 Метод функциональной ренормгруппы

Метод функциональной ренормализационной группы (метод функциональной ренормгруппы; РГ метод) был предложен сравнительно недавно и на сегодняшний день представляет собой один из наиболее перспективных методов анализа многочастичных проблем [62; 63]. Данный подход наследует основные идеи ренормгруппового метода Вильсона [97], основанного на концепции последовательного устранения мод. При этом он позволяет выразить основную идею Вильсона посредством точных уравнений для соответствующих производящих функционалов [63; 65; 66].

Отправной точкой получения уравнений функциональной ренормгруппы (РГ уравнений) является введение в рассматриваемый производящий функционал нового независимого параметра (масштаба)  $\Lambda$ . При этом  $\Lambda$  может быть как реальным физическим параметром (например, параметром электрон-электронного взаимодействия [62]), так и искусственным. Технически параметр  $\Lambda$  удобно вводить через одночастичную электронную функцию Грина системы при отсутствии электрон-электронного взаимодействия («затравочный» пропагатор)  $\mathcal{G}_0$ , посредством замены:

$$\mathcal{G}_0 \rightarrow \mathcal{G}_0(\Lambda) \equiv \mathcal{G}_0^\Lambda, \quad (1.28)$$

требуя при этом выполнения условий:

$$\mathcal{G}_0^{\Lambda_{\text{ini}}} = 0, \quad (1.29)$$

$$\mathcal{G}_0^{\Lambda_{\text{fin}}} = \mathcal{G}_0, \quad (1.30)$$

где  $\Lambda_{\text{ini}}$  и  $\Lambda_{\text{fin}}$  – начальное и конечное значения параметра  $\Lambda$ , соответственно.

Замена (1.28) приводит к зависимости производящих функционалов от  $\Lambda$ . Уравнение ренормгруппы для рассматриваемого производящего функционала получается путем его дифференцирования по параметру  $\Lambda$ . Полученное РГ уравнение позволяет проследить эволюцию производящего функционала от

некоторого стартового масштаба  $\Lambda = \Lambda_{\text{ini}}$ , для которого в силу требования (1.29) задача может быть решена точно, до конечного масштаба  $\Lambda = \Lambda_{\text{fin}}$ , в силу условия (1.30) гарантирующего восстановление полного производящего функционала исходной многочастичной задачи.

Непосредственный физический интерес представляет нахождение одночастично-неприводимых вершин электрон-электронного взаимодействия (например, собственно-энергетической части (СЭЧ)  $\Sigma$ , эффективного двухчастичного межэлектронного взаимодействия  $\mathcal{V}$  и т.д.), поэтому дальнейшее рассмотрение удобно проводить в одночастично-неприводимом (1ЧН) варианте функциональной ренормгруппы [62]. Данный подход позволяет учесть электрон-электронное взаимодействие посредством решения точной иерархии РГ уравнений для одночастично-неприводимых вершин. Решение данной иерархии уравнений обеспечивает полное описание функции Грина при наличии электрон-электронного взаимодействия в системе. На практике бесконечная иерархия РГ уравнений не может быть решена точно и для получения конечного набора уравнений необходим выбор схемы усечения. Решение конечной (усеченной) системы РГ уравнений позволяет найти приближенные одночастично-неприводимые вершинные функции системы с учетом взаимодействия. Это позволяет построить функцию Грина, учитывающую эффекты электронных корреляций, и, следовательно, вычислить интересующие физические величины.

Предложенный изначально для рассмотрения систем в равновесном режиме, метод функциональной ренормгруппы был впоследствии сформулирован на базисе неравновесных функций Грина. Это позволяет в рамках данного обобщенного РГ подхода [69–71] изучать системы в различных неравновесных ситуациях. Например, рассматривать стационарный и нестационарный перенос заряда через рассматриваемую систему.

В данном разделе рассматривается общий вид иерархии уравнений РГ в 1ЧН формулировке в рамках равновесной и неравновесной техник, обсуждаются схемы усечения иерархии РГ уравнений и методы введения масштаба  $\Lambda$ , приводится явный вид уравнений для систем квантовых точек.



### 1.2.1 РГ уравнения в 1ЧН формулировке

Общая стратегия получения уравнений функциональной ренормгруппы в 1ЧН представлении [62; 63] заключается в выводе уравнения РГ для производящего функционала одночастично-неприводимых вершинных функций (1ЧН вершин) и последующим выражением эволюции данного функционала через РГ уравнения для 1ЧН вершин, что достигается путем разложения производящего функционала в ряд Тейлора по грассмановым переменным. Как будет видно из дальнейшего, это приводит к бесконечной иерархии дифференциальных уравнений для 1ЧН вершин электрон-электронного взаимодействия.

Рассмотрим кратко основные этапы вывода РГ уравнений в 1ЧН подходе. С этой целью воспользуемся представлением статистической суммы многочастичной ферми-системы в виде континуального интеграла по грассмановым переменным [98]:

$$\frac{\mathcal{Z}}{\mathcal{Z}_0} = \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \int \mathcal{D} [\bar{\phi}, \phi] \exp \left[ \left( \bar{\phi}, [\mathcal{G}_0]^{-1} \phi \right) - \alpha \mathcal{S}_{\text{int}} (\{\bar{\phi}\}, \{\phi\}) \right], \quad (1.31)$$

где  $\{\bar{\phi}\}, \{\phi\}$  – набор грассмановых переменных (полей) [98],  $\mathcal{D} [\bar{\phi}, \phi]$  – мера интегрирования,  $(\bar{\phi}, A\phi) \equiv \alpha \sum_{\xi, \xi'} \bar{\phi}_{\xi} A_{\xi, \xi'} \phi_{\xi'}$ . Индексы  $\xi^{(\prime)} \equiv (i\omega^{(\prime)}, k^{(\prime)})$  при работе в рамках мацубаровского формализма ( $\alpha = 1$ ) и  $\xi^{(\prime)} \equiv (\omega^{(\prime)}, k^{(\prime)}, \nu^{(\prime)})$  при рассмотрении статистической суммы в формализме Келдыша ( $\alpha = i$ ), где  $\omega^{(\prime)}$  – частота,  $\nu^{(\prime)} = \pm(\pm 1)$  – индексы Келдыша и индексы  $k^{(\prime)}$  – набор оставшихся одночастичных квантовых чисел (для рассматриваемых систем с гамильтонианом (1.1)  $k^{(\prime)} = (j^{(\prime)}, \sigma^{(\prime)})$ ). В выражении (1.31) член  $\mathcal{S}_{\text{int}}$  дается квадратичной формой по  $(\bar{\phi}, \phi)$  и учитывает эффекты электрон-электронного взаимодействия ( $\mathcal{S}_{\text{int}} = 0$  при отсутствии взаимодействия),  $\mathcal{G}_0$  и  $\mathcal{Z}_0$  представляют собой одночастичную функцию Грина и статистическую сумму рассматриваемой системы при отсутствии взаимодействия.

Для дальнейшего рассмотрения введем производящий функционал  $\mathcal{W} [\bar{\eta}, \eta]$ , получаемый из выражения (1.31) путем стандартной процедуры вклю-

чения внешних фермионных источников (внешних полей)  $\bar{\eta}, \eta$  [63; 66]:

$$\mathcal{W}[\bar{\eta}, \eta] = \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \int \mathcal{D}[\bar{\phi}, \phi] \exp \left[ \left( \bar{\phi}, [\mathcal{G}_0]^{-1} \phi \right) - \alpha \mathcal{S}_{\text{int}}(\{\bar{\phi}\}, \{\phi\}) - (\bar{\phi}, \eta) - (\bar{\eta}, \phi) \right] \quad (1.32)$$

и производящий функционал  $\mathcal{W}^c[\bar{\eta}, \eta]$ :

$$\mathcal{W}^c[\bar{\eta}, \eta] = \ln(\mathcal{W}[\bar{\eta}, \eta]), \quad (1.33)$$

генерирующий связанные  $m$ -частичные функции Грина  $\mathcal{G}^{(m)}$  [94] при взятии функциональных производных по внешним полям  $\bar{\eta}$  и  $\eta$  при значении последних равных нулю:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\xi'_1 \dots \xi'_m \xi_1 \dots \xi_m}^{(m)} &\equiv \mathcal{G}^{(m)}(\xi'_1, \dots, \xi'_m; \xi_1, \dots, \xi_m) \\ &= \alpha^{3m} \frac{\delta^{2m} \mathcal{W}^c[\bar{\eta}, \eta]}{\delta \bar{\eta}_{\xi'_1} \dots \delta \bar{\eta}_{\xi'_m} \delta \eta_{\xi_1} \dots \delta \eta_{\xi_m}} \Bigg|_{\bar{\eta}, \eta=0}, \end{aligned} \quad (1.34)$$

что непосредственно следует из определения функционала  $\mathcal{W}^c$ .

Одночастично-неприводимый вариант функциональной ренормгруппы формулируется при рассмотрении функционала вершинных функций  $\Gamma[\bar{\psi}, \psi]$ , определенного через функционал  $\mathcal{W}^c[\bar{\eta}, \eta]$  следующим преобразованием Лежандра [63]:

$$\Gamma[\bar{\psi}, \psi] = -\mathcal{W}^c[\bar{\eta}, \eta] - (\bar{\psi}, \eta) - (\bar{\eta}, \psi) + \left( \bar{\psi}, [\mathcal{G}_0]^{-1} \psi \right), \quad (1.35)$$

где введены новые фермионные поля  $\psi$  и  $\bar{\psi}$ :

$$\psi_\xi = -\alpha^3 \frac{\delta \mathcal{W}^c[\bar{\eta}, \eta]}{\delta \bar{\eta}_\xi}, \quad \bar{\psi}_\xi = \alpha^3 \frac{\delta \mathcal{W}^c[\bar{\eta}, \eta]}{\delta \eta_\xi}. \quad (1.36)$$

Одночастично-неприводимые  $m$ -частичные ( $2m$ -точечные) вершинные функции  $\Gamma^{(2m)}$  получаются после взятия функциональных производных по полям

$\bar{\psi}$  и  $\psi$  от данного функционала  $\Gamma[\bar{\psi}, \psi]$  при  $\bar{\psi}(\psi) = 0$ :

$$\begin{aligned} \Gamma_{\xi'_1 \dots \xi'_m \xi_1 \dots \xi_m}^{(2m)} &\equiv \Gamma^{(2m)}(\xi'_1, \dots, \xi'_m; \xi_1, \dots, \xi_m) \\ &= \alpha^{3m} \frac{\delta^{2m} \Gamma[\bar{\psi}, \psi]}{\delta \bar{\psi}_{\xi'_1} \dots \delta \bar{\psi}_{\xi'_m} \delta \psi_{\xi_m} \dots \delta \psi_{\xi_1}} \Bigg|_{\bar{\psi}, \psi=0}. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Учитывая (1.37) функционал  $\Gamma[\bar{\psi}, \psi]$  может быть представлен в виде ряда по грассмановым полям:

$$\Gamma[\bar{\psi}, \psi] = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-\alpha)^m}{(m!)^2} \sum_{\xi'_1 \dots \xi'_m \xi_1 \dots \xi_m}^{\xi_1 \dots \xi_m} \Gamma_{\xi'_1 \dots \xi'_m \xi_1 \dots \xi_m}^{(2m)} \bar{\psi}_{\xi'_1} \dots \bar{\psi}_{\xi'_m} \psi_{\xi_m} \dots \psi_{\xi_1}. \quad (1.38)$$

Принимая во внимание (1.34) – (1.37), одноэлектронная (одночастичная;  $m = 1$ ) функция Грина системы с учетом взаимодействия представима в виде:

$$\mathcal{G}(\xi'; \xi) \equiv \mathcal{G}^{(1)}(\xi'; \xi) = \left[ \Gamma^{(2)} + [\mathcal{G}_0]^{-1} \right]_{\xi' \xi}^{-1}. \quad (1.39)$$

Данное выражение является уравнением Дайсона [94], с собственно-энергетической частью  $\Sigma = -\Gamma^{(2)}$ .

Ключевым шагом для формулировки ренормгрупповой процедуры является рассмотрение эволюции зависимых от масштаба  $\Lambda$  производящих функционалов при непрерывном изменении масштаба. Пусть параметр  $\Lambda$  введен через «затравочный» пропагатор  $\mathcal{G}_0$ , посредством замены (1.28). Поскольку вид ренормгрупповых уравнений не зависит от конкретного способа введения  $\Lambda$  в  $\mathcal{G}_0$ , на данном этапе  $\mathcal{G}_0(\Lambda)$  в (1.28) представляет собой произвольную функцию  $\Lambda$ .

После замены (1.28) производящий функционал  $\Gamma[\bar{\psi}, \psi]$  имеет вид:

$$\Gamma^\Lambda[\bar{\psi}, \psi] = -\mathcal{W}^{c, \Lambda} [\bar{\eta}(\Lambda), \eta(\Lambda)] - (\bar{\psi}, \eta(\Lambda)) - (\bar{\eta}(\Lambda), \psi) + \left( \bar{\psi}, [\mathcal{G}_0^\Lambda]^{-1} \psi \right) \quad (1.40)$$

и зависит от параметра  $\Lambda$  (здесь и далее  $X(\Lambda)$  для краткости обозначается как  $X^\Lambda$ ). В выражении (1.40) учтено, что поля  $\eta$  и  $\bar{\eta}$  также зависят от  $\Lambda$  поскольку

выражаются в терминах производящего функционала для связных функций Грина (1.33), который в свою очередь после замены (1.28) зависит от  $\Lambda$ .

Дифференцирование функционала (1.40) по параметру  $\Lambda$  приводит к соответствующему РГ уравнению [63], определяющему эволюцию  $\Gamma^\Lambda$  при изменении параметра  $\Lambda$ . Уравнения РГ в 1ЧН подходе получаются после подстановки в данное уравнение разложения  $\Gamma^\Lambda[\bar{\psi}, \psi]$  по грассмановым полям (1.38) и приравнивания коэффициентов при одинаковых степенях  $(\bar{\psi}\psi)$ . Данная процедура приводит к бесконечной иерархии связанных дифференциальных уравнений для зависящих от  $\Lambda$  одночастично-неприводимых вершин  $\Gamma^{(2m),\Lambda}$  [62; 63; 65; 66; 99; 100], которая имеет следующую структуру:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_\Lambda \Gamma^{(0),\Lambda} = F_0(\Gamma^{(2),\Lambda}) \\ \partial_\Lambda \Gamma^{(2),\Lambda} = F_1(\Gamma^{(2),\Lambda}, \Gamma^{(4),\Lambda}) = S^\Lambda \circ \Gamma^{(4),\Lambda} \\ \partial_\Lambda \Gamma^{(4),\Lambda} = F_2(\Gamma^{(2),\Lambda}, \Gamma^{(4),\Lambda}, \Gamma^{(6),\Lambda}) = \Gamma^{(4),\Lambda} \circ S^\Lambda \circ \mathcal{G}^\Lambda \circ \Gamma^{(4),\Lambda} + S^\Lambda \circ \Gamma^{(6),\Lambda} \\ \partial_\Lambda \Gamma^{(6),\Lambda} = F_3(\Gamma^{(2),\Lambda}, \Gamma^{(4),\Lambda}, \Gamma^{(6),\Lambda}, \Gamma^{(8),\Lambda}) = \Gamma^{(6),\Lambda} \circ S^\Lambda \circ \mathcal{G}^\Lambda \circ \Gamma^{(4),\Lambda} \\ \quad \quad \quad + S^\Lambda \circ \Gamma^{(8),\Lambda} + \Gamma^{(4),\Lambda} \circ S^\Lambda \circ \mathcal{G}^\Lambda \circ \mathcal{G}^\Lambda \circ \Gamma^{(4),\Lambda} \circ \Gamma^{(4),\Lambda} \\ \quad \quad \quad \vdots \\ \partial_\Lambda \Gamma^{(2m),\Lambda} = F_m(\Gamma^{(2),\Lambda}, \Gamma^{(4),\Lambda}, \Gamma^{(6),\Lambda}, \dots, \Gamma^{(2m+2),\Lambda}) \\ \quad \quad \quad \vdots \end{array} \right. \quad (1.41)$$

В уравнениях (1.41)  $\mathcal{G}^\Lambda$  представляет собой зависящий от  $\Lambda$  пропагатор:

$$\mathcal{G}^\Lambda = \left[ [\mathcal{G}_0^\Lambda]^{-1} + \Gamma^{(2),\Lambda} \right]^{-1} = \left[ [\mathcal{G}_0^\Lambda]^{-1} - \Sigma^\Lambda \right]^{-1}, \quad (1.42)$$

$\mathcal{S}^\Lambda$  – одномасштабный пропагатор, определяемый равенством:

$$\mathcal{S}^\Lambda = \mathcal{G}^\Lambda \partial_\Lambda (\mathcal{G}_0^\Lambda)^{-1} \mathcal{G}^\Lambda, \quad (1.43)$$

операция « $\circ$ » обозначает свертку по внутренним индексам, а явный вид функций  $F_m$  определяется описанной выше процедурой получения уравнений. Как видно из определений (1.42) и (1.43),  $\mathcal{G}^\Lambda$  и  $\mathcal{S}^\Lambda$  зависят от  $\Sigma^\Lambda$ .

Рассмотрим явный вид уравнений для первых трех вершин  $\Gamma^{(0),\Lambda}$ ,  $\Gamma^{(2),\Lambda}$  и  $\Gamma^{(4),\Lambda}$ , которые по сути представляют собой уравнения для термодинамического потенциала  $\Omega$ , собственно-энергетической части  $\Sigma = -\Gamma^{(2)}$  и эффективного перенормированного двухчастичного взаимодействия  $\mathcal{V} = \Gamma^{(4)}$  [65; 66].

– РГ уравнение для термодинамического потенциала:

Условие равенства коэффициентов при  $(\bar{\psi}\psi)^0$  в разложении РГ уравнения для функционала  $\Gamma^\Lambda[\bar{\psi},\psi]$  приводит к следующему РГ уравнению для вершины  $\Gamma^{(0),\Lambda}$  (первое уравнение в (1.41)):

$$\partial_\Lambda \Gamma^{(0),\Lambda} = \text{Tr} \left[ (\mathcal{G}_0^\Lambda - \mathcal{G}^\Lambda) \partial_\Lambda [\mathcal{G}_0^\Lambda]^{-1} \right]. \quad (1.44)$$

Согласно определению функционала  $\Gamma^\Lambda$  (1.40), ноль-частичная вершина  $\Gamma^{(0),\Lambda}$  при  $\Lambda \rightarrow 0$  представляет собой большой термодинамический потенциал  $\Omega$ , отсчитываемый от соответствующего потенциала системы при отсутствии взаимодействия. Таким образом, (1.44) является РГ уравнением для термодинамического потенциала. Отметим, что правая часть данного уравнения содержит  $\Sigma^\Lambda$  через ФГ  $\mathcal{G}^\Lambda$ .

– РГ уравнение для собственно-энергетической части:

Уравнение для вершины  $\Gamma^{(2),\Lambda}$  следует из равенства коэффициентов при  $(\bar{\psi}\psi)^1$  (второе уравнение в (1.41)):

$$\begin{aligned} \partial_\Lambda \Gamma^{(2),\Lambda}(\xi'_1; \xi_1) &= \sum_{\xi'_2 \xi_2} e^{i\kappa\omega_2 0^+} \underbrace{[\mathcal{G}^\Lambda \partial_\Lambda (\mathcal{G}_0^\Lambda)^{-1} \mathcal{G}^\Lambda]_{\xi_2 \xi'_2}}_{\mathcal{S}^\Lambda} \Gamma^{(4),\Lambda}(\xi'_1, \xi'_2; \xi_1, \xi_2) \\ &= \sum_{\xi'_2 \xi_2} e^{i\kappa\omega_2 0^+} \mathcal{S}_{\xi_2 \xi'_2}^\Lambda \Gamma^{(4),\Lambda}(\xi'_1, \xi'_2; \xi_1, \xi_2), \end{aligned} \quad (1.45)$$

где фактор  $e^{i\kappa\omega_2 0^+}$  возникает из-за преобразования Фурье континуального представления статистической суммы (1.31) в частотное представление [68; 99],  $\kappa = 1(-\nu_2)$  для  $\alpha = 1(i)$ .

Учитывая соотношение (1.42) между  $\Gamma^{(2)}$  и  $\Sigma$ , (1.45) эквивалентно следующему РГ уравнению для зависимой от  $\Lambda$  собственно-энергетической

части  $\Sigma^\Lambda$  [62]:

$$\partial_\Lambda \Sigma_{\xi'_1 \xi_1}^\Lambda \equiv \partial_\Lambda \Sigma^\Lambda(\xi'_1; \xi_1) = - \sum_{\xi'_2 \xi_2} e^{i\kappa\omega_2 0^+} \mathcal{S}_{\xi_2 \xi'_2}^\Lambda \mathcal{V}_{\xi'_1 \xi'_2 \xi_1 \xi_2}^\Lambda, \quad (1.46)$$

здесь и далее используется обозначение  $\mathcal{V}^\Lambda \equiv \Gamma^{(4),\Lambda}$ .

– РГ уравнение для эффективного двухчастичного взаимодействия:

В этом случае в разложении РГ уравнения для функционала  $\Gamma^\Lambda[\bar{\psi}, \psi]$  по полям  $\bar{\psi}$  и  $\psi$  нас будут интересовать слагаемые пропорциональные  $(\bar{\psi}\psi)^2$ , условие равенства коэффициентов при которых приводит к соответствующему РГ уравнению для вершины  $\mathcal{V}^\Lambda$  (третье уравнение в (1.41)) [62]:

$$\begin{aligned} \partial_\Lambda \mathcal{V}^\Lambda(\xi'_1, \xi'_2; \xi_1, \xi_2) &= \sum_{\xi_3, \xi'_3, \xi_4, \xi'_4} \mathcal{G}^\Lambda(\xi_3, \xi'_3) \mathcal{S}^\Lambda(\xi_4, \xi'_4) \times \\ &\times \left\{ \mathcal{V}^\Lambda(\xi'_1, \xi'_2; \xi_3, \xi_4) \mathcal{V}^\Lambda(\xi'_3, \xi'_4; \xi_1, \xi_2) \right. \\ &- \left[ \mathcal{V}^\Lambda(\xi'_1, \xi'_4; \xi_1, \xi_3) \mathcal{V}^\Lambda(\xi'_3, \xi'_2; \xi_4, \xi_2) + (\xi_3 \rightleftharpoons \xi_4, \xi'_3 \rightleftharpoons \xi'_4) \right] \\ &+ \left[ \mathcal{V}^\Lambda(\xi'_2, \xi'_4; \xi_1, \xi_3) \mathcal{V}^\Lambda(\xi'_3, \xi'_1; \xi_4, \xi_2) + (\xi_3 \rightleftharpoons \xi_4, \xi'_3 \rightleftharpoons \xi'_4) \right] \left. \right\} \\ &+ \sum_{\xi, \xi'} \mathcal{S}^\Lambda(\xi, \xi') \Gamma^{(6),\Lambda}(\xi'_1, \xi'_2, \xi'; \xi_1, \xi_2, \xi). \end{aligned} \quad (1.47)$$

Из неявной записи РГ уравнений (1.41), а также явного вида уравнений (1.46) и (1.47) видно, что РГ уравнение для вершины  $\Gamma^{(2m),\Lambda}$  ( $m > 0$ ) содержит вклад, отвечающий вершине  $\Gamma^{(2m+2),\Lambda}$ , а также включает вклады всех вершин более низкого порядка, включая саму вершину  $\Gamma^{(2m),\Lambda}$ . К примеру, РГ уравнение для  $\Gamma^{(4),\Lambda}$  ( $\mathcal{V}^\Lambda$ ) (1.47) содержит явно вклад самой вершины  $\Gamma^{(4),\Lambda}$  через произведение  $\Gamma^{(4),\Lambda} \Gamma^{(4),\Lambda}$ , вклад трехчастичной вершины  $\Gamma^{(6),\Lambda}$ , а также зависит от  $\Sigma^\Lambda$  (т.е. фактически от  $\Gamma^{(2),\Lambda}$ ) через полный пропагатор  $\mathcal{G}^\Lambda$  (см. (1.42)). Таким образом, полученная цепочка РГ уравнений никогда не замыкается, что в итоге приводит к иерархии нетривиальным образом связанных дифференциальных уравнений для одночастично-неприводимых вершинных функций  $\Gamma^{(2m),\Lambda}$ .

На практике данная бесконечная система дифференциальных РГ уравнений не может быть проинтегрирована аналитически. Следовательно, для нахождения требуемых вершинных функций  $\Gamma^{(2m),\Lambda}$  необходимы некоторые приближения, позволяющие сформулировать РГ уравнения в замкнутом виде.

Важно отметить, что структура полученных РГ уравнений в целом идентична как при их формулировке в рамках мацубаровской техники, так и в формализме Келдыша. Помимо разного частотного/временного представления функций Грина и вершин, наибольшее различие двух техник заключается в более сложной структуре индексов при рассмотрении уравнений РГ в формализме Келдыша, где каждый мультииндекс  $\xi(\xi')$  содержит также индекс Келдыша  $\nu(\nu')$ , который связан с необходимостью рассмотрения хронологического упорядочения на контуре Келдыша-Швингера при неравновесном описании системы [91]. Это приводит к увеличению числа РГ уравнений для каждой вершины  $\Gamma^{(2m),\Lambda}$  в  $4^m$  раз по сравнению с формализмом Мацубары.

Для однозначного решения полученных дифференциальных уравнений ренормгруппы необходимо задание начальных условий, определяющих значение вершин  $\Gamma^{(2m),\Lambda}$  при  $\Lambda = \Lambda_{\text{ini}}$ . В интересующем нас случае часть полного гамильтониана системы (1.1), которая учитывает локальное кулоновское взаимодействие имеет вид:

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = U \sum_{j=1}^N d_{j,\uparrow}^\dagger d_{j,\uparrow} d_{j,\downarrow}^\dagger d_{j,\downarrow}. \quad (1.48)$$

В этом случае начальные условия для иерархии РГ уравнений имеют следующий вид [62; 66]:

$$\begin{aligned} \Gamma^{(4),\Lambda \rightarrow \Lambda_{\text{ini}}}(\xi'_1, \xi'_2; \xi_1, \xi_2) &= \delta(\omega'_1 + \omega'_2 - \omega_1 - \omega_2) \delta_{j_1, j_2} \delta_{j_1, j'_1} \delta_{j_2, j'_2} \\ &\times \left( \delta_{\sigma'_1, \sigma_1} \delta_{\sigma'_2, \sigma_2} - \delta_{\sigma'_1, \sigma_2} \delta_{\sigma'_2, \sigma_1} \right) \begin{cases} i\nu_1 U \delta_{\nu_1 \nu_2} \delta_{\nu'_1 \nu'_2} \delta_{\nu'_1 \nu_1}, & \text{форм. Келдыша;} \\ U, & \text{форм. Мацубары} \end{cases} \end{aligned} \quad (1.49)$$

и  $\Gamma^{(2m),\Lambda \rightarrow \Lambda_{\text{ini}}}(\xi'_1, \dots, \xi'_m; \xi_1, \dots, \xi_m) = 0$  при  $m \neq 2$ .

### 1.2.2 Схемы усечения иерархии РГ уравнений

Иерархия РГ уравнений (1.41) для вершин  $\Gamma^{(2m),\Lambda}$  представляет собой точную переформулировку исходной многочастичной проблемы и, соответственно, ее решение приводит к точным значениям для вершинных функций  $\Gamma^{(2m),\Lambda}$ . Однако, как уже отмечалось ранее, поскольку решение данной бесконечной цепочки дифференциальных уравнений в общем виде не представляется возможным, практический анализ требует выбора той или иной схемы усечения иерархии РГ уравнений, приводящей к замкнутой системе уравнений. Решение полученной усеченной системы уравнений определяет приближенные значения вершинных функций.

На сегодняшний день предложено несколько схем усечения [62]. Наиболее часто используемый в литературе метод усечения заключается в пренебрежении перенормировкой всех  $m$ -частичных вершин  $\Gamma^{(2m),\Lambda}$  с  $m$  большим, чем рассматриваемый (далее ссылаемся на этот способ усечения РГ уравнений как на усечение  $m$ -го порядка). К примеру, в рамках схемы усечения первого порядка следует рассматривать только перенормировку вершины  $\Gamma^{(2),\Lambda}$  ( $\Sigma^\Lambda$ ) и пренебрегать перенормировкой всех  $\Gamma^{(2m),\Lambda}$  с  $m \geq 2$ , полагая  $\Gamma^{(2m),\Lambda} = \Gamma^{(2m),\Lambda \rightarrow \Lambda_{\text{ini}}}$  при  $m \geq 2$ . Полученное РГ уравнение содержит только  $\Sigma^\Lambda$  в качестве неизвестной величины. Схема усечения второго порядка состоит в пренебрежении перенормировкой вершин  $\Gamma^{(2m),\Lambda}$  с  $m \geq 3$ , что приводит к замкнутой системе уравнений для вершин  $\Gamma^{(2),\Lambda}$  ( $\Sigma^\Lambda$ ) и  $\mathcal{V}^\Lambda \equiv \Gamma^{(4),\Lambda}$ .

Отметим основные аспекты описанных выше схем усечения. Во-первых, поскольку в силу начальных условий (1.49) при  $\Lambda = \Lambda_{\text{ini}}$  все вершины, кроме  $\Gamma^{(4),\Lambda}$  ( $\mathcal{V}^\Lambda$ ), обращаются в ноль, правая часть уравнения для вершины  $\Gamma^{(2m),\Lambda}$  содержит произведение по крайней мере  $m$  вкладов  $\Gamma^{(4),\Lambda}$  ( $\mathcal{V}^\Lambda$ ), генерируя тем самым вклад порядка  $m$  по двухчастичному взаимодействию. Следовательно, при слабой перенормировке изначально малых по величине взаимодействия вершин  $\Gamma^{(4)}$ , приближение, задаваемое схемой усечения  $m$ -го порядка, содержит все вклады теории возмущений порядка  $m$  по «затравочному» двухчастичному взаимодействию. Однако, важно отметить, что в силу непертурбативной при-



роды РГ уравнений результат каждой схемы усечения  $m$ -го порядка выходит за рамки соответствующего разложения по величине взаимодействия стандартных пертурбативных подходов. Другой важный аспект данной схемы усечения заключается в том, что приближение каждого порядка имеет явный физический смысл. Так, схема усечения второго порядка, пренебрегающая перенормировкой вершины  $\Gamma^{(6),\Lambda}$  и вершин старшего порядка, представляет собой пренебрежение генерацией 3-х частичных и других  $m$ -частичных взаимодействий ( $m > 3$ ).

После реализации одной из вышеперечисленных схем усечения мы снова имеем бесконечную цепочку уравнений, поскольку вершинные функции зависят от бесконечного количества мнимых или вещественных частот (совокупность остальных используемых в данной работе индексов представляет собой конечное множество). Один из способов разрешения данной проблемы состоит в пренебрежении частотной зависимостью вершинных функций, что приводит к ошибкам только третьего порядка для двухчастичной вершины [62; 99; 101]. Данное приближение неоднократно использовалось при изучении различных многочастичных проблем (к примеру [34; 62; 68; 73–75]) и его результаты хорошо согласуются с численно точными методами, с высокой точностью воспроизводя в том числе результаты известных точных решений. Существует и альтернативный подход [62; 72], состоящий в частотной параметризации вершин, однако он имеет меньшую степень применимости при рассмотрении систем квантовых точек и не приводит к существенно отличным результатам [72].

В данной работе будут использованы схемы усечения иерархии РГ уравнений первого и второго порядка и все вершинные функции рассматриваются независимыми от частот (однако, будут учитываться связанные с ними законы сохранения). Отметим, что при рассмотрении конечной температуры  $T$  в формализме Мацубары в правой части РГ уравнений возникает суммирование по дискретным мацубаровским частотам  $\omega_n$ , однако, поскольку в дальнейшем будет рассматриваться только случай нулевой температуры  $T = 0$ , будет использован предельный переход [94]:  $\sum_{i\omega_n} \xrightarrow{T \rightarrow 0} (2\pi T)^{-1} \int d\omega$ .

Рассмотрим конкретный вид РГ уравнений для схем усечения первого и второго порядка:

– Усечение первого порядка.

РГ уравнение для  $\Sigma^\Lambda$  схеме усечения первого порядка получается из уравнения (1.46) после замены  $\Gamma^{(4),\Lambda}(\mathcal{V}^\Lambda)$  на  $\Gamma^{(4),\Lambda \rightarrow \Lambda_{\text{ini}}}$ , что с учетом (1.49) приводит к уравнению:

$$\begin{aligned} \partial_\Lambda \Sigma_{\eta'_1 \eta_1}^\Lambda = & -\frac{U}{2\pi} \int_\omega e^{i\kappa\omega 0^+} \sum_{\eta'_2 \eta_2} \mathcal{S}_{\eta_2 \eta'_2}^\Lambda(i\alpha^3 \omega) \delta_{j_1, j_2} \delta_{j_1, j'_1} \delta_{j_2, j'_2} \\ & \times \left( \delta_{\sigma'_1, \sigma_1} \delta_{\sigma'_2, \sigma_2} - \delta_{\sigma'_1, \sigma_2} \delta_{\sigma'_2, \sigma_1} \right) \begin{cases} i\nu_1 \delta_{\nu_1 \nu_2} \delta_{\nu'_1 \nu'_2} \delta_{\nu'_1 \nu_1}, & \text{форм. Келдыша;} \\ 1, & \text{форм. Мацубары.} \end{cases} \end{aligned} \quad (1.50)$$

Здесь и далее в данном разделе вводятся индексы  $\eta(\eta')$ , содержащие все квантовые числа что и индексы  $\xi(\xi')$  за исключением частот (т.е.  $\eta^{(l)} \equiv k^{(l)} = (j^{(l)}, \sigma^{(l)})$  для формализма Мацубары ( $\alpha = 1$ ) и  $\eta^{(l)} \equiv (k^{(l)}, \nu^{(l)}) = (j^{(l)}, \sigma^{(l)}, \nu^{(l)})$  для формализма Келдыша ( $\alpha = i$ )), а также явно выделено интегрирование по частотам с учетом законов сохранения, используя обозначения  $X_{\xi\xi'} \rightarrow X_{\eta\eta'}(i\alpha^3 \omega)$ . Поскольку правая часть уравнения (1.50) не зависит от частоты, то приближение данного порядка автоматически гарантирует независимость собственной энергии от частоты.

– Приближение второго порядка.

В этом случае  $\Gamma^{(2m),\Lambda} = \Gamma^{(2m),\Lambda \rightarrow \Lambda_{\text{ini}}} = 0$  при  $m \geq 3$ . Пренебрегая зависимостью двухчастичной вершины  $\mathcal{V}^\Lambda$  от частот (достаточно для обеспечения частотной независимости  $\Sigma^\Lambda$ ) и учитывая законы сохранения частот в узлах, из (1.46) и (1.47) получаем следующие РГ уравнения для  $\Sigma^\Lambda$  и  $\mathcal{V}^\Lambda$ :

$$\partial_\Lambda \Sigma_{\eta'_1 \eta_1}^\Lambda = -\frac{1}{2\pi} \int_\omega \sum_{\eta'_2 \eta_2} e^{i\kappa\omega 0^+} \mathcal{S}_{\eta_2 \eta'_2}^\Lambda(i\alpha^3 \omega) \mathcal{V}_{\eta'_1 \eta'_2 \eta_1 \eta_2}^\Lambda \quad (1.51)$$

$$\begin{aligned}
\partial_\Lambda \mathcal{V}_{\eta'_1 \eta'_2 \eta_1 \eta_2}^\Lambda &= \frac{1}{2\pi} \int_\omega \sum_{\eta_3, \eta'_3, \eta_4, \eta'_4} \mathcal{G}_{\eta_3 \eta'_3}^\Lambda(-i\alpha^3 \omega) \mathcal{S}_{\eta_4 \eta'_4}^\Lambda(i\alpha^3 \omega) \mathcal{V}_{\eta'_1 \eta'_2 \eta_3 \eta_4}^\Lambda \mathcal{V}_{\eta'_3 \eta'_4 \eta_1 \eta_2}^\Lambda \\
&- \frac{1}{2\pi} \int_\omega \sum_{\eta_3, \eta'_3, \eta_4, \eta'_4} \mathcal{G}_{\eta_3 \eta'_3}^\Lambda(i\alpha^3 \omega) \mathcal{S}_{\eta_4 \eta'_4}^\Lambda(i\alpha^3 \omega) \left[ \mathcal{V}_{\eta'_1 \eta'_4 \eta_1 \eta_3}^\Lambda \mathcal{V}_{\eta'_3 \eta'_2 \eta_4 \eta_2}^\Lambda \right. \\
&\qquad\qquad\qquad \left. + (\eta_3 \leftrightarrow \eta_4, \eta'_3 \leftrightarrow \eta'_4) \right] \\
&+ \frac{1}{2\pi} \int_\omega \sum_{\eta_3, \eta'_3, \eta_4, \eta'_4} \mathcal{G}_{\eta_3 \eta'_3}^\Lambda(i\alpha^3 \omega) \mathcal{S}_{\eta_4 \eta'_4}^\Lambda(i\alpha^3 \omega) \left[ \mathcal{V}_{\eta'_2 \eta'_4 \eta_1 \eta_3}^\Lambda \mathcal{V}_{\eta'_3 \eta'_1 \eta_4 \eta_2}^\Lambda \right. \\
&\qquad\qquad\qquad \left. + (\eta_3 \leftrightarrow \eta_4, \eta'_3 \leftrightarrow \eta'_4) \right]. \quad (1.52)
\end{aligned}$$

Совместно уравнения (1.51) и (1.52) задают замкнутую систему связанных ( $\Sigma^\Lambda$  входит также через  $\mathcal{G}^\Lambda$  и  $\mathcal{S}^\Lambda$ ) уравнений. Уравнения (1.50) – (1.52) являются основными и дальнейший анализ рассматриваемых в настоящей работе задач основан на их численном решении.

Для дальнейшего рассмотрения удобно перейти к следующим обозначениям:

$$X_{\eta'_1 \eta'_2 \dots \eta'_m \eta_1 \eta_2 \dots \eta_m} \equiv \begin{cases} X_{k'_1 k'_2 \dots k'_m k_1 k_2 \dots k_m}^{\nu'_1 \nu'_2 \dots \nu'_m \nu_1 \nu_2 \dots \nu_m}, & \text{форм. Келдыша,} \\ X_{k'_1 k'_2 \dots k'_m k_1 k_2 \dots k_m}, & \text{форм. Мацубары.} \end{cases} \quad (1.53)$$

В указанных обозначениях уравнение (1.51) примет вид:

$$\partial_\Lambda \Sigma_{k'_1 k_1}^{\nu'_1 \nu_1, \Lambda} = -\frac{1}{2\pi} \int_\omega \sum_{k'_2 k_2} \sum_{\nu'_2 \nu_2} e^{-i\nu_2 \omega 0^+} \mathcal{S}_{k_2 k'_2}^{\nu_2 \nu'_2, \Lambda}(\omega) \mathcal{V}_{k'_1 k'_2 k_1 k_2}^{\nu'_1 \nu'_2 \nu_1 \nu_2, \Lambda} \quad (1.54)$$

в формализме Келдыша ( $\alpha = i$ ) и

$$\partial_\Lambda \Sigma_{k'_1 k_1}^\Lambda = -\frac{1}{2\pi} \int_\omega \sum_{k'_2 k_2} e^{i\omega 0^+} \mathcal{S}_{k_2 k'_2}^\Lambda(i\omega) \mathcal{V}_{k'_1 k'_2 k_1 k_2}^\Lambda \quad (1.55)$$

в формализме Мацубары ( $\alpha = 1$ ). Аналогичным образом могут быть записаны уравнения (1.50) и (1.51).

Из структуры уравнений уравнения (1.50) – (1.52) видно, что их явный вид полностью определяется заданием функции Грина  $\mathcal{G}_0^\Lambda$ . В свою очередь,  $\mathcal{G}_0^\Lambda$  определяется двумя факторами:

1. Заданием функции Грина системы при отсутствии взаимодействия («затравочного» пропагатора)  $\mathcal{G}_0$ , однозначно определяемой одночастичной частью гамильтониана (1.1). При этом взаимодействие учитывается посредством задания начальных условий (1.49).
2. Выбором способа введения масштаба  $\Lambda$  в  $\mathcal{G}_0$ , при котором полученный пропагатор  $\mathcal{G}_0^\Lambda$  удовлетворяет условиям (1.29) и (1.30). Данная процедура как правило реализуется путем введения той или иной функции отсечки в  $\mathcal{G}_0$ .

### 1.2.3 Функции отсечки

При выводе уравнений функциональной ренормгруппы явный вид зависимости  $\mathcal{G}_0^\Lambda$  от параметра  $\Lambda$  никак не конкретизировался. Формально, введение параметра  $\Lambda$  в пропагатор  $\mathcal{G}_0$  ограничено только требованием выполнения условий (1.29)-(1.30), определяющих значения  $\mathcal{G}_0^\Lambda$  в начале ( $\Lambda = \Lambda_{\text{ini}}$ ) и в конце ( $\Lambda = \Lambda_{\text{fin}}$ ) РГ потока. Поскольку в остальной области изменения  $\Lambda$  поведение  $\mathcal{G}_0^\Lambda$  как функции  $\Lambda$  формально не ограничено никакими дополнительными условиями, то выбор  $\mathcal{G}_0^\Lambda$  не однозначен. С одной стороны, решение бесконечной иерархии уравнений РГ при любом выборе функциональной зависимости  $\mathcal{G}_0$  от  $\Lambda$  приводит к одним и тем же значениям вершин в конце потока ( $\Lambda = \Lambda_{\text{fin}}$ ) и, таким образом, никак не влияет на конечный физический результат. Однако, необходимость усечения иерархии дифференциальных уравнений РГ приводит к тому, что различные схемы введения масштаба  $\Lambda$  оказываются неэквивалентными и могут приводить к некоторому отличию получаемых физических результатов.

Можно выделить два способа введения параметра  $\Lambda$ , при которых условия (1.29)-(1.30) выполнены [62; 66]. Первый способ – «мультипликативная отсечка», который заключается в умножении  $\mathcal{G}_0$  на функцию  $\chi(\Lambda) \equiv \chi^\Lambda$  (функцию

отсечки):

$$\mathcal{G}_0^\Lambda = \chi^\Lambda \mathcal{G}_0,$$

удовлетворяющую условиям:

$$\chi^\Lambda = \begin{cases} 0, & \text{при } \Lambda \rightarrow \Lambda_{\text{ini}}; \\ 1, & \text{при } \Lambda \rightarrow \Lambda_{\text{fin}}. \end{cases} \quad (1.56)$$

В силу построения  $\mathcal{G}_0^\Lambda$  условия (1.29)–(1.30) выполнены. Второй способ – «аддитивная отсечка» состоит во введении аддитивной добавки  $\Pi(\Lambda) \equiv \Pi^\Lambda$  к обратному пропагатору  $\mathcal{G}_0^{-1}$ :

$$[\mathcal{G}_0^\Lambda]^{-1} = [\mathcal{G}_0]^{-1} + \Pi^\Lambda.$$

В этом случае, требования (1.29)–(1.30) приводят к необходимости выполнения следующих условий для функции отсечки  $\Pi^\Lambda$ :

$$\Pi^\Lambda = \begin{cases} \pm(i)\infty, & \text{при } \Lambda \rightarrow \Lambda_{\text{ini}}; \\ 0, & \text{при } \Lambda \rightarrow \Lambda_{\text{fin}}. \end{cases} \quad (1.57)$$

Таким образом, масштаб  $\Lambda$  может быть введен при помощи той или иной функции отсечки (мультипликативной –  $\chi^\Lambda$  или аддитивной –  $\Pi^\Lambda$ ).

Сформулируем основные используемые в настоящей работе функции отсечки, а также обсудим их преимущества, недостатки и явный вид РГ уравнений. Далее явный вид уравнений для схемы усечения первого порядка не приводится, поскольку соответствующие уравнения всегда могут быть получены из (1.51) путем замены  $\mathcal{V}^\Lambda \rightarrow \mathcal{V}^{\Lambda \rightarrow \Lambda_{\text{ini}}}$ .

### а) Резкая мультипликативная отсечка

Данный способ введения параметра  $\Lambda$  реализуется за счет резкого подавления низкочастотных ( $|\omega| < \Lambda$ ) мод пропагатора  $\mathcal{G}_0$ , что достигается умноже-

нием  $\mathcal{G}_0$  на  $\chi^\Lambda = \Theta(|\omega| - \Lambda)$  [62; 66; 68; 70]:

$$\mathcal{G}_0^\Lambda(i\alpha^3\omega) = \Theta(|\omega| - \Lambda)\mathcal{G}_0(i\alpha^3\omega). \quad (1.58)$$

В этом случае  $\Lambda$  изменяется в пределах от  $\Lambda_{\text{ini}} = +\infty$  до  $\Lambda_{\text{fin}} = 0$ .

Указанная функция отсечки является одной из наиболее часто используемых в литературе. Одна из причин состоит в том, что она позволяет аналитически выполнить интегрирование по частоте в правой части РГ уравнений (1.50)–(1.52) [62; 68; 101], что обеспечивает более доступный численный анализ получаемых РГ уравнений. Действительно, ФГ (1.58) соответствует одномасштабный пропагатор  $\mathcal{S}^\Lambda$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^\Lambda &= \left( [\mathcal{G}_0^\Lambda]^{-1} - \Sigma^\Lambda \right)^{-1} \left[ \partial_\Lambda [\mathcal{G}_0^\Lambda]^{-1} \right] \left( [\mathcal{G}_0^\Lambda]^{-1} - \Sigma^\Lambda \right)^{-1} \\ &= \delta(|\omega| - \Lambda) (\mathcal{G}_0^{-1} - \Theta\Sigma^\Lambda)^{-1} \mathcal{G}_0^{-1} (\mathcal{G}_0^{-1} - \Theta\Sigma^\Lambda)^{-1}, \end{aligned} \quad (1.59)$$

содержащий дельта функцию  $\delta(|\omega| - \Lambda)$  в качестве множителя. Данное обстоятельство позволяет осуществить интегрирование по частоте аналитически [68; 101] и РГ уравнения (1.51)–(1.52) принимают вид [62; 68]:

$$\partial_\Lambda \Sigma_{\eta'_1 \eta_1}^\Lambda = -\frac{1}{2\pi} \sum_{\omega=\pm\Lambda} \sum_{\eta'_2, \eta_2} e^{i\kappa\omega 0^+} \tilde{\mathcal{G}}_{\eta_2 \eta'_2}^\Lambda(i\alpha^3\omega) \mathcal{V}_{\eta'_1 \eta'_2 \eta_1 \eta_2}^\Lambda, \quad (1.60)$$

$$\begin{aligned} \partial_\Lambda \mathcal{V}_{\eta'_1 \eta'_2 \eta_1 \eta_2}^\Lambda &= \frac{1}{4\pi} \sum_{\omega=\pm\Lambda} \sum_{\eta_3, \eta'_3, \eta_4, \eta'_4} \tilde{\mathcal{G}}_{\eta_3 \eta'_3}^\Lambda(-i\alpha^3\omega) \tilde{\mathcal{G}}_{\eta_4 \eta'_4}^\Lambda(i\alpha^3\omega) \mathcal{V}_{\eta'_1 \eta'_2 \eta_3 \eta_4}^\Lambda \mathcal{V}_{\eta'_3 \eta'_4 \eta_1 \eta_2}^\Lambda \\ &\quad - \frac{1}{2\pi} \sum_{\omega=\pm\Lambda} \sum_{\eta_3, \eta'_3, \eta_4, \eta'_4} \tilde{\mathcal{G}}_{\eta_3 \eta'_3}^\Lambda(i\alpha^3\omega) \tilde{\mathcal{G}}_{\eta_4 \eta'_4}^\Lambda(i\alpha^3\omega) \left[ \mathcal{V}_{\eta'_1 \eta'_4 \eta_1 \eta_3}^\Lambda \mathcal{V}_{\eta'_3 \eta'_2 \eta_4 \eta_2}^\Lambda \right. \\ &\quad \left. - \mathcal{V}_{\eta'_2 \eta'_4 \eta_1 \eta_3}^\Lambda \mathcal{V}_{\eta'_3 \eta'_1 \eta_4 \eta_2}^\Lambda \right], \end{aligned} \quad (1.61)$$

где определен пропагатор:

$$\tilde{\mathcal{G}}^\Lambda(i\alpha^3\omega) \equiv (\mathcal{G}_0^{-1}(i\alpha^3\omega) - \Sigma^\Lambda)^{-1}, \quad (1.62)$$

который уже не содержит зависимость от  $\Lambda$  функцию  $\Theta$  и, таким образом, включает  $\Lambda$  только через СЭЧ  $\Sigma^\Lambda$ .

