Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. В. Вальков, С. В. Аксенов, Неравновесные функции Грина в атомном представлении и проблема квантового транспорта электронов через системы с внутренними степенями свободы, *ТМФ*, 2018, том 194, номер 2, 277–294

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9396>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 34.229.108.108

26 апреля 2023 г., 11:39:14

© 2018 г.

В. В. Вальков*, С. В. Аксенов*

НЕРАВНОВЕСНЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА В АТОМНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ И ПРОБЛЕМА КВАНТОВОГО ТРАНСПОРТА ЭЛЕКТРОНОВ ЧЕРЕЗ СИСТЕМЫ С ВНУТРЕННИМИ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ

Развивается теория квантового транспорта электронов через системы с сильными корреляциями между фермиевскими и внутренними спиновыми степенями свободы. Применение атомного представления для гамильтониана устройства, а также неравновесных функций Грина, построенных с помощью операторов Хаббарда позволяет преодолеть трудности теории возмущений, возникающие при традиционном подходе из-за большого числа затравочных амплитуд рассеяния. Запись матричных элементов эффективных взаимодействий в виде суперпозиции слагаемых, каждое из которых имеет расщепленный по матричным индексам характер, приводит к простому методу решения системы большого числа уравнений для неравновесных функций Грина в атомном представлении. В результате найдено выражение, описывающее электронный ток в устройстве, один узел которого туннельно связан с левым контактом, а другой – с правым. Выведены замкнутые кинетические уравнения для чисел заполнения в условиях, когда поток электронов приводит к их существенной ренормировке.

Ключевые слова: неравновесные функции Грина, контур Келдыша, атомное представление, кинетические уравнения, неупругое рассеяние.

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9396>

Работа выполнена при поддержке РФФИ, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности (гранты № 16-02-00073, 16-42-243056, 16-42-242036, 17-42-240441). С. В. Аксенов благодарит Программу государственной поддержки молодых ученых – кандидатов наук (грант № МК-1398.2017.2).

*Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия.
E-mail: vvv@iph.krasn.ru, asv86@iph.krasn.ru

1. ВВЕДЕНИЕ

При решении проблемы протекания электрического тока через системы атомного масштаба (в дальнейшем такие системы будем называть устройствами) приходится сталкиваться с ситуацией, когда устройство обладает своими (внутренними) степенями свободы, не принимающими непосредственного участия в процессах переноса заряда [1]. Тем не менее наличие таких дополнительных подсистем, взаимодействующих с подсистемой зарядовых степеней свободы, из-за модификации результирующего спектра фермиевских возбуждений может влиять, например, на вольт-амперную характеристику устройства. Это имеет большое прикладное значение, поскольку открывает широкие возможности для управления электронным транспортом посредством воздействия внешними полями (например, магнитным) на внутренние, не только фермиевские, степени свободы [2], [3].

В качестве примера можно привести устройство, в котором содержится подсистема магнитных примесных ионов. Тогда процессы инжекции электронов в устройство, как и процессы испускания устройством электронов, из-за $(s - d(f))$ -обменного взаимодействия между спинами примесей и электронами устройства будут сопровождаться возмущением подсистемы спинов примесей [4]. Возникающая корреляция между фермиевскими и спиновыми степенями свободы, приводящая к существенной для транспортных явлений зависимости энергетического спектра устройства от внешнего магнитного поля, определяет механизм, позволяющий целенаправленно управлять транспортными характеристиками устройства.

К сожалению, вычисление вольт-амперных характеристик устройств с внутренними степенями свободы существенно усложняется из-за того, что гамильтониан, учитывающий взаимодействия между подсистемами, является недиагональным в обычном представлении фермиевских и бозевских операторов вторичного квантования. В результате происходит значительное усложнение ряда теории возмущений, связанное с большим числом затравочных амплитуд рассеяния. Между тем ограничение теории только низшими порядками часто оказывается недостаточным, поскольку необходимо учитывать эффекты многократного рассеяния электронов, сопровождающие процессы инжекции и испускания электронов. Таким образом, возникает ситуация, когда необходимо суммировать бесконечный ряд теории возмущений, но из-за множественности потенциалов рассеяния этот ряд имеет громоздкое представление.