При численном анализе данных уравнений масштаб  $\Lambda_{\text{ini}}$  имеет большое (много больше всех масштабов энергии системы), но всегда конечное значение  $\Lambda_{\text{ini}} = \tilde{\Lambda}$ . Отметим, что из-за фактора  $e^{ik\omega 0^+}$ , интегрирование уравнения (1.60) по  $\Lambda$  в пределах  $[+\infty, \tilde{\Lambda}]$  дает конечный вклад в СЭЧ при  $\tilde{\Lambda} \rightarrow +\infty$  [68; 101]:

$$\lim_{\tilde{\Lambda} \rightarrow +\infty} \int_{+\infty}^{\tilde{\Lambda}} \partial_\Lambda \Sigma_{\eta'_1 \eta_1}^\Lambda d\Lambda = \frac{U}{2} \delta_{j'_1 j_1} \delta_{\sigma'_1 \sigma_1} \begin{cases} \delta_{\nu'_1 \nu_1}, & \alpha = i, \nu_1 = -; \\ -\delta_{\nu'_1 \nu_1}, & \alpha = i, \nu_1 = +; \\ 1, & \alpha = 1 \end{cases} \quad (1.63)$$

и, следовательно, должен быть учтен заранее путем переопределения начальных условий (1.49) для собственно-энергетической части. Однако, добавка (1.63) полностью компенсируется вкладом в собственно-энергетическую часть от одночастичного члена  $-\sum_\sigma \sum_{j=1}^N (U/2) n_{j,\sigma}$ , включенного в гамильтониан  $\mathcal{H}_{\text{dot}}$  (1.2) для сохранения частично-дырочной симметрии гамильтониана (1.1). Таким образом, при численном анализе уравнений фактор  $e^{ik\omega 0^+}$  в уравнении (1.60) может быть отброшен и начальные условия (1.49) при  $\Lambda_{\text{ini}} = \tilde{\Lambda}$  остаются неизменными.

## б) Оптимизированная (Литима) отсечка

Для улучшения свойств сходимости ренормгруппового потока был предложен класс так называемых «оптимизированных» отсечек, удовлетворяющих процедуре оптимизации, сформулированной в работе [102]. Функции отсечки, построенные согласно указанной процедуре, обладают рядом преимуществ по сравнению с рассмотренной выше резкой схемой отсечки [102; 103]. Одной из наиболее простых «оптимизированных» отсечек является «оптимизированная» отсечка Литима [103], которая при реализации частотного усечения «затравоч-

ного» пропагатора системы (1.10) определена следующим образом [104–106]:

$$\begin{aligned} [\mathcal{G}_0^\Lambda(i\omega)]^{-1} &= [\mathcal{G}_0(i\omega)]^{-1} + \Pi^\Lambda \\ &= [\mathcal{G}_0(i\omega)]^{-1} + iI_N (\Lambda - |\omega|) \Theta(\Lambda - |\omega|) \text{sign}(\omega), \end{aligned} \quad (1.64)$$

где  $I_N$  – единичная матрица размерности  $N \times N$ . Как и при резкой отсечке  $\Lambda_{\text{ini}} = +\infty$  и  $\Lambda_{\text{fin}} = 0$ . Условия (1.29)–(1.30) для данной функции отсечки выполнены:

$$\mathcal{G}_0^{\Lambda \rightarrow \Lambda_{\text{ini}} = +\infty} \simeq \pm \frac{I_N}{i\Lambda} \xrightarrow{\Lambda \rightarrow +\infty} 0, \quad (1.65)$$

$$\mathcal{G}_0^{\Lambda \rightarrow \Lambda_{\text{fin}} = 0} = \left[ [\mathcal{G}_0(i\omega)]^{-1} + iI_N (-|\omega|) \Theta(-|\omega|) \text{sign}(\omega) \right]^{-1} = \mathcal{G}_0(i\omega). \quad (1.66)$$

Данный метод введения масштаба  $\Lambda$  значительно улучшает физические результаты, полученные резкой схемой отсечки, и приводит к плавному поведению пропагатора  $\mathcal{G}_0^\Lambda$  на малых частотах [102; 103]. Учитывая явный вид  $[\mathcal{G}_0^\Lambda(i\omega)]^{-1}$  (1.10), имеем:

$$\left[ \mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1,\Lambda}(i\omega) \right]_{ij} = \begin{cases} [\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(i\omega)]_{ij}, & |\omega| > \Lambda; \\ -\epsilon_\sigma \delta_{ij} + t_{ij} + i [\Gamma_{ij}^L + \Gamma_{ij}^R + \Lambda \delta_{ij}] \text{sign}(\omega), & |\omega| < \Lambda; \end{cases} \quad (1.67)$$

Откуда видно, что подавление низкочастотных мод пропагатора ( $|\omega| < \Lambda$ ) реализуется плавным образом. При  $|\omega| < \Lambda$  пропагатор  $\mathcal{G}_{0,\sigma}^\Lambda(i\omega)$  не равен нулю как при резкой отсечке и зависит только от знака частоты  $\omega$ .

Функция Грина  $\mathcal{G}^\Lambda(i\omega)$  представима в виде:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^\Lambda(i\omega) &= \left[ [\mathcal{G}_0^\Lambda(i\omega)]^{-1} - \Sigma^\Lambda \right]^{-1} \\ &= \begin{cases} \left[ [\mathcal{G}_0(i\omega)]^{-1} - \Sigma^\Lambda \right]^{-1}, & |\omega| > \Lambda; \\ \mathcal{G}_+^\Lambda, & 0 < \omega < \Lambda; \\ \mathcal{G}_-^\Lambda, & -\Lambda < \omega < 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (1.68)$$

где функции  $\mathcal{G}_+^\Lambda$  и  $\mathcal{G}_-^\Lambda$  уже не зависят от частоты  $\omega$  и определяются выражением (1.67).



Одномасштабный пропагатор (1.43) в данном случае запишется как:

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}^\Lambda(i\omega) &= \mathcal{G}^\Lambda(i\omega) \partial_\Lambda [\mathcal{G}_0^\Lambda(i\omega)]^{-1} \mathcal{G}^\Lambda(i\omega) \\
&= i \operatorname{sign}(\omega) [\Theta(\Lambda - |\omega|) + (\Lambda - |\omega|) \delta(\Lambda - |\omega|)] [\mathcal{G}^\Lambda(i\omega)]^2 \\
&= i \Theta(\Lambda - |\omega|) \operatorname{sign}(\omega) [\mathcal{G}^\Lambda(i\omega)]^2 = \begin{cases} i [\mathcal{G}_+^\Lambda]^2, & 0 < \omega < \Lambda; \\ -i [\mathcal{G}_-^\Lambda]^2, & -\Lambda < \omega < 0; \\ 0, & |\omega| > \Lambda. \end{cases} \quad (1.69)
\end{aligned}$$

Большим преимуществом отсечки (1.64) по сравнению с другими видами «оптимизированных» отсечек заключается в возможности аналитического интегрирования правых частей ренормгрупповых уравнений по частоте. Учитывая выражения (1.68) и (1.69) для входящих в правую часть РГ уравнений (1.50)–(1.52) интегралов по частоте, имеем:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{S}_{k_2 k_2'}^\Lambda(i\omega) d\omega &= i\Lambda \left( [\mathcal{G}_+^\Lambda]_{k_2 k_2'}^2 - [\mathcal{G}_-^\Lambda]_{k_2 k_2'}^2 \right), \quad (1.70) \\
\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{G}_{k_3 k_3'}^\Lambda(\pm i\omega) \mathcal{S}_{k_4 k_4'}^\Lambda(i\omega) d\omega &= i\Lambda \left( [\mathcal{G}_\pm^\Lambda]_{k_3 k_3'} [\mathcal{G}_+^\Lambda]_{k_4 k_4'}^2 - [\mathcal{G}_\mp^\Lambda]_{k_3 k_3'} [\mathcal{G}_-^\Lambda]_{k_4 k_4'}^2 \right). \quad (1.71)
\end{aligned}$$

Подстановка (1.70) и (1.71) в (1.51)–(1.52) дает окончательный вид РГ уравнений в рамках отсечки Литима:

$$\partial_\Lambda \Sigma_{k_1' k_1}^\Lambda = -\frac{i\Lambda}{2\pi} \sum_{k_2' k_2} \left( [\mathcal{G}_+^\Lambda]_{k_2 k_2'}^2 - [\mathcal{G}_-^\Lambda]_{k_2 k_2'}^2 \right) \mathcal{V}_{k_1' k_2' k_1 k_2}^\Lambda \quad (1.72)$$

$$\begin{aligned}
\partial_\Lambda \mathcal{V}_{k_1' k_2' k_1 k_2}^\Lambda &= \frac{i\Lambda}{2\pi} \sum_{k_3, k_3', k_4, k_4'} \left( [\mathcal{G}_-^\Lambda]_{k_3 k_3'} [\mathcal{G}_+^\Lambda]_{k_4 k_4'}^2 - [\mathcal{G}_+^\Lambda]_{k_3 k_3'} [\mathcal{G}_-^\Lambda]_{k_4 k_4'}^2 \right) \quad (1.73) \\
&\times \mathcal{V}_{k_1' k_2' k_3 k_4}^\Lambda \mathcal{V}_{k_3' k_4' k_1 k_2}^\Lambda - \frac{i\Lambda}{2\pi} \sum_{k_3, k_3', k_4, k_4'} \left( [\mathcal{G}_+^\Lambda]_{k_3 k_3'} [\mathcal{G}_+^\Lambda]_{k_4 k_4'}^2 - [\mathcal{G}_-^\Lambda]_{k_3 k_3'} [\mathcal{G}_-^\Lambda]_{k_4 k_4'}^2 \right) \\
&\times \left[ \mathcal{V}_{k_1' k_4' k_1 k_3}^\Lambda \mathcal{V}_{k_3' k_2' k_4 k_2}^\Lambda + \mathcal{V}_{k_1' k_3' k_1 k_4}^\Lambda \mathcal{V}_{k_4' k_2' k_3 k_2}^\Lambda - \mathcal{V}_{k_2' k_4' k_1 k_3}^\Lambda \mathcal{V}_{k_3' k_1' k_4 k_2}^\Lambda - \mathcal{V}_{k_2' k_3' k_1 k_4}^\Lambda \mathcal{V}_{k_4' k_1' k_3 k_2}^\Lambda \right].
\end{aligned}$$

Фактор  $e^{i\omega 0^+}$  в уравнении для собственно-энергетической части (1.51) как и для резкой схемы отсечки приводит к появлению вклада (1.63) при интегрировании правой части уравнения в пределах  $\tilde{\Lambda} < \Lambda < +\infty$ , где  $\tilde{\Lambda} \rightarrow +\infty$  и аналогично предыдущему случаю был отброшен в уравнении (1.72).

Хотя можно предложить обобщение отсечки (1.64) на формализм Келдыша, далее данный метод введения масштаба  $\Lambda$  не используется для изучения неравновесных режимов систем квантовых точек. Главным аргументом этого является то, что схемы отсечки, реализующие отсечку части частотного спектра «затравочного» пропагатора из-за «плохих» аналитических свойств (например, возможности появления комплексных полюсов правых частей РГ уравнений, отмеченной при использовании резкой схемы отсечки [70]; более подробно это обсуждается ниже) являются крайне неподходящими для исследования неравновесных свойств систем квантовых точек. В этом отношении, рассмотрение неравновесных режимов требует применения методов введения масштаба  $\Lambda$  отличных от представленных выше.

## в) Введение вспомогательных электронных резервуаров

Данный метод [107–109] состоит во введении  $N$  независимых вспомогательных электронных резервуаров, имеющих химические потенциалы  $\mu_\beta = 0$  ( $\beta \in \{1, N\}$ ), каждый из которых связан зависящим от масштаба  $\Lambda$  матричным элементом перескока  $t_j^\beta(\Lambda) = \sqrt{\Lambda/\pi\rho_{\text{res}}^\beta(0)}$  с квантовой точкой  $j$ , где  $\rho_{\text{res}}^\beta$  – плотность состояний электронного резервуара  $\beta$ . Применяя проекционную технику (см. раздел 1.1) к данной «расширенной» системе (система квантовых точек и контактов+вспомогательные электронные резервуары), а также полагая эквивалентность всех вспомогательных резервуаров  $\rho_{\text{res}}^\beta = \rho_{\text{res}}$  и выполнимость предела широкой зоны, приходим к следующему выражению для ФГ  $\mathcal{G}_0^\Lambda$  системы при отсутствии взаимодействия:

$$[\mathcal{G}_0^\Lambda]^{-1} = [\mathcal{G}_0]^{-1} + \Pi^\Lambda = [\mathcal{G}_0]^{-1} + iI_N\Lambda\text{sign}(\omega) \quad (1.74)$$

при рассмотрении мацубаровской ФГ и

$$[\mathcal{G}_0^\Lambda]^{-1} = [\mathcal{G}_0]^{-1} + \Pi^\Lambda = [\mathcal{G}_0]^{-1} + iI_N \Lambda \begin{pmatrix} \text{sign}(\omega) & 1 - \text{sign}(\omega) \\ -(1 + \text{sign}(\omega)) & \text{sign}(\omega) \end{pmatrix} \quad (1.75)$$

при работе в рамках формализма Келдыша. Выражения (1.74) и (1.75) определяют аддитивную отсечку  $\Pi^\Lambda$  в рамках метода вспомогательных резервуаров. Условия (1.57) и (1.29)-(1.30) очевидным образом выполнены при  $\Lambda_{\text{ini}} = +\infty$  и  $\Lambda_{\text{fin}} = 0$ .

В рамках данного способа отсечки интегрирование правой части уравнений ренормгруппы (1.51) и (1.52) по частоте  $\omega$  в общем виде не может быть осуществлено аналитически. Таким образом, рассматриваемый метод отсечки требует рассмотрения общих ренормгрупповых уравнений (1.51)-(1.52), в которых пропагатор  $\mathcal{G}^\Lambda$  дается уравнением Дайсона (1.42), а одномасштабный пропагатор (1.43)  $\mathcal{S}^\Lambda$  с учетом выражений (1.74) и (1.75) имеет вид:

$$\mathcal{S}^\Lambda(i\omega) = i \text{sign}(\omega) [\mathcal{G}^\Lambda(i\omega)]^2 \quad (1.76)$$

для мацубаровской техники и

$$\mathcal{S}^\Lambda(\omega) = i \mathcal{G}^\Lambda(\omega) \begin{pmatrix} \text{sign}(\omega) & 1 - \text{sign}(\omega) \\ -(1 + \text{sign}(\omega)) & \text{sign}(\omega) \end{pmatrix} \mathcal{G}^\Lambda(\omega) \quad (1.77)$$

для формализма Келдыша. Роль фактора  $e^{i\kappa\omega 0^+}$  в правой части уравнения (1.51) в данной схеме идентична ранее рассмотренным случаям.

Несмотря на более сложный численный анализ полученных РГ уравнений, введение параметра  $\Lambda$  данным способом имеет ряд существенных преимуществ по сравнению с ранее рассмотренными схемами отсечки, в особенности, при изучении систем вдали от равновесного режима. Прежде всего пропагатор (1.75) не приводит к усечению частотной зависимости запаздывающей  $\mathcal{G}^{r,\Lambda}$  и опере-

жающей функций Грина  $\mathcal{G}^{a,\Lambda}$  при любом масштабе  $\Lambda$ :

$$\begin{aligned} \left[\mathcal{G}_0^{r/a,\Lambda}(\omega)\right]^{-1} &= \frac{1}{2} \left( \left[\mathcal{G}_0^{-1,\Lambda}(\omega)\right]^{--} \pm \left[\mathcal{G}_0^{-1,\Lambda}(\omega)\right]^{-+} \right. \\ &\quad \left. \mp \left[\mathcal{G}_0^{-1,\Lambda}(\omega)\right]^{+-} - \left[\mathcal{G}_0^{-1,\Lambda}(\omega)\right]^{++} \right) = \left[ \left[\mathcal{G}_0^{r/a}(\omega)\right]^{-1} \pm iI_N\Lambda \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (1.78)$$

Отсутствие модификации частотных/временных переменных функций Грина приводит к тому, что зависящий от  $\Lambda$  пропагатор  $\mathcal{G}_0^\Lambda$  обладает теми же аналитическими свойствами, что и пропагатор  $\mathcal{G}_0$  [108]. В этом случае все законы сохранения для зависящих от параметра  $\Lambda$  вершин электрон-электронного взаимодействия сохраняются в течение всего РГ потока, даже при усечении иерархии РГ уравнений [107; 108]. В том числе, получаемые компоненты функций Грина  $\mathcal{G}^\Lambda$  удовлетворяют принципу причинности [110]:

$$\mathcal{G}^{--, \Lambda} - \mathcal{G}^{-+, \Lambda} - \mathcal{G}^{+-, \Lambda} + \mathcal{G}^{++, \Lambda} = 0, \quad (1.79)$$

которое приводит к следующей связи компонент собственно-энергетической части [92]:

$$\Sigma^{--, \Lambda} + \Sigma^{-+, \Lambda} + \Sigma^{+-, \Lambda} + \Sigma^{++, \Lambda} = 0. \quad (1.80)$$

Соотношение (1.79) следует непосредственно из определения неравновесной функции Грина [110] и, таким образом, представляет собой точное соотношение, связывающее ее различные компоненты. Однако, для приближенных РГ схем выполнение соотношений (1.79) и (1.80) априори не гарантировано. Сохранение соотношений (1.79) и (1.80) при отсечке методом вспомогательных резервуаров гарантирует корректное построение опережающей и запаздывающей функций Грина с учетом эффектов электрон-электронного взаимодействия, через которые выражаются представляющие интерес в данной работе величины (токи, проводимости, числа заполнения и др.).

Другое обстоятельство заключается в том, что не все приближенные многочастичные подходы заведомо удовлетворяют закону сохранения тока/заряда в системе. В этом плане метод функциональной ренормгруппы, сформулиро-

ванный в рамках того или иного приближения, не является исключением и может приводить к тому, что алгебраическая сумма входящих и выходящих из рассматриваемой системы токов может быть не нулевой и, следовательно, к нарушению закона сохранения тока. В частности, это имеет место при усечении иерархии РГ уравнений в рамках схемы усечения второго порядка [70]. Однако, при использовании отсечки методом вспомогательных резервуаров и усечении иерархии РГ уравнений в рамках схемы усечения первого порядка закон сохранения тока всегда выполнен [101; 108; 109].

В дополнение к обозначенным преимуществам РГ уравнения в технике неравновесных ФГ, использующие отсечку методом вспомогательных резервуаров, при предельном переходе к равновесному режиму ( $V_b \rightarrow 0$ ) воспроизводят РГ уравнения равновесной (мадубаровской) схемы [101] (для резкой схемы усечения это не справедливо [70]). Стоит также отметить, что как и схема отсечки Литима, рассмотренная схема реализует плавную интерполяцию пропагатора  $\mathcal{G}^\Lambda$  между его значениями в начале и в конце РГ потока.

Поскольку в рамках формализма Келдыша рассмотренный метод введения масштаба  $\Lambda$  обладает несомненным преимуществом для нахождения приближенной функции Грина систем с взаимодействием по сравнению с другими схемами отсечки, то в данной работе для анализа неравновесной физики систем квантовых точек используется только отсечка методом вспомогательных резервуаров. Как будет видно из представляемых далее результатов в равновесном случае все три рассмотренных метода отсечки дают почти идентичные физические результаты).

### 1.3 Система с одной квантовой точкой

Рассмотрим результат применения метода функциональной ренормгруппы к анализу наиболее простой системы – одноуровневой квантовой точки, соединенной с двумя контактами.

Согласно (1.1)–(1.4) гамильтониан системы имеет вид:

$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma} (V_g - \sigma H) n_{\sigma} + U \left( n_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left( n_{\downarrow} - \frac{1}{2} \right) - \sum_{\sigma} \left[ \left( t^L c_{L,0,\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + t^R c_{R,0,\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} \right) + \text{H.c.} \right] + \mathcal{H}_{\text{leads}}. \quad (1.81)$$

### а) Равновесный случай

Рассмотрим данную систему в равновесном режиме, когда  $\mu_{L(R)} = 0$ . Матрица ФГ  $\mathcal{G}_{0,\sigma}(i\omega)$  системы при отсутствии взаимодействия дается выражением (1.11). Подстановка  $\mathcal{G}_{0,\sigma}$  в уравнения (1.60)–(1.61) и (1.72)–(1.73) приводит к следующим РГ уравнениям для зависящего от  $\Lambda$  эффективного уровня энергии квантовой точки  $\epsilon_{\sigma}^{\text{eff},\Lambda} = V_g + \Sigma_{\sigma}^{\Lambda} - \sigma H$  и эффективного двухчастичного взаимодействия  $U^{\text{eff},\Lambda} = \mathcal{V}_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{\Lambda}$ :

$$\partial_{\Lambda} \epsilon_{\sigma}^{\text{eff},\Lambda} = \frac{1}{\pi} \frac{U^{\text{eff},\Lambda} \epsilon_{\sigma}^{\text{eff},\Lambda}}{\left( \epsilon_{\sigma}^{\text{eff},\Lambda} \right)^2 + (\Lambda + \Gamma)^2} \quad (1.82)$$

$$\partial_{\Lambda} U^{\text{eff},\Lambda} = \frac{2}{\pi} \frac{(U^{\text{eff},\Lambda})^2 \epsilon_{\uparrow}^{\text{eff},\Lambda} \epsilon_{\downarrow}^{\text{eff},\Lambda}}{\left[ \left( \epsilon_{\uparrow}^{\text{eff},\Lambda} \right)^2 + (\Lambda + \Gamma)^2 \right] \left[ \left( \epsilon_{\downarrow}^{\text{eff},\Lambda} \right)^2 + (\Lambda + \Gamma)^2 \right]} \quad (1.83)$$

при использовании резкой мультипликативной отсечки [68] и

$$\partial_{\Lambda} \epsilon_{\sigma}^{\text{eff},\Lambda} = \frac{2\Lambda (\Lambda + \Gamma)}{\pi} \frac{U^{\text{eff},\Lambda} \epsilon_{\sigma}^{\text{eff},\Lambda}}{\left[ \left( \epsilon_{\sigma}^{\text{eff},\Lambda} \right)^2 + (\Lambda + \Gamma)^2 \right]^2} \quad (1.84)$$

$$\begin{aligned} \partial_{\Lambda} U^{\text{eff},\Lambda} = & \frac{4\Lambda (\Lambda + \Gamma)}{\pi} \frac{(U^{\text{eff},\Lambda})^2 \epsilon_{\uparrow}^{\text{eff},\Lambda} \epsilon_{\downarrow}^{\text{eff},\Lambda}}{\left[ \left( \epsilon_{\uparrow}^{\text{eff},\Lambda} \right)^2 + (\Lambda + \Gamma)^2 \right] \left[ \left( \epsilon_{\downarrow}^{\text{eff},\Lambda} \right)^2 + (\Lambda + \Gamma)^2 \right]} \\ & \times \sum_{\sigma} \left( \left( \epsilon_{\sigma}^{\text{eff},\Lambda} \right)^2 + (\Lambda + \Gamma)^2 \right)^{-1} \end{aligned} \quad (1.85)$$

при отсечке Литима. В вышеприведенных уравнениях  $\bar{\sigma} = \uparrow$  ( $1/2$ ) для  $\sigma = \downarrow$  ( $-1/2$ ) и наоборот. Отметим, что СЭЧ  $\Sigma^\Lambda$  и эффективное двухчастичное взаимодействие  $U^{\text{eff},\Lambda}$  действительны в рамках рассматриваемых приближений метода функциональной РГ в случае формализма Мацубары. Это является следствием антисимметрии правых частей уравнений ренормгруппы (1.51) и (1.52) для формализма Мацубары относительно операции комплексного сопряжения. Для рассматриваемой системы РГ уравнения при отсечке методом вспомогательных резервуаров совпадают с уравнениями (1.82) и (1.83), полученными при использовании резкой схемы отсечки по частоте. Однако, это замечание не является общим и, как будет видно из дальнейшего, даже при рассмотрении одиночной квантовой точки данные схемы отсечки приводят к принципиально разным РГ уравнениям при анализе неравновесных режимов.

На рисунке 1.2 построены зависимости перенормированного уровня  $\epsilon_\sigma^{\text{eff},\Lambda=0}$  от напряжения  $V_g$  при  $U = 4\pi\Gamma$  и  $H = 0$ , полученные путем интегрирования уравнений (1.82)-(1.85) (отметим, что при  $H = 0$ :  $\epsilon_\uparrow^{\text{eff},\Lambda=0} = \epsilon_\downarrow^{\text{eff},\Lambda=0}$ ). Из рисунка 1.2 видно, что учет электрон-электронного взаимодействия  $U$  приводит к формированию плоского участка зависимости  $\epsilon_\sigma^{\text{eff},\Lambda=0}(V_g)$  в окрестности

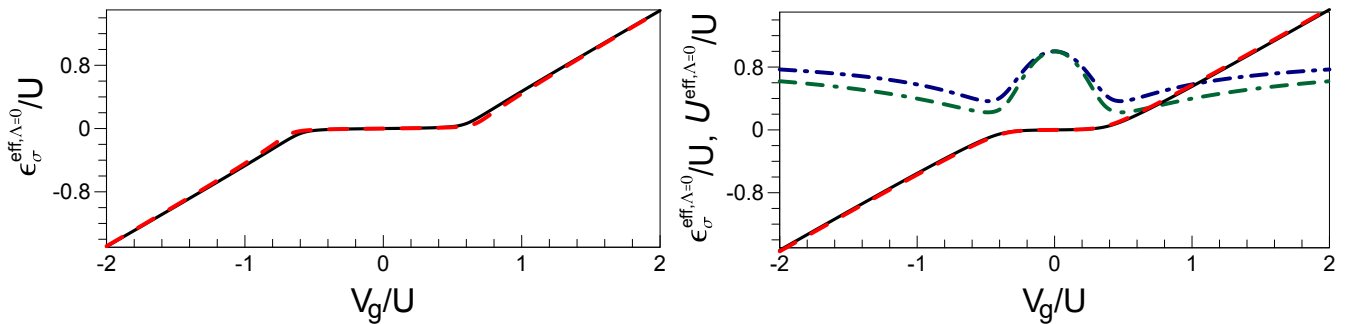


Рисунок 1.2 — Эффективные уровни энергии  $\epsilon_\sigma^{\text{eff},\Lambda=0}$  (сплошные/штриховые линии – РГ результаты для резкой/Литима схем отсечки) и перенормированное двухчастичное взаимодействие  $U^{\text{eff},\Lambda=0}$  (штрихпунктирные/штрихпунктирные с двумя пунктирами линии – РГ результаты для резкой/Литима схем отсечки) как функции запирающего напряжения  $V_g$  при  $U = 4\pi\Gamma$  и  $H = 0$ , полученные без учета (левая панель) и с учетом (правая панель) перенормировки двухчастичной вершины. Результаты для резкой схемы отсечки были получены в работе [68].

$V_g = 0$ , в пределах которого  $\epsilon_\sigma^{\text{eff}, \Lambda=0}$  удерживается почти на нулевом значении. Данное поведение связано с возникновением Кондо эффекта [12] в системе при  $U \gg \Gamma$  [68]. Из сравнения результатов, полученных в разных порядках усечения иерархии РГ уравнений, следует, что основным эффектом учета перенормировки двухчастичной вершины является сужение плоского участка рассматриваемой зависимости. Результаты разных схем отсечки практически идентичны, демонстрируя лишь небольшое количественное отличие при рассмотрении зависимости  $U^{\text{eff}, \Lambda=0}$  от  $V_g$ .

В общем виде линейная проводимость квантовомеханической системы  $G = e(dJ/dV_b)|_{V_b \rightarrow 0}$ , где  $J$  – ток, проходящий через систему, дается формулой Ландауэра [111–113]. В случае, когда система соединена с двумя электронными резервуарами, а температура  $T = 0$ , проводимость имеет вид  $G = \sum_\sigma G_\sigma$ , где  $G_\sigma$  – проводимость для электронов со спином  $\sigma$  [9; 111–113]:

$$G_\sigma = \frac{4e^2}{h} \left| \sum_{j,j'} \sqrt{\Gamma_j^R \Gamma_{j'}^L} \mathcal{G}_{j,j';\sigma}^{\Lambda \rightarrow 0}(0) \right|^2. \quad (1.86)$$

После подстановки ФГ (1.11), проводимость системы, содержащей одну квантовую точку, запишется как [68]:

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_\sigma \frac{\Gamma^2}{\left(\epsilon_\sigma^{\text{eff}, \Lambda=0}\right)^2 + \Gamma^2}. \quad (1.87)$$

При  $U = 0$  (1.87) принимает вид:  $G = (e^2/h) \sum_\sigma \Gamma^2 / \left[ (V_g + \sigma H)^2 + \Gamma^2 \right]$ , откуда видно, что при отсутствии взаимодействия проводимость как функция  $V_g$  для  $H \neq 0$  представляет собой суперпозицию двух лоренцевых кривых, смещенных по разные стороны относительно  $V_g = 0$ , и лоренцеву кривую  $G = (2e^2/h) \Gamma^2 / (V_g^2 + \Gamma^2)$ , центрированную на  $V_g = 0$  при  $H = 0$ .

На рисунке 1.3 показаны результаты для проводимости, соответствующие различным РГ схемам, а также точный результат для проводимости, полученный анзацем Бете [114]. Учет взаимодействия приводит к формированию Кондо



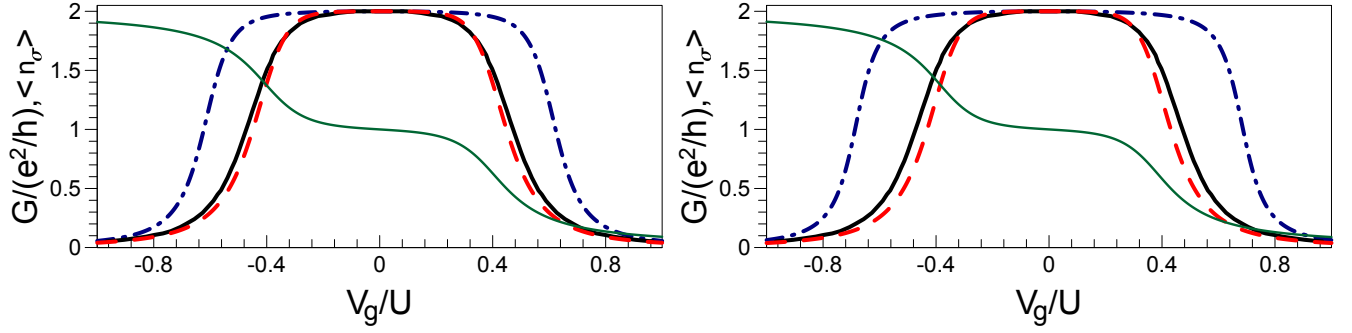


Рисунок 1.3 — Левая панель: проводимость  $G$  в РГ методе с резкой схемой отсечки без учета (синяя штрихпунктирная линия) и с учетом (красная штриховая линия) перенормировки двухчастичной вершины как функции  $V_g$ . Среднее заполнение уровня квантовой точки  $\langle n \rangle = \langle n_{\uparrow} \rangle + \langle n_{\downarrow} \rangle$  (зеленая сплошная тонкая линия) в РГ подходе с учетом перенормировки двухчастичной вершины. Проводимость  $G$  для анзаца Бете (черная сплошная жирная линия). Представленные результаты были получены в работе [68]. Правая панель: те же величины, полученные в рамках РГ подходе с отсечкой Литима. Параметры системы соответствуют рисунку 1.2.

плата проводимости в окрестности  $V_g = 0$  [68], которое является следствием об-суждаемого выше плоского участка кривой  $\epsilon_{\sigma}^{\text{eff}, \Lambda=0}(V_g)$ .

Среднее заполнение уровня квантовой точки  $\langle n \rangle = \langle n_{\uparrow} \rangle + \langle n_{\downarrow} \rangle$ , где [94;115]:

$$\langle n_{\sigma} \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega 0^+} \left[ [\mathcal{G}_{0,\sigma}^{\Lambda=0}(i\omega)]^{-1} - \Sigma_{\sigma}^{\Lambda \rightarrow 0} \right]^{-1} = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan \frac{\epsilon_{\sigma}^{\text{eff}, \Lambda=0}}{\Gamma} \quad (1.88)$$

при малых  $V_g$  фиксировано значением  $\langle n \rangle = 1$ , что отвечает половинному заполнению уровня квантовой точки (см. рисунок 1.3). РГ схемы, учитывающие перенормировку двухчастичной вершины находят хорошее количественное согласие для проводимости с точным решением во всем диапазоне запирающих напряжений. Таким образом, в равновесном случае метод функциональной ренорм-группы корректно учитывает электронные корреляции даже в режиме  $U \gg \Gamma$ .

Конечное магнитное поле  $H$  приводит к расщеплению состояний, отвечающих разным проекциям спина (см. рисунок 1.4 и рисунок 1.5). Это обуславливает подавление Кондо эффекта, что выражается в исчезновении плоского участка проводимости  $G = 2e^2/h$  с ростом поля [68] (правая панель рисунка 1.4). Наличие спинового расщепления делает более выгодным заполнение

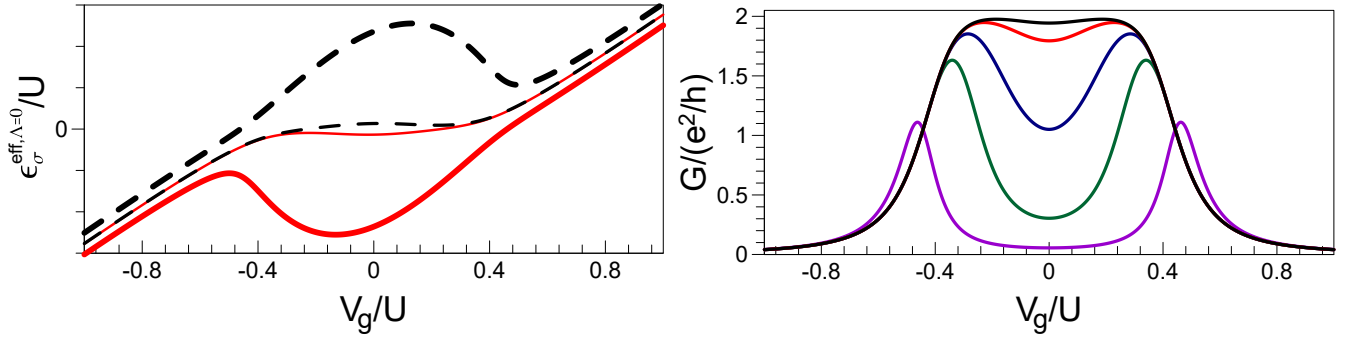


Рисунок 1.4 — Левая панель:  $\epsilon_{\uparrow}^{\text{eff}, \Lambda=0}$  (сплошные красные линии) и  $\epsilon_{\downarrow}^{\text{eff}, \Lambda=0}$  (штриховые черные линии) как функции  $V_g$  при  $U/\Gamma = 4\pi$  для  $H/U = 1 \times 10^{-2}$  (жирные линии) и  $H/U = 1 \times 10^{-3}$  (тонкие линии). Правая панель:  $G$  как функции  $V_g$  при  $U/\Gamma = 4\pi$  и магнитных полях:  $H/U = 5 \times 10^{-4}$ ,  $1 \times 10^{-3}$ ,  $3 \times 10^{-3}$ ,  $1 \times 10^{-2}$ ,  $1 \times 10^{-1}$  (от верхней кривой к нижней; приведенные зависимости соответствуют работе [68]). Для расчетов применялась РГ схема, учитывающая перенормировку двухчастичной вершины и резкая функция отсечки.

уровня с проекцией спина вдоль направления магнитного поля, приводя к разности заполнений состояний с  $\sigma = \uparrow$  и  $\sigma = \downarrow$  (см. рисунок 1.5). Как видно из рисунка 1.5, расщепление уровней и чисел заполнения в системе отсутствует в пределе  $H \rightarrow 0$ . Таким образом, хотя рассматриваемый режим отвечает слабой гибридизации квантовой точки с контактами, получаемое решение не соответствует наличию локального магнитного момента в системе. Отметим, что разные способы отсечки приводят к почти идентичным результатам.

## б) Неравновесный случай

Неравновесный режим системы задается приложением конечного напряжения смещения  $V_b$  между контактами:  $\mu_L = -\mu_R = V_b/2$ ,  $\mu_L - \mu_R = V_b$ . Рассмотрим результаты метода функциональной ренормгруппы с резкой схемой отсечки по частоте при  $H = 0$ . Подстановка функций Грина  $\mathcal{G}_{0,\sigma}^{\nu\nu'}$  (1.25) в (1.60) и (1.61) определяет явный вид РГ уравнений. В схеме усечения, пренебрегающей перенормировкой двухчастичной вершины, приходим к следующим

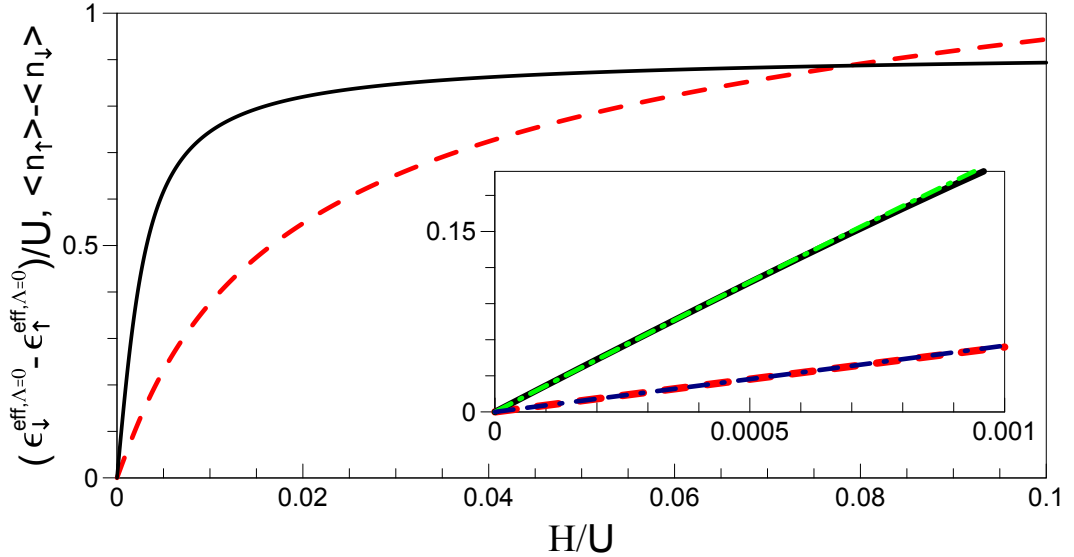


Рисунок 1.5 — Зависимость  $(\epsilon_{\downarrow}^{\text{eff}, \Lambda=0} - \epsilon_{\uparrow}^{\text{eff}, \Lambda=0})/U$  (штриховая линия) и  $(\langle n_{\uparrow} \rangle - \langle n_{\downarrow} \rangle)$  (сплошная линия) от  $H$  при  $U/\Gamma = 4\pi$  и  $V_g = 0$ . Метод расчета соответствует рисунку 1.4. Вставка: сравнение результатов, представленных на основном рисунке, с результатами РГ подхода с отсечкой Литима.

РГ уравнениям для  $\Sigma_{\sigma}^{--/++}$  [70]:

$$\begin{aligned} \partial_{\Lambda} \Sigma_{\sigma}^{--/++} = & \mp i \frac{U}{2\pi} \sum_{\omega=\pm\Lambda} \left[ \Delta_{\bar{\sigma}}(\omega) \mathcal{G}_{0, \bar{\sigma}}^{--/++}(\omega) + \Sigma_{\bar{\sigma}}^{++/--, \Lambda} \right] \\ & \times \left[ \left( \Delta_{\bar{\sigma}}(\omega) \mathcal{G}_{0, \bar{\sigma}}^{++}(\omega) + \Sigma_{\bar{\sigma}}^{--, \Lambda} \right) \left( \Delta_{\bar{\sigma}}(\omega) \mathcal{G}_{0, \bar{\sigma}}^{--}(\omega) + \Sigma_{\bar{\sigma}}^{++, \Lambda} \right) \right. \\ & \left. - \left( \Delta_{\bar{\sigma}}(\omega)^2 \mathcal{G}_{0, \bar{\sigma}}^{-+}(\omega) \mathcal{G}_{0, \bar{\sigma}}^{+-}(\omega) \right) \right]^{-1}, \quad (1.89) \end{aligned}$$

где  $\Delta_{\sigma}(\omega) = (\omega - \epsilon_{\sigma})^2 + \Gamma^2$ . В силу соотношения  $\Sigma^{++, \Lambda} = -[\Sigma^{--, \Lambda}]^{\dagger}$  [108] уравнения (1.89) не являются независимыми и достаточно рассмотреть только одно из уравнений. Переходя от  $\Sigma_{\sigma}^{--/++}$  к  $\epsilon_{\sigma}^{--/++} = \epsilon_{\sigma} \pm \Sigma_{\sigma}^{--/++}$  и учитывая явный вид функции  $\mathcal{G}_{0, \sigma}^{\nu\nu'}(\omega)$  (см. 1.25), в пределе  $V_b \rightarrow 0$ , получаем [70]:

$$\partial_{\Lambda} \epsilon_{\sigma}^{--/++} = \mp \frac{iU}{\pi} \frac{\epsilon_{\bar{\sigma}}^{--/++}}{\left( \epsilon_{\bar{\sigma}}^{--/++} \right)^2 - (\Lambda \pm i\Gamma)^2}. \quad (1.90)$$

Полученное выражение имеет структуру, отличную от РГ уравнения в формализме Мацубары (1.82). Таким образом, при использовании резкой схемы отсечки по частоте РГ метод в базисе ФГ Келдыша в равновесном пределе

не воспроизводит в точности РГ уравнения мацубаровского подхода. Как было показано в работе [70], ненулевая мнимая часть уравнения (1.90) приводит к трудностям его численного анализа. На рисунке 1.6 построены зависимости  $\epsilon_\sigma^{-,\Lambda}$  от параметра  $\Lambda$  при  $V_b \rightarrow 0$ . Видно, что в пределе  $\Lambda \rightarrow 0$  численное решение уравнения (1.90) приводит к возможности генерации мнимой части  $\epsilon_\sigma^{-,+}$ , что является артефактом резкой схемы отсечки [70]. При небольших величинах взаимодействия и запирающего напряжения (см. левую панель рисунка 1.6)  $\text{Im} \epsilon_\sigma^{-,\Lambda \rightarrow 0} \rightarrow 0$  и  $\text{Re} \epsilon_\sigma^{-,\Lambda \rightarrow 0}$  в точности воспроизводит результат РГ в формализме Мацубары:  $\text{Re} \epsilon_\sigma^{-,\Lambda \rightarrow 0} = \epsilon_\sigma^{\text{eff},\Lambda \rightarrow 0}$ . Однако, в случае относительно больших  $U$  или величин  $V_g$  (см. правую панель рисунка 1.6) мнимая часть  $\epsilon_\sigma^{-,\Lambda}$  не исчезает при  $\Lambda \rightarrow 0$  и  $\text{Re} \epsilon_\sigma^{-,\Lambda \rightarrow 0} \neq \epsilon_\sigma^{\text{eff},\Lambda \rightarrow 0}$ . Таким образом, использование резкой функции отсечки по частоте при формулировке РГ схемы в формализме Келдыша может приводить к некорректным результатам даже в равновесном пределе для широкого диапазона параметров системы. Кроме того, использование резкой схемы отсечки по частоте приводит к нарушению принципа причинности (1.80) для компонент  $\Sigma_\sigma^{\nu\nu'}$ . В частности, указанные проблемы не позволяют

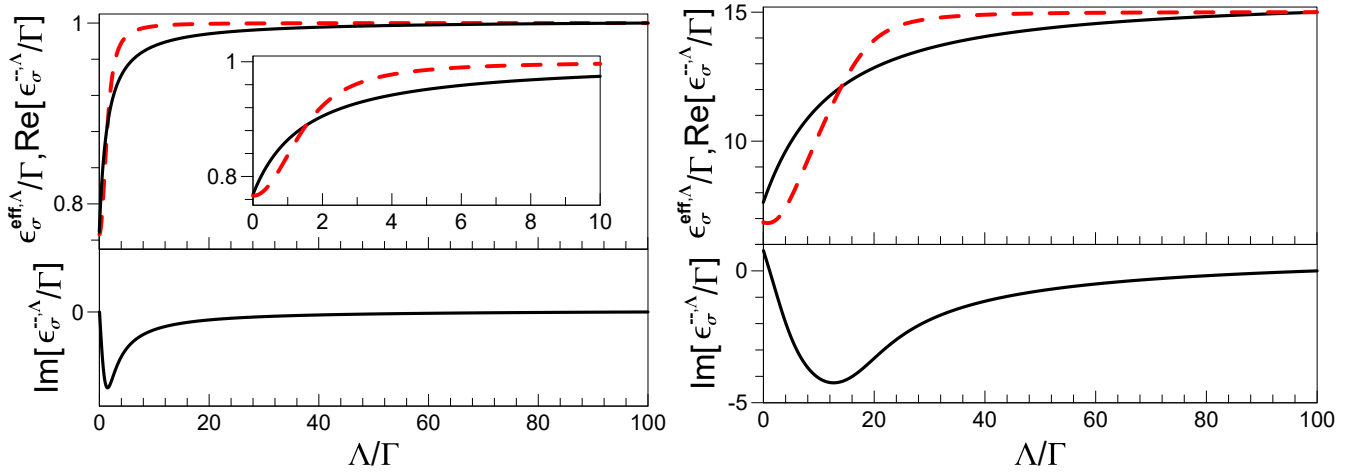


Рисунок 1.6 — Перенормировка  $\epsilon_\sigma^{\text{eff},\Lambda}$  в формализме Мацубары (черная сплошная линия на верхней панели) и  $\epsilon_\sigma^{-,\Lambda}$  в формализме Келдыша [70] (действительная часть — красная пунктирная линия, мнимая часть — черная сплошная линия на нижней панели) для  $V_b \rightarrow 0$  при  $V_g = \Gamma$ ,  $U = \Gamma$  (левая панель) и  $V_g = 15\Gamma$ ,  $U = 15\Gamma$  (правая панель). Для расчетов применялся РГ метод, не учитывающий перенормировку двухчастичной вершины, и резкая схема функции отсечки.

рассматривать величины  $\epsilon_\sigma^{- -/+ +, \Lambda \rightarrow 0}$  в качестве перенормированных уровней энергии системы.

Реализация отсечки методом вспомогательных резервуаров позволяет избежать отмеченных проблем. Данный метод в точности воспроизводит равновесный предел при использовании любой схемы усечения иерархии РГ уравнений, что гарантирует отсутствие мнимой части СЭЧ при  $V_b = 0$  [101; 107; 108]. При этом соотношение (1.80) для компонент СЭЧ выполнено при любом выборе параметров системы и величин напряжений смещения  $V_b$  [101; 108]. Рассмотрим явный вид РГ уравнений в схеме, не учитывающей перенормировку двухчастичной вершины. Подстановка (1.25) в уравнение (1.50) с учетом (1.75) и (1.77) дает:

$$\begin{aligned} \partial_\Lambda \Sigma_\sigma^{\mp\mp, \Lambda} = \mp \frac{U}{2\pi} \int d\omega \left[ \text{sign}(\omega) \mathcal{G}_\sigma^{\mp-, \Lambda}(\omega) \mathcal{G}_\sigma^{-\mp, \Lambda}(\omega) + \text{sign}(\omega) \mathcal{G}_\sigma^{\mp+, \Lambda}(\omega) \mathcal{G}_\sigma^{+\mp, \Lambda}(\omega) \right. \\ \left. + (1 - \text{sign}(\omega)) \mathcal{G}_\sigma^{\mp-, \Lambda}(\omega) \mathcal{G}_\sigma^{+\mp, \Lambda}(\omega) - (1 + \text{sign}(\omega)) \mathcal{G}_\sigma^{\mp+, \Lambda}(\omega) \mathcal{G}_\sigma^{-\mp, \Lambda}(\omega) \right], \quad (1.91) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathcal{G}_\sigma^{- -, \Lambda} & \mathcal{G}_\sigma^{- +, \Lambda} \\ \mathcal{G}_\sigma^{+ -, \Lambda} & \mathcal{G}_\sigma^{+ +, \Lambda} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} \omega - \epsilon_\sigma - \Sigma_\sigma^{- -, \Lambda} + i\tilde{Z}^\Lambda(\omega) & i(\Gamma + \Lambda) - i\tilde{Z}^\Lambda(\omega) \\ -i(\Gamma + \Lambda) - i\tilde{Z}^\Lambda(\omega) & -\Sigma_\sigma^{+ +, \Lambda} - \omega + \epsilon_\sigma + i\tilde{Z}^\Lambda(\omega) \end{pmatrix}^{-1}, \quad (1.92) \end{aligned}$$

$\tilde{Z}^\Lambda(\omega) = Z(\omega) + \Lambda \text{sign}(\omega)$ ,  $Z(\omega) = \sum_{\eta=L,R} \Gamma^\eta \text{sign}(\omega - \mu_\eta)$ . Из полученных РГ уравнений (1.91) следует соотношение (1.80) [108].

Отметим, что в рамках РГ схемы, не учитывающей перенормировку двухчастичной вершины, выполнение соотношения (1.80) приводит к вещественности  $\Sigma^{\pm\pm, \Lambda}$ . В этом случае рассматриваемая система может быть отображена на эффективную систему без взаимодействия с эффективными уровнями энергии  $\epsilon_\sigma^{\text{eff}, - -} = \epsilon_\sigma^{- -, 0} = \epsilon_\sigma + \Sigma_\sigma^{- -, 0}$ . Это остается справедливым для произвольных систем квантовых точек. Учет перенормировки двухчастичной вершины приводит к генерации недиагональных по индексам Келдыша компонент собственной

энергии  $\Sigma^{\pm\mp,\Lambda}$ , которые не могут рассматриваться как эффективные перенормированные параметры. Следовательно, указанное отображение системы, учитывающей эффекты электронных корреляций, на эффективную систему без взаимодействия не может быть построено.

В пределе  $V_b \rightarrow 0$   $\tilde{Z}^\Lambda(\omega) = (\Gamma + \Lambda) \text{sign}(\omega)$ ,  $\mathcal{G}_\sigma^{\mp\pm,\Lambda}(\omega \geq 0) = 0$  и уравнение (1.91) принимает вид:

$$\partial_\Lambda \Sigma_\sigma^{\mp\mp,\Lambda} = \frac{U}{2\pi} \left[ \pm \int_{-\infty}^0 d\omega \left( \mathcal{G}_\sigma^{\mp\mp,\Lambda}(\omega) \right)^2 \mp \int_0^{+\infty} d\omega \left( \mathcal{G}_\sigma^{\mp\mp,\Lambda}(\omega) \right)^2 \right]. \quad (1.93)$$

После подстановки  $\mathcal{G}_\sigma^{\mp\mp,\Lambda}$  (1.92) в (1.93) и интегрирования по частоте, для предела  $V_b \rightarrow 0$  окончательно имеем:

$$\partial_\Lambda \epsilon_\sigma^{\mp\mp,\Lambda} = \frac{U}{\pi} \frac{\epsilon_\sigma^{\mp\mp,\Lambda}}{\left( \epsilon_\sigma^{\mp\mp,\Lambda} \right)^2 + \left( \Gamma + \Lambda \right)^2}, \quad (1.94)$$

что совпадает с (1.82) при замене  $\epsilon_\sigma^{--,\Lambda}(-\epsilon_\sigma^{++,\Lambda})$  на  $\epsilon_\sigma^{\text{eff},\Lambda}$ .

Ток  $J$ , проходящий через одиночную квантовую точку, представим в виде  $J = \sum_\sigma J_\sigma$ , где  $J_\sigma$  – ток в спиновом канале  $\sigma$  [111;116]:

$$J_\sigma = \frac{ie}{h} \int d\omega \left[ (\Gamma^L - \Gamma^R) \mathcal{G}_\sigma^{-+,0}(\omega) + (f_L(\omega) \Gamma^L - f_R(\omega) \Gamma^R) (\mathcal{G}_\sigma^{r,0}(\omega) - \mathcal{G}_\sigma^{a,0}(\omega)) \right], \quad (1.95)$$

где  $\mathcal{G}_\sigma^{r/a,0} = \mathcal{G}_\sigma^{--,0} - \mathcal{G}_\sigma^{-+/+-,0}$  и  $f_\alpha(\omega) = [1 + e^{(\omega - \mu_\alpha)/T}]^{-1}$  – функция Ферми. Подстановка (1.92) в (1.95) при  $T = 0$  и  $\Gamma^L = \Gamma^R = \Gamma/2$  дает:

$$J = \frac{e\Gamma^2}{h} \sum_\sigma \int_{\mu_R}^{\mu_L} \frac{d\omega}{\left( \omega - \epsilon_\sigma^{--,0} \right)^2 + \Gamma^2} = \frac{e\Gamma}{h} \sum_\sigma \sum_{\kappa=\pm 1} \kappa \arctan \frac{\epsilon_\sigma^{--,0} + \kappa V_b/2}{\Gamma}. \quad (1.96)$$

Отметим, что выражение для тока (1.96) справедливо только при пренебрежении перенормировкой двухчастичной вершины.

На рисунке 1.7 представлены зависимости тока  $J$  от напряжения на контактах  $V_b$  для системы с одной квантовой точкой, полученные разными мето-

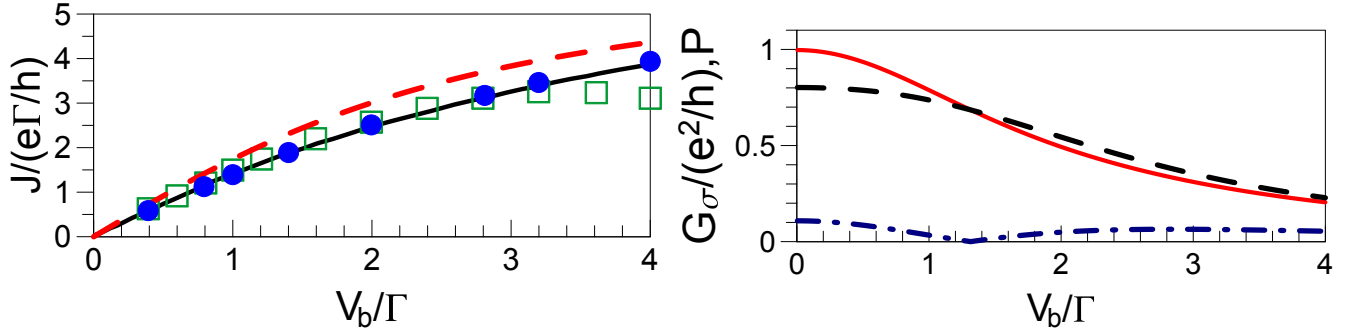


Рисунок 1.7 — Левая панель: зависимости тока  $J$  от  $V_b$  при  $\Gamma^L = \Gamma^R = \Gamma/2$ ,  $U = 2\Gamma$ ,  $V_g = 0.5\Gamma$  и  $H = 0$ , рассчитанные методами: ISPI (круглые точки), tDMRG (квадратные точки), РГ подходе с учетом (сплошная линия) и без учета (штриховая линия) перенормировки двухчастичной вершины. Правая панель: зависимость дифференциальной проводимости  $G_\sigma$  (сплошная/штриховая линия для  $\sigma = \uparrow / \downarrow$ ) и модуля спин-поляризации  $|P|$  (штрихпунктирная линия) от  $V_b$  при  $H = 0.5\Gamma$  (остальные параметры системы те же, что для левой панели), рассчитанные в РГ схеме без учета перенормировки вершины.

дами: РГ подходом с учетом (сплошная линия; данные взяты из работы [77]) и без учета (штриховая линия) перенормировки двухчастичной вершины, точным ISPI методом [51] (круглые точки; данные взяты из работы [77]) и tDMRG методом [117] (квадратные точки; данные взяты из работы [117]). Результаты всех методов, за исключением tDMRG, находятся в хорошем качественном согласии. Последний метод недооценивает величину тока при больших напряжениях, что является артефактом данного метода [77]. Видно, что РГ подход с учетом перенормировки двухчастичной вершины демонстрирует количественное согласие с результатом ISPI метода. Таким образом, РГ метод при небольших вычислительных затратах позволяет корректно проанализировать ток для системы, учитывающей эффекты электронных корреляций, даже в режиме  $V_b/\Gamma \gg 1$ , приводя к хорошему качественному или количественному согласию с результатами более сложных подходов.

Дифференциальные проводимости для разных проекций спина  $G_\sigma = e(dJ_\sigma/dV_b)$  (рисунок 1.7) даже при достаточно большом магнитном поле  $H = 0.5\Gamma \sim U$  несущественно отличны друг от друга. В частности,  $|G_\uparrow - G_\downarrow| \ll 1$  при  $V_b \gtrsim \Gamma$ . Как следствие, абсолютная величина спин-поляризации  $P =$

$|G_{\uparrow} - G_{\downarrow}| / (G_{\uparrow} + G_{\downarrow})$  (рисунок 1.7), характеризующей эффективность свойств спиновой фильтрации системы, незначительна ( $P \simeq 0.1 \ll 1$ ).

#### 1.4 Детали численной реализации метода функциональной РГ

Как видно из уравнений (1.51) и (1.52), учет электрон-электронного взаимодействия  $U$  методом функциональной ренормгруппы требует решения  $(zN)^2$  уравнений для собственно-энергетической части  $\Sigma$  и  $(zN)^4$  уравнений для двухчастичной вершины  $\mathcal{V}$ , где  $N$  – число квантовых точек в системе и  $z = 2$  ( $z = 4$ ) для формализма Мацубары (Келдыша). С математической точки зрения мы имеем задачу о решении системы  $(zN)^2 + (zN)^4$  нелинейных дифференциальных уравнений первого порядка (речь идет о схеме метода функциональной РГ, учитывающей перенормировку двухчастичной вершины). В общем случае получаемая система уравнений не может быть проинтегрирована аналитически. В данной работе для численного решения системы дифференциальных уравнений метода функциональной РГ использован метод Рунге-Кутты-Кэша-Карпа 5-го порядка порядка точности с автоматическим выбором шага [118]. Интегрирование по мацубаровским или действительным частотам в правой части уравнений (1.51) и (1.52) осуществлены путем численного интегрирования методом Гаусса [118]. Требуемые программные алгоритмы были реализованы на языке программирования Fortran-90.



## 2 Ренормгрупповой анализ электронных свойств и проводимости системы двух квантовых точек

Система двух квантовых точек, соединенных с общими контактами, является одной из наиболее простых систем, реализующих состояние сингулярной ферми-жидкости [20; 21; 119–122]. Данное состояние характеризуется возникновением в системе неэкранированного локального спинового магнитного момента  $S = 1/2$  в пределе бесконечно малого магнитного поля  $H \rightarrow 0$ . Это противоположно состоянию нормальной ферми-жидкости, которое при  $T = 0$  и  $H \rightarrow 0$  описывает парамагнитное основное состояние системы квантовых точек. К настоящему времени исследование возможности реализации состояния сингулярной ферми-жидкости в системе двух квантовых точек ограничено частным случаем полностью симметричной системы, когда связь квантовых точек с контактами характеризуется одинаковыми параметрами. Для данной конфигурации системы показано, что ключевую роль в возникновении состояния сингулярной ферми-жидкости играет так называемое антисвязывающее состояние системы. Данное состояние определяется как состояние, которое не имеет непосредственной связи с контактами. Наличие электрон-электронного взаимодействия и антисвязывающего состояния в симметричной системе квантовых точек приводит к возможности квантового фазового перехода между состояниями нормальной и сингулярной ферми жидкости. Квантовый фазовый переход – фазовый переход, который имеет место при нулевой температуре. В отличие от классических фазовых переходов при конечной температуре, при квантовом фазовом переходе тепловые флуктуации отсутствуют и фазовый переход возникает вследствие квантовых флуктуаций. В свою очередь, приближение к фазовой границе управляется не температурой, а параметрами системы. Для рассматриваемой системы двух квантовых точек в качестве такого параметра выбиралось внешнее запирающее напряжение  $V_g$ , приложенное к квантовым точкам [20; 21]. Состояние регулярной ферми-жидкости является основным при напряжениях  $|V_g| > V_g^c$ , в то время как в интервале  $|V_g| < V_g^c$  реализуется состояние сингулярной ферми-жидкости [21]. Напряжение  $V_g^c$  определяет точ-

ку квантового фазового перехода. В состоянии сингулярной ферми-жидкости заполнения электронных состояний перераспределяются таким образом, что антисвязывающее состояние заселено ровно одним электроном. Это приводит к возникновению локального магнитного момента в системе на данном состоянии. Как показано в работе [20], квантовый фазовый переход в данной системе сопровождается скачком линейной проводимости и среднего числа электронов в системе, а также сменой знака спин-спиновой корреляционной функции в точке фазового перехода.

В данной главе метод функциональной ренормгруппы применяется для исследования равновесных свойств системы двух квантовых точек. Будет показано, что в силу расходимости вершин электрон-электронного взаимодействия, имеющиеся к настоящему моменту подходы метода функциональной ренормгруппы не позволяют исследовать состояние сингулярной ферми-жидкости. Для устранения указанного недостатка предложена модификация метода функциональной ренормгруппы, заключающаяся во включении вспомогательного магнитного поля в ренормгрупповой поток. Показано, что предложенная схема позволяет продолжить ренормгрупповой поток в фазу сингулярной ферми-жидкости и корректно описать возникновение локального магнитного момента и электронный транспорт системы. Данная схема будет применена к исследованию ранее не рассмотренных эффектов асимметрии параметров перескока между квантовыми точками и контактами. В частности, для всевозможных типов асимметрии параметров перескока будет рассмотрена возможность и особенности квантовых фазовых переходов в состоянии с локальным магнитным моментом в системе и установим их связь с линейной проводимостью.

## 2.1 Модель и детали расчетов

Рассматриваемая система состоит из двух квантовых точек QD1 и QD2, каждая из которых соединена с левым (L) и правым (R) макроскопическими контактами, как показано на рисунке 2.1. Гамильтониан (1.1) системы в этом

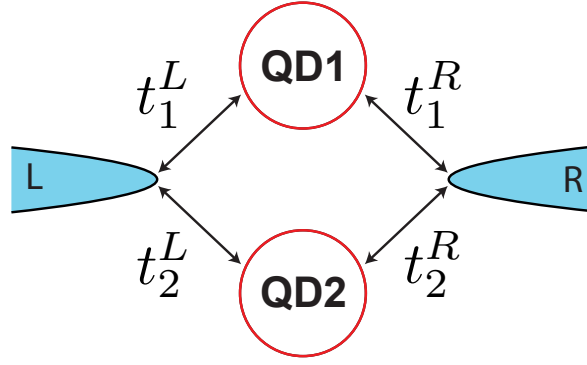


Рисунок 2.1 — Схематическое представление системы двух квантовых точек QD1 и QD2, соединенных с левым (L) и правым (R) контактами.

случае имеет вид:

$$\mathcal{H} = \underbrace{\sum_{\sigma} \sum_{j=1}^2 \epsilon_{\sigma} n_{j,\sigma} + \sum_{j=1}^2 U \left( n_{j,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left( n_{j,\downarrow} - \frac{1}{2} \right)}_{\mathcal{H}_{\text{dots}}} - \underbrace{\sum_{\alpha=L,R} \sum_j \sum_{\sigma} (t_j^{\alpha} c_{\alpha,0,\sigma}^{\dagger} d_{j,\sigma} + \text{H.c.})}_{\mathcal{H}_{\text{coupl}}} + \mathcal{H}_{\text{leads}}, \quad (2.1)$$

где (см. раздел 1.1) операторы  $d_{j,\sigma}^{\{\dagger\}}$  ( $c_{\alpha,0,\sigma}^{\{\dagger\}}$ ) описывают уничтожение {рождение} электрона на квантовых точках (контактах),  $n_{j,\sigma} = d_{j,\sigma}^{\dagger} d_{j,\sigma}$ ,  $U$  – параметр локального кулоновского взаимодействия,  $t_j^{\alpha}$  – параметр перескока между контактом  $\alpha$  ( $\alpha = L, R$ ) и  $j$ -й ( $j = 1, 2$ ) квантовой точкой. Положение уровней энергии квантовых точек может быть изменено посредством приложения запирающего напряжения  $V_g$  или внешнего магнитного поля  $H$ :  $\epsilon_{\sigma} = V_g - \sigma H$ ,  $\sigma = \pm 1/2$ . В выражении (2.1)  $\mathcal{H}_{\text{leads}}$  представляет собой гамильтониан макроскопических контактов и определяется выражением (1.3). Данная глава ограничена рассмотрением только равновесного режима системы, когда химические потенциалы контактов  $\mu_{L(R)}$ , входящие в гамильтониан  $\mathcal{H}_{\text{lead}}$ , равны:  $\mu_{L(R)} = \epsilon_F = 0$ .

Для учета электрон-электронного взаимодействия  $U$  методом функциональной ренормгруппы (РГ) требуется задание «затравочной» мацубаровской функции Грина  $\mathcal{G}_0(i\omega)$ , отвечающей гамильтониану (2.1) с  $U = 0$ . Согласно

выражению (1.10), функция Грина  $\mathcal{G}_0(i\omega)$  имеет вид [68]:

$$\mathcal{G}_{0,\sigma}(i\omega) = \left[ (i\omega - \epsilon_\sigma) \mathbf{I}_2 + i \begin{pmatrix} \Gamma_1^L + \Gamma_1^R & \Gamma_{12} \\ \Gamma_{12} & \Gamma_2^L + \Gamma_2^R \end{pmatrix} \text{sign}(\omega) \right]^{-1}, \quad (2.2)$$

где  $\Gamma_{12} = \sum_\alpha \sqrt{\Gamma_1^\alpha \Gamma_2^\alpha}$ ,  $\Gamma_j^\alpha \equiv \Gamma_{jj}^\alpha = \pi |t_j^\alpha|^2 \rho_{\text{lead}}(0)$  – параметры гибридизации,  $\rho_{\text{lead}}(\omega)$  – локальная плотность состояний на последнем узле контакта и  $\mathbf{I}_2$  – единичная матрица размерности  $2 \times 2$ .

При расчетах используется схема усечения иерархии РГ уравнений второго порядка (см. раздел 1.2.2) и различные схемы отсечки, которые модифицируют  $\mathcal{G}_{0,\sigma}(i\omega)$  до зависящего от масштаба  $\Lambda$  пропагатора  $\mathcal{G}_{0,\sigma}^\Lambda(i\omega)$  (см. раздел 1.2.3).

Функция Грина  $\mathcal{G}_\sigma^{\Lambda=0}(i\omega) = [\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(i\omega) - \Sigma_\sigma^{\Lambda=0}]^{-1}$ , полученная в конце РГ потока (при  $\Lambda = 0$ ;  $\mathcal{G}_{0,\sigma}^{\Lambda=0} = \mathcal{G}_{0,\sigma}$ ), где собственно-энергетическая часть (СЭЧ)  $\Sigma_\sigma^{\Lambda=0}$  определяется путем решения РГ уравнений, запишется как:

$$\mathcal{G}_\sigma^{\Lambda=0}(i\omega) = \begin{pmatrix} i\omega - \tilde{\epsilon}_{1,\sigma} + i(\Gamma_1^L + \Gamma_1^R) \text{sign}(\omega) & \tilde{t}_{12}^\sigma + i\Gamma_{12} \text{sign}(\omega) \\ \tilde{t}_{21}^\sigma + i\Gamma_{12} \text{sign}(\omega) & i\omega - \tilde{\epsilon}_{2,\sigma} + i(\Gamma_2^L + \Gamma_2^R) \text{sign}(\omega) \end{pmatrix}^{-1}, \quad (2.3)$$

где определены величины  $\tilde{\epsilon}_{j,\sigma} = \epsilon_\sigma + \Sigma_{jj,\sigma}^{\Lambda=0}$  и  $\tilde{t}_{12(21)}^\sigma = -\Sigma_{12(21),\sigma}^{\Lambda=0}$  ( $\tilde{t}_{12}^\sigma = \tilde{t}_{21}^\sigma$ ).

Поскольку для используемых РГ схем  $\Sigma^\Lambda$  при произвольном масштабе  $\Lambda$  не зависит от частоты  $\omega$ , функции Грина (2.3) может быть сопоставлена эффективная система двух квантовых точек с гамильтонианом:

$$\mathcal{H}^{\text{eff}} = \mathcal{H}_{\text{dots}}^{\text{eff}} + \mathcal{H}_{\text{coupl}} + \mathcal{H}_{\text{leads}}, \quad (2.4)$$

в котором подсистема квантовых точек определяется эффективным гамильтонианом  $\mathcal{H}_{\text{dots}}^{\text{eff}}$ :

$$\mathcal{H}_{\text{dots}}^{\text{eff}} = \sum_{j,\sigma} \tilde{\epsilon}_{j,\sigma} n_{j,\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{j \neq j', \sigma} \left( \tilde{t}_{jj'}^\sigma d_{j,\sigma}^\dagger d_{j',\sigma} + \text{H.c.} \right). \quad (2.5)$$

Видно, что  $\mathcal{H}_{\text{dots}}^{\text{eff}}$  содержит только квадратичные по операторам рождения и уничтожения электронов на квантовых точках вклады и, следовательно, опи-

сывает эффективную систему без взаимодействия, которая может быть сопоставлена исходной системе. Параметры  $\tilde{\epsilon}_{1(2),\sigma}$  и  $\tilde{t}_{12(21)}^\sigma$  могут рассматриваться как эффективные перенормированные уровни энергии и эффективные матричные элементы перескока, которые зависят от величины электрон-электронного взаимодействия  $U$ , поскольку явно определены через СЭЧ  $\Sigma_\sigma^{\Lambda=0}$ . Отметим, что в рассматриваемой модели (2.1) параметр перескока  $t_{12}$  между квантовыми точками QD1 и QD2 не учитывается, однако, учет электронных корреляций приводит к возможности генерации эффективного перескока  $\tilde{t}_{12(21)}^\sigma$ , что, как будет показано далее, может приводить к нетривиальным эффектам.

## 2.2 Ренормгрупповой анализ симметричной системы

### 2.2.1 Результаты «стандартных» РГ схем

Рассмотрим результаты наиболее часто используемых («стандартных») схем метода функциональной ренормгруппы в случае, когда квантовые точки связаны с контактами симметричным (изотропным) образом, т.е.  $t_j^\alpha = t$  для  $j = 1, 2$  и  $\alpha = L, R$ . В данной геометрии система двух квантовых точек уже изучалась ранее методом численной ренормализационной группы (NRG) [20; 21]. В частности, было показано [20], что вблизи половинного заполнения в пределе бесконечно малого магнитного поля  $H \rightarrow 0$  линейная проводимость  $G$  системы близка к максимально возможному значению  $G_{\max} = 2e^2/h$ . Данное поведение проводимости является одним из индикаторов возникновения фазы сингулярной ферми-жидкости в системе. При этом проводимость  $G = G_{\max}$  достигается при напряжении  $V_g = 0$ , которое соответствует половинному заполнению системы. Ниже будет показано, что данный результат для проводимости не может быть получен в рамках «стандартных» ренормгрупповых подходов, что является отражением общей проблемы неприменимости данных подходов при описании фазы сингулярной ферми-жидкости.

При произвольной гибридизации квантовых точек с контактами линейная проводимость  $G$  при нулевой температуре имеет вид [68]  $G = \sum_\sigma G_\sigma$ , где

$G_\sigma$  представляет проводимость для электронов с проекцией спина  $\sigma$  и дается выражением (1.86). Учитывая, что для рассматриваемого случая  $\Gamma_j^\alpha = \Gamma$  ( $\Gamma = \pi|t|^2\rho_{\text{lead}}(0)$ ), подстановка функции Грина (2.3) в (1.86) дает:

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_{\sigma} \frac{16\Gamma^2}{(\tilde{\epsilon}_\sigma - \tilde{t}_{12}^\sigma)^2 + 16\Gamma^2}, \quad (2.6)$$

где мы учли, что в силу симметрии системы  $\tilde{\epsilon}_{1(2),\sigma} = \tilde{\epsilon}_\sigma$ .

Проанализируем результаты для проводимости  $G$  как функции магнитного поля  $H$  при  $V_g = 0$  и  $U = 4\Gamma$ , представленные на рисунке 2.2, которые получены методом функциональной ренормгруппы при использовании резкой схемы отсечки (1.58). Данная схема отсечки используется в большинстве имеющих работ, посвященных исследованию равновесных свойств систем квантовых точек при нулевой температуре методом функциональной ренормгруппы. На рисунке 2.2 также представлен результат расчета зависимости  $G(H)$  методом NRG. В данном разделе для расчетов проводимости методом NRG использовался программный код «NRG Budapest code», предложенный в работе [123]. Проводимость системы в рамках NRG расчетов вычислялась согласно процедуре сформулированной в работе [124]. Как видно из рисунка 2.2, кривая  $G(H)$ , рассчитанная методом функциональной ренормгруппы с резкой отсечкой (штриховая линия), меняет характер монотонности при некотором критическом магнитном поле  $H_c$ , резко убывая при  $H < H_c$ . Данный результат качественно отличен от поведения  $G(H)$ , полученной методом NRG (сплошная черная линия на рисунке 2.2), которая демонстрирует монотонный рост до  $G = G_{\text{max}}$  при уменьшении  $H$ . Наблюдаемое рассогласование результатов связано с нефизическим поведением вершин электрон-электронного взаимодействия, рассчитываемых РГ методом, которые при  $H < H_c$  сначала сходятся к некоторому конечному, но нефизически большому значению, и расходятся на конечных масштабах  $\Lambda$  в области малых магнитных полей. В частности, это видно из поведения зависящих от масштаба уровней квантовых точек  $\tilde{\epsilon}_\sigma^\Lambda = \epsilon_\sigma + \Sigma_{11(22),\sigma}^\Lambda$  (в силу симметрии системы  $\Sigma_{11,\sigma}^\Lambda = \Sigma_{22,\sigma}^\Lambda$ ) при  $\Lambda \rightarrow 0$ , построенных на рисунке 2.2 (правая панель). Для достаточно большого поля  $H$  (например,  $H = 0.1U$ ) метод

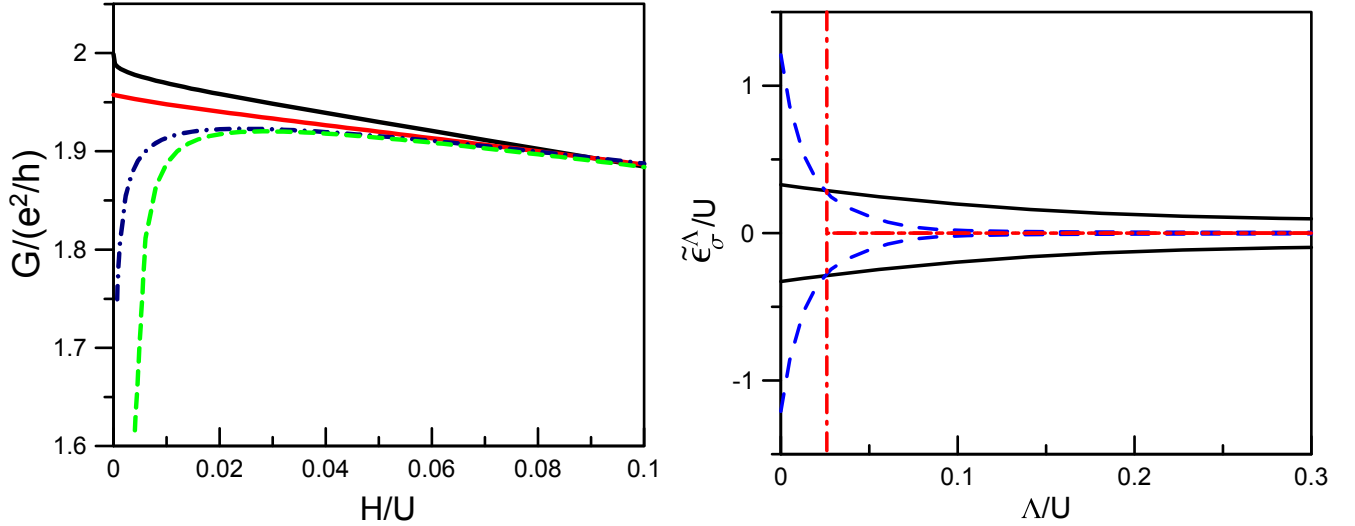


Рисунок 2.2 — Левая панель: результаты метода функциональной ренормгруппы при резкой/Литима схемах отсечки (штриховая зеленая/штрихпунктирная синяя линия) и NRG метода (сплошная черная верхняя линия) для зависимости  $G(H)$  при  $\Gamma = U/4$  и  $V_g = 0$ . Сплошная красная линия — зависимость  $G(H)$ , полученная методом функциональной ренормгруппы с контрчленом  $\sigma \mathbf{I}_2 \chi_1^\Lambda$  ( $\tilde{H}/U = 0.1$ ,  $\Lambda_c/U = 0.05$ ; см. (2.9)). Правая панель:  $\tilde{\epsilon}_\uparrow^\Lambda$  (нижние кривые) и  $\tilde{\epsilon}_\downarrow^\Lambda$  (верхние кривые) как функции  $\Lambda$  при  $H = 0.1U$  (сплошные линии),  $H = 0.005U$  (штриховые линии) и  $H = 0$  (штрихпунктирные линии). Остальные параметры соответствуют левой панели рисунка 2.2.

ренормгруппы приводит к конечным значениям перенормированных уровней  $\tilde{\epsilon}_\sigma = \tilde{\epsilon}_\sigma^{\Lambda=0}$ , которые демонстрируют некоторое усиление «затравочного» спинового расщепления. В этом случае подстановка перенормированных параметров  $\tilde{\epsilon}_\sigma$  и  $\tilde{t}_{12}^\sigma$  в (2.6) приводит к проводимости  $G$ , которая находит количественное согласие с NRG данными (см. левую панель рисунка 2.2). При  $H = 0$  мы обнаруживаем расходимость  $\tilde{\epsilon}_\sigma^\Lambda$  (и  $\tilde{t}_{12}^\sigma$ ,  $|\tilde{\epsilon}_\sigma^\Lambda - \tilde{t}_{12}^\sigma|$ ) при конечном  $\Lambda$  (см. штрихпунктирную линию на правой панели рисунка 2.2), связанную с расходимостью СЭЧ. Формально, согласно выражению (2.6), это приводит к исчезновению проводимости для  $V_g = H = 0$ , что противоположно результату  $G = G_{\max}$  NRG метода. Для  $H \lesssim H_c$  сходимость в пределе  $\Lambda \rightarrow 0$  достигается (см. случай  $H = 0.005U$  на рисунке 2.2), однако величина расщепления уровней переоценена, что приводит к падению проводимости. Отметим, что тенденция к усилению спинового расщепления уровней при учете электронных корреляций сохраняется в

пределе  $H \rightarrow 0$ , однако, как видно из приведенного выше анализа, не может быть корректно описана ренормгрупповым методом с резкой схемой отсечки при  $H \lesssim H_c$ .

Использование отсечки Литима (1.64) позволяет описать область более малых магнитных полей и приводит к проводимости (штрихпунктирная линия на рисунке 2.2), которая демонстрирует несколько лучшее согласие с NRG результатами. Однако, несмотря на данное преимущество, корректное описание проводимости системы для малых полей  $H$  в ренормгрупповом подходе с отсечкой Литима недостижимо, что, как и для резкой схемы отсечки, связано с нефизическим поведением перенормированных вершин.

Отмеченная проблема возникает не только при напряжении  $V_g = 0$ , соответствующем половинному заполнению системы, но и при  $|V_g| \lesssim V_g^c$ , где  $V_g^c$  – критическое значение запирающего напряжения, зависящее от параметров системы. Предыдущий анализ [20; 21] системы двух квантовых точек NRG методом продемонстрировал, что при  $H \rightarrow 0$  в окрестности половинного заполнения система находится в состоянии сингулярной ферми-жидкости, которое характеризуется наличием локального магнитного момента в системе. На рисунке 2.3 приведена фазовая диаграмма системы двух квантовых точек, полученная NRG методом в работе [21]. Видно, что при любой величине параметра  $U$  существует диапазон напряжений  $|V_g| < V_g^{pt}(U)$ , отвечающий фазе сингулярной ферми-жидкости системы, где  $V_g^{pt}$  – напряжение, при котором система испытывает квантовый фазовый переход. Область значений  $(U, V_g)$ , которая соответствует расходимости вершин взаимодействия в методе ренормгруппы (заштрихованная область на рисунке 2.3) почти соответствует области стабильности фазы сингулярной ферми-жидкости. Принимая во внимание существование нефизической сходимости вершин указанных РГ схем в узкой окрестности  $V_g^c$ , рассмотренные области фактически идентичны и  $V_g^c$  можно отождествить с точкой квантового фазового перехода  $V_g^{pt}$ . Аналогичный результат получается для отсечек Литима и метода вспомогательных резервуаров. Это позволяет заключить, что случаи, когда «стандартные» ренормгрупповые подходы оказываются неприменимы, соответствуют фазе сингулярной ферми-жидкости системы.



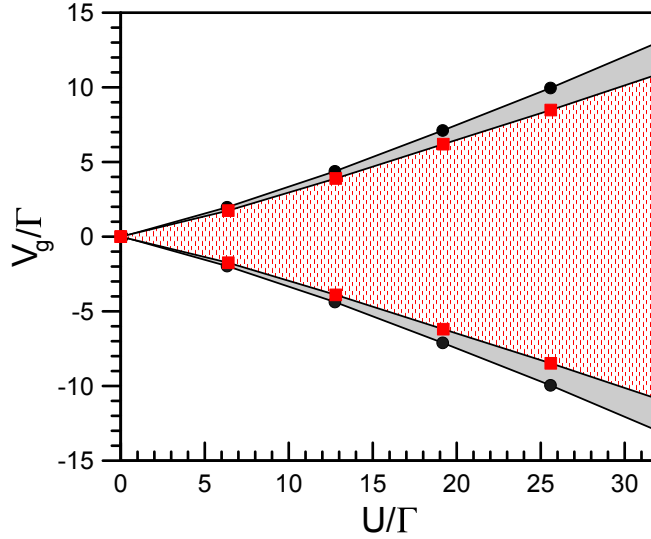


Рисунок 2.3 — Фазовая диаграмма в координатах  $U - V_g$ , полученная NRG методом [21] (затемненная область, ограниченная круглыми черными точками соответствует фазе сингулярной ферми-жидкости), и область расходимости вершин электрон-электронного взаимодействия в методе функциональной ренормгруппы с резкой схемой отсечки (заштрихованная область, ограниченная красными точками). Результаты NRG расчетов фазовой диаграммы были получены в работе [21].

В фазе сингулярной ферми-жидкости система квантовых точек имеет неэкранированный локальный спиновый магнитный момент  $S = 1/2$  [20]. Соответственно, в данном состоянии даже в пределе бесконечно малого магнитного поля должен реализовываться дисбаланс средних чисел заполнения  $\langle n_{j,\sigma} \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega 0^+} [\mathcal{G}_\sigma^{\Lambda=0}(i\omega)]_{jj}$ , при котором  $\sum_j (\langle n_{j,\uparrow} \rangle - \langle n_{j,\downarrow} \rangle) = 1$ . Для ренормгруппового подхода реализация данной ситуации требует наличия существенного спинового расщепления перенормированных уровней квантовых точек, которое имеет место в том числе и при  $H \rightarrow 0$ . Как было показано выше, при  $H > H_c$  удастся достичь предела  $\Lambda \rightarrow 0$  и получить спин-расщепленные решения, которые корректно описывают проводимость системы. В то же время, для  $H < H_c$  несмотря на наличие тенденции к спиновому расщеплению энергетических состояний, малое поле  $H$  не позволяет избежать расходимости ренормгруппового потока на малых масштабах  $\Lambda$  и достичь конечного физического расщепления при  $\Lambda = 0$ . Ниже будет представлена модификация метода функциональной ренормгруппы, которая позволяет решить указанную пробле-

му «стандартных» РГ схем и корректно описать состояние сингулярной ферми-жидкости.

### 2.2.2 Метод функциональной ренормгруппы с контрчленом

Рассмотренные в предыдущем разделе схемы метода функциональной ренормгруппы устанавливали связь между начальным состоянием системы при отсутствии электронных корреляций  $|\text{QD}\rangle^{U=0}$  и состоянием с учетом электронных корреляций  $|\text{QD}\rangle^{U\neq 0}$ . Состояние  $|\text{QD}\rangle^{U=0}$  определялось гамильтонианом системы (2.1) при  $U = 0$ , т.е. отвечало «физическому» состоянию системы квантовых точек при отсутствии электрон-электронного взаимодействия. Данное соответствие между начальным и конечным состояниями фактически предполагает, что в конце ренормгруппового потока мы приходим в состояние нормальной ферми-жидкости. В частности, что состояние  $|\text{QD}\rangle^{U\neq 0}$  в нулевом магнитном поле достигается из  $|\text{QD}\rangle^{U=0}$ , заданного при  $H = 0$ . Для получения интересующего нас состояния сингулярной ферми жидкости системы, которое связано с возникновением спинового расщепления энергетических состояний, спиновая симметрия конечного состояния должна быть определена в начале ренормгруппового потока (при  $\Lambda = \Lambda_{\text{ini}}$ ). Другими словами, ренормгрупповой поток должен начинаться в состоянии, которое отвечает невзаимодействующей системе в конечном не малом ( $H \gtrsim H_c$ ) магнитном поле.

Произвол выбора стартового состояния системы позволяет интерполировать между состоянием системы при  $U = 0$  в магнитном поле  $H^\Lambda = \Lambda_{\text{ini}} = H + \tilde{H}$  ( $\tilde{H} \neq 0$ ) и состоянием при  $U \neq 0$  в физическом поле  $H^\Lambda = 0 = H$  (включая случай  $H \rightarrow 0$ ), где  $\tilde{H}$  – дополнительное к  $H$  («вспомогательное») магнитное поле. Для организации такого процесса необходимо реализовать выключение вспомогательного магнитного поля  $\tilde{H}$  при  $\Lambda \rightarrow 0$  за счет выбора подходящей функции  $H^\Lambda = H(\Lambda)$ . В силу произвола функции  $H^\Lambda$  в оставшейся области изменения  $\Lambda$  она может быть сконструирована так, чтобы на масштабе, соответствующем началу непропорционального полю  $H$  спинового расщепления состояний,  $H^\Lambda$  было больше критического поля  $H_c$ . Как будет показано ниже, данный метод

позволяет продолжить РГ поток в спин-расщепленную фазу и достичь предела  $\Lambda \rightarrow 0$ , при котором получаемое состояние описывает фазу сингулярной ферми-жидкости системы.

Технически, описанная выше схема может быть реализована путем включения в обратный затравочный пропагатор системы дополнительного слагаемого  $\sigma \mathbf{I}_2 \chi^\Lambda \equiv \sigma \mathbf{I}_2 (H^\Lambda - H)$  – контрчлена:

$$\tilde{\mathcal{G}}_{0,\sigma}^\Lambda = \left\{ [\mathcal{G}_{0,\sigma}^\Lambda]^{-1} + \sigma \mathbf{I}_2 \chi^\Lambda \right\}^{-1}, \quad (2.7)$$

где  $\chi^\Lambda$  удовлетворяет условиям:

$$\begin{cases} \chi^{\Lambda=\Lambda_{\text{ini}} \rightarrow \infty} = \tilde{H}, \\ \chi^{\Lambda=\Lambda_{\text{fin}} \rightarrow 0} = 0. \end{cases} \quad (2.8)$$

Выражение (2.7) позволяет трактовать  $\chi^\Lambda$  как зависящее от масштаба  $\Lambda$  вспомогательное магнитное поле. Поскольку никаких дополнительных условий, кроме (2.8), и физического требования непрерывности на функцию  $\chi^\Lambda$  не накладывается, ее выбор неоднозначен. Наиболее простой вариант состоит в использовании линейной:

$$\chi_1^\Lambda = \tilde{H} \min(1, \Lambda/\Lambda_c) \quad (2.9)$$

или экспоненциальной:

$$\chi_2^\Lambda = \frac{\tilde{H}}{1 + \exp[(\Lambda_c - \Lambda)/\Lambda_0]} \quad (2.10)$$

зависимости  $\chi^\Lambda$  от  $\Lambda$ . Как будет видно из дальнейшего, конкретный вид функции  $\chi^\Lambda$  не влияет на получаемый при  $\Lambda \rightarrow 0$  результат. В выражениях (2.9) и (2.10)  $\Lambda_c$  и  $\Lambda_0$  ( $\Lambda_0 \ll \Lambda_c$ ) являются независимыми параметрами, определяющими масштаб и скорость выключения вспомогательного поля  $\tilde{H}$ . В дальнейшем параметр  $\Lambda_c$  выбирается приблизительно равным величине масштаба, соответствующего началу расщепления энергий состояний, отвечающих разным проекциям спина. Значение параметра  $\Lambda_0$  выбирается в соответствии с полем

контрчлена  $\tilde{H}$ . Его выбор должен обеспечивать медленное выключение поля  $\tilde{H}$ , и в то же время, не должен приводить к слишком быстрому выключению контрчлена при больших значениях  $\tilde{H}$ . В остальных отношениях выбор этих параметров достаточно произволен.

На рисунке 2.2 (левая панель) приведен результат расчета проводимости методом функциональной ренормгруппы с использованием контрчлена  $\sigma \mathbf{I}_2 \chi_1^\Lambda$  (сплошная красная линия). Видно, что предложенная модификация метода функциональной ренормгруппы приводит к корректному поведению проводимости в области малых магнитных полей. Как будет показано далее, это связано с тем, что использование техники включения контрчлена в ренормгрупповой поток устраняет нефизическое поведение вершин электрон-электронного взаимодействия и эффективные параметры системы имеют конечные физические значения даже в пределе  $H \rightarrow 0$ . Несмотря на небольшое отличие полученных для проводимости результатов от NRG расчетов, мы имеем  $G_\sigma(H=0)|_{V_g=0} \approx 0.98e^2/h$  для проводимости на одну проекцию спина в РГ методе с контрчленом, что почти соответствует унитарному пределу проводимости. Полученный результат устойчив относительно выбора вида контрчлена и значений параметров  $\Lambda_c$ ,  $\tilde{H}$ ,  $\Lambda_0$ . Рисунок 2.4 демонстрирует зависимость  $\tilde{\epsilon}_\sigma^\Lambda$  от параметра  $\Lambda$  при различных способах включения контрчлена. Видно, что значения перенормированных уровней квантовых точек  $\tilde{\epsilon}_{1(2),\sigma} = \tilde{\epsilon}_\sigma$ , получаемые при  $\Lambda = 0$  ( $\tilde{\epsilon}_\sigma = \tilde{\epsilon}_\sigma^{\Lambda=0}$ ), не изменяются при произвольном выборе контрчлена.

Продemonстрируем, что предложенный подход действительно описывает состояние сингулярной ферми-жидкости, которое для рассматриваемой системы реализуется при  $|V_g| < V_g^c$ , где напряжение  $V_g^c$  соответствует точке квантового фазового перехода первого рода. Покажем, что в отличие от «парамагнитного» состояния нормальной ферми-жидкости, которое является основным состоянием системы при  $|V_g| > V_g^c$ , в диапазоне напряжений  $|V_g| < V_g^c$  система демонстрирует наличие локального магнитного момента.

Рассмотрим результаты метода функциональной ренормгруппы с контрчленом в пределе нулевого магнитного поля. Как видно из рисунка 2.5а, в интервале напряжений  $|V_g| < V_g^c$  эффективные уровни энергии  $\tilde{\epsilon}_{j,\sigma}$  и пара-

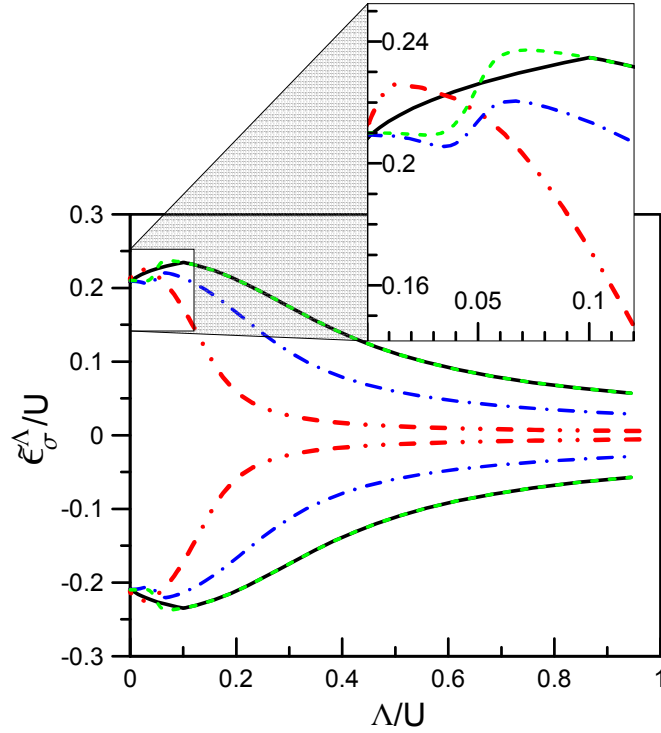


Рисунок 2.4 — Зависимость  $\tilde{\epsilon}_\sigma^\Lambda = \tilde{\epsilon}_{1(2),\sigma}^\Lambda$  от  $\Lambda$  для  $\sigma = \uparrow$  (нижние кривые) и  $\sigma = \downarrow$  (верхние кривые) при  $\Gamma = U/4$  и  $H = V_g = 0$ , рассчитанная методом функциональной ренормгруппы с контрчленом при линейно зависящем от  $\Lambda$  контрчлене  $\sigma \mathbf{I}_2 \chi_1^\Lambda$  ( $\Lambda_c = \tilde{H}/2$ ; сплошные и штрихпунктирные с двумя точками линии для  $\tilde{H} = 0.2U$  и  $\tilde{H} = 0.02U$ ) и при экспоненциально зависящем от  $\Lambda$  контрчлене  $\sigma \mathbf{I}_2 \chi_2^\Lambda$  ( $\Lambda_c = 10\Lambda_0 = 0.05U$ ; штриховые и штрихпунктирные линии для  $\tilde{H} = 0.2U$  и  $\tilde{H} = 0.1U$ ).