Важными являются и процессы перехода устройств в возбужденные состояния. Такие переходы индуцируются за счет взаимодействия транспортируемых электронов с зарядовыми и спиновыми степенями свободы устройства. В результате протекание туннельного тока сопровождается перераспределением заселенностей энергетических состояний устройства. При этом итоговое распределение заселенности энергетических уровней устройства может существенно отличаться от исходного равновесного распределения [5].

В настоящей работе отмеченные трудности преодолеваются путем построения неравновесных функций в атомном представлении. Введение операторов Хаббарда позволяет представить в диагональном виде гамильтониан устройства. Поэтому только оператор туннелирования, записанный в атомном представлении, выступает в роли возмущения, по которому строится диаграммный ряд. Такой подход позволил описать эффекты многократного рассеяния электронов и получить выражение для тока, а также систему кинетических уравнений для чисел заполнения.

Рис. 1. Модель устройства с двумя узлами и двумя примесными спинами. Левый контакт (t_L) туннельно связан с первым узлом устройства, а правый контакт (t_R) — со вторым узлом. Электрон, попадая на узел устройства (на рисунке на первый узел), посредством $(s - d(f))$ -обменной связи коррелирует с примесным спином.

2. ГАМИЛЬТОНИАН СИСТЕМЫ

Рассмотрим туннельный транспорт электронов через устройство, показанное на рис. 1. Туннельная связь левого контакта с устройством реализована так, что при туннелировании из контакта электрон попадает на первый узел в состоянии с энергией $\xi_{d\sigma}$. Туннельная связь с правым контактом осуществляется аналогично, с той лишь разницей, что в процессе туннелирования участвует второй узел устройства. Особенность рассматриваемого в настоящей работе устройства связана с тем, что в нем присутствует подсистема, состоящая из двух локализованных спинов. Это соответствует простейшей модельной ситуации, способной отразить зависимость транспортных характеристик устройства от взаимодействия в его магнитной подсистеме. Внесение магнитных ионов в устройство достигается, например, посредством адсорбирования примесей в область между контактами. Другая возможность возникает в том случае, если формирование структуры устройства происходит на основе пары переходных ионов с незаполненной d - или f -оболочкой.

Между двумя локализованными спинами устройства имеется гейзенберговское обменное взаимодействие. Для определенности предположим, что это взаимодействие имеет антиферромагнитный характер. Согласно изложенному, в том случае, когда на устройстве нет электронов, основному состоянию устройства соответствует спиновый синглет, а триплетный терм, отвечающий трем магнитным состояниям, отделен от синглетного терма на величину обменной энергии I .

Благодаря $(s - d(f))$ -обменному взаимодействию спиновое состояние каждого электрона, попавшего на узел из контакта, сильно коррелирует с состоянием одного из локализованных спинов. В результате при туннелировании электрона в устройство из контакта магнитное состояние устройства может качественно измениться. Это происходит благодаря тому, что параметр $(s - d(f))$ -обменной связи, как правило, значительно превосходит интеграл гейзенберговского взаимодействия. Тогда энергетически выгодным становится разрушение синглетного состояния двух локализованных спинов, поскольку локализованный спин сильно коррелирует со спином пришедшего фермиона. На языке магнитных термов спинового димера можно сказать, что происходит возбуждение триплетных состояний. Это означает, что процессы транспорта электронов через рассматриваемое устройство будут сопровождаться

возбуждениями магнитных степеней свободы. Иначе говоря, транспорт электронов в данном случае будет происходить при существенном влиянии процессов неупругого рассеяния электронов на внутренних (магнитных) степенях свободы устройства.