метры перескока  $\tilde{t}_{12}^\sigma$  демонстрируют конечное расщепление по спину. Это обуславливает существенное отличие средних чисел заполнения состояний  $\langle n_{j,\sigma} \rangle$  (рисунок 2.5b) для разных проекций спина при  $|V_g| < V_g^c$ . В данном интервале напряжения  $V_g = 0$ , которое, как видно из рисунка 2.5d, отвечает половинному заполнению системы  $\langle n \rangle = \sum_{j,\sigma} \langle n_{j,\sigma} \rangle = 2$ , заполнение состояний с  $\sigma = \uparrow$  энергетически более выгодно. Указанный дисбаланс чисел заполнения приводит к конечной величине среднего значения оператора спина вдоль направления поля  $H$  (среднего значения  $z$ -компоненты оператора спина)  $\langle S^z \rangle / S = \sum_j (\langle n_{j,\uparrow} \rangle - \langle n_{j,\downarrow} \rangle) / 2S \approx 1$ , что свидетельствует о наличии магнитного момента в системе. Отметим, что в узкой окрестности напряжений  $\pm V_g^c$  (заштрихованные области на рисунке 2.5a) рассматриваемый метод переоценивает величину перенормировки вершин электрон-электронного взаимодействия. Это

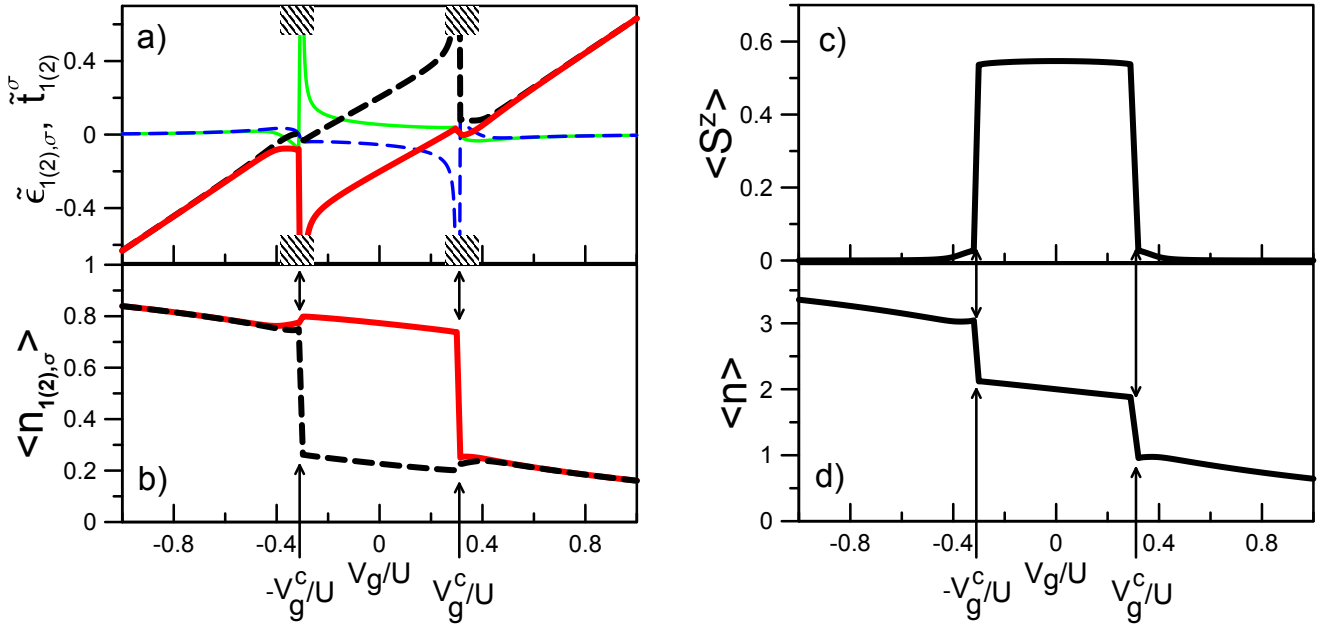


Рисунок 2.5 — Результаты метода функциональной ренормгруппы с контрчленом  $\sigma \mathbf{I}_2 \chi_1^\Lambda$  ( $\tilde{H}/U = 0.1$ ,  $\Lambda_c/U = 0.05$ ; см. (2.9)) для (a)  $\tilde{\epsilon}_{1(2),\sigma}$  (толстая сплошная красная для  $\sigma = \uparrow$  и толстая штриховая черная линия для  $\sigma = \downarrow$ ) и  $\tilde{t}_{12}^\sigma$  (тонкая сплошная зеленая линия для  $\sigma = \uparrow$  и штриховая синяя линия для  $\sigma = \downarrow$ ), (b)  $\langle n_{1(2),\sigma} \rangle$  (сплошная красная линия для  $\sigma = \uparrow$  и штриховая черная линия для  $\sigma = \downarrow$ ), (c)  $\langle S^z \rangle$ , (d)  $\langle n \rangle$  как функций  $V_g/U$  при  $\Gamma = U/4$  и  $H \rightarrow 0$ . Стрелками отмечены напряжения  $\pm V_g^c/U$ .

приводит к незначительному расщеплению перенормированных параметров  $\tilde{\epsilon}_{j,\sigma}$  и  $\tilde{t}_{12}^\sigma$  в малой окрестности напряжений  $|V_g| > V_g^c$ , которое является артефактом рассматриваемого метода.

Как было отмечено в [20; 21], фаза сингулярной ферми-жидкости характеризуется специфическим перераспределением заряда между связывающим ( $d_{s,\sigma}$ ) и антисвязывающим ( $d_{a,\sigma}$ ) состояниями, которые в случае симметричной системы ( $t_i^\alpha = t$ ) определены преобразованиями [20]:

$$d_{s(a),\sigma} = \frac{(d_{1,\sigma} \pm d_{2,\sigma})}{\sqrt{2}}. \quad (2.11)$$

В базисе  $d_{s(a),\sigma} (d_{s(a),\sigma}^\dagger)$  гамильтониан  $\mathcal{H}_{\text{coupl}}$  (см. (2.1)), описывающий связь квантовых точек с контактами, принимает вид:

$$\mathcal{H}_{\text{coupl}} = - \sum_{\alpha=L,R} \sum_{\sigma} (t_s c_{\alpha,0,\sigma}^\dagger d_{s,\sigma} + \text{H.c.}), \quad (2.12)$$

где  $t_s = \sqrt{2}t$ . Следовательно, антисвязывающее состояние не имеет непосредственной связи с контактами.

Фаза сингулярной ферми-жидкости соответствует наличию только одного электрона с проекцией спина вдоль поля  $H$  на антисвязывающем состоянии [21], что отвечает локальному магнитному моменту на данном состоянии. Отметим, что несмотря на то, что антисвязывающее состояние «отцеплено» от контактов, оно не изолировано от остальной части системы. Действительно, гамильтониан квантовых точек  $\mathcal{H}_{\text{dots}}$  (2.1) в базисе связывающего и антисвязывающего состояний имеет вид:

$$\mathcal{H}_{\text{dots}} = \sum_{k=s,a} \sum_{\sigma} \left( \epsilon_{\sigma} - \frac{U}{2} \right) n_{k,\sigma} - U \vec{\mathbf{S}}_s \vec{\mathbf{S}}_a + \frac{U}{2} \left[ n_{s,\uparrow} n_{s,\downarrow} + n_{a,\uparrow} n_{a,\downarrow} + \frac{1}{2} n_a n_s + \left( d_{s,\uparrow}^{\dagger} d_{a,\uparrow} d_{s,\downarrow}^{\dagger} d_{a,\downarrow} + \text{H.c.} \right) \right], \quad (2.13)$$

где  $n_{s(a),\sigma} = d_{s(a),\sigma}^{\dagger} d_{s(a),\sigma}$ ,  $\mathbf{S}_{s(a)} = (1/2) \sum_{\sigma,\sigma'} (d_{s(a),\sigma}^{\dagger} \boldsymbol{\sigma} d_{s(a),\sigma'})$  ( $\boldsymbol{\sigma}$  – вектор матриц Паули) и неоператорные вклады были отброшены. Выражение (2.13) имеет вид двухорбитальной модели Андерсона [125; 126], включающей электрон-электронное взаимодействие на орбиталях и межорбитальное кулоновское взаимодействие, обменное (хундовское) взаимодействие и процессы «парного перескока» электронов. Как видно из (2.13), антисвязывающая орбиталь связана различными двухчастичными взаимодействиями со связывающей.

На рисунке 2.6а приведены результаты метода функциональной ренорм-группы с контрчленом для средних чисел заполнения  $\langle n_{s(a)} \rangle = \sum_{\sigma} \langle n_{s(a),\sigma} \rangle$ . В соответствии с NRG результатами работ [20; 21] при  $|V_g| < V_g^c$  антисвязывающее состояние заполнено только одним электроном  $\langle n_a \rangle = 1$ . Среднее  $\langle n_{a,\uparrow} \rangle = 1$  и  $\langle n_{a,\downarrow} \rangle = 0$  при  $|V_g| < V_g^c$ , что подтверждает формирование локального магнитного момента  $S = 1/2$  на антисвязывающем состоянии. Среднее  $\langle n_s \rangle$  для связывающего состояния ведет себя плавно ( $\langle n_{s,\sigma} \rangle \approx 0.5$  при  $|V_g| < V_g^c$ ) из-за делокализации («размытия») данного состояния, обусловленного гибридизацией  $\Gamma_s^{L(R)} = \pi |t_s|^2 \rho_{\text{lead}}(0) = 2\Gamma$  с контактами.

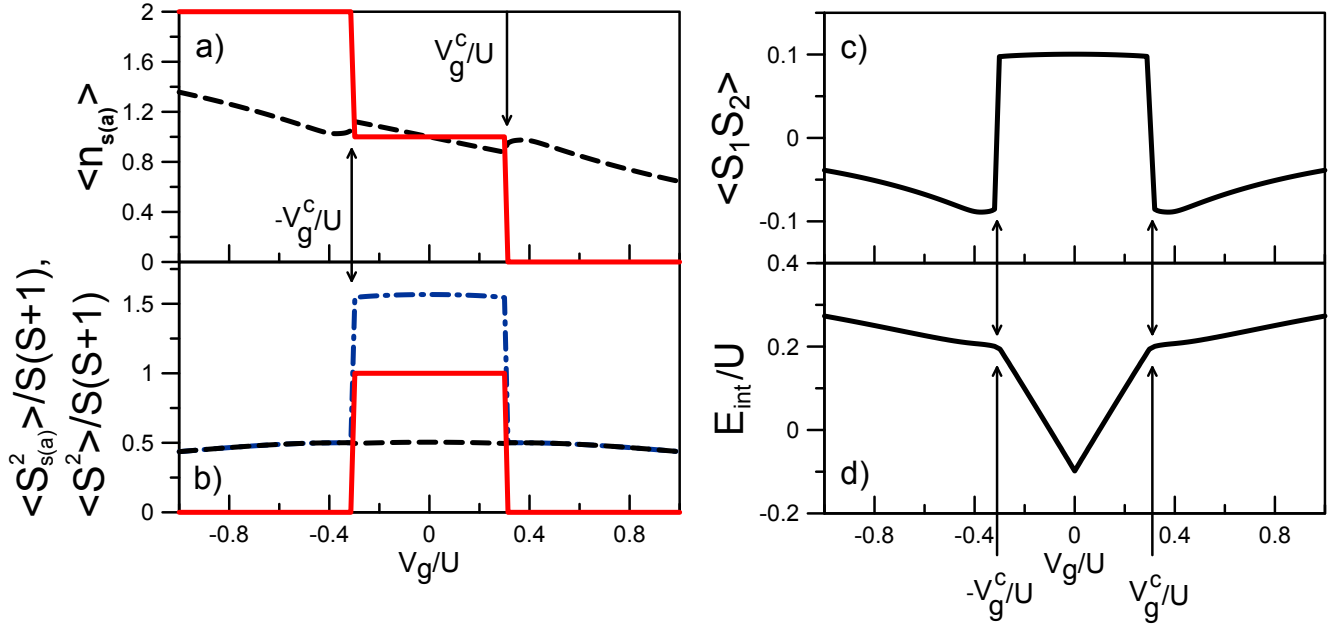


Рисунок 2.6 — Результаты ренормгруппового подхода с контрчленом для (а)  $\langle n_{s(a)} \rangle$  (штриховые черные линии для связывающего и сплошные красные линии для антисвязывающего состояния), (б)  $\langle \mathbf{S}_{s(a)}^2 \rangle$  (штриховые черные линии для связывающего и сплошные красные линии для антисвязывающего состояния),  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  (штрихпунктирная синяя линия), (с)  $\langle \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 \rangle$  и (д)  $E_{\text{int}}$  как функций  $V_g/U$ . Стрелками отмечены напряжения  $\pm V_g^c/U$ . Параметры системы и метод расчета те же, что для рисунка 2.5.

Наличие локального магнитного момента на антисвязывающем состоянии демонстрирует также анализ зависимостей средних значений квадрата оператора спина  $\langle \mathbf{S}_{s(a)}^2 \rangle = (1/4) \sum_{\sigma, \sigma'} \langle (d_{s(a), \sigma}^\dagger \sigma d_{s(a), \sigma'})^2 \rangle$  от запирающего напряжения, представленные на рисунке 2.6b. Для антисвязывающего состояния  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle / S(S+1) = 1$  в области  $|V_g| < V_g^c$  и обращается в ноль при  $|V_g| > V_g^c$ . Среднее  $\langle \mathbf{S}_s^2 \rangle / S(S+1) \approx 1/2$  и не демонстрирует существенного изменения при  $V_g = \pm V_g^c$ .

Среднее значение квадрата оператора полного спина  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle = \langle (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 \rangle$  (штрихпунктирная синяя линия на рисунке 2.6b) имеет почти постоянное значение  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle \approx 1.6S(S+1)$  при  $|V_g| < V_g^c$ . С увеличением  $|V_g|$  среднее  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  существенно уменьшается и при  $|V_g| = V_g^c$  обнаруживает разрыв, который сопровождается резким падением  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$ . В дополнение,  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle > \langle \mathbf{S}_s^2 \rangle + \langle \mathbf{S}_a^2 \rangle$ ,  $\langle \mathbf{S}_1^2 \rangle + \langle \mathbf{S}_2^2 \rangle$  при  $|V_g| < V_g^c$ , что является свидетельством наличия ферромагнитных корреляций квантовых точек. Это также демонстрирует зависимость спин-спиновой кор-



реляционной функции  $\langle \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 \rangle$  от напряжения  $V_g$  (рисунок 2.6с)), которая, как было отмечено ранее [20;21], демонстрирует смену знака при фазовом переходе.

Зависимость от  $V_g$  энергии, связанной с наличием электрон-электронного взаимодействия  $E_{\text{int}} = \Omega - \Omega_0$  (дается выражением (1.44)), т.е. разность между энергией системы  $\Omega$  при  $U \neq 0$  и энергии  $\Omega_0$ , отвечающей  $U = 0$ , приведена на рисунке 2.6d. Видно, что «скачки» (разрывы) зависимостей средних чисел заполнения и спин-спиновых корреляционных функций при  $|V_g| = V_g^c$  соответствуют излому кривой  $E_{\text{int}}(V_g)$ . Это подтверждает наличие фазового перехода первого рода в точке  $|V_g| = V_g^c$  и, следовательно, критическое напряжение  $V_g^c$  соответствует точке квантового фазового перехода между состояниями сингулярной и нормальной ферми-жидкости системы.

Рассмотрим линейную проводимость системы  $G$  при конечных ненулевых напряжениях  $V_g$ . Зависимости  $G(V_g)$ , полученные различными РГ схемами при параметрах, соответствующих рисунку 2.5, приведены на рисунке 2.7. Проводимости, рассчитанные методом функциональной ренормгруппы с резкой и Лити-

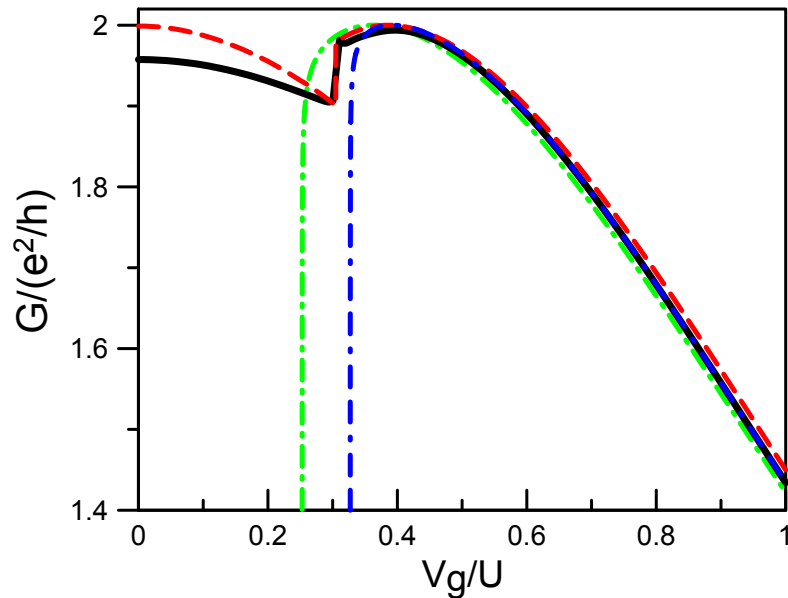


Рисунок 2.7 — Результаты для линейной проводимости  $G$  как функции  $V_g$  в РГ методе без контрчлена (штрихпунктирная зеленая и штрихпунктирная с двумя пунктирами синяя линия –  $G(V_g)$  при использовании резкой и Литима схем отсечки), РГ методом с контрчленом  $\sigma \mathbf{I}_2 \chi_1^\Lambda$  ( $\tilde{H}/U = 0.1$ ,  $\Lambda_c/U = 0.05$ ; см. (2.9)) (сплошная черная линия) и NRG методом (штриховая красная линия). Параметры системы те же, что для рисунка 2.5.

ма схемами усечения, падают до нуля при приближении к границе фазы сингулярной ферми-жидкости. В то же время, метод функциональной ренормгруппы с контрчленом приводит к конечной близкой к  $G_{\max}$  проводимости во всем диапазоне напряжений  $|V_g| < V_g^c$ , в котором состояние сингулярной ферми-жидкости является основным состоянием системы. При этом в рассматриваемом случае симметричной системы ( $t_i^\alpha = t$ ) проводимость  $G$  испытывает скачок при  $\pm V_g^c$ , что находит согласие как с представленными результатами численной ренормгруппы (штриховая линия на рисунке 2.7), так и с предыдущим анализом NRG методом для случая сильного кулоновского взаимодействия [20].

С целью более детального сравнения результатов методов функциональной ренормгруппы с контрчленом и численной ренормгруппы, на рисунке 2.8 приведены расчеты линейной проводимости при более сильном ( $U = 6\Gamma$ ) и слабом ( $U = 2\Gamma$ ) кулоновском взаимодействии, чем было рассмотрено ранее. Согласие двух методов улучшается при уменьшении  $U/\Gamma$ . В то же время, даже при  $U/\Gamma = 6$  различие результатов метода NRG и функциональной ренормгруппы не столь значительно вблизи половинного заполнения системы. Таким образом, проводимость (и другие величины) в фазе сингулярной ферми-жидкости даже

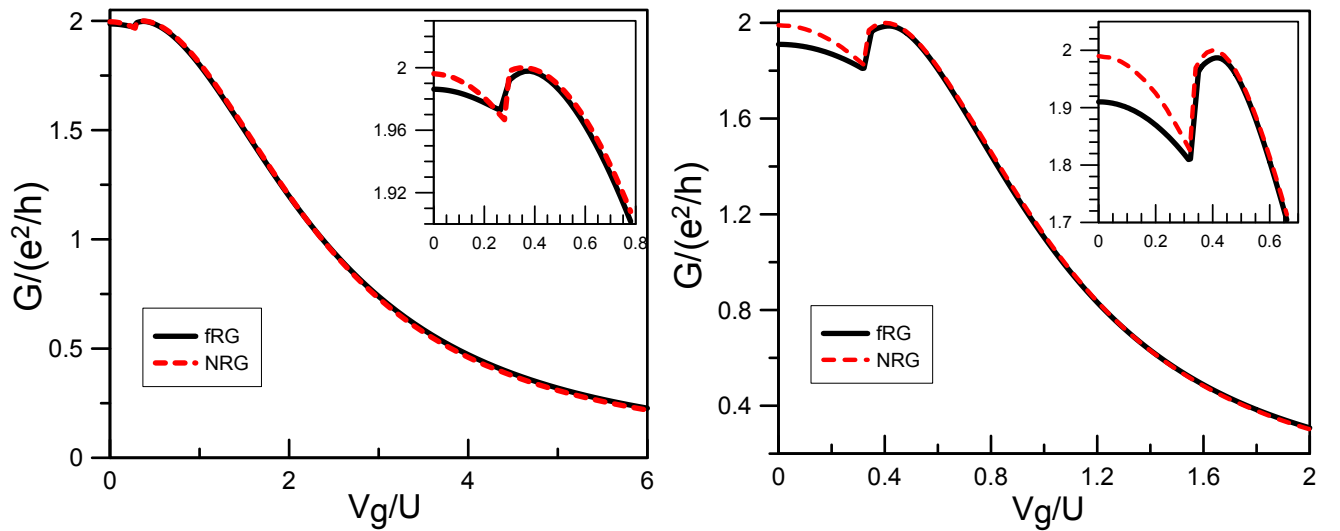


Рисунок 2.8 — Линейная проводимость  $G$  как функция  $V_g$  при  $\Gamma = U/2$  (левая панель) и  $\Gamma = U/6$  (правая панель), рассчитанная методом ренормгруппы с контрчленом (сплошная черная линия) и NRG методом (штриховая красная линия). Остальные параметры системы и метод расчета те же, что для рисунка 2.5.

в этом случае могут быть надежно описаны в рамках предлагаемого подхода. Данное утверждение справедливо вплоть до  $U/\Gamma \approx 10$ .

## 2.3 Ренормгрупповой анализ асимметричной системы

В данном разделе с помощью метода функциональной ренормгруппы изучается влияние различных типов асимметрии параметров перескока между квантовыми точками и контактами на линейную проводимость и формирование локального магнитного момента в системе двух квантовых точек. Поскольку в фазе с магнитными моментами, как и в случае полностью симметричной системы, «стандартные» ренормгрупповые подходы неприменимы используется предложенный в разделе 2.2.2 метод функциональной ренормгруппы с контрчленом. При расчетах используется линейно зависящий от  $\Lambda$  контрчлен  $\sigma \mathbf{I}_2 \chi_1^\Lambda$  (2.9) при  $\tilde{H}/U = 0.1$  и  $\Lambda_c/U = 0.05$ .

### 2.3.1 Асимметрия туннелирования через контакты

В качестве первого возможного типа асимметрии системы рассмотрим случай, когда туннелирование электронов вдоль путей L-QD1-R и L-QD2-R (см. рисунок 2.1) характеризуется одинаковыми матричными элементами,  $t_1^{L(R)} = t_2^{L(R)}$ , а вдоль путей QD1-L-QD2 и QD1-R-QD2 – различными,  $t_{1(2)}^L \neq t_{1(2)}^R$ . Другими словами, когда туннелирование электронов через левый (L) и правый (R) контакты происходит асимметричным образом. В этом случае для параметров гибридизации  $\Gamma_j^\alpha = \pi |t_j^\alpha|^2 \rho_{\text{lead}}(0)$  справедливы равенства:  $\Gamma_1^{(L)R} = \Gamma_2^{L(R)}$ ,  $\Gamma_{1(2)}^R = \chi \Gamma_{1(2)}^L$ , где без ограничения общности можно полагать  $0 < \chi < 1$  ( $\chi = 1$  приводит к полностью симметричной системе квантовых точек, которая была рассмотрена в предыдущем разделе).

При произвольном  $\chi \neq 1$  и заданном  $U$  рассматриваемая система квантовых точек будет иметь те же значения перенормированных параметров, что и эффективная система, которая обладает полной симметрией параметров перескока и имеет параметры гибридизации  $\tilde{\Gamma}_j^\alpha = (1 + \chi) \Gamma_1^L / 2$  для  $\alpha = L, R$  и

$j = 1, 2$ . Данный факт следует непосредственно из инвариантности функции Грина (2.3), которая полностью конкретизирует систему в РГ процедуре, относительно замены  $\Gamma_j^\alpha \leftrightarrow \tilde{\Gamma}_j^\alpha$  при  $\Gamma_1^{(L)R} = \Gamma_2^{L(R)}$  и  $\Gamma_{1(2)}^R = \chi \Gamma_{1(2)}^L$ . Как следствие, для рассматриваемого случая справедливы все выводы и результаты, относящиеся к формированию состояния сингулярной ферми-жидкости, полученные в предыдущем разделе для симметричной системы квантовых точек. Поскольку проводимость определяется не только функцией Грина, но и вероятностями туннелирования между контактами и квантовыми точками, она не будет в точности соответствовать проводимости эффективной симметричной системы. С учетом выражения (1.86), линейная проводимость  $G(V_g)$  как функция запирающего напряжения  $V_g$  интересующей нас системы может быть представлена в следующей форме:

$$G(V_g) = \frac{4e^2}{h} \Gamma_1^R \Gamma_1^L \left| \sum_{j,j'} \mathcal{G}_{jj',\sigma}^{\Lambda \rightarrow 0}(0) \right|^2 = \Gamma_1^R \Gamma_1^L \left( \tilde{\Gamma}_1^R \tilde{\Gamma}_1^L \right)^{-1} G_{\text{eff}}(V_g) = \frac{4\chi}{(1+\chi)^2} G_{\text{eff}}(V_g), \quad (2.14)$$

где  $G_{\text{eff}}(V_g)$  – проводимость эффективной полностью симметричной системы (см. (2.6)) с параметрами гибридизации  $\tilde{\Gamma}_j^\alpha$  и мы учли, что для рассматриваемой геометрии системы  $\Gamma_j^L \Gamma_i^R = \Gamma_1^L \Gamma_1^R$ . Таким образом, зависимость  $G(V_g)$  может быть получена из соответствующей зависимости для полностью симметричной системы с  $\tilde{\Gamma}_j^\alpha < \Gamma_j^\alpha$ , путем умножения последней на фактор  $4\chi/(1+\chi)^2 < 1$ . Это означает, что рассматриваемая асимметрия параметров перескока не приводит к появлению новых особенностей проводимости, относительно тех, что были отмечены при изучении полностью симметричной системы квантовых точек.

На рисунке 2.9 показаны результаты метода функциональной ренормгруппы для линейной проводимости при  $\Gamma_1^L = U/4$  и различных  $\chi$ . В соответствии с представленным выше полуаналитическим анализом,  $G(V_g)$  воспроизводит особенности проводимости системы с изотропной геометрией: при любом выборе параметра  $\chi$  проводимость демонстрирует разрыв, обусловленный квантовым фазовым переходом при запирающем напряжении  $V_g = V_g^c(\chi)$ . При этом,

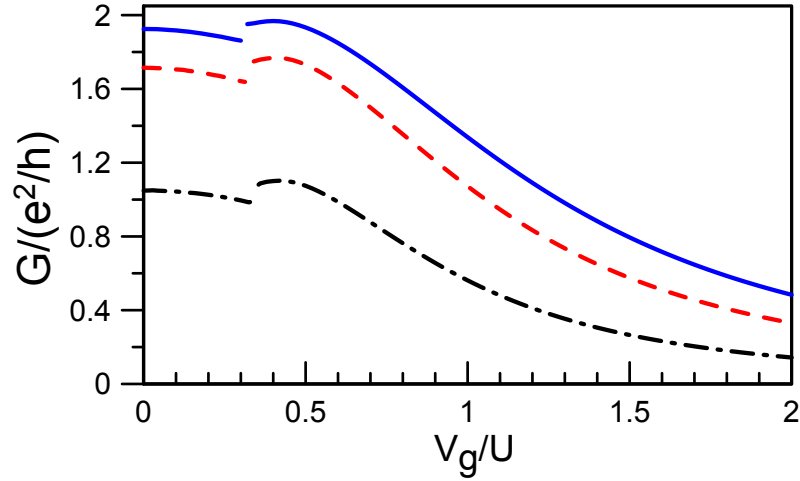


Рисунок 2.9 — Проводимость  $G$  как функция напряжения  $V_g$  в РГ подходе с контрчленом при  $\Gamma_1^L = \Gamma_2^L = U/4$ ,  $\Gamma_1^R = \Gamma_2^R = \chi\Gamma_1^L$  и  $H \rightarrow 0$  для  $\chi = 0.8$  (сплошная синяя линия), 0.5 (штриховая красная линия) и 0.2 (штрихпунктирная черная линия).

проводимость почти достигает своего максимального значения  $G_{\max}/(e^2/h) = 8\chi/(1+\chi)^2$  при напряжении  $V_g = 0$ , которое соответствует половинному заполнению системы. Точка фазового перехода первого рода  $V_g^c(\chi)$  слегка смещается в сторону больших запирающих напряжений с уменьшением параметра  $\chi$ . Это связано с тем, что с уменьшением параметра  $\chi$  отношение  $U/\tilde{\Gamma}_j^\alpha = 2(1+\chi)^{-1}U/\Gamma_1^L$  возрастает, и, следовательно, область напряжений  $|V_g| < V_g^c$ , для которой возможно существования фазы сингулярной ферми-жидкости увеличивается (см. рисунок 2.3, а также [21]).

### 2.3.2 Асимметрия туннелирования через квантовые точки

Рассмотрим асимметрию параметров перескока, когда  $t_{1(2)}^L = t_{1(2)}^R$  и  $t_1^{L(R)} \neq t_2^{L(R)}$ . Это означает, что туннелирование электронов через квантовые точки QD1 и QD2 вдоль путей L-QD1-R и L-QD2-R (см. рисунок 2.1) неэквивалентно. В этом случае параметры гибридизации представимы в виде:  $\Gamma_{(1)2}^L = \Gamma_{1(2)}^R$ ,  $\Gamma_2^{L(R)} = \gamma\Gamma_1^{L(R)}$ , где  $0 < \gamma < 1$ .

Результаты метода функциональной ренормгруппы с контрчленом для зависимости линейной проводимости  $G$  от запирающего напряжения  $V_g$  представлены на рисунке 2.10. Видно, что для рассматриваемого типа асимметрии си-

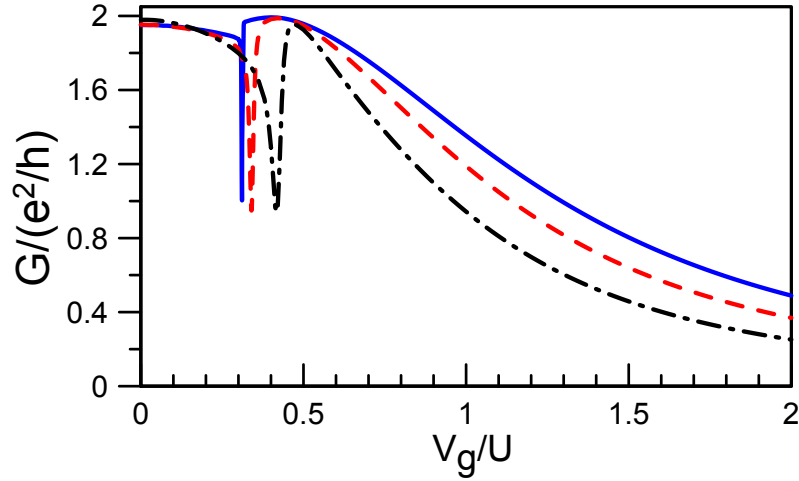


Рисунок 2.10 — Проводимость  $G$  как функция напряжения  $V_g$  в РГ подходе с контрчленом при  $\Gamma_1^L = \Gamma_1^R = U/4$ ,  $\Gamma_2^L = \Gamma_2^R = \gamma\Gamma_1^L$  и  $H \rightarrow 0$  для  $\gamma = 0.8$  (сплошная синяя линия),  $0.5$  (штриховая красная линия) и  $0.2$  (штрихпунктирная черная линия).

стемы проводимость  $G(V_g)$  имеет поведение качественно отличное от рассмотренных выше случаев. При любом выборе параметра  $\gamma$  проводимость  $G(V_g)$  непрерывна и демонстрирует резкий асимметричный антирезонанс при некотором запирающем напряжении  $\tilde{V}_g(\gamma)$ , значение которого зависит от параметра  $\gamma$ . С увеличением  $\gamma$  антирезонанс становится более узким и его позиция сдвигается в область меньших  $V_g$ . При напряжениях  $|V_g| < \tilde{V}_g(\gamma)$  проводимость возрастает с убыванием  $|V_g|$  и вблизи половинного заполнения ( $V_g = 0$ ) почти достигает своего максимального предела  $G_{\max} = 2e^2/h$ .

Покажем, что отмеченные особенности проводимости связаны с квантовым фазовым переходом системы в состояние сингулярной ферми-жидкости, который приводит к возникновению локального магнитного момента на антисвязывающем состоянии. Для этого рассмотрим исходную задачу в терминах связывающего и антисвязывающего состояний, определив антисвязывающее состояние как состояние, которое не имеет или имеет минимально возможную гибридизацию с контактами. Для построения требуемых состояний рассмотрим каноническое преобразование общего вида:

$$\begin{pmatrix} d_{s,\sigma} \\ d_{a,\sigma} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1+\eta^2}} \begin{pmatrix} 1 & \eta \\ -\eta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{1,\sigma} \\ d_{2,\sigma} \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

с произвольным параметром  $\eta$ .

В базисе (2.15) эффективный одночастичный гамильтониан системы  $\mathcal{H}^{\text{eff}}$  (2.4) имеет вид:

$$\mathcal{H}^{\text{eff}} = \mathcal{H}_{\text{dots}}^{\text{eff,sa}} + \mathcal{H}_{\text{coupl}}^{\text{eff,sa}} + \mathcal{H}_{\text{leads}}. \quad (2.16)$$

Первый член в (2.16) соответствует гамильтониану квантовых точек:

$$\mathcal{H}_{\text{dots}}^{\text{eff,sa}} = \sum_{\sigma} [(\epsilon_{s,\sigma} n_{s,\sigma} + \epsilon_{a,\sigma} n_{a,\sigma}) - (t_{sa}^{\sigma} d_{s,\sigma}^{\dagger} d_{a,\sigma} + \text{H.c.})] \quad (2.17)$$

с эффективными уровнями энергии связывающего ( $\epsilon_{s,\sigma}$ ) и антисвязывающего ( $\epsilon_{a,\sigma}$ ) состояний:

$$\epsilon_{s(a),\sigma} = [\tilde{\epsilon}_{1(2),\sigma} + \eta^2 \tilde{\epsilon}_{2(1),\sigma} \mp 2\eta \tilde{t}_{12}^{\sigma}] / (1 + \eta^2) \quad (2.18)$$

и эффективными матричными элементами перескока между связывающим и антисвязывающим состояниями  $t_{sa}^{\sigma}$ :

$$t_{sa}^{\sigma} = [\eta (\tilde{\epsilon}_{1,\sigma} - \tilde{\epsilon}_{2,\sigma}) - \tilde{t}_{12}^{\sigma} (\eta^2 - 1)] / (1 + \eta^2), \quad (2.19)$$

где  $\tilde{\epsilon}_{1(2),\sigma}$  и  $\tilde{t}_{12}^{\sigma}$  определены в выражении (2.3). Член  $\mathcal{H}_{\text{coupl}}^{\text{eff,sa}}$  задает связь связывающего и антисвязывающего состояний с контактами:

$$\mathcal{H}_{\text{coupl}}^{\text{eff,sa}} = - \sum_{\alpha=L,R} \sum_{\sigma} (t_s^{\alpha} c_{\alpha,0,\sigma}^{\dagger} d_{s,\sigma} + t_a^{\alpha} c_{\alpha,0,\sigma}^{\dagger} d_{a,\sigma} + \text{H.c.}), \quad (2.20)$$

где параметры перескока между новыми состояниями и контактами  $t_{s(a)}^{L(R)}$  выражаются через матричные элементы исходной системы  $t_{1(2)}^{L(R)}$  следующим образом:

$$t_s^{\alpha} = z t_1^{\alpha} + (1 - z^2)^{1/2} t_2^{\alpha}, \quad (2.21)$$

$$t_a^{\alpha} = z t_2^{\alpha} - (1 - z^2)^{1/2} t_1^{\alpha}, \quad (2.22)$$

где параметр  $z = (1 + \eta^2)^{-1/2}$ . Гамильтониан  $\mathcal{H}_{\text{leads}}$  в (2.4), описывающий контакты, остается неизменным, поскольку преобразование (2.15) не затрагива-

ет состояния контактов. Отметим, что выражения (2.16)–(2.22) не ограничены никакими условиями на параметры перескока между квантовыми точками и контактами и, следовательно, справедливы при любом выборе асимметрии параметров перескока.

В интересующем нас случае, когда  $t_2^{L(R)} = \gamma^{1/2}t_1^{L(R)}$  и  $t_{1(2)}^R = t_{1(2)}^L$  параметры  $t_{s(a)}^{L(R)}$  (2.21)–(2.22) даются выражениями:

$$t_s^L = t_s^R = \frac{1 + \gamma^{1/2}\eta}{\sqrt{1 + \eta^2}} t_1^\alpha \quad (2.23)$$

$$t_a^L = t_a^R = \frac{\gamma^{1/2} - \eta}{\sqrt{1 + \eta^2}} t_1^\alpha. \quad (2.24)$$

Как видно из выражения (2.24), при  $\eta = \gamma^{1/2}$  антисвязывающее состояние не имеет непосредственной связи с контактами. При этом параметры гибридизации данного состояния с контактами  $\Gamma_a^\alpha = \pi|t_a^\alpha|^2\rho_{\text{lead}}(0)$  достигают своего минимально возможного значения  $\Gamma_a^\alpha = 0$  ( $\alpha \in \{L, R\}$ ). В этом случае гамильтониан  $\mathcal{H}_{\text{coupl}}^{\text{eff,sa}}$  (2.20) принимает вид:

$$\mathcal{H}_{\text{coupl}}^{\text{eff,sa}} = - \sum_{\alpha=L,R} \sum_{\sigma} (t_s^\alpha c_{\alpha,0,\sigma}^\dagger d_{s,\sigma} + \text{H.c.}). \quad (2.25)$$

Откуда видно, что только связывающее состояние имеет ненулевые матричные элементы перескока с контактами  $t_s^\alpha = \sqrt{1 + \gamma}t_1^\alpha$ . Проанализируем выражение для проводимости системы, записанное в терминах связывающего и антисвязывающего состояний при  $\eta = \gamma^{1/2}$ . С учетом явного вида гамильтониана системы в новом базисе (2.16), проводимость в спиновом канале  $\sigma$  (1.86) запишется как:

$$G_\sigma/(e^2/h) = 4\Gamma_s^L\Gamma_s^R \left| \begin{pmatrix} -\epsilon_{s,\sigma} + i\Gamma_s & t_{sa}^\sigma \\ t_{sa}^\sigma & -\epsilon_{a,\sigma} \end{pmatrix}_{11}^{-1} \right|^2 = \frac{4\Gamma_s^L\Gamma_s^R}{q_\sigma^2 + \Gamma_s^2}, \quad (2.26)$$

где  $\Gamma_s^\alpha = \pi|t_s^\alpha|^2\rho_{\text{lead}}(0)$  – величина гибридизации связывающего состояния с контактом  $\alpha$  ( $\alpha = L, R$ ),  $\Gamma_s = \Gamma_s^L + \Gamma_s^R$  – полная гибридизация связывающего



состояния с контактами и параметр  $q_\sigma$  дается выражением:

$$q_\sigma = (\epsilon_{a,\sigma}\epsilon_{s,\sigma} - (t_{sa}^\sigma)^2)/\epsilon_{a,\sigma}. \quad (2.27)$$

При  $\gamma = 1$  система симметрична и  $\tilde{\epsilon}_{1,\sigma} = \tilde{\epsilon}_{2,\sigma}$ . Как видно из (2.19), в этом случае параметр перескока  $t_{sa}^\sigma \equiv 0$ . Следовательно,  $q_\sigma = \epsilon_{s,\sigma}$ , что при подстановке в (2.26) приводит к выражению для проводимости (2.6) симметричной системы, которая зависит только от уровня энергии связывающего состояния  $\epsilon_{s,\sigma}$  и не обращается в ноль при любой величине запирающего напряжения.

При наличии асимметрии туннелирования через квантовые точки ( $\gamma \neq 1$ ) параметр перескока электронов между связывающим и антисвязывающим состояниями  $t_{sa}^\sigma \neq 0$ . Генерация эффективного перескока  $t_{sa}^\sigma$  при учете электрон-электронного взаимодействия приводит к тому, что проводимость (2.26) зависит также от позиции уровня энергии антисвязывающего состояния  $\epsilon_{a,\sigma}$  (входит через параметр  $q_\sigma$ ). Включение данного уровня имеет нетривиальный эффект на проводимость системы. В отличие от рассмотренных случаев возможно полное подавление проводимости  $G_\sigma$ , когда уровень  $\epsilon_{a,\sigma}$  лежит на уровне Ферми контактов ( $\epsilon_{a,\sigma} = 0$ ), что вызвано эффектом деструктивной интерференции вкладов в проводимость от связывающего и антисвязывающего состояний. С другой стороны, если эффективные уровни  $\epsilon_{s/a,\sigma}$  и параметры перескока  $t_{sa}^\sigma$  удовлетворяют соотношению  $q_\sigma = 0$ , проводимость достигает максимального значения  $G_{\max,\sigma}/(e^2/h) = 4\Gamma_s^L\Gamma_s^R/\Gamma_s^2 = 1$ . Отметим, что при  $U = 0$ , как видно из выражений (2.18) и (2.19),  $\epsilon_{s(a),\sigma} = \epsilon_\sigma$  и  $t_{sa}^\sigma \equiv 0$ . Следовательно, проводимость  $G_\sigma$  (2.26) принимает вид:  $G_\sigma/(e^2/h) = 4\Gamma_s^L\Gamma_s^R/(\epsilon_\sigma^2 + \Gamma_s^2)$ . Таким образом, в отсутствие электрон-электронного взаимодействия (при  $U = 0$ ) проводимость  $G_\sigma$  как функция  $\epsilon_\sigma$  (и  $V_g$ ;  $\epsilon_\sigma = V_g - \sigma H$ ) имеет лоренцеву форму и не обращается в ноль при конечных  $\epsilon_\sigma$ .

На рисунке 2.11 приведены результаты для проводимости  $g_\uparrow = G_\uparrow/(e^2/h)$  и модуля параметра  $q_\uparrow$  для случая  $\gamma = 0.2$ , проводимость  $G = G_\uparrow + G_\downarrow$  для которого была представлена на рисунке 2.10. Видно, что  $q_\uparrow$  дважды обращается в ноль – при близком к  $V_g = 0$  значении запирающего напряжения  $V_g = V_g^{(1)}$

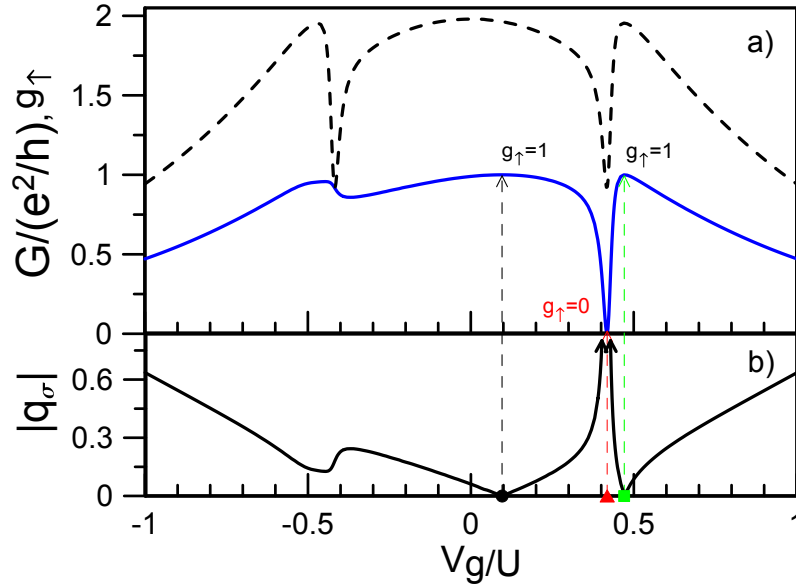


Рисунок 2.11 — Результаты ренормгруппового подхода с контрчленом для (а)  $G = G_{\uparrow} + G_{\downarrow}$  (штриховая черная линия),  $g_{\uparrow} = G_{\uparrow}/(e^2/h)$  (сплошная синяя линия) и (б) параметра  $|q_{\uparrow}|$  как функций  $V_g/U$  при  $\gamma = 0.2$ . Остальные параметры соответствуют рисунку 2.10. Напряжения  $V_g^{(1-3)}$  отмечены символом круга (черный), треугольника (красный) и квадрата (зеленый), соответственно.

и при напряжении  $V_g = V_g^{(3)}$  (см. подпись к рисунку 2.11). В соответствии с вышеприведенным полуаналитическим анализом, при напряжениях  $V_g = V_g^{(1,3)}$  проводимость максимальна  $G_{\uparrow}/(e^2/h) = 1$ . В области  $V_g < 0$ , параметр  $q_{\uparrow}$  демонстрирует плавное поведение и достигает минимума вблизи  $V_g = -V_g^{(3)}$ , при этом  $g_{\uparrow}(-V_g^{(3)}) \approx 1$ . Учитывая последнее замечание и принимая во внимание, что при  $H \rightarrow 0$  полная проводимость системы  $G = G_{\uparrow} + G_{\downarrow}$  может быть получена из проводимости, рассчитанной только для одной проекции спина, как [106]  $G = G_{\sigma}(V_g) + G_{\sigma}(-V_g)$ , имеем:  $G(V_g^{(3)}) \approx 2$ . Такую же величину  $G$  имеет вблизи половинного заполнения в силу максимума  $G_{\uparrow}$  при  $V_g = V_g^{(1)}$ . При  $V_g \rightarrow V_g^{(2)}$  ( $V_g^{(2)}$  отмечено красным треугольником на рисунке 2.11) параметр  $q_{\uparrow}$  расходится. Это связано с тем, что при данном напряжении уровень энергии антисвязывающего состояния  $\epsilon_{a,\sigma}$  пересекает уровень Ферми контактов  $\epsilon_F = 0$ . В этом случае, в соответствии с выражением (2.26), проводимость  $G_{\uparrow}$  резко падает, обращаясь в ноль при  $V_g = V_g^{(2)}$ . Данное обстоятельство приводит к наблюдаемому на рисунке 2.11а резкому антирезонансу проводимости в окрестности напряжения  $V_g^{(2)}$  при  $G(V_g^{(2)}) \approx 1$ .