Для учета влияния процессов неупругого рассеяния электронов на характеристики электронного транспорта устройства воспользуемся методом неравновесных функций Грина. Оригинальность развиваемой методики связана с введением неравновесных функций в атомном представлении. Необходимость использования этого представления и, соответственно, перехода к неравновесным функциям Грина, построенным на операторах Хаббарда, связана с наличием внутренних степеней свободы устройства. В этом случае удастся сформулировать теорию возмущений так, что только процессы туннелирования будут определять матрицу рассеяния на контуре Келдыша. При использовании обычного представления вторичного квантования пришлось бы использовать много затравочных вершин, что привело бы к громоздкости математического аппарата.

Гамильтониан системы, отражающий наличие левого и правого контактов, а также находящееся между ними устройство, через которое осуществляется квантовый транспорт, запишем в следующем виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{T} + \hat{V}, \quad (1)$$

где оператор

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_D$$

описывает невзаимодействующие между собой подсистемы левого и правого металлических контактов

$$\hat{H}_L = \sum_{k\sigma} \xi_{Lk\sigma} c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}, \quad \hat{H}_R = \sum_{p\sigma} \xi_{Rp\sigma} d_{p\sigma}^+ d_{p\sigma}, \quad (2)$$

а также устройство, которое в нашем случае представляется посредством гамильтониана

$$\begin{aligned} \hat{H}_D = & \sum_{l=1}^2 \left\{ \sum_{\sigma} \xi_{d\sigma} a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma} + U n_{l\uparrow} n_{l\downarrow} \right\} + t_d \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^+ a_{1\sigma}) + U_{12} n_1 n_2 + \\ & + \sum_{l=1}^2 \{ A(\boldsymbol{\sigma}_l \mathbf{S}_l) - g\mu_B H S_l^z \} + I(\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2). \end{aligned} \quad (3)$$

Наличие туннельной связи между левым контактом и устройством, а также между правым контактом и устройством учитывается посредством оператора $\hat{T}$:

$$\hat{T} = \sum_{k\sigma} t_{Lk} c_{k\sigma}^+ a_{1\sigma} + \sum_{p\sigma} t_{Rp} d_{p\sigma}^+ a_{2\sigma} + \text{h.c.} = \hat{T}_L + \hat{T}_R + \text{э.с.} \quad (4)$$

Происхождение оператора $\hat{V}$ связано с приложенной к системе разностью потенциалов, индуцирующей ток в системе. Учитывая постоянство потенциала на каждом из контактов и на устройстве, а также связывая начало отсчета потенциала с левым контактом, получим

$$\hat{V} = \sum_{l=1}^2 \sum_{\sigma} \frac{eV}{2} a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma} + \sum_{p\sigma} eV d_{p\sigma}^+ d_{p\sigma}. \quad (5)$$

В приведенных выражениях использованы следующие обозначения: $c_{k\sigma}(d_{p\sigma})$ – оператор уничтожения электрона в левом (правом) контакте с волновым вектором k (p) и проекцией спина σ ; $\xi_{Lk\sigma} = \varepsilon_{Lk} - g_e \mu_B H \sigma - \mu$, $\xi_{Rp\sigma} = \varepsilon_{Rp} - \sigma g_e \mu_B H - \mu$ – одноэлектронные энергии в левом и правом контакте соответственно, отсчитанные от уровня химического потенциала μ и учитывающие расщепление энергии по проекции спина электрона $\sigma = \pm 1/2$ в магнитном поле; g_e – электронный g -фактор в контактах; μ_B – магнетон Бора. В дальнейшем предполагается, что контакты представляют собой однозонные парамагнитные металлы. Входящие в гамильтониан устройства параметры имеют следующий физический смысл: $\xi_{d\sigma} = \varepsilon_d - g_e \mu_B H \sigma - \mu$ – отсчитанная от химического потенциала зависящая от спина энергия электрона, находящегося на одном из узлов устройства, во внешнем магнитном поле H ; ε_d – затравочная одноэлектронная энергия; $n_{l\sigma} = a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma}$ – оператор числа электронов на узле устройства с номером l и проекцией спина σ ; $a_{l\sigma}^+(a_{l\sigma})$ – оператор рождения (уничтожения) электрона в устройстве на узле l с проекцией спина σ ; параметр U характеризует хаббардовское отталкивание двух электронов с противоположными проекциями спинов, находящихся на одном узле; $n_l = n_{l\uparrow} + n_{l\downarrow}$ – оператор полного числа электронов на узле устройства с номером l . Параметр U_{12} определяет интенсивность кулоновского взаимодействия электронов, находящихся на первом и втором узлах устройства. Действие магнитного поля на энергетическую структуру подсистемы локализованных спинов с эффективным g -фактором описывается посредством предпоследнего слагаемого в гамильтониане (3). Взаимосвязь между спиновой степенью свободы транспортируемого электрона и локализованными спинами устройства, осуществляемая через механизм $(s - d(f))$ -обменной связи, характеризуется параметром A , при этом $\mathbf{S}_l$ является векторным оператором локализованного спина устройства, а $\boldsymbol{\sigma}_l$ – векторным оператором спина транспортируемого электрона. Как известно, скалярное произведение $\boldsymbol{\sigma} \mathbf{S}$ содержит операторные слагаемые, соответствующие учету спин-флип процессов, когда происходит одновременное изменение проекций у примесных спинов и у электрона.

3. ТУННЕЛЬНЫЙ ТОК ЭЛЕКТРОНОВ И НЕРАВНОВЕСНЫЕ СРЕДНИЕ

Выражение для тока J , протекающего через устройство, может быть получено на основе хорошо известной связи его величины с изменением заряда в единицу времени в левом контакте, $J = e \dot{\hat{N}}_L$ ($\hat{N}_L = \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}$). Проведя простые преобразования, находим

$$J = \frac{-ie}{\hbar} \langle [\hat{N}_L, \hat{T}_L] \rangle, \quad (6)$$

где в правой части под знаком среднего стоит коммутатор оператора числа электронов в левом контакте с оператором туннелирования между левым контактом и устройством. Принято, что e обозначает абсолютную величину заряда электрона. Усреднение проводится с матрицей плотности $\rho(t)$ [6], [7], удовлетворяющей уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [\hat{H}, \rho(t)]. \quad (7)$$

Используя выражения для $\hat{N}_L$ и $\hat{T}_L$, получаем

$$J = \frac{-iet_L}{\hbar} \sum_{\sigma} [\langle c_{1\sigma}^+ a_{1\sigma} \rangle - \langle a_{1\sigma}^+ c_{1\sigma} \rangle]. \quad (8)$$

Для вычисления входящих в это выражение средних обычно применяются неравновесные функции Грина. Необходимость их использования связана с наличием разности потенциалов, индуцирующей поток электронов, что делает задачу неравновесной. Вычисление неравновесных функций Грина может быть реализовано в рамках теории возмущений.

Для построения теории возмущений, в которой в качестве возмущения формально будет выступать только туннельная связь между контактами и устройством, а в качестве нулевого гамильтониана – оператор $\hat{H}_0$, проведем два преобразования.

Первое преобразование связано с переходом к матрице плотности $\rho_v(t)$ [8] такой, что

$$\rho(t) = \hat{U}_v^+ \rho_v(t) \hat{U}_v, \quad \hat{U}_v = e^{it\hat{V}/\hbar}. \quad (9)$$

В уравнение движения для $\rho_v(t)$

$$i\hbar \frac{\partial \rho_v(t)}{\partial t} = [\hat{H}_v(t), \rho_v(t)] \quad (10)$$

входит гамильтониан $\hat{H}_v(t) = \hat{H}_0 + \hat{T}_v(t)$, в котором оператор туннелирования

$$\hat{T}_v(t) = \sum_{k\sigma} t_{Lk}(t) c_{k\sigma}^+ a_{1\sigma} + \sum_{p\sigma} t_{Rp}(t) d_{p\sigma}^+ a_{2\sigma} + \text{э.с.} \quad (11)$$

имеет явную временную зависимость, определяемую функциями

$$t_{Lk}(t) = t_{Lk} e^{-iteV/2\hbar}, \quad t_{Rp}(t) = t_{Rp} e^{iteV/2\hbar}.$$

С этим обстоятельством связана необходимость использования неравновесных функций Грина.