Для выявления связи наблюдаемых особенностей проводимости с формированием локального магнитного момента в системе рассмотрим средние числа заполнения  $\langle n_{s(a)} \rangle$  и средние значения квадрата оператора спина  $\langle \mathbf{S}_{s(a)}^2 \rangle$  для связывающего и антисвязывающего состояний, а также среднее значение квадрата оператора полного спина  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$ . Как видно из представленных на рисунке 2.12 результатов РГ подхода, в некоторой окрестности половинного заполнения  $|V_g| < V_g^c$  для антисвязывающего состояния имеем:  $\langle n_a \rangle \approx 1$  (при этом  $\langle n_{a,\uparrow} \rangle \approx 1$ ,  $\langle n_{a,\downarrow} \rangle \approx 0$ ) и  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle / S(S+1) \approx 1$ , что свидетельствует о наличии

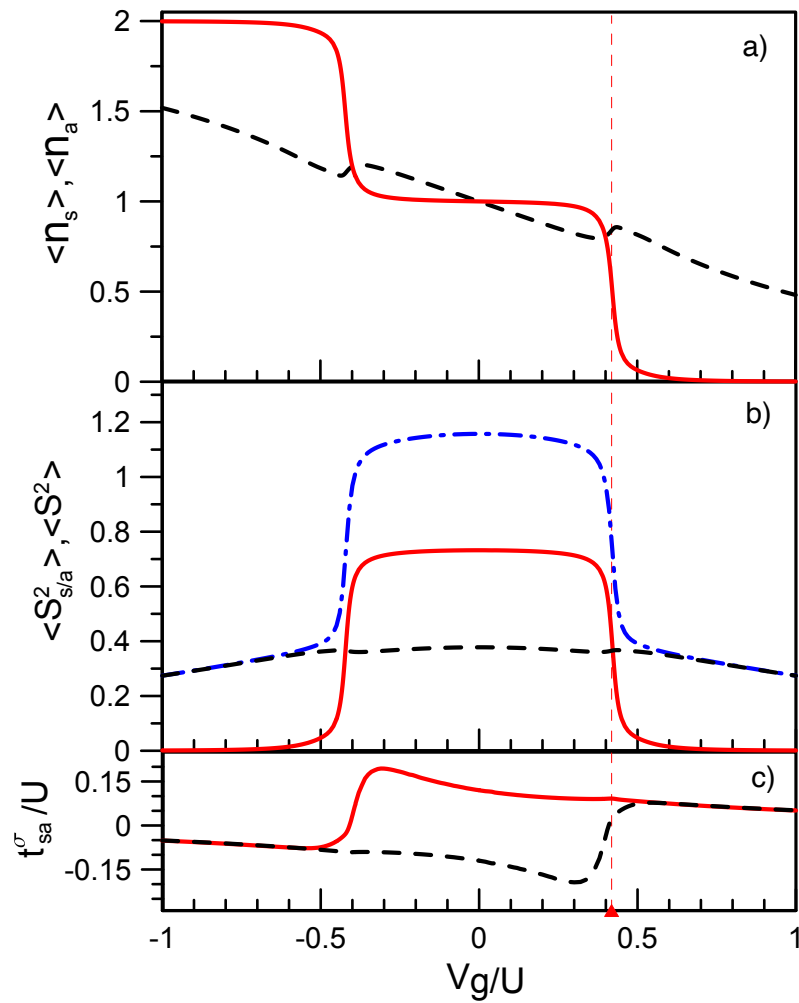


Рисунок 2.12 — Результаты ренормгруппового подхода с контрчленом для (а)  $\langle n_s \rangle$  (штриховая черная линия) и  $\langle n_a \rangle$  (сплошная красная линия), (б)  $\langle \mathbf{S}_s^2 \rangle$  (штриховая черная линия),  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle$  (сплошная красная линия),  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  (штрихпунктирная синяя линия) и (с)  $t_{sa}^\sigma$  как функций  $V_g/U$  (сплошная красная/штриховая черная линия для  $\sigma = \uparrow / \downarrow$ ). Параметры системы соответствуют рисунку 2.11. Напряжение  $V_g^{(2)}$  отмечено символом треугольника.

локального магнитного момента на данном состоянии. Для связывающего состояния  $\langle \mathbf{S}_s^2 \rangle / S(S+1) \approx 1/2$  для всего диапазона напряжений. Среднее  $\langle n_a \rangle$ ,  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle$  и  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  изменяются непрерывно при изменении напряжения  $V_g$ , что отличается от поведения соответствующих зависимостей для полностью симметричной системы (см. рисунок 2.6), и демонстрируют резкое падение при  $V_g = V_g^c$ . Отметим, что критическое напряжение  $V_g^c$  совпадает с введенным выше запирающим напряжением  $V_g^{(2)} = V_g^c$ , соответствующем минимуму проводимости. Следовательно, запирающее напряжение  $V_g^{(2)}$  можно идентифицировать как точку фазового перехода из фазы сингулярной ферми-жидкости в фазу нормальной ферми-жидкости. Непрерывное изменение средних  $\langle n_a \rangle$ ,  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle$  и  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  имеет место из-за отмеченной выше возможности генерации эффективного перескока между антисвязывающим и связывающим состояниями  $t_{sa}^\sigma$  (см. рисунок 2.12с). Таким образом, когда  $\Gamma_{(1)2}^L = \Gamma_{1(2)}^R$  и  $\Gamma_2^{L(R)} = \gamma \Gamma_1^{L(R)}$  ( $\gamma \neq 1$ ) даже при наличии довольно сильной асимметрии параметров перескока (малых  $\gamma$ ) локальный магнитный момент на антисвязывающем состоянии по-прежнему формируется.

Рассмотрим более общую асимметрию системы, соответствующую комбинации двух рассмотренных выше случаев:  $\Gamma_2^{L(R)} = \gamma \Gamma_1^{L(R)}$  и  $\Gamma_{1(2)}^R = \chi \Gamma_{1(2)}^L$ ,  $0 < \gamma, \chi < 1$ . Аналогично случаю асимметричного туннелирования через контакты ( $t_1^{L(R)} = t_2^{L(R)}$ ,  $t_{1(2)}^L \neq t_{1(2)}^R$ ; см. раздел 2.3.1), вместо интересующей нас системы квантовых точек можно рассмотреть эффективную систему с параметрами гибридизации  $\tilde{\Gamma}_1^{L(R)} = (1 + \chi)\Gamma_1^L/2$  и  $\tilde{\Gamma}_2^{L(R)} = \gamma(1 + \chi)\Gamma_1^L/2$ , которая имеет только асимметрию туннелирования через квантовые точки вида  $\tilde{\Gamma}_{(1)2}^L = \tilde{\Gamma}_{1(2)}^R$ ,  $\tilde{\Gamma}_2^{L(R)} = \gamma \tilde{\Gamma}_1^{L(R)}$ . Выражение для проводимости в рассматриваемом случае может быть представлено в виде (2.14), где  $G_{\text{eff}}(V_g)$  представляет теперь зависимость проводимости от запирающего напряжения для эффективной системы, имеющей только асимметрию верхнего (L-QD1-R) и нижнего (L-QD2-R) путей. Следовательно, при фиксированном значении параметра кулоновского взаимодействия  $U$  проводимости  $G(V_g)$  и  $G_{\text{eff}}(V_g)$  отличаются только постоянным множителем, который зависит от параметра  $\chi$ . В качестве примера на рисунке 2.13 построена зависимость проводимости от запирающего напряжения при  $U = 2\Gamma_1^L$  для двух конфигураций асимметрии системы:  $(\gamma, \chi) = (0.2, 0.2)$ ,  $(0.2, 0.8)$ . Про-

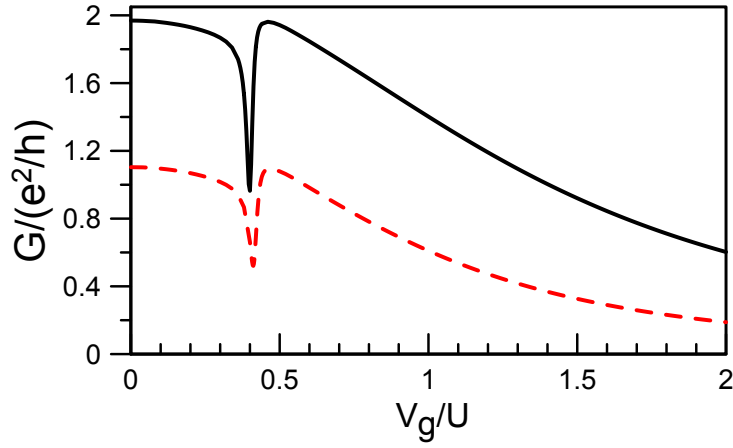


Рисунок 2.13 — Проводимость  $G$  как функция напряжения  $V_g$  в РГ подходе с контрчленом при  $\Gamma_1^L = U/2$ ,  $\Gamma_2^{L(R)} = \gamma\Gamma_1^{L(R)}$ ,  $\Gamma_{1(2)}^R = \chi\Gamma_{1(2)}^L$  и  $H \rightarrow 0$  для  $(\gamma, \chi) = (0.2, 0.8)$  (сплошная черная линия),  $(0.2, 0.2)$  (штриховая красная линия).

проводимость демонстрирует поведение аналогичное случаю наличия асимметрии туннелирования электронов только через квантовые точки. При  $V_g = 0$  проводимость достигает максимального значения  $G_{\max}/(e^2/h) = 8\chi/(1 + \chi)^2 < 2$ , которое не зависит от параметра  $\gamma$ .

### 2.3.3 Обобщение на случай произвольной асимметрии параметров перескока

Как было показано в разделе 2.3.2 при произвольном каноническом преобразовании эффективного гамильтониана системы (2.4) связь новых (связывающего и антисвязывающего) состояний с контактами характеризуется следующими матричными элементами перескока:

$$t_{s(a)}^\alpha = \pm(1 - z^2)^{1/2}t_{2(1)}^\alpha + zt_{1(2)}^\alpha, \quad (2.28)$$

где  $z = (1 + \eta^2)^{-1/2}$  и  $\eta$  — произвольный параметр преобразования (2.15). Рассмотрим случаи, когда отсутствуют процессы прямого туннелирования между антисвязывающим состоянием и контактами. Из выражения (2.28) видно, что матричные элементы перескока  $t_a^\alpha$  обращаются в ноль одновременно при  $\alpha = L$

и  $\alpha = R$ , когда

$$t_2^{L(R)} = z^{-1}(1 - z^2)^{1/2}t_1^{L(R)} = \eta t_1^{L(R)}. \quad (2.29)$$

Условие (2.29) может быть выполнено только для четырех рассмотренных выше случаев: полностью симметричной системы  $t_{1(2)}^{L(R)} = t$  ( $\eta = 1$ ); асимметрии туннелирования через контакты  $t_1^{L(R)} = t_2^{L(R)}$ ,  $t_{1(2)}^L \neq t_{1(2)}^R$  ( $\eta = 1$ ); асимметрии туннелирования через квантовые точки  $t_{1(2)}^L = t_{1(2)}^R$ ,  $t_1^{L(R)} \neq t_2^{L(R)}$  ( $\eta = \gamma^{1/2}$ ,  $\gamma \neq 1$ ); и комбинации двух последних асимметрий ( $\eta = \gamma^{1/2}$ ,  $\gamma \neq 1$ ). В остальных случаях параметры  $t_a^{L(R)}$  не обращаются в ноль одновременно. При более сложной асимметрии параметров перескока  $t_j^\alpha$  между квантовыми точками ( $j = 1, 2$ ) и контактами ( $\alpha = L, R$ ), антисвязывающее состояние уже не может быть рассмотрено как состояние не имеющее гибридизации с контактами. Непосредственная связь антисвязывающего состояния с контактами должна приводить к «размытию» или невозможности формирования локального магнитного момента на данном состоянии. Однако, как будет показано ниже, при выполнении определенных условий на параметры перескока  $t_j^\alpha$  можно построить антисвязывающее состояние, которое почти не имеет гибридизации с контактами. В этом случае, возможно формирование почти локального магнитного момента (в смысле  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle / S(S + 1) \approx 1$ ) на антисвязывающем состоянии.

Для построения указанного антисвязывающего состояния системы рассмотрим задачу на поиск параметра  $\eta$  (или эквивалентно параметра  $z$ ;  $\eta = z^{-1}(1 - z^2)^{1/2}$ ), который отвечает минимально возможной связи антисвязывающего состояния с контактами. Это соответствует рассмотрению минимума функции  $F(z)$ :

$$F(z) = |t_a^L(z)| + |t_a^R(z)|. \quad (2.30)$$

После подстановки (2.28) в (2.30) и стандартного анализа полученного выражения, для точки минимума  $z_{\min}$  функции  $F(z)$  имеем:

$$z_{\min} = \begin{cases} t_1^L/t^L, & t^L \geq t^R, \\ t_1^R/t^R, & t^L \leq t^R, \end{cases} \quad (2.31)$$

где  $t^\alpha = \sqrt{(t_1^\alpha)^2 + (t_2^\alpha)^2}$ . Будем определять связывающее и антисвязывающее состояния посредством преобразования (2.15), в котором до настоящего момента произвольный параметр  $\eta$  фиксирован значением  $\eta = z_{\min}^{-1}(1 - z_{\min}^2)^{1/2}$ , где  $z_{\min}$  определяется выражением (2.31). Отметим, что предложенная процедура построения связывающего и антисвязывающего состояний включает в качестве частных все рассмотренные ранее случаи, когда антисвязывающее состояние может быть полностью «отцеплено» от контактов.

Проанализируем в качестве примера геометрию параметров перескока системы, когда  $t_{1(2)}^L = t_{2(1)}^R$  ( $\Gamma_{1(2)}^L = \Gamma_{2(1)}^R$ ). За исключением случая  $t_1^L = t_1^R$ , отвечающего полностью симметричной системе,  $t_1^L/t_2^L \neq t_1^R/t_2^R$ , что соответствует «диагональной» асимметрии параметров перескока. На рисунке 2.14 приведены результаты ренормгруппового подхода для линейной проводимости  $G$  при  $\Gamma_1^L = \Gamma_2^R = U/2$  и разных параметрах  $\Gamma_1^R = \Gamma_2^L = \Gamma_{12}^{RL}$ . Видно, что поведение проводимости сильно зависит от степени асимметрии системы. При малом отклонении  $\Gamma_{12}^{RL}$  от значения  $\Gamma_{12}^{RL} = U/2$ , которое соответствует симметричной системе, проводимость ведет себя аналогично случаю наличия только асимметрии туннелирования через квантовые точки (см. раздел 2.3.2), демонстрируя резкий асимметричный антирезонанс. При увеличении асимметрии системы форма кривой проводимости претерпевает существенные изменения, показывая паде-

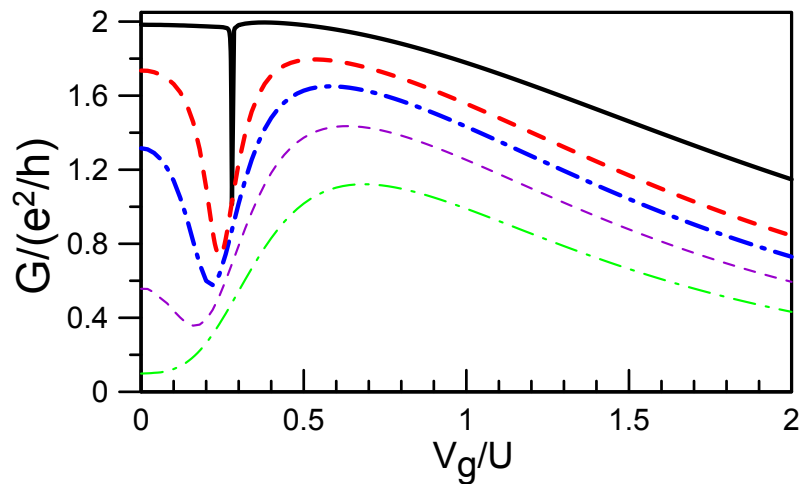


Рисунок 2.14 — Проводимость  $G$  как функция напряжения  $V_g$  в РГ подходе с контрчленом при  $\Gamma_1^L = \Gamma_2^R = U/2$ ,  $\Gamma_2^L = \Gamma_1^R = \Gamma_{12}^{RL}$  и  $H \rightarrow 0$  для  $\Gamma_{12}^{RL}/U = 0.45, 0.25, 0.2, 0.15, 0.1$  (от верхней кривой к нижней).

ние проводимости при  $V_g = 0$ . В промежуточных случаях  $\Gamma_{12}^{RL} = 0.25$  (штриховая линия) и  $\Gamma_{12}^{RL} = 0.2$  (штрихпунктирная линия) антирезонанс сохраняется, но его ширина становится больше при уменьшении параметра  $\Gamma_{12}^{RL}$ . При достаточно большой асимметрии системы резонанс утрачивает свой первоначальный вид и проводимость сильно подавлена вблизи  $V_g = 0$ .

Сопоставление особенностей зависимостей проводимости от запирающего напряжения с характерным видом проводимости в магнитной фазе системы для случая асимметрии системы, рассмотренной в разделе 2.3.2, позволяет предположить наличие магнитного момента в некоторой окрестности половинного заполнения при  $0.25 \lesssim \Gamma_{12}^{RL} < 0.5$ . В частности, на это указывает наличие отмеченной ранее связи между проводимостью и спиновым расщеплением электронных состояний системы, когда реализация последнего в окрестности половинного заполнения системы ( $V_g = 0$ ) приводит к тому, что проводимость почти достигает своего максимально возможного значения. Как видно из рисунка 2.15а, зависимость проводимости от параметра  $\Gamma_{12}^{RL}$  при  $V_g = 0$  имеет асимметричный «колоколообразный» вид с максимумом  $G/(e^2/h) \approx 2$  при значении  $\Gamma_{12}^{RL} = 0.5$ , которое отвечает полностью симметричной системе. В то же время, отмеченная область, характеризующаяся проводимостью  $G/(e^2/h) \approx 2$ , соответствует существенному спиновому расщеплению электронных состояний в пределе  $H \rightarrow 0$  (рисунок 2.15b).

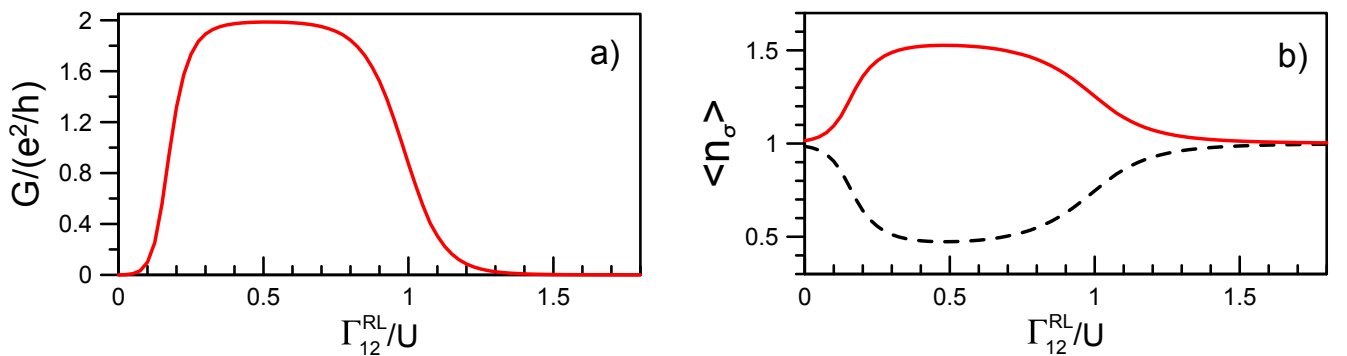


Рисунок 2.15 — Результаты ренормгруппового подхода с контрчленом для (а)  $G$ , (б)  $\langle n_\sigma \rangle = \sum_j \langle n_{j,\sigma} \rangle$  (сплошная/штриховая линии для  $\sigma = \uparrow / \downarrow$ ) как функций  $\Gamma_{12}^{RL}/U$  при  $V_g = 0$  и  $H \rightarrow 0$ . Остальные параметры соответствуют рисунку 2.14.



Результаты метода функциональной ренормгруппы для зависимости среднего значения квадрата оператора спина на связывающем (антисвязывающем) состоянии  $\langle \mathbf{S}_{s(a)}^2 \rangle$  от параметра  $\Gamma_{12}^{RL}$ , представленные на рисунке 2.16а, подтверждают связь рассмотренного поведения проводимости с наличием частично сформированного локального магнитного момента в системе. Как видно из рисунка 2.16а,  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle$  максимально в том же диапазоне  $\Gamma_{12}^{RL}$ , что проводимость и среднее заполнение  $\langle n_\uparrow \rangle$ . Возможность существования почти локального магнитного момента в данном диапазоне асимметрии системы обеспечивается малостью гибридизации антисвязывающего состояния с контактами (см. рисунок 2.16b), когда данное состояние почти не имеет связи с контактами.

В завершение рассмотрим случай, когда связь между квантовыми точками и контактами не фиксирована никакими условиями и ее выбор произволен. На рисунке 2.17 показаны РГ результаты для зависимостей  $G$  и  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  от напряжения  $V_g$  при  $\Gamma_1^L/U = 0.27$ ,  $\Gamma_2^L/U = 0.16$ ,  $\Gamma_1^R/U = 0.33$ ,  $\Gamma_2^R/U = 0.24$ . Для данного случая проводимость (рисунок 2.17а) демонстрирует характерные случаю асимметрии через квантовые точки особенности (см. раздел 2.3.2) – появление антирезонанса и возрастание проводимости вне региона резонанса при уменьшении напряжения  $|V_g|$ . Как было отмечено выше это поведение проводимости

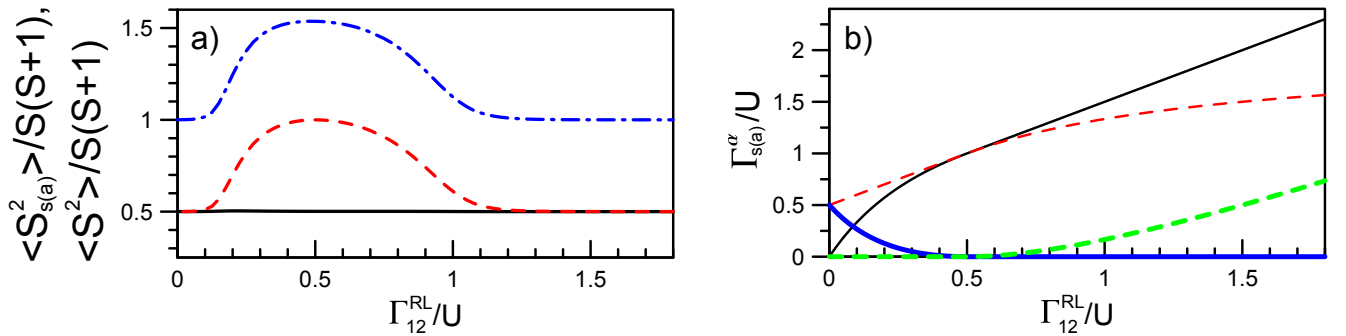


Рисунок 2.16 — Результаты метода функциональной ренормгруппы с контрчленом для (а)  $\langle \mathbf{S}_s^2 \rangle / S(S+1)$  (сплошная черная линия),  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle / S(S+1)$  (штриховая красная линия),  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle / S(S+1)$  (штрихпунктирная синяя линия), (б)  $\Gamma_s^\alpha$  (тонкая сплошная черная линия для  $\alpha = L$  и тонкая пунктирная красная линия для  $\alpha = R$ ),  $\Gamma_a^\alpha$  (толстая сплошная синяя линия для  $\alpha = L$  и толстая пунктирная зеленая линия для  $\alpha = R$ ) как функций  $\Gamma_{12}^{RL}/U$  при  $V_g = 0$ . Остальные параметры соответствуют рисунку 2.14.

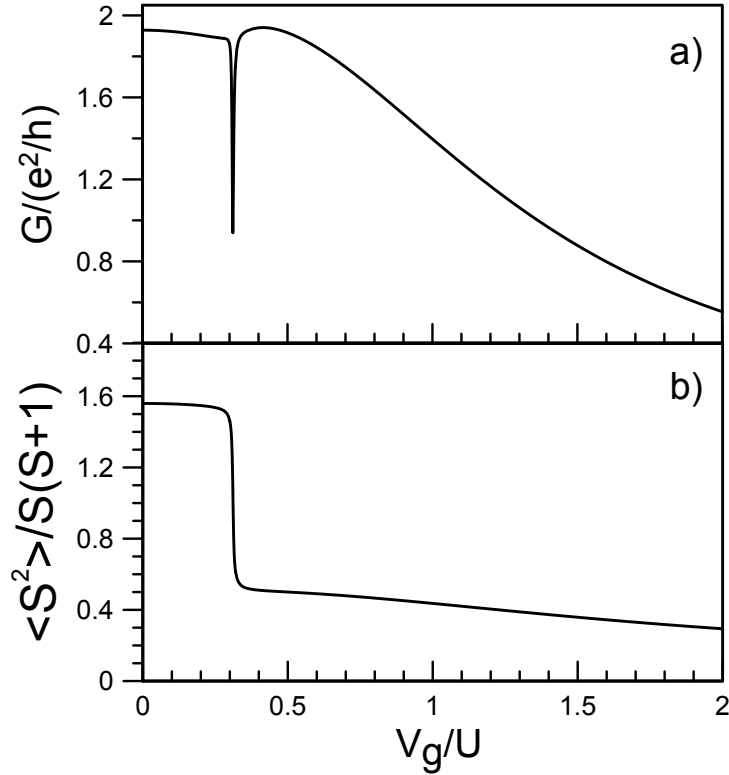


Рисунок 2.17 — Результаты метода ренормгруппы с контрчленом для (а) проводимости  $G$  (а) и (б)  $\langle S^2 \rangle$  как функций  $V_g/U$  при  $\Gamma_1^L/U = 0.27$ ,  $\Gamma_2^L/U = 0.16$ ,  $\Gamma_1^R/U = 0.33$ ,  $\Gamma_2^R/U = 0.24$  и  $H \rightarrow 0$ .

характерно для формирования магнитного момента в системе. Действительно, зависимость  $\langle S^2 \rangle$  от  $V_g$  (рисунок 2.17b) позволяет заключить, что даже при рассматриваемых произвольных параметрах гибридизации квантовых точек с контактами магнитный момент хорошо определен вблизи половинного заполнения.

Причина формирования локального момента для данного набора параметров становится ясна после перехода к базису связывающих и антисвязывающих состояний согласно предложенной в данном разделе процедуре. В базисе данных состояний мы получаем следующие параметры гибридизации:  $\Gamma_s^L \approx 0.429$ ,  $\Gamma_s^R \approx 0.570$ ,  $\Gamma_a^L \approx 0.001$  и  $\Gamma_a^R \approx 0$ . Следовательно, антисвязывающее состояние почти не имеет гибридизации с контактами. Это приводит к существованию почти локального магнитного момента на данном состоянии при наличии электрон-электронного взаимодействия. Таким образом, для произвольной асимметрии параметров перескока системы условие  $\Gamma_a^\alpha \ll \Gamma_s^\alpha$  можно рассматри-

вать в качестве общего критерия возможности существования частично сформированного локального магнитного момента на квантовых точках.

## 2.4 Основные результаты и выводы к главе 2

1. Предложена модификация метода функциональной ренормализационной группы, позволяющая описать корреляционные эффекты в фазе сингулярной ферми-жидкости, где взаимодействие приводит к возможности формирования локального магнитного момента в системе двух соединенных с общими контактами квантовых точек.

2. С помощью предложенного ренормгруппового подхода была проанализирована связь особенностей проводимости системы двух квантовых точек с ее магнитным состоянием при различном выборе асимметрии параметров перескока между квантовыми точками и контактами. В частности, представлен полуаналитический анализ проводимости для систем, параметры которых допускают построение эффективной модели системы в базисе связывающего и антисвязывающего состояний, которая характеризуется полным отсутствием матричных элементов перескока между антисвязывающим состоянием и контактами. Это включало случаи симметричной (изотропной) системы, асимметрии туннелирования через контакты, асимметрии туннелирования через квантовые точки и комбинацию данных случаев. Показано, что в зависимости от типа асимметрии система может демонстрировать либо квантовый фазовый переход первого рода в состояние сингулярной ферми-жидкости, сопровождающийся, аналогично случаю симметричной системы, скачкообразным изменением проводимости, или непрерывный квантовый фазовый переход, при котором проводимость имеет асимметричный резонанс вблизи точки фазового перехода.

3. Проанализирована возможность частичного формирования локального магнитного момента в системах двух квантовых точек, обладающих произвольными параметрами перескока между квантовыми точками и контактами. Предложен универсальный метод анализа данных систем, заключающийся в

построении эффективной модели в базисе особым образом определенных связывающих и антисвязывающих состояний.

Основные результаты, обсуждаемые в главе 2, опубликованы в работах [104–106].

### 3 Равновесные и неравновесные свойства системы четырех квантовых точек

В данной главе для системы четырех квантовых точек исследуется поведение магнитных моментов вблизи равновесия и при приложении конечного напряжения к контактам. Устанавливается связь особенностей электронного транспорта и переходов между различными магнитными состояниями системы. Для описания эффектов электрон-электронного взаимодействия используется метод функциональной ренормализационной группы, обобщенный на формализм неравновесных функций Грина.

#### 3.1 Модель и детали расчетов

Рассматриваемая система включает в себя четыре квантовые точки QD1-QD4, образующие кольцевую геометрию, соединенную через квантовые точки QD1 и QD4 с левым (L) и правым (R) контактам (см. рисунок 3.1). Гамильтониан (1.1) в данном случае принимает вид:

$$\mathcal{H} = \underbrace{\sum_{j=1}^4 \mathcal{H}_{\text{dots}}^j}_{\mathcal{H}_{\text{dots}}} + \mathcal{H}_{\text{T}} + \mathcal{H}_{\text{leads}} - \underbrace{\sum_{\sigma} \left[ \left( t_{LC}^{\dagger} d_{1,\sigma} + t_{RC}^{\dagger} d_{4,\sigma} \right) + \text{H.c.} \right]}_{\mathcal{H}_{\text{coupl}}}, \quad (3.1)$$

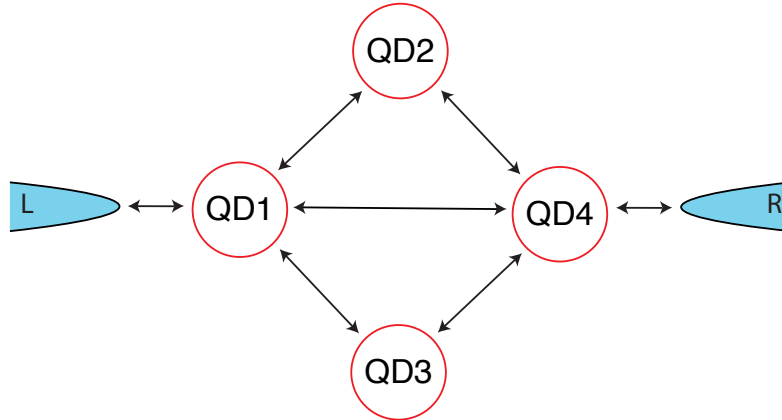


Рисунок 3.1 — Схематическое представление системы четырех квантовых точек (QD1-QD4), соединенных с левым (L) и правым (R) контактами.

где  $\mathcal{H}_{\text{dots}}^j$  – гамильтониан изолированной  $j$ -й квантовой точки:

$$\mathcal{H}_{\text{dots}}^j = \sum_{\sigma} \epsilon_{\sigma} n_{j,\sigma} + U \left( n_{j,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left( n_{j,\downarrow} - \frac{1}{2} \right), \quad (3.2)$$

$\mathcal{H}_{\text{T}}$  – описывает процессы перескока электронов между квантовыми точками:

$$\mathcal{H}_{\text{T}} = - \sum_{\sigma} \left[ \left( t_{12} d_{1,\sigma}^{\dagger} d_{2,\sigma} + t_{24} d_{2,\sigma}^{\dagger} d_{4,\sigma} + t_{13} d_{1,\sigma}^{\dagger} d_{3,\sigma} \right. \right. \\ \left. \left. + t_{34} d_{3,\sigma}^{\dagger} d_{4,\sigma} + t_{14} d_{1,\sigma}^{\dagger} d_{4,\sigma} \right) + \text{H.c.} \right]. \quad (3.3)$$

В выражениях (3.1)-(3.3)  $\epsilon_{\sigma}$  определяет уровни энергии квантовых точек,  $U$  и  $t_{ij}$  ( $i, j \in \{1..4\}$ ) – параметр локального кулоновского взаимодействия и матричные элементы перескока между квантовыми точками,  $t_L$  ( $t_R$ ) – параметр перескока между квантовой точкой QD1 (QD4) и контактом L (R). Как и при рассмотрении системы двух квантовых точек (см. главу 2) полагаем, что  $\epsilon_{\sigma} = V_g - \sigma H$ , где  $V_g$  – запирающее напряжение и  $H$  – магнитное поле,  $\sigma \in \{-1/2(\downarrow), 1/2(\uparrow)\}$ . Неравновесный режим системы задается путем приложения напряжения смещения  $V_b \neq 0$  между контактами (определяются гамильтонианом  $\mathcal{H}_{\text{leads}}$ , заданным (1.3)):  $\mu_L = -\mu_R = V_b/2$ ,  $\mu_L - \mu_R = V_b$ .

При исследовании системы четырех квантовых точек удобно ограничиться рассмотрением случая диагональной асимметрии параметров перескока:  $t_{12} = t_{34} = t$ ,  $t_{13} = t_{24} = \gamma t$ ,  $0 < \gamma < 1$ . Как будет показано далее, наличие матричного элемента  $t_{14}$  не приводит к качественному изменению картины формирования локальных магнитных моментов (однако, оказывает существенное влияние на электронный транспорт), поэтому анализ магнитных режимов системы четырех квантовых точек в целом сосредоточен на рассмотрении случая  $t_{14} = 0$ . При  $t_{14} = 0$  данный выбор параметров перескока между квантовыми точками позволяет проанализировать эволюцию системы при изменении параметра  $\gamma$  между двумя предельными случаями:  $\gamma = 1$ , отвечающего полностью симметричной системе ( $t_{ij} \rightarrow t$ ), и  $\gamma = 0$ , при котором система представляет собой две несвязанные подсистемы и проводимость/ток отсутствует.

Возможность прямого туннелирования между квантовыми точками QD2 и QD3 не рассматривается, так как ее учет не приводит к качественному изменению проводимости при малой величине амплитуд туннелирования, а при больших амплитудах разрушает локальный магнитный момент.

Для нахождения приближенной собственно-энергетической части (СЭЧ;  $\Sigma$ ) системы, которая в данном случае является матрицей  $8 \times 8$  для каждой проекции спина, будет использован метод функциональной ренормализационной группы в формализме Келдыша (раздел 1.2). Равновесный случай будет рассмотрен также в рамках данной техники при помощи предельного перехода  $V_b \rightarrow 0$ . Для рассматриваемой системы «затравочная» функция Грина  $\mathcal{G}_0$  в формализме Келдыша имеет вид (см. раздел 1.1.2):

$$\mathcal{G}_0 = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_0^{--} & \mathcal{G}_0^{-+} \\ \mathcal{G}_0^{+-} & \mathcal{G}_0^{++} \end{pmatrix} = [\mathcal{G}_{\text{dots}}^{-1} - \Sigma_{\text{bath}}]^{-1}, \quad (3.4)$$

где  $\mathcal{G}_{\text{dots}}$  – функция Грина изолированных от контактов квантовых точек:

$$[\mathcal{G}_{\text{dots}}^{-1}]_{jj';\sigma}^{kk'} = -k\delta_{kk'} \times \begin{pmatrix} \omega - \epsilon_\sigma & t_{12} & t_{13} & t_{14} \\ t_{12} & \omega - \epsilon_\sigma & 0 & t_{24} \\ t_{13} & 0 & \omega - \epsilon_\sigma & t_{34} \\ t_{14} & t_{24} & t_{34} & \omega - \epsilon_\sigma \end{pmatrix}_{jj'}, \quad (3.5)$$

где  $k(k') = \pm$  – индексы Келдыша, для которых также используется обозначение  $k(k') = \pm 1$ . Член  $\Sigma_{\text{bath}}$  определяет связь квантовых точек с контактами:

$$\begin{aligned} [\Sigma_{\text{bath}}]_{jj';\sigma}^{kk'} &= -i\delta_{jj'} \sum_{\alpha} \Theta_j^{\alpha} \Gamma_{\alpha} \begin{pmatrix} 1 - 2f(\omega - \mu_{\alpha}) & 2f(\omega - \mu_{\alpha}) \\ -2f(-(\omega - \mu_{\alpha})) & 1 - 2f(\omega - \mu_{\alpha}) \end{pmatrix}_{kk'} \\ &= -i\delta_{jj'} \sum_{\alpha} \Theta_j^{\alpha} \Gamma_{\alpha} [(2\delta_{kk'} - 1)\text{sign}(\omega - \mu_{\alpha}) + k(\delta_{kk'} - 1)], \end{aligned} \quad (3.6)$$

где  $\Theta_j^{\alpha} = \delta_{\alpha L}\delta_{j1} + \delta_{\alpha R}\delta_{j4}$ ,  $\Gamma_{L(R)} = \pi|t_{L(R)}|^2\rho_{\text{lead}}(0)$  – параметр гибридизации,  $\rho_{\text{lead}}$  – локальная плотность состояний на последнем узле контакта,  $f(\omega - \mu_{\alpha}) =$

$\theta(\mu_\alpha - \omega)$  – функция Ферми при нулевой температуре  $T = 0$  ( $\theta(x)$  – функция Хевисайда) и  $\mu_\alpha$  – химический потенциал контакта  $\alpha$ . Далее полагаем  $\Gamma_L = \Gamma_R = \Gamma$ , используя  $\Gamma$  в качестве единицы энергии.

Введение масштаба  $\Lambda$  в  $\mathcal{G}_0$  осуществляется методом вспомогательных резервуаров (см. раздел 1.2.3). При рассмотрении равновесных режимов будут использоваться схемы усечения иерархии РГ уравнений первого и второго порядка (см. раздел 1.2.2). Чтобы обеспечить закон сохранения тока при рассмотрении неравновесных режимов, будет использоваться схема усечения иерархии РГ уравнений первого порядка, которая учитывает только перенормировку СЭЧ. В этом случае РГ уравнение для  $\Sigma^\Lambda$  дается выражением (1.50) главы 1:

$$\partial_\Lambda \Sigma_{jj';\sigma}^{kk';\Lambda} = -ikU \delta_{kk'} \delta_{jj'} \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{S}_{jj';\bar{\sigma}}^{kk;\Lambda}(\omega), \quad (3.7)$$

где  $\mathcal{S}_{jj';\sigma}^{kk';\Lambda} = -\sum_{ii'} \sum_{qq'} \mathcal{G}_{jj';\sigma}^{kq';\Lambda} \partial_\Lambda [\Sigma_{\text{cut}}^\Lambda]_{i'i;\sigma}^{q'q} \mathcal{G}_{i'i;\sigma}^{qk';\Lambda}$  – одномасштабный пропагатор,  $\mathcal{G}^\Lambda = [\mathcal{G}_0^{-1} - \Sigma_{\text{cut}}^\Lambda - \Sigma^\Lambda]^{-1}$  – полная, зависящая от масштаба  $\Lambda$ , функция Грина, где

$$[\Sigma_{\text{cut}}^\Lambda]_{jj';\sigma}^{kk'} = -i\Lambda \delta_{jj'} [(2\delta_{kk'} - 1)\text{sign}(\omega) + k(\delta_{kk'} - 1)] \quad (3.8)$$

определяет зависимость  $\mathcal{G}_0$  от параметра  $\Lambda$  в рамках схемы вспомогательных резервуаров и  $\bar{\sigma} = -\sigma$ .

Поскольку в используемом приближении СЭЧ не зависит от частоты, параметры  $\tilde{\epsilon}_{j,\sigma} = \epsilon_\sigma + \Sigma_{jj;\sigma}^{--;\Lambda \rightarrow 0}$  можно рассматривать в качестве эффективных перенормированных уровней энергии квантовых точек. Это позволяет рассматривать систему с гамильтонианом (3.1) как эффективную систему без взаимодействия, определенную гамильтонианом:  $\mathcal{H}^{\text{eff}} = \mathcal{H}_{\text{dots}}^{\text{eff}} + \mathcal{H}_{\text{leads}} + \mathcal{H}_{\text{coupl}}$ , где

$$\mathcal{H}_{\text{dots}}^{\text{eff}} = \sum_{j=1}^4 \sum_{\sigma} \tilde{\epsilon}_{j,\sigma} n_{j,\sigma} + \mathcal{H}_T \quad (3.9)$$

представляет собой эффективный гамильтониан подсистемы квантовых точек. Здесь мы учли, что для РГ схемы, не учитывающей перенормировку двухчастичной вершины, генерируются только диагональные компоненты СЭЧ.



### 3.2 Формирование магнитных моментов в равновесном режиме

Рассмотрим возможные магнитные режимы системы четырех квантовых точек в равновесном случае (при  $V_b = 0$ ), обусловленные наличием электрон-электронного взаимодействия. По аналогии с системой двух квантовых точек, рассмотренной в главе 2, для дальнейшего анализа удобно перейти от набора состояний ( $\{d_{j,\sigma}\}$ ) к  $(d_{1,\sigma}, d_{s,\sigma}, d_{a,\sigma}, d_{4,\sigma})$ , где определены связывающее ( $d_{s,\sigma}$ ) и антисвязывающее ( $d_{a,\sigma}$ ) состояния:

$$\begin{pmatrix} d_{s,\sigma} \\ d_{a,\sigma} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1+\eta^2}} \begin{pmatrix} 1 & \eta \\ -\eta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{2,\sigma} \\ d_{3,\sigma} \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Преобразование эффективного гамильтониана системы  $\mathcal{H}^{\text{eff}}$  к базису состояний  $(d_{1,\sigma}, d_{s,\sigma}, d_{a,\sigma}, d_{4,\sigma})$  приведет к видоизменению только гамильтониана подсистемы квантовых точек  $\mathcal{H}_{\text{dots}}^{\text{eff}}$  (3.9):

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{dots}}^{\text{eff}} = & \sum_{p,\sigma} \tilde{\epsilon}_{p,\sigma} d_{p,\sigma}^\dagger d_{p,\sigma} - \sum_{\sigma} \left[ \left( t_{sa}^\sigma d_{s,\sigma}^\dagger d_{a,\sigma} + t_{1s} d_{1,\sigma}^\dagger d_{s,\sigma} \right. \right. \\ & \left. \left. + t_{4s} d_{4,\sigma}^\dagger d_{s,\sigma} + t_{1a} d_{1,\sigma}^\dagger d_{a,\sigma} + t_{4a} d_{4,\sigma}^\dagger d_{a,\sigma} + t_{14} d_{1,\sigma}^\dagger d_{4,\sigma} \right) + \text{H.c.} \right], \quad (3.11) \end{aligned}$$

где  $p \in \{1, s, a, 4\}$ ,  $\tilde{\epsilon}_{s(a),\sigma} = h^2 [\tilde{\epsilon}_{2(3),\sigma} + \eta^2 \tilde{\epsilon}_{3(2),\sigma}]$  и ненулевые матричные элементы перескока (не включая  $t_{14}$ ) в новом базисе имеют вид:

$$\begin{aligned} t_{1s} &= h(t_{12} + \eta t_{13}) = h(1 + \gamma\eta)t, \\ t_{4s} &= h(t_{24} + \eta t_{34}) = h(\gamma + \eta)t, \\ t_{1a} &= h(t_{13} - \eta t_{12}) = h(\gamma - \eta)t, \\ t_{4a} &= h(t_{34} - \eta t_{24}) = h(1 - \gamma\eta)t, \\ t_{sa}^\sigma &= h^2 [\eta (\tilde{\epsilon}_{2,\sigma} - \tilde{\epsilon}_{3,\sigma})], \end{aligned} \quad (3.12)$$

где  $h = (1 + \eta^2)^{-1/2}$ ,  $0 < \gamma < 1$ . Поскольку РГ схемы, не рассматривающие ренормгрупповой поток двухчастичной вершины, не перенормируют амплитуды перескока  $t_{ij}$  ( $i \neq j$ ;  $i, j \in \{1..4\}$ ), то и параметры  $t_{pq}$  ( $p \in \{1, 4\}$ ,  $q \in \{s, a\}$ )

в данном приближении постоянны (отметим, что  $t_{sa}^\sigma = 0$  при  $V_b = 0$ ). При учете РГ потока двухчастичной вершины данная картина изменяется в силу перенормировки недиагональных элементов СЭЧ, что ведет к генерации новых эффективных перескоков в системе. Однако, как будет отмечено ниже, эти процессы не приводят к изменению общей картины формирования локальных магнитных моментов.

Аналогично системе двух квантовых точек (см. главу 2), антисвязывающему состоянию сопоставим операторы  $d_{a,\sigma}(d_{a,\sigma}^\dagger)$ , определяемые преобразованием (3.10), в котором параметр  $\eta$  фиксирован условием минимума связи данного состояния с контактами. Для этого рассмотрим минимум функции  $F(\eta) = |t_{1a}| + |t_{4a}|$ , который, как следует из (3.12), достигается при двух значениях  $\eta_1 = \gamma$  и  $\eta_2 = \gamma^{-1}$ . Подстановка  $\eta_{1(2)}$  в (3.12) приводит к физически эквивалентным ситуациям, поэтому в дальнейшем фиксируем  $\eta = \eta_1$ . Учитывая последнее, приходим к следующим выражениям для матричных элементов перескока между квантовыми точками QD1/QD4 и связывающим/антисвязывающим состоянием:  $t_{1s} = (1 + \gamma^2)^{1/2}t$ ,  $t_{4s} = 2\gamma(1 + \gamma^2)^{-1/2}t$ ,  $t_{1a} = 0$  и  $t_{4a} = (1 - \gamma^2)(1 + \gamma^2)^{-1/2}t$ . Отметим, что при  $\gamma = 1$  когда система полностью симметрична, т.е.  $t_{ij} = t$ , мы получаем:  $t_{1s} = t_{4s} = \sqrt{2}t$  и  $t_{1a} = t_{4a} = 0$ . Следовательно, при  $\gamma = 1$  антисвязывающее состояние не имеет непосредственной связи с контактами (однако, оно связано с другими состояниями двухчастичными взаимодействиями).

На рисунке 3.2 приведены результаты РГ метода для зависимостей  $\langle \mathbf{S}_{s/a}^2 \rangle$  от параметра  $\gamma$  при  $V_g = 0$ ,  $H/\Gamma = 10^{-3}$ ,  $U = 2\Gamma$ ,  $t_{14} = 0$  и различных  $t$ . При фиксированном малом  $t$  РГ метод, учитывающий только перенормировку СЭЧ, демонстрирует, что  $\langle \mathbf{S}_{s(a)}^2 \rangle / S(S + 1) \approx 1$  во всем диапазоне изменения параметра  $\gamma$  (см. например случай  $t/\Gamma = 0.05$  на рисунке 3.2а). При этом  $\langle n_{s(a),\uparrow} \rangle \approx 1$  и  $\langle n_{s(a),\downarrow} \rangle \approx 0$  (см. подпись к рисунку 3.3а), и как следствие  $\langle S_{s(a)}^z \rangle \approx 1/2$ . Данный результат указывает на наличие почти локального магнитного момента как на связывающем, так и на антисвязывающем состоянии. Это обусловлено тем, что данные состояния почти не имеют связи с контактами в силу малости матричных элементов перескока между данными состояниями и квантовыми

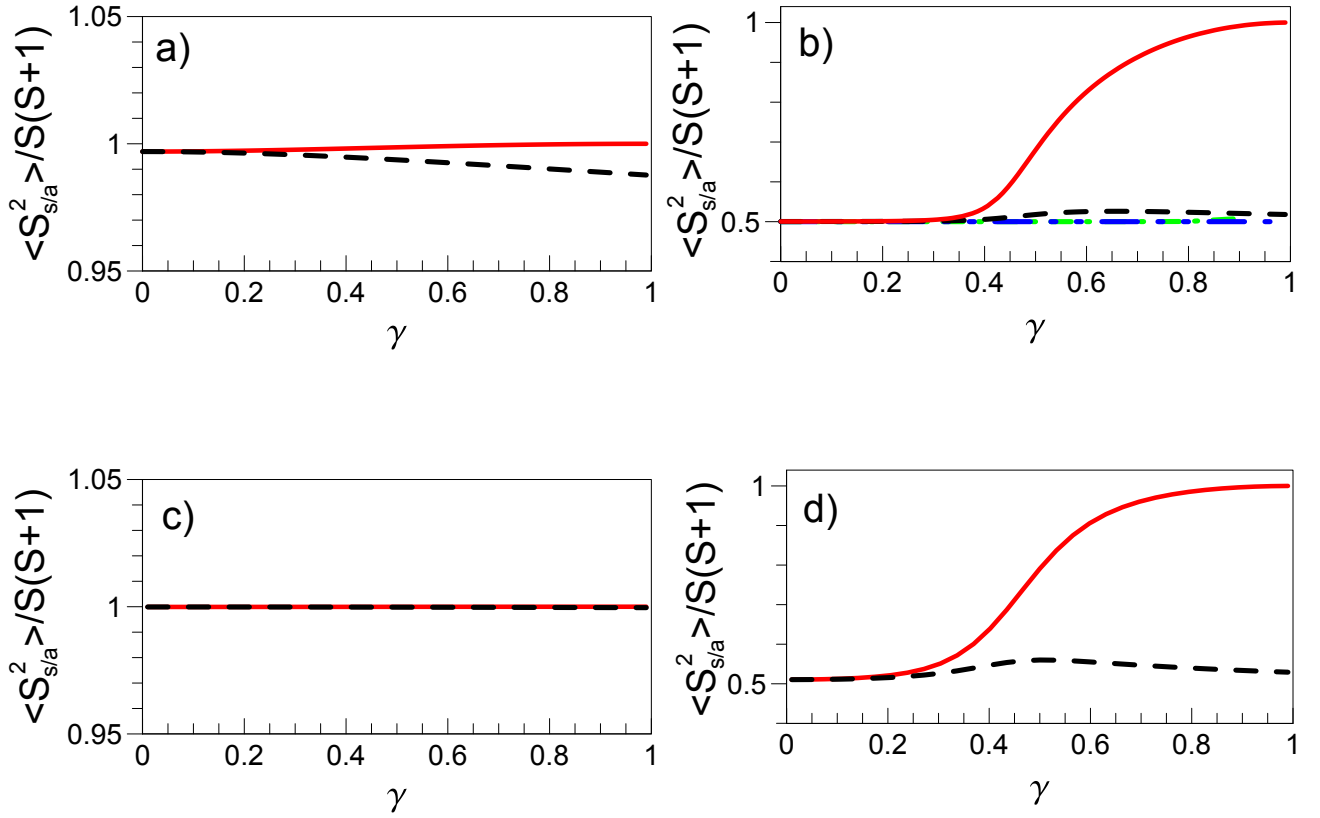


Рисунок 3.2 — Результаты РГ метода без учета (верхние панели; а и б) и с учетом (нижние панели; с и d) перенормировки двухчастичной вершины для  $\langle \mathbf{S}_s^2 \rangle$  (пунктирная линия) и  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle$  (сплошная линия) как функций  $\gamma$  при  $t_{14} = V_g = 0$ ,  $U = 2\Gamma$ ,  $H/\Gamma = 10^{-3}$ ,  $t/\Gamma = 0.05$  (а и с) и  $t/\Gamma = 0.5$  (б и d). Штрихпунктирная и штрихпунктирная с двумя пунктирами линии на рисунке 3.2b —  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle$  и  $\langle \mathbf{S}_s^2 \rangle$  при  $U = 0$ .

точками QD1 и QD4, которые непосредственно гибридизованы с контактами, при малых  $t$ , т.е.  $t_{pq} \ll U$  ( $p \in \{1,4\}$ ,  $q \in \{s,a\}$ ). Важно отметить, что в этом и рассматриваемых далее случаях  $\langle \mathbf{S}_{1(4)}^2 \rangle / S(S+1)$  близко к значению  $1/2$  и  $\langle n_{1(4),\sigma} \rangle \approx 1/2$ , (как следствие,  $\langle S_{1(4)}^z \rangle$  малы), что свидетельствует об отсутствии магнитных моментов на квантовых точках QD1 и QD4. Среднее  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle / S(S+1)$  монотонно возрастает до максимального значения  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle / S(S+1) = 1$  при  $\gamma = 1$  из-за уменьшения матричного элемента перескока  $t_{4a}$  между антисвязывающим состоянием и квантовой точкой QD4 (в рамках принятого преобразования  $t_{4a} = 0$  для  $\gamma = 1$  и  $t_{1a} = 0$  при любом выборе  $\gamma$ ). В отличие от этого, оба матричных элемента перескока  $t_{1s}$  и  $t_{4s}$ , относящиеся к связывающему состоянию, возрастают с  $\gamma$ , что приводит к плавному уменьшению  $\langle \mathbf{S}_s^2 \rangle$ . Как видно из рисунка 3.3b, среднее значение квадрата оператора полного спина принима-

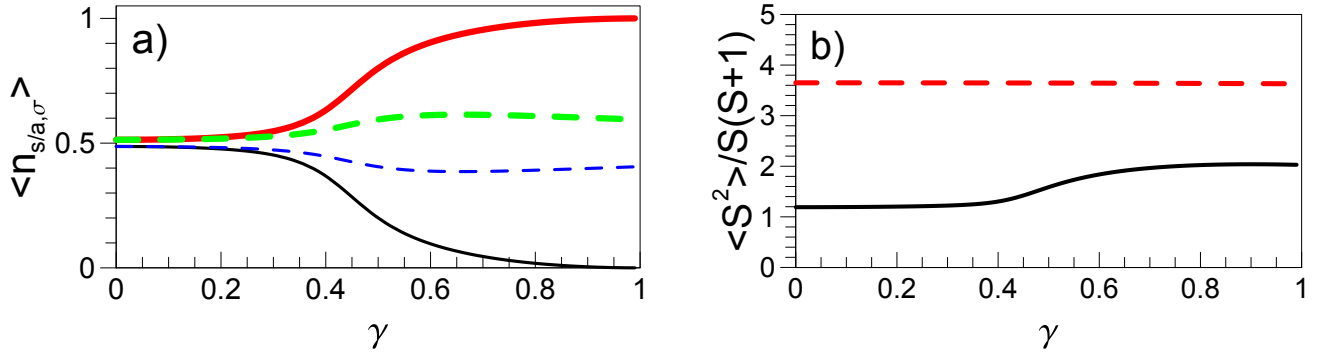


Рисунок 3.3 — Левая панель (a):  $\langle n_{a,\sigma} \rangle$  (толстая сплошная (красная) линия для  $\sigma = \uparrow$  и тонкая сплошная (черная) линия для  $\sigma = \downarrow$ ) и  $\langle n_{s,\sigma} \rangle$  (толстая пунктирная (зеленая) линия для  $\sigma = \uparrow$  и тонкая пунктирная (синяя) линия для  $\sigma = \downarrow$ ) как функции параметра  $\gamma$  при  $t = 0.5$ . Аналогичные зависимости для  $t = 0.05$  не приводятся, поскольку в этом случае числа заполнения  $\langle n_{a(s),\uparrow} \rangle \approx 1$  ( $\langle n_{a(s),\downarrow} \rangle \approx 0$ ) при любом  $\gamma$ . Правая панель (b):  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  как функция параметра  $\gamma$  при  $t = 0.5$  (сплошная линия) и  $t = 0.05$  (пунктирная линия). Остальные параметры рисунка 3.3 такие же, как для рисунка 3.2.

ет практически постоянное значение  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle / S(S+1) \approx 3.6$ , которое свидетельствует о преобладании ферромагнитных спин-спиновых корреляций в системе  $\sum_{p,q} \langle \mathbf{S}_p \mathbf{S}_q \rangle = \left( \langle \mathbf{S}^2 \rangle - \sum_p \langle \mathbf{S}_p^2 \rangle \right) \approx 0.5$ . При этом, основной вклад происходит от ферромагнитных спиновых корреляций квантовых точек QD2 и QD3 (см. рисунок 3.13). Таким образом, при малых значениях параметра  $t$  имеет место формирование двух почти локальных магнитных моментов в системе, устойчивое по отношению к произвольным вариациям параметра  $\gamma$ . Среднее значение квадрата оператора спина на квантовых точках QD2 and QD3  $\langle \mathbf{S}_{2(3)}^2 \rangle / S(S+1) \approx 1$ .

Увеличение параметра перескока  $t$  при малых  $\gamma$  (в частности, при  $\gamma = 0$ ) приводит к делокализации электронных состояний. Данное обстоятельство влечет постепенное уменьшение значений РГ результатов для  $\langle \mathbf{S}_{a(s)}^2 \rangle$  при  $\gamma \rightarrow 0$ . Начиная с некоторого достаточно большого  $t$  ( $t \gtrsim \Gamma/2$ ) имеем  $\langle \mathbf{S}_{a(s)}^2 \rangle / S(S+1) \rightarrow 1/2$  при  $\gamma \rightarrow 0$ , что свидетельствует об отсутствии локальных магнитных моментов на связывающем/антисвязывающем состояниях. Данная ситуация реализуется, например, в случае  $t = 0.5\Gamma$  и  $\gamma = 0.1$  (см. рисунок 3.2b). В то же время, при увеличении  $\gamma$  от  $\gamma = 0$  до  $\gamma = 1$ ,  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle / S(S+1)$  возрастает с  $1/2$  до  $1$  (рисунок 3.2b), показывая наличие локального магнитного момен-

та на антисвязывающем состоянии при  $\gamma \gtrsim 0.6$  (в этом случае  $\langle n_{a,\uparrow} \rangle \approx 1$ ,  $\langle n_{a,\downarrow} \rangle \approx 0$ ,  $\langle n_{s,\sigma} \rangle \approx 0.5$  как видно из рисунка 3.3а). Это объясняется тем, что при любом выборе  $t$  антисвязывающее состояние почти не имеет непосредственной гибридизации с контактами при  $\gamma \rightarrow 1$  (матричный элемент перескока  $t_{4a}$  (см. 3.12) убывает до нуля). Следовательно, локальный магнитный момент на антисвязывающем состоянии всегда хорошо определен при  $\gamma \rightarrow 1$ . Указанное поведение  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle$  приводит к монотонному росту  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  при увеличении симметрии системы (увеличении параметра  $\gamma$ ; рисунок 3.3b). При этом для больших  $t$  среднее  $\langle \mathbf{S}_s^2 \rangle / S(S+1) \approx 1/2$  и слабо зависит от  $\gamma$  (см. рисунок 3.2b), поскольку связывающее состояние имеет большую величину гибридизации с квантовыми точками QD1 и QD4, которые непосредственно связаны с контактами. Таким образом, для достаточно больших  $t$  ( $t \gtrsim \Gamma/2$ ) только антисвязывающее состояние ответственно за возникновение локального магнитного момента в системе. В частности, почти локальный магнитный момент на антисвязывающем состоянии реализуется для случая  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$ . Для сравнения на рисунке 3.2b приведены зависимости  $\langle \mathbf{S}_{s(a)}^2 \rangle$  от параметра  $\gamma$  при  $U = 0$ . Можно видеть, что при любом  $\gamma$  средние  $\langle \mathbf{S}_{s(a)}^2 \rangle / S(S+1) \approx 1/2$ , что свидетельствует об отсутствии магнитных моментов при отсутствии электрон-электронного взаимодействия в системе.

Сравним представленные выше результаты с результатами РГ подхода, учитывающего перенормировку двухчастичной вершины. Для устранения проблемы расходимости вершин электрон-электронного взаимодействия при  $\Lambda \rightarrow 0$  применяется предложенная в главе 2 техника включения контрчлена в РГ поток. При расчетах указанная техника реализуется путем использования линейного контрчлена (2.9) с  $\tilde{H}/\Gamma = 0.02$  и  $\Lambda_c/\Gamma = 0.02$ . Применение данного РГ подхода обнаруживает, что для промежуточных и больших величин параметров перескока между квантовыми точками  $\min(t_{ij}) \gtrsim U, \Gamma$  ( $i, j \in \{1, 2\}$ ) учет перенормировки двухчастичной вершины вносит лишь небольшие количественные поправки в результаты, полученные РГ схемой, учитывающей только перенормировку СЭЧ (см. к примеру результаты для  $\langle \mathbf{S}_{s(a)}^2 \rangle$  при  $t = 0.5$ , показанные на рисунке 3.2d). Для режима, когда параметры перескока малы

$\max(t_{ij}) \ll \max(U, \Gamma)$ , разность между компонентами СЭЧ для  $\sigma = \uparrow$  и  $\sigma = \downarrow$  в РГ подходе, учитывающем поток двухчастичной вершины, несколько больше по сравнению с РГ схемой без учета перенормировки соответствующей вершины электрон-электронного взаимодействия. Это приводит к большей локализации магнитных моментов в системе, что отражается в увеличении  $\langle \mathbf{S}_{s(a)}^2 \rangle$  (см. например случай  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$ , приведенный на рисунке 3.2с). Однако, даже в этом случае, общая физическая картина формирования локальных магнитных моментов в системе остается неизменной.

На рисунке 3.4 приведены результаты РГ метода без учета перенормировки двухчастичной вершины для зависимостей  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle$  и  $\langle \mathbf{S}_s^2 \rangle$  от параметра  $\gamma$  при  $V_g \neq 0$  и  $t_{14} \neq 0$ . Аналогично системе двух квантовых точек (см. главу 2) магнитные моменты по-прежнему формируются при напряжениях, отвечающих некоторой окрестности напряжения  $V_g = 0$ , которое соответствует половинному заполнению системы. В то же время, достаточно далеко от половинного заполнения, когда все состояния заполнены ( $V_g \ll -\Gamma, -U$ ) или вакантны ( $V_g \gg \Gamma, U$ ), образование локальных магнитных моментов невозможно (см. например случай  $(V_g/\Gamma, t_{14}/\Gamma) = (2, 0)$ , отвечающий «парамагнитному» режиму системы, в отличие от случая  $(V_g/\Gamma, t_{14}/\Gamma) = (1, 0)$ , при котором антисвязывающее состояние демонстрирует наличие почти локального магнитного момента при  $\gamma \approx 1$ ). Учет  $t_{14}$  не приводит к существенному изменению рассмотренной

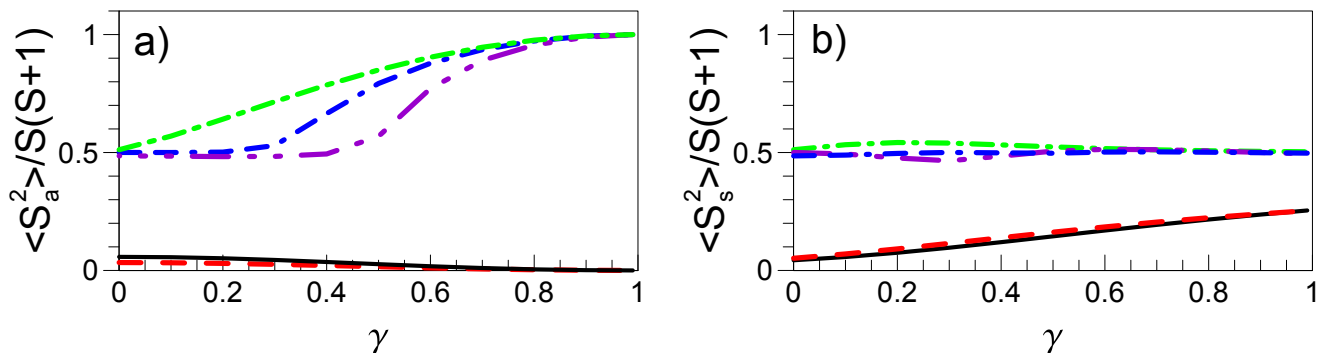


Рисунок 3.4 — Результаты РГ метода для  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle$  (a) и  $\langle \mathbf{S}_s^2 \rangle$  (b) как функций параметра  $\gamma$  при  $(V_g/\Gamma, t_{14}/\Gamma) = (1, 0)$  (штрихпунктирная с двумя штрихами линия),  $(0, 1)$  (штрихпунктирная с двумя пунктирами линия),  $(1, 1)$  (штрихпунктирная линия),  $(2, 0)$  (штриховая линия),  $(2, 1)$  (сплошная линия). Остальные параметры рисунка 3.4 такие же, как для рисунка 3.2.

картины даже при  $t_{14} \sim \Gamma$  (см. рисунок 3.4). Это связано с тем, что  $t_{14}$  обеспечивает только косвенную связь связывающего и антисвязывающего состояния с контактами, величина которой не является существенной для «размытия» магнитных моментов на данных состояниях.

### 3.3 Линейная проводимость и эффекты спиновой фильтрации

Рассмотрим результаты метода функциональной ренормгруппы для транспортных характеристик системы четырех квантовых точек в режиме линейного отклика ( $V_b \rightarrow 0$ ). Спин-зависимая линейная проводимость  $G_\sigma$  для рассматриваемой системы согласно формуле Ландауэра [9; 112; 113] имеет вид:

$$G_\sigma = (4e^2/h)\Gamma_L\Gamma_R|\mathcal{G}_{14;\sigma}^r(\omega=0)|^2, \quad (3.13)$$

где  $\mathcal{G}^r = \mathcal{G}^{--;\Lambda \rightarrow 0} - \mathcal{G}^{+;\Lambda \rightarrow 0}$  – запаздывающая функция Грина при  $\Lambda \rightarrow 0$ .

Прежде чем переходить к анализу проводимости в различных спиновых каналах, рассмотрим общие особенности полной проводимости системы  $G = G_\uparrow + G_\downarrow$ , связанные с наличием магнитных моментов на квантовых точках. На рисунке 3.5а представлена зависимость  $G(V_g)$ , полученная РГ методом без учета перенормировки двухчастичной вершины, для различных геометрий систем  $(t/\Gamma, \gamma) \in \{(0.05, 0.9), (0.5, 0.9), (0.5, 0.1)\}$  при  $t_{14} = 0$ . Для случаев  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$  и  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$ , которые характеризуются наличием почти локальных магнитных моментов при  $V_g = 0$ , зависимость проводимости от  $V_g$  демонстрирует появление резких особенностей в узкой окрестности некоторого запирающего напряжения  $V_g^c = V_g^c(t, \gamma)$  (отмечены на рисунке 3.5а как  $V_g^{c1}$  для случая  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  и  $V_g^{c2}$  при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$ ).

Для напряжений  $|V_g| < V_g^c$  числа заполнения и спин-спиновые корреляционные функции близки к своим значениям при  $V_g = 0$  (см. предыдущий раздел), в том числе, как видно из рисунка 3.5b:  $\langle S^z \rangle / S \approx 1$ ,  $\langle \mathbf{S}_{a(s)}^2 \rangle / S(S+1) \approx 1(1/2)$  при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  и  $\langle S^z \rangle / S \approx 2$ ,  $\langle \mathbf{S}_{a(s)}^2 \rangle / S(S+1) \approx 1$  для  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$ . При напряжениях  $|V_g| > V_g^c$  реализуется режим, при котором  $\langle S^z \rangle \approx 0$ ,

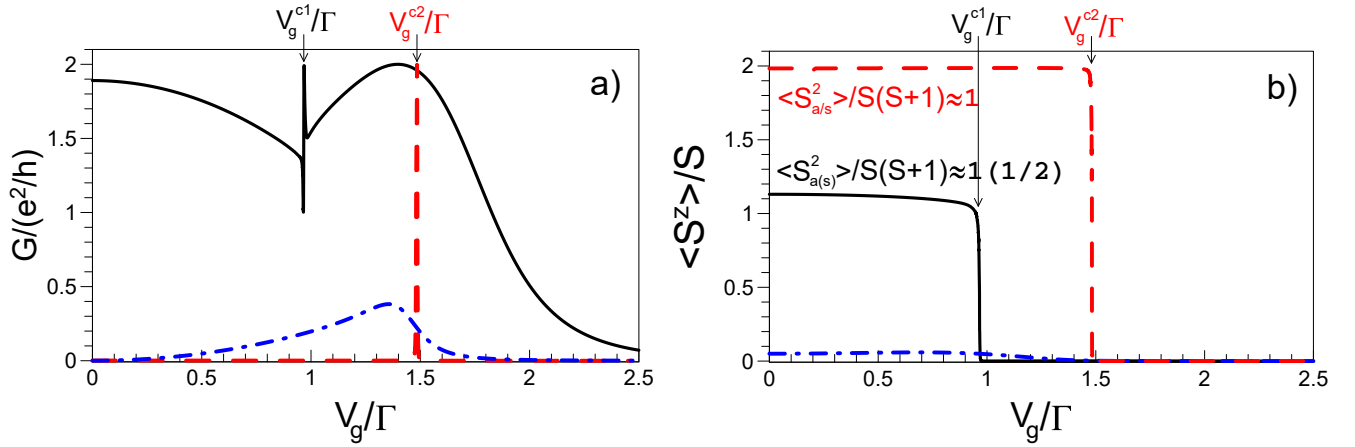


Рисунок 3.5 — Результаты РГ метода без учета перенормировки двухчастичной вершины для проводимости  $G$  (a) и  $\langle S^z \rangle$  (b) как функций  $V_g$  при  $U = 2\Gamma$ ,  $H/\Gamma = 10^{-3}$ , для случая  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$  (штриховые красные линии),  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  (сплошные черные линии) и  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$  (штрихпунктирные синие линии). Для всех случаев  $t_{14} = 0$ .

$\langle S_p^2 \rangle / S(S+1) \approx 1/2$  ( $p = 1..4$ ), что отвечает отсутствию магнитных моментов в системе. Таким образом, напряжение  $V_g^c$  отвечает точке квантового фазового перехода из состояния с одним или двумя почти локальными магнитными моментами в «парамагнитное» состояние системы. При наличии одного магнитного момента в окрестности  $V_g = 0$ , фазовый переход, аналогично системе двух квантовых точек (см. главу 2), сопровождается появлением асимметричного резонанса проводимости в окрестности точки фазового перехода (см. случай  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  на рисунке 3.5a). В случае  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$ , который соответствует наличию двух локальных магнитных моментов при  $|V_g| < V_g^c$  ( $V_g^c = V_g^{c2}$ ), проводимость демонстрирует резкий пик при  $V_g \approx V_g^c$ . При  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$  на квантовых точках нет магнитных моментов  $\langle S^z \rangle / S \approx 0$ ,  $\langle S_p^2 \rangle / S(S+1) \approx 1/2$  ( $p = 1..4$ ) и, как видно из рисунка 3.5a, проводимость  $G(V_g)$  является плавной немонотонной функцией напряжения  $V_g$ .

Результаты для проводимости  $G$ , полученные РГ методом, учитывающим перенормировку двухчастичной вершины, представлены на рисунке 3.6a. Сравнение данных зависимостей с результатами рисунка 3.5a позволяет заключить, что РГ схема, допускающая только перенормировку СЭЧ, воспроизводит общее поведение и все характерные особенности проводимости, полученные схемой с



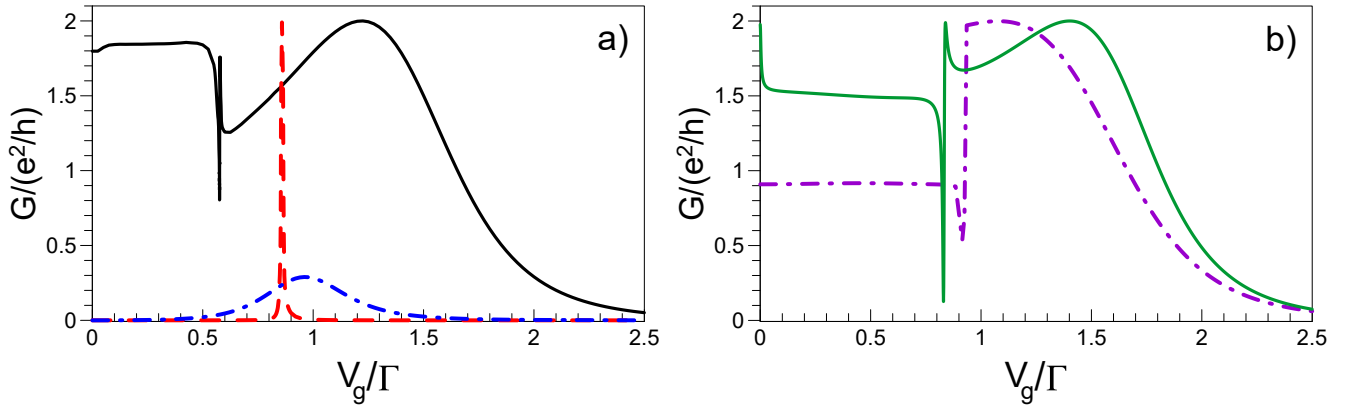


Рисунок 3.6 — Левая панель (a): Зависимости  $G$  от  $V_g$  при параметрах рисунка 3.5а, рассчитанные РГ методом с учетом перенормировки двухчастичной вершины. Обозначения линий соответствуют рисунку 3.5а. Правая панель (b):  $G$  в первом порядке теории возмущений (1-РТ; сплошная зеленая линия) и приближении среднего поля (MF; штрихпунктирная фиолетовая линия) при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$ .

учетом РГ потока двухчастичной вершины. Однако, хотя качественные результаты обеих РГ схем остаются неизменными, учет перенормировки двухчастичной вершины приводит к смещению точки фазового перехода  $V_g^c$  в сторону меньших напряжений.

Чтобы подчеркнуть нетривиальность результатов РГ метода даже при отсутствии учета перенормировки двухчастичной вершины, на рисунке 3.6b приведены зависимости  $G(V_g)$  при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$ , полученные в рамках теории среднего поля (MF) и в первом порядке теории возмущений (1-РТ).

Приближение среднего поля состоит в пренебрежении квадратичным по флуктуациям операторов числа частиц вкладом в гамильтониане (3.1), что достигается посредством замены:

$$Un_{j,\uparrow}n_{j,\downarrow} \rightarrow U\langle n_{j,\uparrow} \rangle n_{j,\downarrow} + Un_{j,\uparrow} \langle n_{j,\downarrow} \rangle, \quad (3.14)$$

где отброшен неоператорный вклад. Следовательно,  $\Sigma_{jj';\sigma}^{--} = U\langle n_{j,-\sigma} \rangle \delta_{jj'}$ , где заполнения  $\langle n_{j,\sigma} \rangle$  вычисляются самосогласованным образом. Рассчитанная в рамках среднеполевого подхода проводимость (штрихпунктирная линия на рисунке 3.6b) сильно подавлена вблизи  $V_g = 0$  по сравнению с результатами метода

функциональной ренормгруппы. Это связано с переоценкой величины спинового расщепления уровней энергии в MF подходе, что при малых  $V_g$  не позволяет даже качественно приблизиться к максимальному значению проводимости  $G = 2e^2/h$ . В то же время, MF подход, демонстрирующий наличие существенного спинового расщепления в окрестности половинного заполнения системы, предсказывает существование фазы с локальным магнитным моментом.

Результаты первого порядка теории возмущений по  $U$  (1-РТ) получаются из уравнений функциональной РГ [62] если пренебречь вкладом СЭЧ в правой части уравнения потока (1.50). Теория возмущений для всех напряжений  $V_g$  предсказывает наличие только «парамагнитного» состояния системы. Как видно из рисунка 3.6b, проводимость вблизи  $V_g = 0$ , полученная данным подходом, значительно больше, чем в MF методе, и несколько ближе к  $G = 2e^2/h$ . Резонанс проводимости вблизи напряжения  $V_g \approx 0.8\Gamma$ , получаемый в 1-РТ методе, не связан с фазовым переходом между различными магнитными режимами системы и возникает исключительно из-за более сложной зависимости эффективных уровней от запирающего напряжения, которая имеет место при учете взаимодействия 1-РТ методом.

Рассмотрим проводимость системы в различных спиновых каналах, полученную РГ методом при использовании схемы усечения первого порядка. На рисунке 3.7 показаны результаты для проводимости  $G_\sigma(V_g)$  для случая  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$ , который характеризуется наличием одного локального магнитного момента в системе при  $|V_g| < V_g^c$ . Для  $t_{14} = 0$  (рисунок 3.7a) проводимости  $G_\uparrow(V_g)$  и  $G_\downarrow(V_g)$  отличны от нуля при всех напряжениях  $V_g$  за исключением  $G_\uparrow(V_g)$  в узкой области вблизи резонанса. При  $t_{14} \neq 0$  ситуация существенно меняется. Как видно из рисунка 3.7b, при  $t_{14} = \Gamma$  проводимость  $G_\downarrow(V_g)$  демонстрирует качественно схожее случаю  $t_{14} = 0$  поведение, в то время как проводимость  $G_\uparrow(V_g)$  для широкой окрестности напряжений  $V_g$  подавляется. При увеличении параметра перескока между квантовыми точками QD1 и QD4 до значения  $t_{14} \approx 2\Gamma$  проводимость  $G_\uparrow(V_g)$  исчезает при некотором запирающем напряжении, формируя плато почти нулевой проводимости (см. рисунок 3.7c).

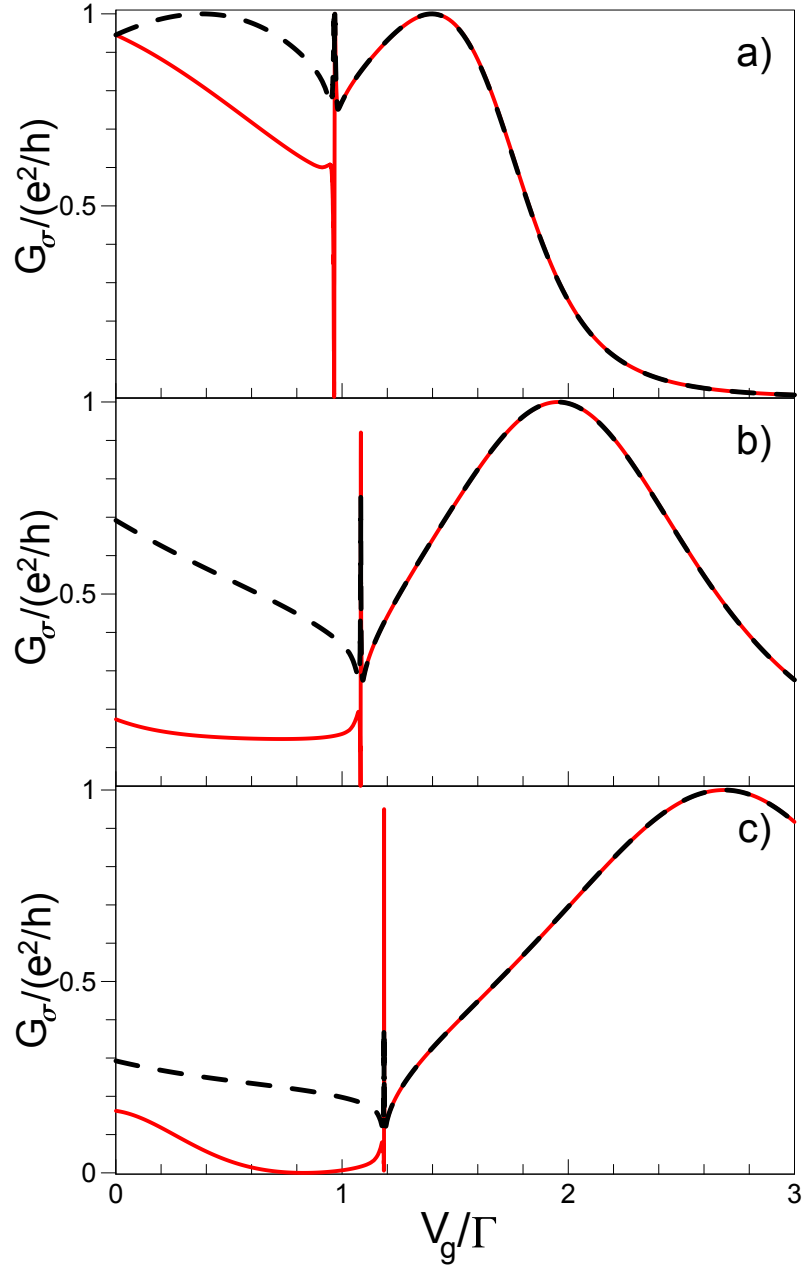


Рисунок 3.7 —  $G_{\uparrow}$  (сплошные красные линии) и  $G_{\downarrow}$  (штриховые черные линии), рассчитанные РГ методом без учета потока двухчастичной вершины, при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  и  $t_{14} = 0$  (a),  $t_{14} = \Gamma$  (b),  $t_{14} = 2\Gamma$  (c). Остальные параметры соответствуют рисунку 3.5.

Для анализа механизма исчезновения проводимости в одном из спиновых каналов, рассмотрим вклад в проводимость  $G_{\sigma}(V_g)$  от собственных состояний системы  $|\text{es}_{\lambda_m^{\sigma}}\rangle$ ,  $m = 1..4$ , отвечающих набору собственных уровней энергии  $\{\lambda_m^{\sigma}\}$ , которые получены диагонализацией обратной функции Грина  $[\mathcal{G}_{\sigma}^r(0)]^{-1}$  при  $\Lambda \rightarrow 0$ . Для случаев, показанных на рисунке 3.7, ненормированные состо-

яния  $\{|\text{es}_{\lambda_m^\sigma}\rangle\}$  можно приближенно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} |\text{es}_{\lambda_1^\sigma}\rangle &\approx \alpha(\sigma)(|1,\sigma\rangle + |4,\sigma\rangle) + (|2,\sigma\rangle + |3,\sigma\rangle), \\ |\text{es}_{\lambda_2^\sigma}\rangle &\approx |2,\sigma\rangle - |3,\sigma\rangle, \\ |\text{es}_{\lambda_3^\sigma}\rangle &\approx |1,\sigma\rangle - |4,\sigma\rangle, \\ |\text{es}_{\lambda_4^\sigma}\rangle &\approx \alpha(\sigma)(|2,\sigma\rangle + |3,\sigma\rangle) - (|1,\sigma\rangle + |4,\sigma\rangle), \end{aligned} \quad (3.15)$$

где  $\alpha$  зависит от  $\sigma$  и определяется параметрами системы. Отметим, что представление (3.15) является точным в пределе  $\gamma \rightarrow 1$ . Состояния  $|\text{es}_{\lambda_1^\sigma}\rangle$  и  $|\text{es}_{\lambda_4^\sigma}\rangle$  описывают процессы последовательного туннелирования электронов через связывающее состояние  $|s,\sigma\rangle = (|2,\sigma\rangle + |3,\sigma\rangle)/\sqrt{2}$ , а также резонансного туннелирования между квантовыми точками QD1 и QD4 при  $t_{14} \neq 0$ . Состояние  $|\text{es}_{\lambda_3^\sigma}\rangle$  описывает процесс резонансного туннелирования между квантовыми точками QD1 и QD4. Наконец, состояние  $|\text{es}_{\lambda_2^\sigma}\rangle$  представляет собой обсуждаемое выше антисвязывающее состояние квантовых точек QD2,3.

В базисе  $\{|\text{es}_{\lambda_m^\sigma}\rangle\}$  проводимость  $G_\sigma$  (3.13) запишется как  $G_\sigma = \sum_{mm'} G_{\sigma,mm'}$ , где

$$G_{\sigma,mm'} = (4e^2/h)\Gamma_L\Gamma_R \text{Re} [P_m^\sigma (P_{m'}^\sigma)^*] \quad (3.16)$$

представляют собой вклады в проводимость через индивидуальные состояния ( $m = m'$ ) и вклады за счет их интерференции ( $m \neq m'$ ),  $P_m^\sigma = U_{1m}^\sigma [U^\sigma]_{m4}^{-1} / \lambda_m^\sigma$ , где  $U^\sigma$  – матрица собственных векторов обратной функции Грина  $[\mathcal{G}_\sigma^r(0)]^{-1}$ .

Оценка величин  $G_{\sigma,mm'}(V_g)$  с  $m = 2$  или  $m' = 2$  показывает, что они, за исключением узкого региона вблизи резонанса, дают пренебрежимо малый вклад в проводимость  $G_\sigma$ . Данное обстоятельство ожидаемо, поскольку, как было отмечено ранее, антисвязывающее состояние  $|\text{es}_{\lambda_2^\sigma}\rangle$  почти не связано с контактами в силу малости гибридизации с квантовыми точками QD1(QD4) и, следовательно, почти не участвует в электронной проводимости.

Вклады  $G_{\uparrow,mm'}$  (за исключением слагаемых с  $m, m' = 2$ ), отвечающие параметрам рисунка 3.7а и 3.7с, построены на рисунке 3.8. При  $t_{14} = 0$  (рисунок 3.8а)

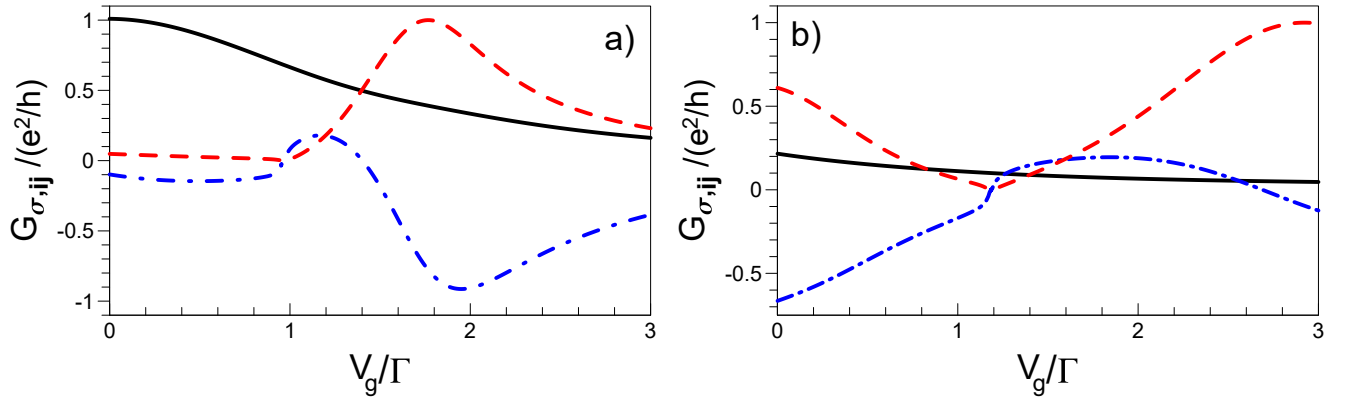


Рисунок 3.8 — Проводимости  $G_{\uparrow,33}$  (сплошная черная линия),  $G_{\uparrow,st} = G_{\uparrow,11} + G_{\uparrow,44} + 2G_{\uparrow,14}$  (штриховая красная линия) и  $G_{\uparrow,if} = 2(G_{\uparrow,34} + G_{\uparrow,13})$  (штрихпунктирная синяя линия) как функции  $V_g$  при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$ ,  $t_{14} = 0$  (a) и  $t_{14} = 2\Gamma$  (b). Остальные параметры соответствуют рисунку 3.5.

слагаемое  $G_{\uparrow,33}$ , связанное с процессом резонансного туннелирования, дает наибольший вклад в проводимость системы. Для  $\sigma = \uparrow$  суммарный вклад процессов последовательного туннелирования  $G_{\sigma,st} = G_{\sigma,11} + G_{\sigma,44} + 2G_{\sigma,14}$  и интерференции описанных выше процессов  $G_{\sigma,if} = 2(G_{\sigma,34} + G_{\sigma,13})$  малы для данного случая. При ненулевом матричном элементе перескока  $t_{14} = 2\Gamma$  (рисунок 3.8b) вклад резонансного туннелирования  $G_{\uparrow,33}$  подавляется за счет смещения энергетических уровней системы и становится сравнимым с вкладом последовательного туннелирования  $G_{\uparrow,st}$ . Значительная интерференция этих вкладов ведет к полному подавлению проводимости вблизи  $V_g = 0.8\Gamma$ . Для противоположной проекции спина ( $\sigma = \downarrow$ ) вклад резонансного туннелирования  $G_{\downarrow,33} \approx G_{\uparrow,33}$ , однако, при  $t_{14} = 2\Gamma$  вклад последовательного туннелирования  $G_{\downarrow,st}$  и квантовой интерференции  $G_{\downarrow,if}$  значительно меньше чем для  $\sigma = \uparrow$ .

Отмеченные эффекты полного подавления проводимости для одного из спиновых каналов демонстрируют возможность использования системы четырех квантовых точек в качестве спинового фильтра.

### 3.4 Магнитные и транспортные свойства при конечных напряжениях смещения

Рассмотрим влияние конечного напряжения смещения  $V_b \neq 0$ , приложенного между контактами, на поведение магнитных моментов в системе четырех квантовых точек. Поскольку малые  $V_g$  ( $|V_g| \ll \Gamma$ ) и  $t_{14} \neq 0$  не приводят к качественному изменению получаемых результатов, а большие  $V_g$  ( $|V_g| \gtrsim \Gamma$ ) приводят к разрушению магнитных моментов в системе, далее ограничимся случаем  $t_{14} = V_g = 0$ . Проанализируем системы со следующими геометриями параметров перескока:  $(t/\Gamma, \gamma) \in \{(0.05, 0.9), (0.5, 0.9), (0.5, 0.1)\}$ . Как видно из рисунка 3.2, в равновесном случае ( $V_b = 0$ ) указанные конфигурации параметров системы отвечают трем разным физическим ситуациям: сформированным магнитным моментам и на связывающем, и на антисвязывающем состояниях (или, что эквивалентно, на квантовых точках QD2 и QD3); магнитному моменту только на антисвязывающем состоянии (т.е. распределенному между квантовыми точками QD2 и QD3); и отсутствию магнитных моментов в системе. Как и при анализе равновесного состояния системы полагаем  $H/\Gamma = 10^{-3}$ ,  $U = 2\Gamma$ .

Результаты метода функциональной ренормгруппы для зависимостей  $\langle \mathbf{S}_{a/s}^2 \rangle$  от  $V_b$  приведены на рисунке 3.9а для случая  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$ . Видно, что рост  $V_b$  приводит к уменьшению значения  $\langle \mathbf{S}_{a/s}^2 \rangle / S(S+1) \approx 1$ , отвечающего равновесному случаю, что свидетельствует о подавлении магнитных моментов как на связывающем, так и на антисвязывающем состояниях. В частности, в предельном случае  $V_b \gg \Gamma$  достигается полное подавление сформированных при  $V_b = 0$  магнитных моментов и  $\langle \mathbf{S}_{a/s}^2 \rangle / S(S+1) \approx 1/2$ . При этом рассматриваемые зависимости имеют хорошо выраженный двухступенчатый характер, демонстрируя при  $0.5 \lesssim V_b/\Gamma \lesssim 2.1$  наличие фазы с промежуточными значениями  $\langle \mathbf{S}_{a/s}^2 \rangle$ . Аналогичное поведение обнаруживают зависимости  $\langle S^z \rangle$  и  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  от напряжения  $V_b$ , показанные на рисунке 3.9b и рисунке 3.13d, соответственно.

Для анализа процессов разрушения магнитных моментов рассмотрим РГ результаты для эффективных уровней энергии связывающего/антисвязывающего состояний  $\tilde{\epsilon}_{s,\sigma}/\tilde{\epsilon}_{a,\sigma}$  (рисунок 3.9с) и эффективных параметров перескока

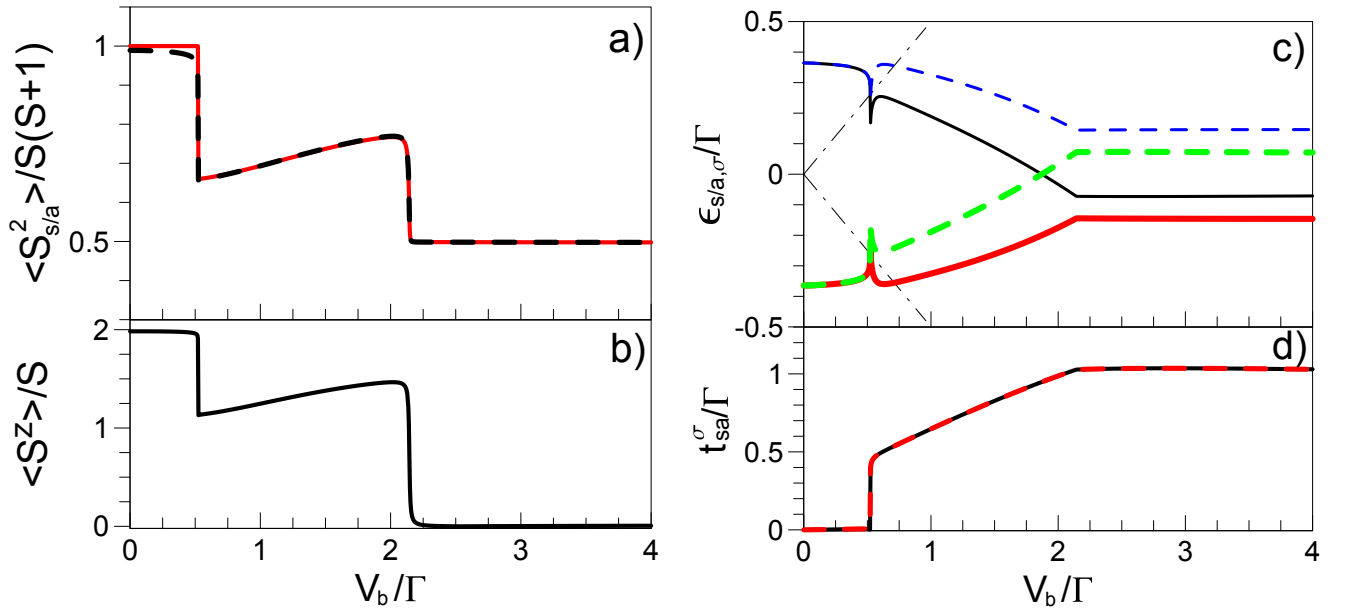


Рисунок 3.9 — Результаты РГ метода для (a)  $\langle \mathbf{S}_s^2 \rangle / S(S+1)$  (пунктирная черная линия) и  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle / S(S+1)$  (сплошная красная линия); (b)  $\langle S^z \rangle / S$ ; (c)  $\tilde{\epsilon}_{a, \sigma}$  (толстая сплошная красная линия для  $\sigma = \uparrow$  и тонкая сплошная черная линия для  $\sigma = \downarrow$ ) и  $\tilde{\epsilon}_{s, \sigma}$  (толстая пунктирная зеленая линия для  $\sigma = \uparrow$  и тонкая пунктирная синяя линия для  $\sigma = \downarrow$ ); (d)  $t_{sa}^\sigma$  (сплошная черная линия для  $\sigma = \uparrow$  и штриховая красная линия для  $\sigma = \downarrow$ ) как функции напряжения  $V_b$  при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$ ,  $U = 2\Gamma$ ,  $V_g = 0$ ,  $H = 10^{-3}\Gamma$ . При расчетах использовалась схема усечения РГ уравнений первого порядка. Штрихпунктирные линии на рисунке 3.9 —  $\mu_{L(R)} = \pm V_b/2$ .