Второе преобразование осуществляет переход к представлению взаимодействия:

$$\rho_v(t) = \hat{U}_0^+ \rho_I(t) \hat{U}_0, \quad \hat{U}_0 = e^{it\hat{H}_0/\hbar}. \quad (12)$$

В этом представлении выражение для тока принимает следующий вид:

$$J = \frac{-ie}{\hbar} \sum_{k\sigma} [t_{Lk}(t) \langle c_{k\sigma}^+(t) a_{1\sigma}(t) \rangle_I - t_{Lk}^*(t) \langle a_{1\sigma}^+(t) c_{k\sigma}(t) \rangle_I], \quad (13)$$

где знак I у угловых скобок означает, что среднее вычисляется с матрицей плотности, удовлетворяющей уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \rho_I(t)}{\partial t} = [\hat{T}_I(t), \rho_I(t)], \quad (14)$$

в котором оператор туннелирования записан в представлении взаимодействия:

$$\hat{T}_I(t) = \sum_{k\sigma} t_{Lk}(t) c_{k\sigma}^+(t) a_{1\sigma}(t) + \sum_{p\sigma} t_{Rp}(t) d_{p\sigma}^+(t) a_{2\sigma}(t) + \text{э.с.} \quad (15)$$

В этом представлении временная зависимость операторов вторичного квантования определяется обычным образом. При этом для операторов контактов

$$c_{k\sigma}(t) = \hat{U}_0^+ c_{k\sigma} \hat{U}_0 = c_{k\sigma} e^{-it\xi_{Lk\sigma}/\hbar}$$

явная временная зависимость хорошо известна. Получение явной зависимости от времени операторов устройства в представлении взаимодействия $a_{1\sigma}(t) = \hat{U}_0^+ a_{1\sigma} \hat{U}_0$ для рассматриваемой системы представляет более сложную задачу. Это препятствует развитию теории возмущений, в которой использовались бы фермиевские операторы. Преодоление отмеченной трудности связано с введением атомного представления для гамильтониана устройства (см. ниже).

На заключительном этапе получения выражения для тока, в котором будут использоваться только средние, вычисляемые с матрицей плотности ρ_0 , описывающей ансамбль не взаимодействующих между собой контактов и устройства, введем эволюционный оператор $S(t, -\infty)$, позволяющий установить связь между $\rho_I(t)$ и ρ_0 :

$$\rho_I(t) = S(t, -\infty) \rho_0 S^+(t, -\infty), \quad \rho_0 = \rho_I(-\infty). \quad (16)$$

Поскольку оператор $S(t, -\infty)$ удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial S(t, -\infty)}{\partial t} = \hat{T}_I(t) S(t, -\infty), \quad (17)$$

то его можно представить через Т-упорядоченную экспоненту:

$$S(t, -\infty) = T_t \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \hat{T}_I(t) dt\right). \quad (18)$$

Оператор $S(t, -\infty)$ является решением поставленной задачи, поскольку

$$\langle c_{k\sigma}^+(t) a_{1\sigma}(t) \rangle_I = \langle S^+(t, -\infty) c_{k\sigma}^+(t) a_{1\sigma}(t) S(t, -\infty) \rangle_0. \quad (19)$$

Если в среднее, находящееся в правой части этого уравнения, вставить единичный оператор $S^{-1}(\infty, -\infty) S(\infty, -\infty)$, то получим

$$\langle c_{k\sigma}^+(t) a_{1\sigma}(t) \rangle_I = \langle S^{-1}(\infty, -\infty) S(\infty, t) c_{k\sigma}^+(t) a_{1\sigma}(t) S(t, -\infty) \rangle_0. \quad (20)$$

Введение контура Келдыша C [7], [9]–[11] позволяет записать рассматриваемые средние в удобном для вычисления виде

$$\langle c_{k\sigma}^+(t) a_{1\sigma}(t) \rangle_I = \langle T_C c_{k\sigma}^+(t) a_{1\sigma}(t) S_C \rangle_0, \quad (21)$$

где T_C – оператор хронологического упорядочения по времени на контуре Келдыша C , а матрица рассеяния

$$S_C = T_C \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_C \hat{T}_I(t) dt\right) \quad (22)$$

определяется через оператор туннелирования, в котором область изменения временного аргумента принадлежит тому же контуру.

4. АТОМНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ДЛЯ ОПЕРАТОРОВ УСТРОЙСТВА

Существенная особенность рассматриваемой задачи связана со структурой устройства, описываемой гамильтонианом $\hat{H}_D$. Из его определения видно, что электрон, попадая в устройство, будет взаимодействовать как с зарядовыми, так и со спиновыми степенями свободы. Присутствие большого числа различных затравочных амплитуд рассеяния приводит не только к значительному усложнению ряда теории возмущений, но и к проблеме вычисления явного вида фермиевских и спиновых операторов в представлении взаимодействия. Это связано с неэквидистантной структурой спектра фермиевских (или спиновых) возбуждений оператора $\hat{H}_D$. Поэтому непосредственное применение диаграммной техники в терминах операторов вторичного квантования становится невозможным из-за отсутствия теоремы Вика для средних от произведения таких операторов.

Выход из этого затруднения связан с построением атомного представления и с записью в нем гамильтониана устройства, а также оператора туннелирования. С этой целью введем функции $|\Psi_n\rangle$, являющиеся решением уравнения Шредингера для устройства

$$\hat{H}_D|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle, \quad n = 1, 2, \dots, N_D. \quad (23)$$

Набор функций $|\Psi_1\rangle, |\Psi_1\rangle, \dots, |\Psi_{N_D}\rangle$ можно рассматривать как базис гильбертова пространства, в котором действуют операторы, относящиеся к устройству. Введем операторы Хаббарда [12], [13]

$$X^{nm} = |\Psi_n\rangle\langle\Psi_m|, \quad n, m = 1, 2, \dots, N_D, \quad (24)$$

действующие в гильбертовом пространстве устройства. В частности, действие этих операторов на базисные состояния определяется как $X^{nm}|\Psi_p\rangle = \delta_{mp}|\Psi_n\rangle$.

Первое преимущество этого представления связано с тем, что переход к нему приводит к диагональной форме гамильтониана H_D :

$$H_D = \sum_{n=1}^{N_D} E_n X^{nn}. \quad (25)$$

Вторая важная особенность атомного представления связана с тем, что явный вид операторов Хаббарда в представлении взаимодействия $X^{nm}(t) = U_0(t)X^{nm}U_0^+(t)$ легко вычисляется. При этом возникает обычная временная зависимость по экспоненциальному закону [12]

$$X^{nm}(t) = e^{i(E_n - E_m)t} X^{nm} \equiv e^{i\alpha Et} X^{nm}.$$

Здесь использована удобная для дальнейшего форма записи: под E понимается N_D -мерный вектор $(E_1, E_2, \dots, E_{N_D})$, а под α — N_D -мерный вектор, i -я компонента которого определяется разностью двух символов Кронекера: $\alpha_i(n, m) = \delta_{in} - \delta_{im}$. Тогда скалярное произведение $\alpha E = E_n - E_m$, если $\alpha = \alpha_i(n, m)$, т. е. если α соответствует переходу между состояниями Ψ_m и Ψ_n .

Простота временной зависимости операторов Хаббарда в представлении взаимодействия открывает очевидный путь построения теории возмущений с применением

диаграммной техники для операторов Хаббарда, поскольку для них существует теорема Вика.