$t_{sa}^\sigma$  (рисунок 3.9d). Отметим, что для используемой РГ схемы, учитывающей только перенормировку СЭЧ, остальные параметры системы не перенормируются. Полученные эффективные параметры демонстрируют нелинейное поведение при изменении напряжения смещения на контактах. При малых напряжениях  $V_b \lesssim 0.5\Gamma$  рост  $V_b$  не влечет значительных изменений эффективных параметров системы относительно их значений при  $V_b = 0$ . В том числе параметр перескока  $t_{sa}^\sigma$  удерживается на нулевом значении (рисунок 3.9d). Последнее означает, что при  $V_b \lesssim 0.5\Gamma$  все отличные от нуля параметры перескока имеют порядок величины  $t$  и малы в силу первоначальной малости  $t$  ( $t/\Gamma = 0.05$ ). В этом случае собственные уровни энергии эффективной системы  $E_{j, \sigma}$  (собственные значения эффективного гамильтониана  $\mathcal{H}^{\text{eff}}$ ) в нулевом порядке по  $t$  могут быть оценены как перенормированные уровни энергии квантовых точек:  $\{E_{j, \sigma}\} \approx \{\tilde{\epsilon}_j^\sigma\}$ . Учитывая данное замечание и принимая во внимание, что

для рассматриваемого диапазона напряжений смещения  $\tilde{\epsilon}_{s/a,\uparrow} < \mu_R = -V_b/2$  и  $\tilde{\epsilon}_{s/a,\downarrow} > \mu_L = V_b/2$  (см. рисунок 3.9с), можно заключить, что при  $V_b \lesssim 0.5\Gamma$  как и для  $V_b = 0$  заполнение состояний, отвечающих  $\sigma = \uparrow$ , является наиболее энергетически выгодным:  $\langle n_{s/a,\uparrow} \rangle \approx 1$  и  $\langle n_{s/a,\downarrow} \rangle \approx 0$ . При  $V_b \lesssim 0.5\Gamma$  имеем  $\langle \mathbf{S}_{a/s}^2 \rangle / S(S+1) \approx 1$  (рисунок 3.9а) и  $\langle S^z \rangle / S \approx 2$  (рисунок 3.9б). Это свидетельствует о том, что процесс формирования двух локальных магнитных моментов с проекцией спина, направленной вдоль малого магнитного поля, устойчив к малым отклонением системы от равновесия ( $V_b \lesssim 0.5\Gamma$ ).

При дальнейшем увеличении напряжения между контактами спиновое расщепление эффективных уровней энергии уменьшается (см. рисунок 3.9с). Однако, полностью оно не исчезает даже при достаточно больших напряжениях. Можно выделить область промежуточных напряжений  $0.5 \lesssim V_b/\Gamma \lesssim 2.1$  при которых расщепление уровней энергии по спину является по-прежнему существенным (см. рисунок 3.9с). В отличие от рассмотренного выше случая малых  $V_b$ , напряжения, соответствующие данной области значений, приводят к возникновению ненулевой амплитуды перескока между связывающим и антисвязывающим состояниями  $t_{sa}^\sigma \gg t$ , которая, как видно из рисунка 3.9d, возрастает с  $V_b$  и не зависит от ориентации спина. Генерация  $t_{sa}^\sigma \neq 0$  обеспечивает дополнительную гибридизацию связывающего и антисвязывающего состояния с контактами из-за возникновения нового пути туннелирования электронов между этими состояниями и контактами. Комбинация эффектов резкого возрастания  $t_{sa}^\sigma$  и уменьшения расщепления уровней энергии приводит к резкому падению  $\langle \mathbf{S}_{s/a}^2 \rangle$  (см. рисунок 3.9а). Однако,  $\langle \mathbf{S}_{a/s}^2 \rangle / S(S+1)$  в диапазоне напряжений  $0.5 \lesssim V_b/\Gamma \lesssim 2.1$  отлично от значения  $1/2$ , которое имеет место при  $V_b \gg \Gamma$  или  $U = 0$ . Это промежуточное состояние можно рассматривать как состояние дробного квазилокального магнитного момента на связывающем и антисвязывающем состояниях, которое возникает исключительно вдали от равновесия при наличии электрон-электронного взаимодействия на квантовых точках. При больших запирающих напряжениях  $V_b \gtrsim 2.1\Gamma$  уровни  $\tilde{\epsilon}_{s/a,\sigma}$  демонстрируют лишь небольшое расщепление и  $t_{as}^\sigma$  практически остаются неизменным при увеличении  $V_b$  (см. рисунок 3.9с и 3.9d). Данное несущественное



расщепление энергий приводит к отсутствию магнитных моментов в системе и  $\langle \mathbf{S}_{a/s}^2 \rangle / S(S+1) \approx \langle \mathbf{S}_j^2 \rangle / S(S+1) \approx 1/2$ .

Средние числа заполнения (рисунки 3.10а, 3.10d) согласуются с описанной картиной эволюции магнитных моментов на квантовых точках при изменении напряжения  $V_b$ . Как видно из рисунка 3.10а, при  $V_b \lesssim \Gamma/2$  заполнения связывающего и антисвязывающего состояний полностью соответствуют значениям, полученным выше из качественного анализа спектра системы. С учетом заполнения квантовых точек QD1 и QD4  $\langle n_{1(4),\sigma} \rangle \approx 0.5$  это приводит

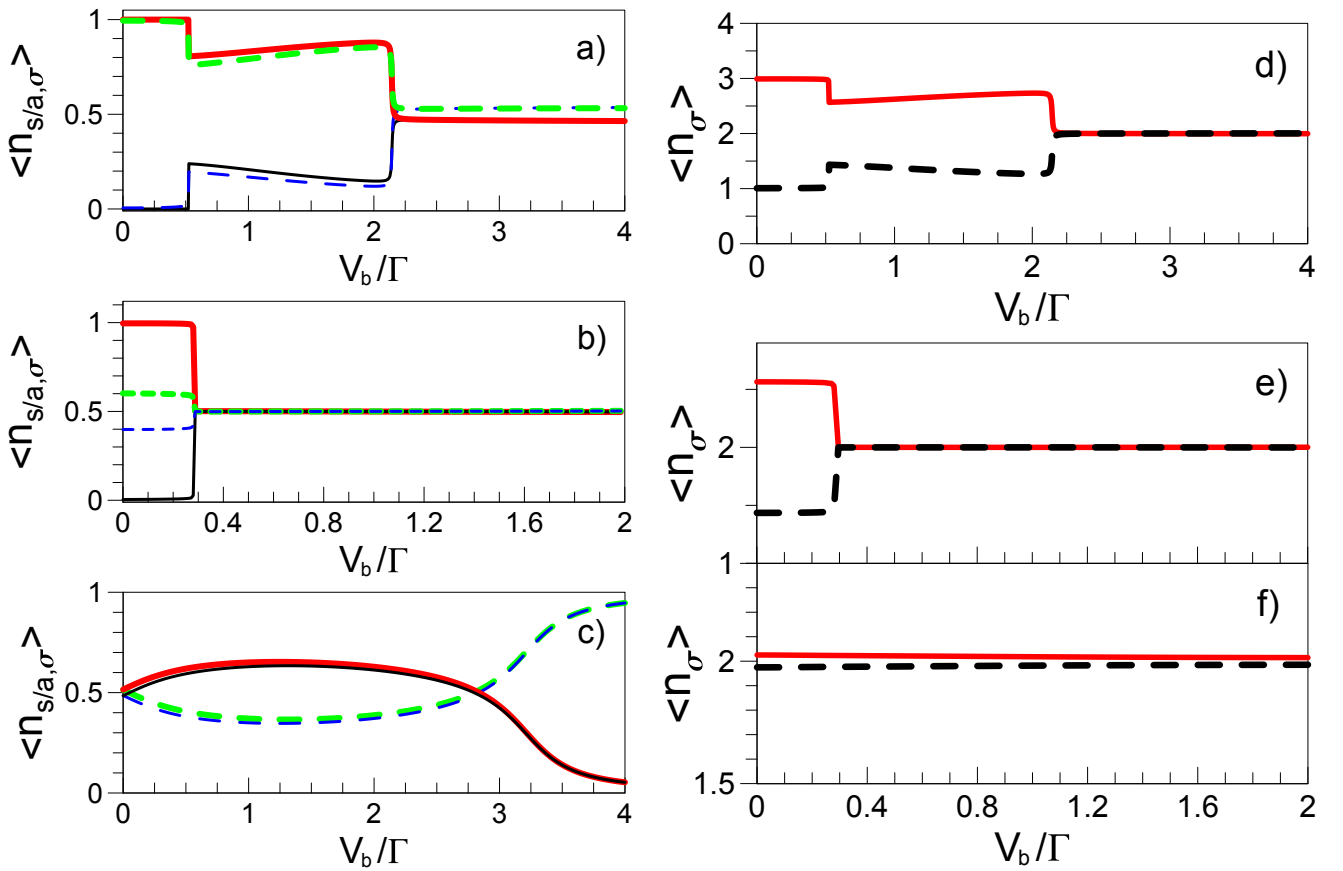


Рисунок 3.10 — Левые панели: зависимости  $\langle n_{a,\sigma} \rangle$  (толстая сплошная красная линия для  $\sigma = \uparrow$  и тонкая сплошная черная линия для  $\sigma = \downarrow$ ) и  $\langle n_{s,\sigma} \rangle$  (толстая штриховая зеленая линия для  $\sigma = \uparrow$  и тонкая штриховая синяя линия для  $\sigma = \downarrow$ ) от напряжения  $V_b$  при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$  (а),  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  (b) и  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$  (c). Правые панели: зависимости  $\langle n_\uparrow \rangle$  (сплошная красная линия) и  $\langle n_\downarrow \rangle$  (штриховая черная линия) от  $V_b$  при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$  (d),  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  (e) и  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$  (f). Остальные параметры и метод расчета соответствуют рисунку 3.9.

к средним  $\langle n_\uparrow \rangle \approx 3$  и  $\langle n_\downarrow \rangle \approx 1$  (рисунок 3.10d). Следовательно,  $\langle S^z \rangle / S \approx 2$  (рисунок 3.9b). Таким образом, для данного диапазона напряжений смещения значения средних чисел заполнения и спин-спиновых корреляционных функции практически совпадают с соответствующими значениями, полученными в равновесном случае (при  $V_b = 0$ ). Для бóльших значений  $V_b$  числа заполнения  $\langle n_{s/a,\uparrow} \rangle$  ( $\langle n_{s/a,\downarrow} \rangle$ ) меньше (больше), чем для случая  $V_b \lesssim \Gamma/2$  (см. рисунок 3.10a). Однако, при  $0.5 \lesssim V_b/\Gamma \lesssim 2.1$  разность чисел заполнения для  $\sigma = \uparrow$  и  $\sigma = \downarrow$  остается существенной. Как видно из рисунка 3.10a, при  $V_b \gtrsim 2.1\Gamma$  имеем  $\langle n_{s/a,\uparrow} \rangle \approx \langle n_{s/a,\downarrow} \rangle \approx 0.5$  и  $\langle S^z \rangle \approx 0$  (рисунок 3.9b).

Рассмотрим теперь случай  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$ , когда матричные элементы перескока  $t_{ij}$  ( $i, j = 1..4$ ) на порядок больше, чем в предыдущем случае, однако сохраняют те же соотношения между собой. Как видно из рисунков 3.11c и 3.11d, вблизи равновесия  $V_b = 0$  поведение перенормированных уровней энергии  $\tilde{\epsilon}_{s/a,\sigma}$  в целом аналогично случаю  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$ . Однако, несмотря на наличие большого спинового расщепления как связывающего, так и антисвязывающего состояний, появление локального магнитного момента имеет место только на антисвязывающем состоянии, что непосредственно видно из зависимости  $\langle \mathbf{S}_{s/a}^2 \rangle$ , показанной на рисунке 3.11a. Как обсуждалось для случая  $V_b = 0$ , это связано с тем, что для данной конфигурации системы только антисвязываю-

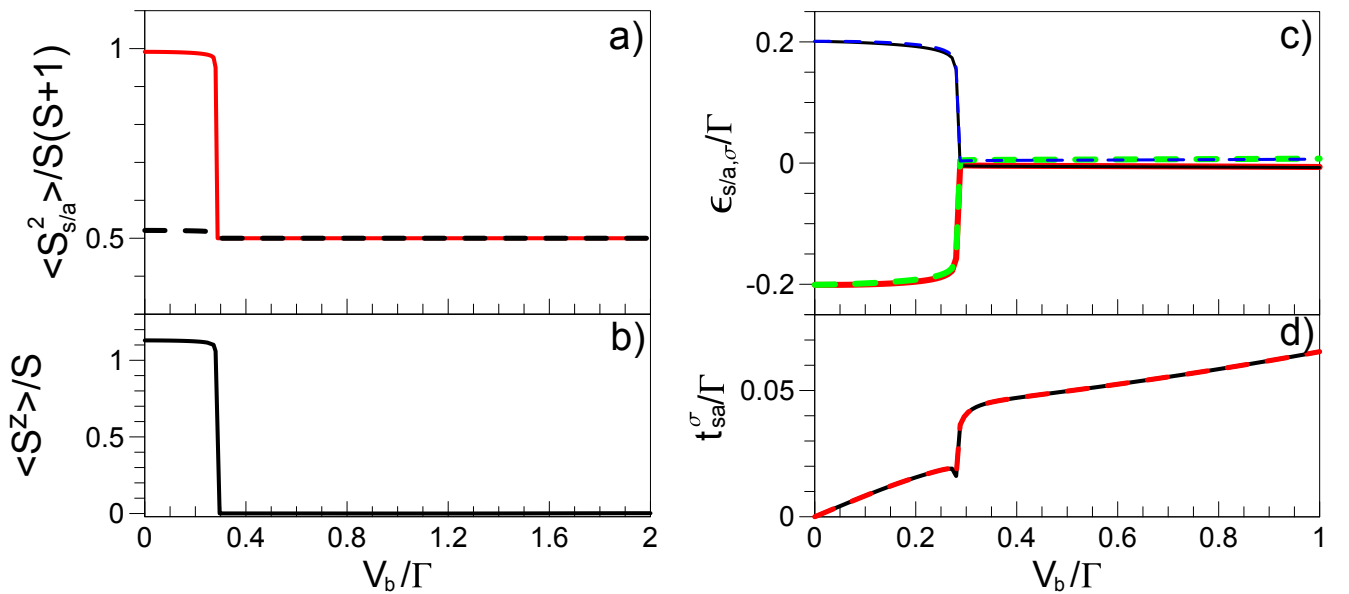


Рисунок 3.11 — Те же зависимости, что и на рисунке 3.9 для  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$ .

щее состояние не имеет непосредственной связи с контактами. При  $V_b \lesssim \Gamma/3$  как и в равновесном режиме имеем  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle / S(S+1) \approx 1$  и  $\langle \mathbf{S}_s^2 \rangle / S(S+1) \approx 1/2$ . Из рисунка 3.11d видно, что в отличие от рассмотренного выше случая малых  $t$  матричные элементы перескока  $t_{sa}^\sigma$  не равны нулю даже при малых напряжениях  $V_b$ . Однако, генерируемые параметры перескока  $t_{sa}^\sigma$  малы и не приводят к достаточному для разрушения магнитного момента «размытию» антисвязывающего состояния. Также, при  $(t, \gamma) = (0.5, 0.9)$ , отсутствует область промежуточного спинового расщепления и при  $V_b \gtrsim \Gamma/3$  имеем  $|\tilde{\epsilon}_{s/a, \uparrow} - \tilde{\epsilon}_{s/a, \downarrow}| \approx H$ . Это приводит к резкому уменьшению  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle$  вблизи напряжения  $V_b \approx \Gamma/3$  от максимального значения  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle / S(S+1) \approx 1$  до значения  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle / S(S+1) \approx 1/2$  (см. рисунок 3.11a). Таким образом, магнитный момент отсутствует при  $V_b \gtrsim \Gamma/3$ . Как и для режима малых  $t$  средние заполнения антисвязывающего состояния  $\langle n_{a, \uparrow(\downarrow)} \rangle \approx 1(0)$  при наличии магнитного момента в системе ( $V_b \lesssim \Gamma/3$ ) и  $\langle n_{a, \uparrow(\downarrow)} \rangle \approx 0.5$  при  $V_b \gg \Gamma$  как видно из рисунка 3.10b. Как следствие, с учетом  $\langle n_{1(4), \sigma} \rangle \approx 0.5$ , при наличии магнитного момента  $\langle n_\uparrow \rangle \approx 2.5$ ,  $\langle n_\downarrow \rangle \approx 1.5$  и  $\langle S^z \rangle / S \approx 1$  (см. рисунки 3.10e и 3.11b). Отметим, что небольшое отличие чисел заполнения  $\langle n_{s, \uparrow} \rangle$  и  $\langle n_{s, \downarrow} \rangle$  для  $V_b \lesssim \Gamma/3$  по-видимому возникает из-за переоценки величины спинового расщепления уровней энергии связывающего состояния, возникающего в силу пренебрежения перенормировкой двухчастичной вершины.

В качестве заключительного рассмотрим случай  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$ , при котором система квантовых точек имеет сильную асимметрию параметров перескока. В этом случае связывающее и антисвязывающее состояния связаны с квантовыми точками QD1 и QD4 почти сравнимыми по величине параметрами перескока:  $t_{1s} \approx t_{4a} \approx 0.5$ ,  $t_{1a} = 0$  и  $t_{4s} \approx 0.1$ . Результаты РГ метода для эффективных уровней энергии связывающего и антисвязывающего состояний, представленные на рисунке 3.12c, не обнаруживают усиления малого, индуцированного полем  $H$ , спинового расщепления. Средние  $\langle \mathbf{S}_{s/a}^2 \rangle / S(S+1) \approx 1/2$  для произвольных напряжений смещения, как видно из рисунка 3.12a. Однако, электрон-электронное взаимодействие приводит к сильной перенормировке уровней энергии. В частности, для широкого диапазона напряжений в окрестности  $V_b = 0$  уровни  $\tilde{\epsilon}_{s, \sigma}(\tilde{\epsilon}_{a, \sigma}) \propto \mu_L(\mu_R)$  и плавно убывают (возрастают) при

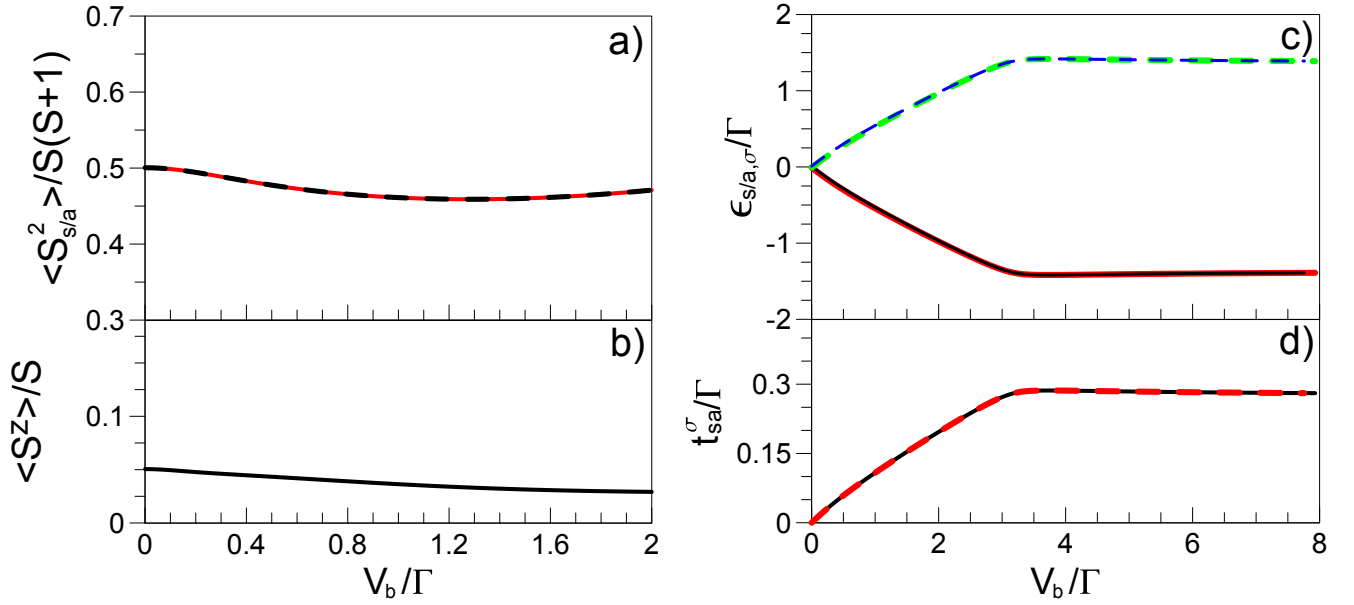


Рисунок 3.12 — Те же зависимости, что и на рисунке 3.9 для  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$ .

дальнейшем росте напряжения смещения. Отметим, что параметры  $t_{sa}^\sigma$  демонстрируют линейное поведение для напряжений  $V \lesssim 3\Gamma$  и имеют практически постоянное значение при больших напряжениях смещения (см. рисунок 3.12d). Данное поведение перенормированных параметров приводит к возможности существенного отличия средних чисел заполнения  $\langle n_{s/a, \sigma} \rangle$  (см. рисунок 3.10c) от их значений для равновесного случая  $\langle n_{s/a, \sigma} \rangle \stackrel{V_b \rightarrow 0}{\approx} 0.5$ . При этом, как видно из рисунка 3.10f, средние числа заполнения  $\langle n_\uparrow \rangle, \langle n_\downarrow \rangle \approx 2$  и несущественно отличны друг от друга. В пределе  $V_b \gg \Gamma$  имеем  $\langle n_{s, \sigma} \rangle \rightarrow 1$  и  $\langle n_{a, \sigma} \rangle \rightarrow 0$  (рисунок 3.10c). Это отлично от ранее рассмотренных случаев, где  $\langle n_{s/a, \sigma} \rangle \approx 0.5$  при  $V_b \gg \Gamma$ . Данный результат обусловлен тем, что в рассматриваемом случае связь между связывающим (антисвязывающим) состоянием и левым (правым) контактом намного сильнее, чем соответствующая связь с правым (левым) контактом. Это делает заполнение связывающего (антисвязывающего) состояния более (менее) выгодным по энергии при  $V_b \gg \Gamma$ . Аналогичные рассуждения справедливы относительно заполнений квантовых точек QD1-QD4, что для  $V_b \gg \Gamma$  дает  $\langle n_{1(2), \sigma} \rangle \approx 1$  и  $\langle n_{3(4), \sigma} \rangle \approx 0$ .

На рисунке 3.13(а-с) приведены спин-спиновые корреляционные функции  $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle$ , соответствующие трем рассмотренным выше случаям. Видно, что формирование магнитного момента в системе сопровождается возникновени-

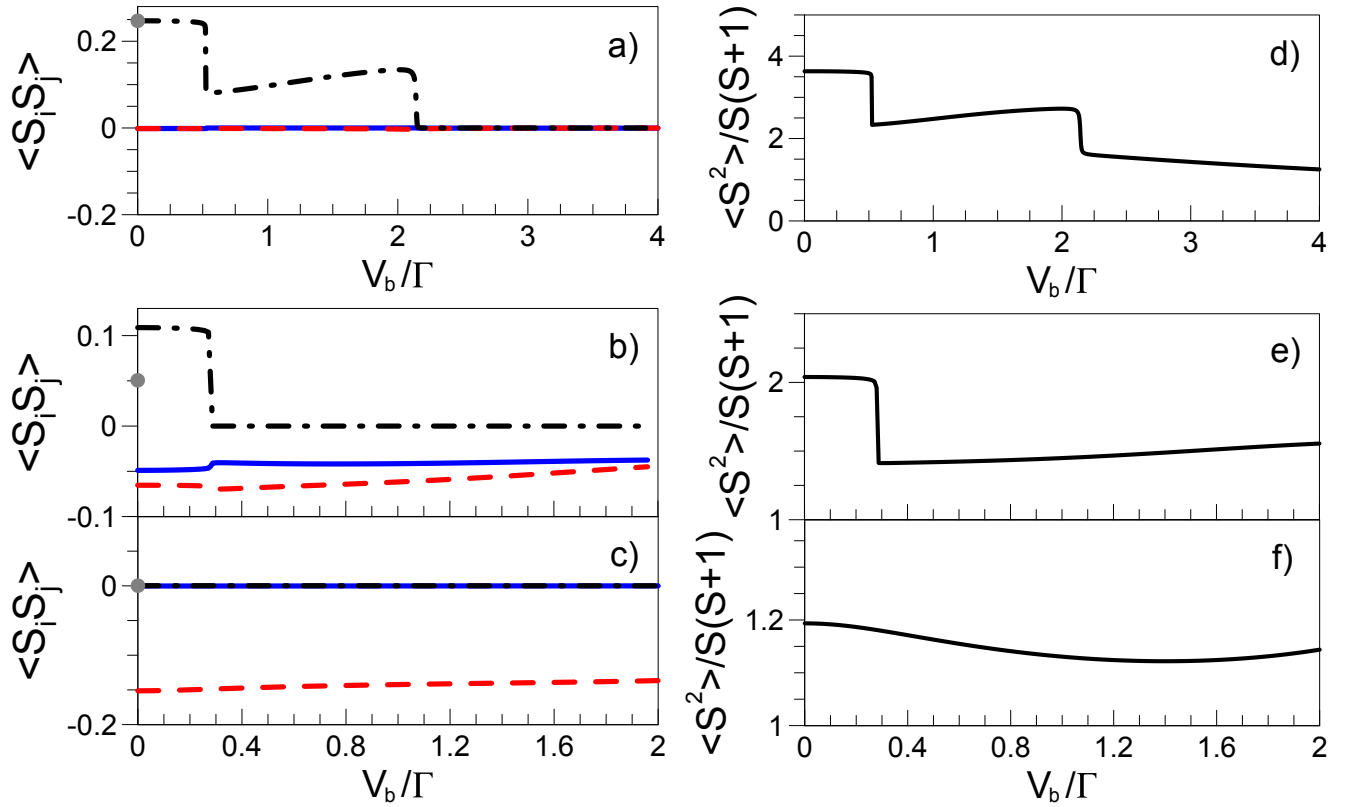


Рисунок 3.13 — Левые панели: корреляторы  $\langle \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 \rangle$  (штриховая красная линия),  $\langle \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_3 \rangle$  (сплошная синяя линия) и  $\langle \mathbf{S}_2 \mathbf{S}_3 \rangle$  (штрихпунктирная черная линия) как функции  $V_b$  при (a)  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$ , (b)  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  и (c)  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$ . Значения  $\langle \mathbf{S}_s \mathbf{S}_a \rangle$  при  $V_b = 0$  отмечены заштрихованными точками. Правые панели:  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  как функция  $V_b$  при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$  (d),  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  (e) и  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$  (f). Остальные параметры и метод расчета соответствуют рисунку 3.9.

ем ферромагнитных корреляций между квантовыми точками QD2 и QD3,  $\langle \mathbf{S}_2 \mathbf{S}_3 \rangle > 0$ , которые усиливаются с ростом величины магнитного момента в системе. Для режимов, когда магнитные моменты отсутствуют, мы имеем  $0 > \langle \mathbf{S}_2 \mathbf{S}_3 \rangle \approx 0$ . Для конфигураций  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$  и  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  зависимости  $\langle \mathbf{S}_2 \mathbf{S}_3 \rangle$  от напряжения  $V_b$  демонстрируют ступенчатое поведение. Спин-спиновые корреляционные функции  $\langle \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 \rangle = \langle \mathbf{S}_3 \mathbf{S}_4 \rangle$  и  $\langle \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_3 \rangle = \langle \mathbf{S}_2 \mathbf{S}_4 \rangle$  всегда отрицательны (антиферромагнитны) и их абсолютное значение пропорционально величине параметра перескока между соответствующими квантовыми точками, т.е.,  $|\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle| \sim t_{ij}$ . При всех рассмотренных случаях, корреляционная функция  $\langle \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_4 \rangle$  близка к нулю. Для случая  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$  в области существования двух магнитных моментов в системе ( $V_b \lesssim \Gamma/2$ ) для сред-

него значения квадрата полного спина  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  справедливо (см. рисунок 3.13d):  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle > \sum_i \langle \mathbf{S}_i^2 \rangle \approx 3S(S+1)$ . Это свидетельствует о преобладании ферромагнитных корреляций между квантовыми точками:  $\sum_{i,j} \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle > 0$ . В то же время, для случая  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  имеем  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle < \sum_i \langle \mathbf{S}_i^2 \rangle \approx 2.5S(S+1)$  (см. рисунок 3.13e) и, следовательно,  $\sum_{i,j} \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle < 0$ . Для всех трех рассмотренных случаев поведение  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  при изменении напряжения  $V_b$  (рисунки 3.13(d-f)) аналогично поведению средних  $\langle \mathbf{S}_{a/s}^2 \rangle$ .

Рассмотрим вольтамперные характеристики  $(J - V_b)$  и дифференциальные проводимости  $G = e(dJ/dV_b)$  для проанализированных выше конфигураций систем. Ток  $J_\sigma^\alpha$  в спиновом канале  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ , текущий через контакт  $\alpha$  ( $\alpha \in \{L, R\}$ ), имеет вид [111]:

$$J_\sigma^\alpha = \frac{2ie}{h} \Gamma_\alpha \sum_j \Theta_j^\alpha \int d\omega \left\{ f(\omega - \mu_\alpha) [\mathcal{G}_{jj;\sigma}^r(\omega) - \mathcal{G}_{jj;\sigma}^a(\omega)] + \mathcal{G}_{jj;\sigma}^{-+;\Lambda \rightarrow 0}(\omega) \right\}, \quad (3.17)$$

где  $\mathcal{G}^a = \mathcal{G}^{--;\Lambda \rightarrow 0} - \mathcal{G}^{+-;\Lambda \rightarrow 0}$  – опережающая функция Грина при  $\Lambda \rightarrow 0$ .

Учитывая явный вид пропагатора  $\mathcal{G}_\sigma^{k,k',\Lambda=0}(\omega)$  (3.4) и принимая во внимание, что без учета перенормировки двухчастичной вершины генерируются только диагональные компоненты СЭЧ, т.е.  $\Sigma_{jj'}^{kk';\Lambda} \sim \delta_{kk'} \delta_{jj'} \Sigma_{jj}^{kk';\Lambda}$  (см. РГ уравнение (3.7)), выражение (3.17) можно привести к виду:

$$J_\sigma^{\alpha=L(R)} = \frac{2ie}{h} \Gamma_\alpha \sum_j \Theta_j^\alpha \int_{\mu_R}^{\mu_L} \mathcal{G}_{jj,\sigma}^{+-(-+);\Lambda \rightarrow 0}(\omega) d\omega. \quad (3.18)$$

Как отмечалось в разделе 1.2.3, для рассматриваемого приближения метода функциональной ренормгруппы закон сохранения тока выполняется  $|J_\sigma^R| = J_\sigma^L$ .

Результаты метода функциональной ренормгруппы для зависимости полного тока  $J = \sum_\sigma (J_\sigma^L - J_\sigma^R)/2$  и дифференциальной проводимости  $G = \sum_\sigma G_\sigma$ , где  $G_\sigma = e(dJ_\sigma^L/dV_b) = -e(dJ_\sigma^R/dV_b)$ , от напряжения смещения  $V_b$  при  $t_{14} = V_g = 0$  приведены на рисунке 3.14. В равновесном пределе ( $V_b \rightarrow 0$ )  $J = 0$  и из выражения (3.18) для дифференциальной проводимости имеем:

$$G_\sigma^0 = \frac{ie^2}{h} \Gamma_L \left[ \mathcal{G}_{11;\sigma}^{+-;\Lambda \rightarrow 0}(\mu_L - 0) + \mathcal{G}_{11;\sigma}^{+-;\Lambda \rightarrow 0}(\mu_R + 0) \right]. \quad (3.19)$$

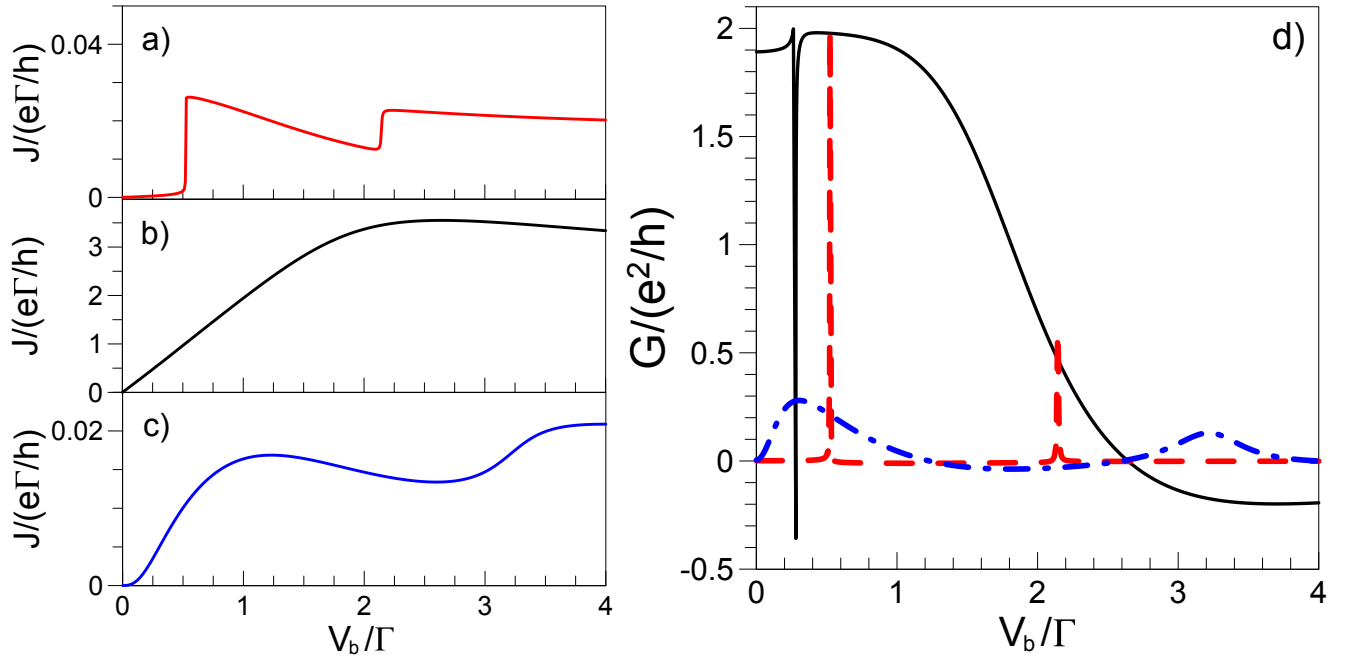


Рисунок 3.14 — Левые панели: ток  $J$  как функция напряжения  $V_b$  при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$  (a),  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  (b) и  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$  (c). Правая панель (d): проводимость  $G$  как функция напряжения  $V_b$  при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$  (пунктирная красная линия),  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  (сплошная черная линия) и  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$  (штрихпунктирная синяя линия: проводимость  $G$  умножена на 10). Остальные параметры соответствуют рисункам 3.9-3.12

Выражение (3.19) полностью совпадает с выражением для проводимости системы (3.13) [127]. В противоположном пределе  $V_b \gg \Gamma$ , вольтамперная характеристика выходит на «насыщение» и  $G_\sigma \rightarrow 0$  для всех рассмотренных случаев.

Как видно из рисунка 3.14а, при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$  вольтамперная характеристика показывает «ступенчатую» структуру с двумя резкими переходами, соответствующими напряжениям, при которых  $\langle \mathbf{S}_{s/a}^2 \rangle$  показывают аналогичные особенности (см. рисунок 3.9а). Дифференциальная проводимость  $G$  (рисунок 3.14d) демонстрирует два резких пика вблизи напряжений  $V_b \approx 0.5\Gamma$  и  $V_b \approx 2.1\Gamma$ . Это противоположно зависимости  $G(V_g)$  при  $V_b = 0$ , где переход между состояниями с различным магнитным упорядочением сопровождается одним пиком проводимости. Первый пик почти достигает предельного значения проводимости  $G_{\max} = 2e^2/h$ . Для напряжений смещения, лежащих вне пиков,  $G \approx 0$ . Важно отметить, что  $J - V_b$  характеристика содержит области, в которых ток убывает с ростом напряжения. Это приводит к возникновению

эффектов отрицательной дифференциальной проводимости. Как будет показано ниже, появление отрицательной дифференциальной проводимости связано с существенной зависимостью перенормированных параметров системы от напряжения на контактах  $V_b$ , которая вызвана электрон-электронным взаимодействием в системе.

При  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  кривая тока демонстрирует скачок небольшой амплитуды (неразличим на рисунке 3.14b), который, как и в предыдущем случае, имеет место при напряжении, соответствующему переходу между разными магнитными состояниями. Данная особенность приводит к резкому асимметричному резонансу дифференциальной проводимости при  $V_b \approx \Gamma/3$ . Вблизи резонанса проводимость достигает своего максимального значения. При  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  проводимость и ток достигают существенно больших значений по сравнению со случаем  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.05, 0.9)$ . Это справедливо и при  $U = 0$  и связано с достаточно большой амплитудой матричных элементов перескока между квантовыми точками. Из рисунка 3.14d видно, что дифференциальная проводимость отрицательна в узкой области вблизи провала проводимости и полубесконечной области при больших напряжениях.

В заключение, рассмотрим случай  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$ , для которого магнитные моменты в системе отсутствуют при любом значении напряжения  $V_b$ . Как видно из рисунка 3.14c, в данном случае ток меняется плавно с изменением напряжения. Однако,  $J - V_b$  характеристика ведет себя существенно нелинейным образом, что является отражением нелинейности перенормированных параметров системы (см. рисунок 3.12c и 3.12d). Эффект отрицательной дифференциальной проводимости также присутствует в этом случае.

Представленные выше результаты позволяют заключить, что переход между состояниями с различным значением магнитного момента сопровождается резким изменением транспортных характеристик системы в точке фазового перехода – возникновении скачка тока  $J$  или резонанса/пика проводимости  $G$ . В то же время, эффект отрицательной дифференциальной проводимости возникает даже в случае отсутствия магнитного момента в системе, как следует из рассмотрения случая  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$ .



Для анализа механизма возникновения отрицательной дифференциальной проводимости рассмотрим явное выражение для  $G_\sigma$ , полученное дифференцированием выражения (3.18) по  $V_b$ . Проводимость  $G_\sigma$  может быть записана в виде суммы  $G_\sigma = G_\sigma^0 + G_\sigma^I$ , где  $G_\sigma^0$  дается выражением (3.19) с  $\mu_{L(R)} \neq 0$  и

$$G_\sigma^I = \frac{e^2}{h} \sum_{p=1}^4 K_{p,\sigma} \frac{d\tilde{\epsilon}_{p,\sigma}}{dV_b}, \quad (3.20)$$

где

$$K_{p,\sigma} = 2i\Gamma_L \int_{\mu_R}^{\mu_L} \left( \mathcal{G}_{1p;\sigma}^{+-;0} \mathcal{G}_{p1;\sigma}^{--;0} - \mathcal{G}_{1p;\sigma}^{++;0} \mathcal{G}_{p1;\sigma}^{+-;0} \right) d\omega. \quad (3.21)$$

Вклад  $G^I$  возникает исключительно при неравновесном режиме системы и отсутствует в пределе  $V_b \rightarrow 0$ . Как будет показано ниже, именно  $G^I$  обуславливает появление эффекта отрицательной дифференциальной проводимости. Вклад  $G_\sigma^0$  также зависит от напряжения смещения, однако, может быть эквивалентно записан в следующем виде [127]:

$$G_\sigma^0 = \frac{2e^2}{h} \Gamma_L \Gamma_R \sum_{\alpha=L,R} \left| \mathcal{G}_{14;\sigma}^{r;0}(\omega = \mu_\alpha) \right|^2 \quad (3.22)$$

и, следовательно, положителен при любом выборе параметров системы и напряжения  $V_b$ .

В качестве примера проанализируем величину и знак вкладов  $G_\sigma^0$  и  $G_\sigma^I$  для случая  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$  при  $\sigma = \uparrow$  (см. рисунок 3.15а; для  $\sigma = \downarrow$  результаты аналогичны). Отметим, что проводимость  $G_\uparrow$  воспроизводит все особенности полной проводимости  $G$  системы (см. рисунок 3.14d). Как отмечалось выше и видно из рисунка 3.15а,  $G_\uparrow^0$  положительна при любых напряжениях  $V_b$  и следовательно не вносит вклада в эффект отрицательной дифференциальной проводимости. Из (3.20) следует, что знак  $G_\sigma^I$  определяется знаком суммы членов  $K_{p,\sigma}(d\tilde{\epsilon}_{p,\sigma}/dV_b)$ . Как видно из рисунка 3.15с,  $d\tilde{\epsilon}_{p,\uparrow}/dV_b$  может быть положительно определенной ( $p = 1$ ), отрицательно определенной ( $p = 4$ ) или знакопеременной ( $p = 2, 3$ ) функцией напряжения  $V_b$ . Кроме того, коэффициенты  $K_{p,\uparrow}$  также не являются знакопостоянными (см. рисунок 3.15d). Отметим,

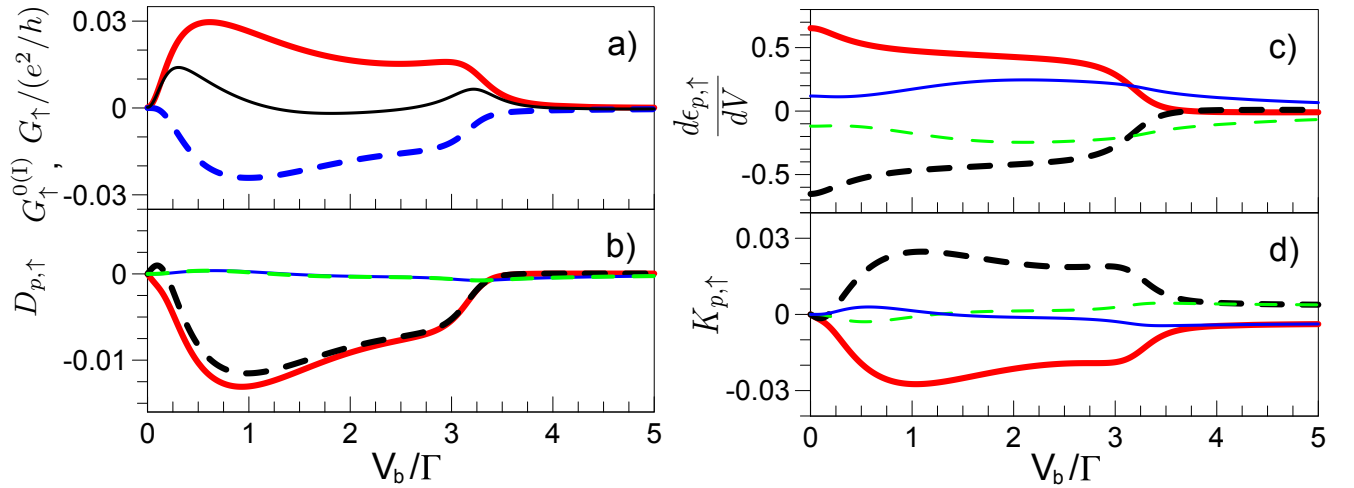


Рисунок 3.15 — Панель (а):  $G_\sigma$  (тонкая сплошная черная линия),  $G_\sigma^0$  (толстая сплошная красная линия) и  $G_\sigma^I$  (толстая штриховая синяя линия) для  $\sigma = \uparrow$  как функции  $V_b$ . Панели (b–d):  $D_{p,\sigma} \equiv K_{p,\sigma} (d\tilde{\epsilon}_{p,\sigma}/dV)$  (b),  $d\tilde{\epsilon}_{p,\sigma}/dV$  (c) и  $K_{p,\sigma}$  (d) для  $\sigma = \uparrow$  как функции  $V_b$ . Тонкие сплошные синие, толстые сплошные красные, толстые штриховые черные, и тонкие штриховые зеленые линии соответствуют  $p = 1, 2, 3$  и 4. Параметры соответствуют случаю  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.1)$  рисунка 3.14.

что  $|d\tilde{\epsilon}_{2(3),\uparrow}/dV_b| > |d\tilde{\epsilon}_{1(4),\uparrow}/dV_b|$  и  $|K_{2(3),\uparrow}| \gg |K_{1(4),\uparrow}|$  для широкого диапазона значений  $V_b$ . Данный результат позволяет заключить, что вклады с  $p = 2, 3$ , соответствующие квантовым точкам QD2 и QD3, являются основными. Это подтверждают зависимости  $D_{p,\uparrow} = K_{p,\uparrow}(d\tilde{\epsilon}_{p,\uparrow}/dV_b)$  от напряжения смещения  $V_b$ , показанные на рисунке 3.15b. Видно, что  $D_{2(3),\uparrow}$  почти везде отрицательно определены и вносят определяющий вклад в проводимость  $G_\uparrow$ , в то время как  $D_{1(4),\uparrow}$  малы по величине для всех напряжений смещения. В результате проводимость  $G_\uparrow^I$  отрицательна для любых напряжений  $V_b$  и сравнима по величине с  $G_\uparrow^0$  (см. рисунок 3.15a), что приводит к подавлению или смене знака проводимости  $G_\uparrow$ . В конечном итоге это приводит к появлению эффекта отрицательной дифференциальной проводимости, когда вклад  $|G_\uparrow^I| > G_\uparrow^0$  является определяющим.