Введение матричных элементов операторов уничтожения электрона с проекцией спина σ на первом и на втором узлах

$$\gamma_{1\sigma}(nm) = \langle \Psi_n | a_{1\sigma} | \Psi_m \rangle, \quad \gamma_{2\sigma}(nm) = \langle \Psi_n | a_{2\sigma} | \Psi_m \rangle \quad (26)$$

позволяет в компактном виде выразить фермиевские операторы через операторы Хаббарда:

$$a_{1\sigma} = \sum_{\alpha} \gamma_{1\sigma}(\alpha) X^{\alpha}, \quad a_{2\sigma} = \sum_{\alpha} \gamma_{2\sigma}(\alpha) X^{\alpha}, \quad \alpha \equiv \alpha(nm). \quad (27)$$

Здесь для краткости использована запись суммирования по индексу α , подразумевающая в действительности суммирование по паре индексов n и m атомных состояний устройства.

При использовании атомного представления оператор туннелирования, входящий в матрицу рассеяния, приобретает удобный для построения теории возмущений вид, когда в явной форме присутствуют операторы перехода между атомными состояниями:

$$\hat{T}_I(t) = \sum_{k\sigma, \alpha} t_{Lk}(t) \gamma_{1\sigma}(\alpha) c_{k\sigma}^+(t) X^{\alpha}(t) + \sum_{p\sigma, \alpha} t_{Rp}(t) \gamma_{2\sigma}(\alpha) d_{p\sigma}^+(t) X^{\alpha}(t) + \text{э.с.} \quad (28)$$

Для рассматриваемого устройства полное число состояний $|\Psi_m\rangle$, $m = 1, 2, \dots, N_D$ равно 64. В режиме сильных корреляций параметр хаббардовского отталкивания U и величина межузельного кулоновского взаимодействия U_{12} значительно превосходят значения других энергетических параметров системы. Это позволяет ограничиться только такими состояниями устройства, которые содержат не более одного транспортируемого электрона. Имеется 20 таких состояний.

Для их описания введем операторы рождения $f_{1\sigma}^+$, $f_{2\sigma}^+$ и уничтожения $f_{1\sigma}$, $f_{2\sigma}$ локализованных фермионов с проекцией спина σ на первом и втором узлах устройства. Тогда сектор гильбертова пространства гамильтониана устройства, не содержащий транспортируемых электронов, соответствует состояниям димерной системы. Синглетное состояние устройства записывается в виде

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(f_{1\uparrow}^+ f_{2\downarrow}^+ - f_{1\downarrow}^+ f_{2\uparrow}^+) |0\rangle, \quad E_1 = -\frac{3I}{4}, \quad (29)$$

где $|0\rangle$ – вакуумное состояние. Три триплетных состояния этого сектора определяются выражениями

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(f_{1\uparrow}^+ f_{2\downarrow}^+ + f_{1\downarrow}^+ f_{2\uparrow}^+) |0\rangle, \quad |3\rangle = f_{1\uparrow}^+ f_{2\uparrow}^+ |0\rangle, \quad |4\rangle = f_{1\downarrow}^+ f_{2\downarrow}^+ |0\rangle \quad (30)$$

и имеют энергию $E_2 = I/4$. Среди 16 состояний одноэлектронного сектора восемь состояний соответствуют четным и нечетным состояниям с суммарным спином $S_t = 3/2$. Четыре четных состояния представим в виде, позволяющем просто вычислять параметры представления:

$$|5\rangle = \frac{a_{1\uparrow}^+ + a_{2\uparrow}^+}{\sqrt{2}} |3\rangle, \quad |6\rangle = \frac{\hat{S}_t^-}{\sqrt{3}} |5\rangle, \quad |7\rangle = \frac{\hat{S}_t^+}{\sqrt{3}} |8\rangle, \quad |8\rangle = \frac{a_{1\downarrow}^+ + a_{2\downarrow}^+}{\sqrt{2}} |4\rangle, \quad (31)$$

где

$$\hat{S}_t^- = \sum_{j=1}^2 (f_{j\downarrow}^+ f_{j\uparrow} + a_{j\downarrow}^+ a_{j\uparrow}), \quad \hat{S}_t^+ = \sum_{j=1}^2 (f_{j\uparrow}^+ f_{j\downarrow} + a_{j\uparrow}^+ a_{j\downarrow}).$$