В заключение, на рисунке 3.16 представлены результаты РГ метода для вольтамперных характеристик при конечных  $t_{14} \neq 0$ . Запирающее напряжение  $V_g$  фиксировано значением  $V_g = 0.8\Gamma$ , которое отвечает минимуму проводимости  $G_\uparrow$  (см. рисунок 3.7c). Видно, что наличие ненулевой амплитуды перескока между квантовыми точками QD1 и QD4 приводит к эффектам спиновой поляризации тока. При  $t_{14} = 2\Gamma$ , когда в равновесном случае  $G_\uparrow \approx 0$  (см. рису-

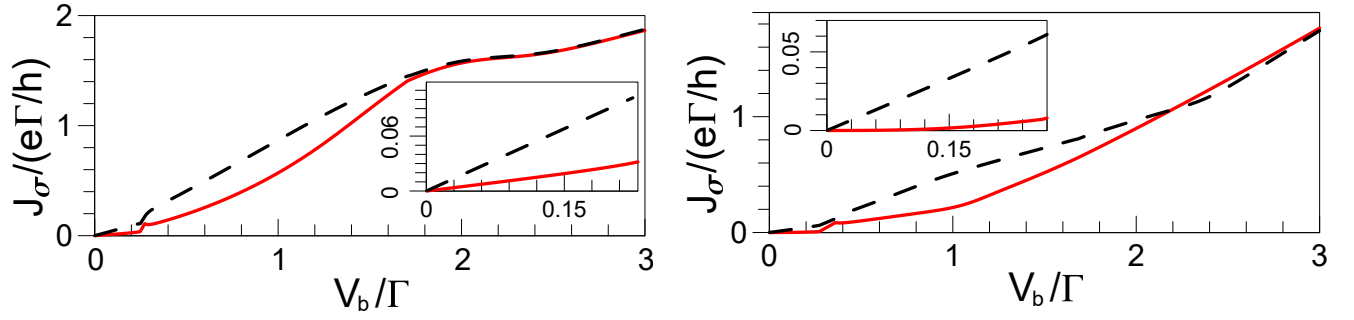


Рисунок 3.16 — Результаты РГ метода для тока  $J_\sigma = J_\sigma^L = |J_\sigma^R|$  при  $\sigma = \uparrow$  (сплошные линии) и  $\sigma = \downarrow$  (штриховые линии) как функции  $V_b$  при  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$ ,  $V_g = 0.8\Gamma$ ,  $U = 2\Gamma$ ,  $H/\Gamma = 10^{-3}$  для  $t_{14} = \Gamma$  (левая панель) и  $t_{14} = 2\Gamma$  (правая панель). Вставки —  $J_\sigma(V_b)$  при малых  $V_b$ .

нок 3.7с), ток  $J_\uparrow(V_b)$  почти отсутствует в диапазоне  $V_b < 0.15\Gamma$ , и по-прежнему незначителен для напряжений  $V_b \sim \Gamma$ . Это показывает возможность использования системы четырех квантовых точек в качестве спинового фильтра с высокой (близкой к 100% для случая  $t_{14} = 2\Gamma$  при малых  $V_b$ ) степенью спиновой поляризации даже при конечных малых напряжениях смещения.

### 3.5 Сравнение с системой двух квантовых точек

Для выявления сходств и различий систем двух и четырех квантовых точек проанализируем результаты метода функциональной ренормгруппы для системы двух квантовых точек в аналогичном системе четырех квантовых точек режиме. Гамильтониан системы двух квантовых точек определяется выражением (2.1) главы 2. Для установления связи с системой четырех квантовых точек рассмотрим случай диагональной асимметрии параметров перескока между квантовыми точками и контактами:  $t_{1(2)}^{L(R)} = t$ ,  $t_{1(2)}^{R(L)} = \gamma t$ . Параметры гибридизации  $\Gamma_j^\alpha = \pi |t_j^\alpha|^2 \rho_{\text{lead}}$  ( $j \in \{1, 2\}$ ,  $\alpha \in \{L, R\}$ ) в данном случае запишутся как:  $\Gamma_{1(2)}^{L(R)} = \Gamma$ ,  $\Gamma_{1(2)}^{R(L)} = \gamma^2 \Gamma$ . Как и для системы четырех квантовых точек будем полагать, что  $V_g = 0$ ,  $\epsilon_\sigma = -\sigma H$ , где  $H/U = 0.001$ . Для моделирования рассмотренной для системы четырех квантовых точек возможности туннелирования электронов между квантовыми точками QD1 и QD4, в системе двух квантовых точек учтем возможность прямого туннелирования электронов меж-

ду контактами L и R (см. вставку на рисунке 3.17а). Это реализуется благодаря включению дополнительного слагаемого

$$\mathcal{H}_{LR} = \sum_{\sigma} (t_{LR} c_{R,0,\sigma}^{\dagger} c_{L,0,\sigma} + \text{H.c.}) \quad (3.23)$$

в гамильтониан (2.1), где  $t_{LR}$  – параметр перескока между контактами.

Рассмотрим результаты РГ метода для спин-зависимой проводимости  $G_{\sigma}(V_g)$  при  $U = 2\Gamma$  в равновесном пределе  $V_b \rightarrow 0$ . Как видно из рисунка 3.17а, при отсутствии перескока между контактами ( $t_{LR} = 0$ ) проводимости  $G_{\uparrow}(V_g)$  и  $G_{\downarrow}(V_g)$  практически не различимы. Это свидетельствует о том, что характерное спиновое расщепление перенормированных уровней энергии, индуцируемое учетом взаимодействия  $U$ , является недостаточным для проявления отличия туннелирования электронов в разных спиновых каналах. Однако, получаемое в окрестности половинного заполнения системы спин-расщепленное решение соответствует  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle / S(S+1) \approx 1$  и  $\langle n_{a,\uparrow(\downarrow)} \rangle \approx 1(0)$  для антисвязывающего состояния системы, что, как обсуждается в главе 2, указывает на наличие локального магнитного момента на данном состоянии. Возникновение плато проводимости в упорядоченной фазе является следствием эффекта удержания уровня энергии связывающего состояния на значении, соответствующему  $V_g = 0$ . Данный

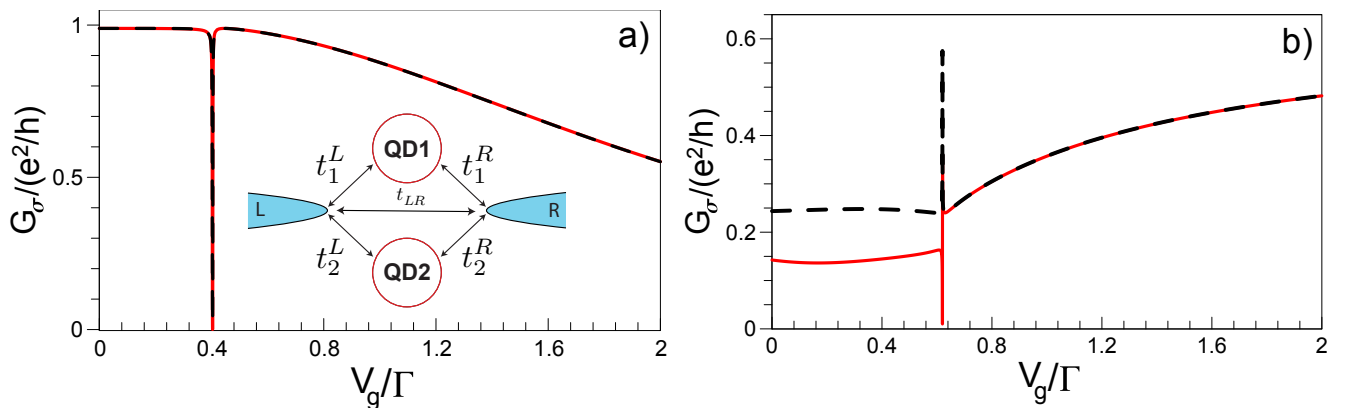


Рисунок 3.17 — Проводимость  $G_{\uparrow}$  (сплошная красная линия) и  $G_{\downarrow}$  (штриховая черная линия) для системы двух квантовых точек при  $\gamma = 0.9$ ,  $U = 2\Gamma$  для  $t_{LR} = 0$  (а) и  $t_{LR} = 4\Gamma$  (б), рассчитанные РГ методом без учета перенормировки двухчастичной вершины. Вставка на рисунке 3.17а – схематическое представление рассматриваемой системы двух квантовых точек.

эффект и связанное с ним плато проводимости  $G(V_g)$  аналогично формированию Кондо плато в проводимости для одной квантовой точки [68] (см. также раздел 1.3).

Учет возможности туннелирования электронов между контактами ( $t_{LR} \neq 0$ ) не приводит к существенному отличию проводимости  $G_{\uparrow}(V_g)$  от  $G_{\downarrow}(V_g)$  из-за слабости эффектов квантовой интерференции различных путей прохождения электронов через систему. Даже при довольно больших значениях  $t_{LR}$  проводимости в обоих спиновых каналах остаются сравнимыми по величине. Например, при  $t_{LR} = 4\Gamma$  (рисунок 3.17b) мы обнаруживаем  $G_{\uparrow}/G_{\downarrow} \approx 0.5$  во всем спинов-расщепленном регионе ( $|V_g/U| \lesssim 0.6$ ), исключая непосредственную окрестность резонанса проводимости, где  $G_{\uparrow}$  принимает значение близкое к нулю из-за деструктивной квантовой интерференции. Это противоположно системе четырех квантовых точек, для которой проводимости, отвечающие разным проекциям спина, могут существенно отличаться в области спинового расщепления уровней энергии для достаточно широкого диапазона напряжений  $V_g$  помимо области вблизи резонанса проводимости. Например, системе четырех квантовых точек с  $(t/\Gamma, \gamma) = (0.5, 0.9)$  (см. рисунок 3.7) области напряжений ниже резонанса соответствует  $G_{\uparrow}/G_{\downarrow} \approx 0.25$  при  $t_{14} = \Gamma$  и  $G_{\uparrow}/G_{\downarrow}$ , принимающее минимальное значение порядка  $10^{-6}$ , при  $t_{14} = 2\Gamma$ .

Перейдем к рассмотрению системы двух квантовых точек в неравновесных режимах при  $V_b \neq 0$ . На рисунке 3.18 показаны результаты РГ метода для дифференциальной проводимости  $G$  и среднего значения квадрата оператора полного спина системы  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  как функций напряжения смещения  $V_b$  между контактами, полученные для  $t_{LR, \epsilon} = 0$  и  $\gamma = 0.9$  при различном выборе  $\Gamma/U$ . Система двух квантовых точек демонстрирует качественно схожую системе четырех квантовых точек картину формирования локальных магнитных моментов. В частности, в зависимости от геометрии системы двух квантовых точек, определяемой параметрами  $(\Gamma, \gamma)$ , могут быть реализованы режимы с одним или двумя магнитными моментами на квантовых точках. К примеру, при  $(\Gamma/U, \gamma) = (0.005, 0.9)$  мы обнаруживаем  $\langle \mathbf{S}_{s/a}^2 \rangle / S(S+1) \approx 1$ , в то время как при  $(\Gamma/U, \gamma) = (0.5, 0.9)$  имеем  $\langle \mathbf{S}_a^2 \rangle / S(S+1) \approx 1$ ,  $\langle \mathbf{S}_s^2 \rangle / S(S+1) \approx 1/2$ , что

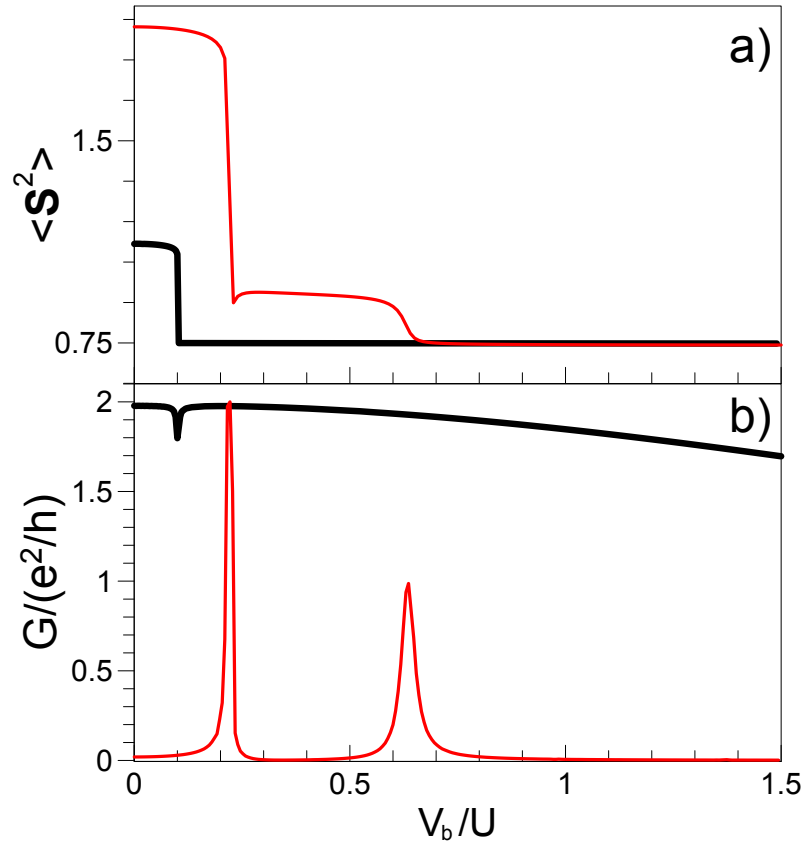


Рисунок 3.18 — Результаты метода функциональной ренормгруппы для  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$  (a) и  $G$  (b) как функций запирающего напряжения  $V_b$ , полученные для системы двух квантовых точек при  $t_{LR} = V_g = 0$ ,  $\gamma = 0.9$  для  $\Gamma = 0.005U$  (тонкая красная линия) и  $\Gamma = 0.5U$  (толстая черная линия). При расчетах РГ поток двухчастичной вершины не учитывался.

соответствует двум или одному магнитному моменту в системе при  $V_b = 0$ . Приложение напряжения смещения  $V_b \neq 0$  ведет к разрушению магнитных моментов в системе (если они существуют при  $V_b = 0$ ), что отражается в подавлении среднего значения квадрата оператора полного спина системы (рисунок 3.18a). При  $V_b \gg U$  магнитный момент на связывающем/антисвязывающем состоянии отсутствует и  $\langle \mathbf{S}_{a/s}^2 \rangle / S(S+1) \approx 1/2$ . Отметим, что как и для системы четырех квантовых точек при промежуточных напряжениях  $V_b$ , имеет место формирование фазы с дробным значением магнитного момента, когда существуют два магнитных момента при  $V_b = 0$ . Таким образом, с ростом напряжения между контактами, система двух квантовых точек демонстрирует эволюцию из магнитного в «парамагнитный» режим, которая соответствует рассмотренной ранее для системы четырех квантовых точек.

Кривые дифференциальной проводимости системы двух квантовых точек, представленные на рисунке 3.18b, выглядят аналогично соответствующим кривым системы четырех квантовых точек (см. рисунок 3.14d), если обе системы имеют одинаковое магнитное состояние при  $V_b = 0$ . Однако, дифференциальная проводимость системы двух квантовых точек демонстрирует несколько иное поведение и особенности вблизи области фазового перехода, а также не обнаруживает наличие эффектов отрицательной дифференциальной проводимости при не слишком большом выборе параметра электрон-электронного взаимодействия  $U$ .

### 3.6 Основные результаты и выводы к главе 3

В настоящей главе исследовалось формирование магнитных моментов и электронный транспорт в системе четырех квантовых точек при равновесных и неравновесных режимах системы. На квантовых точках учитывалось локальное кулоновское взаимодействие, для описания эффектов которого использовался метод функциональной ренормализационной группы, обобщенный на формализм неравновесных функций Грина. Основные результаты заключаются в следующем:

1. Обнаружено, что в зависимости от параметров рассматриваемой системы могут быть реализованы режимы с одним или двумя почти локальными магнитными моментами.

2. Продемонстрирована возможность частичного и полного подавления проводимости в одном из спиновых каналов при приложении малого магнитного поля. Показано, что эффективность достигаемой спиновой фильтрации в системе четырех квантовых точек значительно превосходит соответствующую системе двух квантовых точек.

3. Определена эволюция магнитных состояний системы при неравновесных режимах, вызванных приложением конечного напряжения смещения между контактами. С помощью метода функциональной ренормгруппы показано, что существующие в равновесном режиме локальные магнитные моменты оста-

ются стабильными в широком диапазоне напряжений смещения вблизи равновесия. При дальнейшем росте напряжения смещения имеет место разрушение локальных магнитных моментов и в зависимости от параметров системы оно происходит в один или два этапа. При двухэтапном процессе промежуточная фаза обладает дробным магнитным моментом.

4. Рассчитаны вольтамперные характеристики и дифференциальные проводимости системы. Показано, что характеристики электронного транспорта обнаруживают резкие особенности при напряжениях, соответствующих переходам между различными магнитными состояниями. Выявлены эффекты отрицательной дифференциальной проводимости и спиновой поляризации тока, вызванные наличием электронных корреляций в системе.

Основные результаты, обсуждаемые в главе 3, опубликованы в работе [127].



## Заключение

В диссертационной работе представлены результаты исследования формирования локальных магнитных моментов и электронного транспорта кольцевых систем двух и четырех квантовых точек, соединенных с электронными резервуарами (контактами), методом функциональной ренормгруппы.

*Основные результаты работы состоят в следующем:*

1. Предложена модификация метода функциональной ренормгруппы, позволяющая описывать корреляционные эффекты в системах квантовых точек, находящихся в фазе сингулярной ферми-жидкости, где электрон-электронное взаимодействие приводит к возможности формирования локальных магнитных моментов. Предложенный метод заключается в плавном выключении вспомогательного магнитного поля в ренормгрупповом потоке, что достигается за счет введения в функцию Грина системы дополнительного слагаемого – контрчлена. При анализе системы двух квантовых точек показано, что данный подход устраняет расходимости вершин электрон-электронного взаимодействия, которые возникают в «стандартных» схемах метода функциональной ренормгруппы, и позволяет корректно описать состояние системы с локальным магнитным моментом.

2. В рамках ренормгруппового подхода с контрчленом исследована система двух квантовых точек при наличии асимметрии параметров перескока между квантовыми точками и контактами. Продемонстрирована возможность квантового фазового перехода в режим с локальным магнитным моментом (состояние сингулярной ферми-жидкости) и выявлены характерные зависимости проводимости как функции запирающего напряжения затвора. Показано, что в зависимости от характера асимметрии параметров перескока, система может демонстрировать два типа квантовых фазовых переходов в состояние сингулярной ферми-жидкости. А именно, квантовый фазовый переход, сопровождающийся, аналогично симметричному случаю, скачкообразным изменением про-

водимости, или непрерывный квантовой фазовый переход, при котором проводимость имеет асимметричный резонанс вблизи точки фазового перехода.

3. Показано, что когда в системе четырех квантовых точек существует один локальный магнитный момент и матричные элементы перескока электрона для противоположных квантовых точек, имеющих гибридизацию с контактами, ненулевые, имеет место подавление проводимости для одной из проекций спина. Установлено, что из-за деструктивной квантовой интерференции данный эффект может быть реализован при наличии малого магнитного поля и не возникает в системе двух квантовых точек.

4. Методом функциональной ренормгруппы для функций Грина-Келдыша в системах двух и четырех квантовых точек было исследовано формирование локальных магнитных моментов в неравновесных режимах, когда между контактами приложено конечное напряжение смещения. Рассчитаны зависимости тока, дифференциальной проводимости, спин-спиновых корреляторов, средних чисел заполнения и эффективных (перенормированных) параметров от напряжения смещения между контактами. Показано, что формирование локальных магнитных моментов возможно в широком диапазоне напряжений смещения вблизи равновесия. Вне данного диапазона рост напряжения между контактами приводит к разрушению локальных магнитных моментов, которое в зависимости от параметров системы происходит в один или два этапа. Обнаружено, что при двухэтапном процессе промежуточная фаза обладает дробным значением магнитного момента. Выявлено, что вольтамперные характеристики и дифференциальная проводимость систем обнаруживают резкие особенности при напряжениях, соответствующих переходам между различными магнитными состояниями.

5. Для системы четырех квантовых точек продемонстрировано наличие эффектов отрицательной дифференциальной проводимости и спиновой поляризации тока, вызванных наличием электрон-электронного взаимодействия в системе.

*Перспективы дальнейшей разработки темы*

Развитые в данной работе подходы будут применены к исследованию корреляционных эффектов наиболее реалистичных моделей наноскопических систем. Результаты диссертационной работы могут быть использованы при проектировании устройств спинтроники.

*Благодарности*

Автор выражает благодарность Андрею Александровичу Катанину за научное руководство и поддержку на всех этапах работы, а также коллективу сотрудников лаборатории теоретической физики ИФМ УрО РАН за плодотворное обсуждение работы и создание комфортной рабочей атмосферы.

**Список литературы**

1. Harrison, P. Quantum wells, wires and dots / P. Harrison. – Chichester : Wiley-Interscience, 2007. – 482 p.
2. Murayama, Y. Mesoscopic systems: fundamentals and applications / Y. Murayama. – Weinheim : Wiley-VCH, 2001. – 241 p.
3. Jacak, L. Quantum dots / L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs. – Berlin : Springer Science & Business Media, 2013. – 176 p.
4. Weisbuch, C. Quantum semiconductor structures: fundamentals and applications / C. Weisbuch, B. Vinter. – San Diego : Elsevier, 2014. – 252 p.
5. Koch, S. W. Semiconductor quantum dots / S. W. Koch, L. Bányai. – Singapore : World Scientific series on atomic, molecular, and optical physics, 1993. – 244 p.
6. Nanoparticles: from theory to application / ed. by G. Schmid. – Mörlenbach : John Wiley & Sons, 2011. – 533 p.
7. Mesoscopic Electron Transport / ed. by L. L. Sohn, L. P. Kouwenhoven, G. Schön. – Curacao, Netherlands Antilles : Springer Science & Business Media, 2013. – 677 p.
8. Haug, H. Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors / H. Haug, J. Jauho. – Berlin, Heidelberg : Springer, 2008. – 362 p.
9. Datta, S. Electronic transport in mesoscopic systems / S. Datta. – Cambridge, United Kingdom : Cambridge Univ. Press, 1995. – 377 p.
10. Quantum Materials, Lateral Semiconductor Nanostructures, Hybrid Systems and Nanocrystals: Lateral Semiconductor Nanostructures, Hybrid Systems and Nanocrystals / ed. by D. Heitmann. – Heidelberg : Springer Science & Business Media, 2010. – 434 p.

11. Spins in few-electron quantum dots / R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, and L. M. K. Vandersypen // *Rev. Mod. Phys.* – 2007. – Vol. 79, № 4. – P. 1217-1265.
12. Hewson, A. C. The Kondo problem to heavy fermions / A. C. Hewson. – Cambridge, United Kingdom : Cambridge Univ. Press, 1997. – 444 p.
13. Kondo effect in a single-electron transistor / D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner // *Nature*. – 1998. – Vol. 391, № 6663. – P. 156-159.
14. The Kondo effect in the unitary limit / W. van der Wiel, S. De Franceschi, T. Fujisawa, J. M. Elzerman, S. Tarucha, L. P. Kouwenhoven // *Science*. – 2000. – Vol. 289, № 5487. – P. 2105-2108.
15. Kastner, M. A. The single-electron transistor / M. A. Kastner // *Rev. Mod. Phys.* – 1992. – Vol. 64, № 3. – P. 849-858.
16. Miroshnichenko, A. E. Fano resonances in nanoscale structures / A. E. Miroshnichenko, S. Flach, Y. S. Kivshar // *Rev. Mod. Phys.* – 2010. – Vol. 82, № 3. – P. 2257-2298.
17. The Fano Effect in Aharonov-Bohm Interferometers / O. Entin-Wohlman, A. Aharony, Y. Imry, Y. Levinson // *J. Low Temp. Phys.* – 2002. – Vol. 126, № 3-4. – P. 1251-1273.
18. Trocha, P. Quantum interference and Coulomb correlation effects in spin-polarized transport through two coupled quantum dots / P. Trocha, J. Barnás // *Phys. Rev. B*. – 2007. – Vol. 76, № 16. – P. 165432 (9).
19. Mesoscopic Fano effect in a quantum dot embedded in an Aharonov-Bohm ring / K. Kobayashi, H. Aikawa, S. Katsumoto, Y. Iye // *Phys. Rev. B*. – 2003. – Vol. 68, № 23. – P. 235304 (8).
20. Žitko, R. Quantum phase transitions in systems of parallel quantum dots / R. Žitko, J. Bonča // *Phys. Rev. B*. – 2007. – Vol. 76, № 24. – P. 241305 (4).

21. Žitko, R. Ground State of the Parallel Double Quantum Dot System / R. Žitko, J. Mravlje, K. Haule // *Phys. Rev. Lett.* – 2012. – Vol. 108, № 6. – P. 066602 (5).
22. Galpin, M. R. Quantum Phase Transition in Capacitively Coupled Double Quantum Dots / M. R. Galpin, D. E. Logan, H. R. Krishnamurthy // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – Vol. 94, № 18. – P. 186406 (4).
23. Wang, W. Z. Spectral properties and quantum phase transitions in parallel triple quantum dots / W. Z. Wang // *Phys. Rev. B.* – 2007. – Vol. 76, № 11. – P. 115114 (6).
24. Mitchell, A. K. Quantum phase transition in quantum dot trimers / A. K. Mitchell, T. F. Jarrold, D. E. Logan // *Phys. Rev. B.* – 2009. – Vol. 79, № 8. – P. 085124 (5).
25. Local moment formation and Kondo screening in impurity trimers / A. K. Mitchell, T. F. Jarrold, M. R. Galpin, D. E. Logan // *J. Phys. Chem. B.* – 2013. – Vol. 117, № 42. – P. 12777-12786.
26. Liu, D. E. Quantum phase transition and emergent symmetry in a quadruple quantum dot system / D. E. Liu, S. Chandrasekharan, H. U. Baranger // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – Vol. 105, № 25. – P. 256801 (4).
27. Geometry, chirality, topology and electron-electron interactions in the quadruple quantum dot molecule / I. Ozfidan, A. H. Trojnar, M. Korkusinski, P. Hawrylak // *Solid State Commun.* – 2013. – Vol. 172. – P. 15-19.
28. Understanding quantum phase transitions / ed. L. Carr. – CRC press, 2010. – 756 p.
29. Sachdev S. Quantum phase transitions / S. Sachdev // *Handbook of magnetism and advanced magnetic materials*; ed. H Kronmuller, S Parkin. – John Wiley & Sons, 2007. – P. 413 (7).

30. De Guevara, M. L. L. Ghost Fano resonance in a double quantum dot molecule attached to leads / M. L. L. De Guevara, F. Claro, P. A. Orellana // *Phys. Rev. B.* – 2003. – Vol. 67, № 19. – P. 195335 (6).
31. Transmission gaps and Fano resonances in an acoustic waveguide: analytical model / E. H. E. Boudouti, T. Mrabti, H. Al-Wahsh, B. Djafari-Rouhani, A. Akjouj and L. Dobrzynski // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2008. – Vol. 20, № 25. – P. 255212 (10).
32. Rotter, I. Zeros in single-channel transmission through double quantum dots / I. Rotter, A. F. Sadreev // *Phys. Rev. E.* – 2005. – Vol. 71, № 4. – P. 046204 (8).
33. Kondo effects in a triangular triple quantum dot with lower symmetries / A. Oguri, S. Amaha, Y. Nishikawa, T. Numata, M. Shimamoto, A. C. Hewson, and S. Tarucha // *Phys. Rev. B.* – 2011. – Vol. 83, № 20. – P. 205304 (17).
34. Meden, V. Correlation-induced resonances in transport through coupled quantum dots / V. Meden, F. Marquardt // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 96, № 14. – P. 146801 (4).
35. Ding, G.-H. Quantum phase transition and underscreened Kondo effect in electron transport through parallel double quantum dots / G.-H. Ding, F. Ye, B. Dong // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2009. – Vol. 21, № 45. – P. 455303 (6).
36. Tooski, S. B. Regular and singular Fermi liquid in triple quantum dots: Coherent transport studies / S. B. Tooski, A. Ramšak, B. R. Buřka // *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures.* – 2016. – Vol. 75. – P. 345-352.
37. Bulla, R. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems / R. Bulla, T. Costi, T. Pruschke // *Rev. Mod. Phys.* – 2008. – Vol. 80, № 2. – P. 395-450.
38. Nisikawa, Y. Numerical renormalization group approach to a quartet quantum-dot array connected to reservoirs: Gate-voltage dependence of the conductance / Y. Nisikawa, A. Oguri // *Phys. Rev. B.* – 2006. – Vol. 73, № 12. – P. 125108 (8).

39. Emergent SU (4) Kondo physics in a spin-charge-entangled double quantum dot / A. J. Keller, S. Amasha, I. Weymann, C. P. Moca, I. G. Rau, J. A. Katine, H. Shtrikman, G. Zaránd, and D. Goldhaber-Gordon // *Nat. Phys.* – 2014. – Vol. 10, №. 2. – P. 145-150.
40. Weymann, I. Finite-temperature spintronic transport through Kondo quantum dots: Numerical renormalization group study / I. Weymann // *Phys. Rev. B.* – 2011. – Vol. 83, № 11. – P. 113306 (4).
41. Hofstetter, W. Singlet-triplet transition in lateral quantum dots: A numerical renormalization group study / W. Hofstetter, G. Zaránd // *Phys. Rev. B.* – 2004. – Vol. 69, № 23. – P. 235301 (9).
42. Chung, C.-H. Two-stage Kondo effect in side-coupled quantum dots: Renormalized perturbative scaling theory and numerical renormalization group analysis / C.-H. Chung, G. Zaránd, P. Wölfle // *Phys. Rev. B.* – 2008. – Vol. 77, № 3. – P. 035120 (6).
43. Tanaka, Y. Andreev transport through double quantum dots: Numerical renormalization group approach / Y. Tanaka, N. Kawakami, A. Oguri // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* – 2008. – Vol. 40, № 5. – P. 1618-1620.
44. Kondo effects in a triangular triple quantum dot: Numerical renormalization group study in the whole region of the electron filling / T. Numata, Y. Nisikawa, A. Oguri, A. C. Hewson // *Phys. Rev. B.* – 2009. – Vol. 80, № 15. – P. 155330 (16).
45. Hirsch, J. E. Monte Carlo method for magnetic impurities in metals / J. E. Hirsch, R. M. Fye // *Phys. Rev. Lett.* – 1986. – Vol. 56, № 23. – P. 2521-2524.
46. Quantum Monte Carlo simulations of solids / W. M. C. Foulkes, L. Mitras, R. J. Needs, G. Rajagopal // *Rev. Mod. Phys.* – 2001. – Vol. 73, № 1. – P. 33-83.



47. Rubtsov, A. N. Continuous-time quantum Monte Carlo method for fermions / A. N. Rubtsov, V. V. Savkin, A. I. Lichtenstein // *Phys. Rev. B.* – 2005. – Vol. 72, № 3. – P. 035122 (9).
48. Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models / E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner // *Rev. Mod. Phys.* – 2011. – Vol. 83, № 2. – P. 349-404.
49. White, S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups / S. R. White // *Phys. Rev. Lett.* – 1992. – Vol. 69, № 19. – P. 2863-2866.
50. Dynamical vertex approximation for nanoscopic systems / A. Valli, G. Sangiovanni, O. Gunnarsson, A. Toschi, and K. Held // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – Vol. 104, № 24. – P. 246402 (4).
51. Iterative real-time path integral approach to nonequilibrium quantum transport / S. Weiss, J. Eckel, M. Thorwart, R. Egger // *Phys. Rev. B.* – 2008. – Vol. 77, № 19. – P. 195316 (12).
52. Oliveira, W. C. Generalized numerical renormalization-group method to calculate the thermodynamical properties of impurities in metals / W. C. Oliveira, L. N. Oliveira // *Phys. Rev. B.* – 1994. – Vol. 49, № 17. – P. 11986-11994.
53. Mühlbacher, L. Real-time path integral approach to nonequilibrium many-body quantum systems / L. Mühlbacher, E. Rabani // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – Vol. 100, № 17. – P. 176403 (4).
54. Werner, P. Diagrammatic Monte Carlo simulation of nonequilibrium systems / P. Werner, T. Oka, A. J. Millis // *Phys. Rev. B.* – 2009. – Vol. 79, № 3. – P. 035320 (18).
55. Schiro, M. Real-time diagrammatic Monte Carlo for nonequilibrium quantum transport / M. Schiro, M. Fabrizio // *Phys. Rev. B.* – 2009. – Vol. 79, № 15. – P. 153302 (4).

56. Werner, Ph. Weak-coupling quantum Monte Carlo calculations on the Keldysh contour: Theory and application to the current-voltage characteristics of the Anderson model / Ph. Werner, T. Oka, M. Eckstein, A. J. Millis // *Phys. Rev. B.* – 2010. – Vol. 81, № 3. – P. 035108 (11).
57. Han, J. E. Imaginary-time formulation of steady-state nonequilibrium: application to strongly correlated transport / J. E. Han, R. J. Heary // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol. 99, № 23. – P. 236808 (4).
58. Time-dependent density-matrix renormalization-group using adaptive effective Hilbert spaces / A. J. Daley, C. Kollath, U. Schollwöck, G. Vidal // *J. Stat. Mech.: Theor. Exp.* – 2004. – Vol. 2004, № 04. – P. P04005 (28).
59. White, S. R. Real-time evolution using the density matrix renormalization group / S. R. White, A. E. Feiguin // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 93, № 7. – P. 076401 (4).
60. Schmitteckert, P. Nonequilibrium electron transport using the density matrix renormalization group method / P. Schmitteckert // *Phys. Rev. B.* – 2004. – Vol. 70, № 12. – P. 121302 (4).
61. Anders, F. B. Real-time dynamics in quantum-impurity systems: A time-dependent numerical renormalization-group approach / F. B. Anders, A. Schiller // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – Vol. 95, № 19. – P. 196801 (4).
62. Metzner, W. Functional renormalization group approach to correlated fermion systems / W. Metzner, M. Salmhofer, C. Honerkamp // *Rev. Mod. Phys.* – 2012. – Vol. 84, № 1. – P. 299-352.
63. Salmhofer, M. Fermionic renormalization group flows: Technique and theory / M. Salmhofer, C. Honerkamp // *Prog. Theor. Physics.* – 2001. – Vol. 105, № 1. – P. 1-35.

64. Interaction flow method for many-fermion systems / C. Honerkamp, D. Rohe, S. Andergassen, T. Enss // *Phys. Rev. B.* – 2004. – Vol. 70, № 23. – P. 235115 (10).
65. Salmhofer, M. Renormalization: an introduction / M. Salmhofer. – Springer Science & Business Media, 2013. – P. 231.
66. Kopietz, P. Introduction to the functional renormalization group / P. Kopietz, L. Bartosch, F. Schutz. – Springer, 2010. – P. 380.
67. A functional renormalization group approach to zero-dimensional interacting systems / R. Hedden, V. Meden, Th. Pruschke, K. Schönhammer // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2004. – Vol. 16, № 29. – P. 5279 (18).
68. Karrasch, C. Functional renormalization group approach to transport through correlated quantum dots / C. Karrasch, T. Enss, V. Meden // *Phys. Rev. B.* – 2006. – Vol. 73, № 23. – P. 235337 (16).
69. Renormalization group approach to time-dependent transport through correlated quantum dots / D. M. Kennes, S. G. Jakobs, C. Karrasch, V. Meden // *Phys. Rev. B.* – 2012. – Vol. 85, № 8. – P. 085113 (16).
70. Gezzi, R. Functional renormalization group for nonequilibrium quantum many-body problems / R. Gezzi, Th. Pruschke, V. Meden // *Phys. Rev. B.* – 2007. – Vol. 75, № 4. – P. 045324 (14).
71. Jakobs, S. G. Nonequilibrium functional renormalization group for interacting quantum systems / S. G. Jakobs, V. Meden, H. Schoeller // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol. 99, № 15. – P. 150603 (4).
72. A finite-frequency functional renormalization group approach to the single impurity Anderson model / C. Karrasch, R. Hedden, R. Peters, T. Pruschke, K. Schönhammer and V. Meden // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2008. – Vol. 20, № 34. – P. 345205 (13).

73. A gentle introduction to the functional renormalization group: The Kondo effect in quantum dots / S. Andergassen, T. Enss, C. Karrasch, V. Meden // *Quantum Magnetism*. – Springer, Dordrecht, 2008. – P. 1-17.
74. Phase lapses in transmission through interacting two-level quantum dots / C. Karrasch, T. Hecht, A. Weichselbaum, J. von Delft, Y. Oreg and V. Meden // *New J. Phys.* – 2007. – Vol. 9, № 5. – P. 123 (24).
75. Kondo physics in transport through a quantum dot with Luttinger-liquid leads / S. Andergassen, T. Enss, V. Meden // *Phys. Rev. B*. – 2006. – Vol. 73, № 15. – P. 153308 (4).
76. Nonequilibrium functional renormalization group with frequency-dependent vertex function: A study of the single-impurity Anderson model / S. G. Jakobs, M. Pletyukhov, H. Schoeller // *Phys. Rev. B*. – 2010. – Vol. 81, № 19. – P. 195109 (31).
77. Comparative study of theoretical methods for non-equilibrium quantum transport / J. Eckel, F. Heidrich-Meisner, S. Jakobs, M. Thorwart, M. Pletyukhov and R. Egger // *New J. Phys.* – 2010. – Vol. 12, № 4. – P. 043042 (16).
78. Functional renormalization group study of the interacting resonant level model in and out of equilibrium / C. Karrasch, M. Pletyukhov, L. Borda, V. Meden // *Phys. Rev. B*. – 2010. – Vol. 81, № 12. – P. 125122 (12).
79. Kondo effect in the Kohn-Sham conductance of multiple-level quantum dots / G. Stefanucci, S. Kurth // *Phys. Status Solidi B*. – 2013. – Vol. 250, № 11. – P. 2378-2385.
80. AC transport in correlated quantum dots: From Kondo to Coulomb blockade regime / G. Stefanucci, S. Kurth // *Phys. Rev. B*. – 2018. – Vol. 97, № 24. – P. 245415 (5).

81. Electron-electron interactions in isolated and realistic quantum dots: A density functional theory study / H. Jiang, D. Ullmo, W. Yang, H. U. Baranger // *Phys. Rev. B.* – 2004. – Vol. 69, № 23. – P. 235326 (10).
82. Density functional theory for a model quantum dot: Beyond the local-density approximation / S. Schenk, P. Schwab, M. Dzierzawa, U. Eckern // *Phys. Rev. B.* – 2011. – Vol. 83, № 11. – P. 115128 (8).
83. Kohn, W. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects / W. Kohn, L. J. Sham // *Phys. Rev.* – 1965. – Vol. 140, № 4A. – P. A1133-A1138.
84. Parr, R. G. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules / R. G. Parr W. Yang. – Oxford University Press, 1994. – P. 352.
85. Delaney, P. Correlated electron transport in molecular electronics / P. Delaney, J. C. Greer // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 93, № 3. – P. 036805 (4).
86. Benchmark density functional theory calculations for nanoscale conductance / M. Strange, I. S. Kristensen, K. S. Thygesen, K. W. Jacobsen // *J. Chem. Phys.* – 2008. – Vol. 128, № 11. – P. 114714.
87. Schmitteckert, P. The dark side of DFT based transport calculations / P. Schmitteckert // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2013. – Vol. 15, № 38. – P. 15845-15849.
88. Cohen, A. J. Insights into current limitations of density functional theory / A. J. Cohen, P. Mori-Sánchez, W. Yang // *Science.* – 2008. – Vol. 321, № 5890. – P. 792-794.
89. Matsubara, T. A new approach to quantum-statistical mechanics / T. Matsubara // *Prog. Theor. Phys.* – 1955. – Vol. 14, № 4. – P. 351-378.
90. Mahan, G. D. Many-Particle Physics / G. D. Mahan. – Springer Science & Business Media, 2013. – P. 785.

91. Келдыш, Л. В. Диаграммная техника для неравновесных процессов / Л. В. Келдыш // ЖЭТФ. – 1965. – Т. 48, № 4. – С. 1515-1527.
92. Лифшиц, Е. М. Физическая кинетика / Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. – М.: Наука, 1979. – 528 с.
93. Kamenev, A. Electron-electron interactions in disordered metals: Keldysh formalism / A. Kamenev, A. Andreev // Phys. Rev. B. – 1999. – Vol. 60, № 4. – P. 2218–2238.
94. Negele, J. W. Quantum many-particle systems / J. W. Negele, H. Orland. – Addison-Wesley Pub. Co., 1988. – P. 459.
95. Тейлор, Дж. Теория рассеяния: Квантовая теория нерелятивистских столкновений / Дж. Тейлор ; Перевод с англ. А. С. Жукарева ; Под ред. проф. А. М. Бродского. – Москва : Мир, 1975. – 565 с.
96. Wingreen, N. Inelastic scattering in resonant tunneling / N. Wingreen, K. Jacobsen, J. Wilkins // Phys. Rev. B. – 1989. – Vol. 40, № 17. – P. 11834-11850.
97. Wilson, K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem / K. G. Wilson // Rev. Mod. Phys. – 1975. – Vol. 47, № 4. – P. 773-840.
98. Изюмов, Ю. А. Электронная структура соединений с сильными корреляциями / Ю. А. Изюмов, В. И. Анисимов. – Москва, Ижевск : Регулярная и хаотическая динамика, 2009. – 376 с.
99. Enss T. Renormalization, Conservation Laws and Transport in Correlated Electron Systems: Ph.D. thesis: 27.04.05. – University of Stuttgart, Stuttgart, Germany, 2005 – 120 p.
100. Morris, T. R. The Exact renormalization group and approximate solutions / T. R. Morris // Int. J. Mod. Phys. A. – 1994. – Vol. 9, № 14. – P. 2411-2449.

101. Karrasch C. The Functional Renormalization Group for Zero-Dimensional Quantum Systems in and out of Equilibrium: Ph.D. thesis: 02.07.10. – RWTH Aachen, Germany, 2010 – 219 p.
102. Litim, D. F. Optimisation of the exact renormalisation group / D. F. Litim // Phys. Lett. B. – 2000. – Vol. 486, № 1-2. – P. 92 (8).
103. Litim, D. F. Optimized renormalization group flows / D. F. Litim // Phys. Rev. D. – 2001. – Vol. 64, № 10. – P. 105007 (17).
104. Protsenko, V. S. Quantum phase transition and conductivity of parallel quantum dots with a moderate Coulomb interaction / V. S. Protsenko, A. A. Katanin // J. Phys.: Conf. Ser. – 2016. – Vol. 690, № 1. – P. 012028 (6).
105. Protsenko, V. S. Interaction-induced local moments in parallel quantum dots within the functional renormalization group approach / V. S. Protsenko, A. A. Katanin // Phys. Rev. B. – 2016. – Vol. 94, № 19. – P. 195148 (8).
106. Protsenko, V. S. Functional renormalization group study of parallel double quantum dots: Effects of asymmetric dot-lead couplings / V. S. Protsenko, A. A. Katanin // Phys. Rev. B. – 2017. – Vol. 95, № 24. – P. 245129 (10).
107. Jakobs, S. G. Nonequilibrium functional renormalization group with frequency-dependent vertex function: A study of the single-impurity Anderson model / S. G. Jakobs, M. Pletyukhov, H. Schoeller // Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 81, № 19. – P. 195109 (31).
108. Jakobs, S. G. Properties of multi-particle Green's and vertex functions within Keldysh formalism / S. G. Jakobs, M. Pletyukhov, H. Schoeller // J. Phys. A: Math. Theor. – 2010. – Vol. 43, № 10. – P. 103001 (28).
109. Functional renormalization group study of the interacting resonant level model in and out of equilibrium / C. Karrasch, M. Pletyukhov, L. Borda, V. Meden // Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 81, № 12. – P. 125122 (12).

110. Ермолаев, А. М. Лекции по квантовой статистике и кинетике. 6. Метод функций Грина в физической кинетике / А. М. Ермолаев, Г. И. Рашба. – Х. : ХНУ имени В.Н. Каразина, 2010. – 99 с.
111. Meir, Y. Landauer formula for the current through an interacting electron region / Y. Meir, N. S. Wingreen // *Phys. Rev. Lett.* – 1992. – Vol. 68, № 16. – P. 2512-2515.
112. Landauer, R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction / R. Landauer // *J. Res. Dev.* – 1957. – Vol. 1, № 3. – P. 223-231.
113. Büttiker, M. Four-terminal phase-coherent conductance / M. Büttiker // *Phys. Rev. Lett.* – 1986. – Vol. 57, № 14. – P. 1761-1764.
114. Transmission phase shift of a quantum dot with kondo correlations / U. Gerland, J. von Delft, T. A. Costi, Y. Oreg // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – Vol. 84, № 16. – P. 3710–3713.
115. Абрикосов, А. А. Методы квантовой теории поля в статистической физике / А. А. Абрикосов, Л. Н. Горьков, И. Е. Дзялошинский. – 2 изд., испр. и доп. – М. : Добросвет, 1998. – 513 с.
116. Jauho, A. P. Time-dependent transport in interacting and noninteracting resonant-tunneling systems / A. P. Jauho, N. S. Wingreen, Y. Meir // *Phys. Rev. B.* – 1994. – Vol. 50, № 8. – P. 5528-5544.
117. Heidrich-Meisner, F. Real-time simulations of nonequilibrium transport in the single-impurity Anderson model / F. Heidrich-Meisner, A. E. Feiguin, E. Dagotto // *Phys. Rev. B.* – 2009. – Vol. 79, № 23. – P. 235336 (6).
118. Numerical recipes in Fortran 77: the art of scientific computing / W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery – 2nd ed. – Cambridge University Press, 2001. – 920 p.



119. Zero-field Kondo splitting and quantum-critical transition in double quantum dots / L. G. G. V. Dias da Silva, N. P. Sandler, K. Ingersent, S. E. Ulloa // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97, № 9. – P. 096603 (4).
120. Signatures of quantum phase transitions in parallel quantum dots: Crossover from local moment to underscreened spin-1 Kondo physics / A. Wong, W. B. Lane, L. G. G. V. Dias da Silva, K. Ingersent, N. Sandler, and S. E. Ulloa // *Phys. Rev. B.* – 2012. – Vol. 85, № 11. – P. 115316 (6).
121. Weymann, I. Underscreened Kondo effect in quantum dots coupled to ferromagnetic leads / I. Weymann, L. Borda // *Phys. Rev. B.* – 2010. – Vol. 81, № 11. – P. 115445 (7).
122. Logan, D. E. Correlated electron physics in two-level quantum dots: Phase transitions, transport, and experiment / D. E. Logan, C. J. Wright, M. R. Galpin // *Phys. Rev. B.* – 2009. – Vol. 80, № 12. – P. 125117 (22).
123. Density matrix numerical renormalization group for non-Abelian symmetries / A. I. Toth, C. P. Moca, O. Legeza, G. Zaránd // *Phys. Rev. B.* – 2008. – Vol. 78, № 24. – P. 245109 (11).
124. Oguri, A. Determination of the phase shifts for interacting electrons connected to reservoirs / A. Oguri, Y. Nisikawa, A. C. Hewson // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 2005. – Vol. 74, № 9. – P. 2554-2562.
125. Anderson, P. W. Localized magnetic states in metals / P. W. Anderson // *Phys. Rev.* – 1961. – Vol. 124, № 1. – P. 41-53.
126. Pruschke, Th. Hund's coupling and the metal-insulator transition in the two-band Hubbard model / Th. Pruschke, R. Bulla // *Eur. Phys. J. B.* – 2005. – Vol. 44, № 2. – P. 217-224.
127. Protsenko, V. S. Local magnetic moments and electronic transport in closed loop quantum dot systems: A case of quadruple quantum dot ring at and away

from equilibrium / V. S. Protsenko, A. A. Katanin // Phys. Rev. B. – 2019. – Vol. 99, № 16. – P. 165114 (18).