Четыре нечетных состояния с $S_t = 3/2$ определяются выражениями

$$|9\rangle = \frac{a_{1\uparrow}^+ - a_{2\uparrow}^+}{\sqrt{2}} |3\rangle, \quad |10\rangle = \frac{\hat{S}_t^-}{\sqrt{3}} |9\rangle, \quad |11\rangle = \frac{\hat{S}_t^+}{\sqrt{3}} |12\rangle, \quad |12\rangle = \frac{a_{1\downarrow}^+ - a_{2\downarrow}^+}{\sqrt{2}} |4\rangle. \quad (32)$$

В соответствии с правилом сложения моментов в квантовой механике среди одноэлектронных состояний устройства есть дублетные термы. Два четных (g) и два нечетных (u) состояния с проекцией суммарного спина $S_t^z = 1/2$, относящихся к четным дублетным и нечетным дублетным термам, запишем в виде

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{\pm}^g &= \sum_{\sigma} C_{g\sigma}^{\pm} (f_{1\sigma}^+ f_{2\bar{\sigma}}^+ a_{1\uparrow}^+ + f_{1\bar{\sigma}}^+ f_{2\sigma}^+ a_{2\uparrow}^+) |0\rangle + C_{gg}^{\pm} (a_{1\downarrow}^+ + a_{2\downarrow}^+) f_{1\uparrow}^+ f_{2\uparrow}^+ |0\rangle, \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{\pm}^u &= \sum_{\sigma} C_{u\sigma}^{\pm} (f_{1\sigma}^+ f_{2\bar{\sigma}}^+ a_{1\uparrow}^+ - f_{1\bar{\sigma}}^+ f_{2\sigma}^+ a_{2\uparrow}^+) |0\rangle + C_{uu}^{\pm} (a_{1\downarrow}^+ - a_{2\downarrow}^+) f_{1\uparrow}^+ f_{2\uparrow}^+ |0\rangle. \end{aligned} \quad (33)$$

Тогда оставшиеся восемь состояний нумеруются следующим образом:

$$\begin{aligned} |13\rangle &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{+}^g, & |14\rangle &= \hat{S}_t^- |13\rangle, & |15\rangle &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{-}^g, & |16\rangle &= \hat{S}_t^- |15\rangle, \\ |17\rangle &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{+}^u, & |18\rangle &= \hat{S}_t^- |17\rangle, & |19\rangle &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{-}^u, & |20\rangle &= \hat{S}_t^- |19\rangle. \end{aligned}$$

При записи выражений (33) использовались следующие обозначения:

$$\begin{aligned} C_{g\uparrow}^{\pm} &= \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{b_g^{\pm}}{Z_g^{\pm}}, & C_{g\downarrow}^{\pm} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{a_g^{\pm}}{Z_g^{\pm}}, & C_{gg}^{\pm} &= \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{c_g^{\pm}}{Z_g^{\pm}}, \\ C_{u\uparrow}^{\pm} &= \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{b_u^{\pm}}{Z_u^{\pm}}, & C_{u\downarrow}^{\pm} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{a_u^{\pm}}{Z_u^{\pm}}, & C_{uu}^{\pm} &= \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{c_u^{\pm}}{Z_u^{\pm}}, \\ Z_g^{\pm} &= \sqrt{(a_g^{\pm})^2 + (b_g^{\pm})^2 + (c_g^{\pm})^2}, & Z_u^{\pm} &= \sqrt{(a_u^{\pm})^2 + (b_u^{\pm})^2 + (c_u^{\pm})^2}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} a_g^{\pm} &= (\nu_g \mp A)(\nu_g \mp I \mp 2t_d), & b_g^{\pm} &= (I + 2t_d)(\nu_g \mp I \mp 2t_d), & c_g^{\pm} &= A(\nu_g \mp A), \\ a_u^{\pm} &= (\nu_u \mp A)(\nu_u \mp I \pm 2t_d), & b_u^{\pm} &= (I - 2t_d)(\nu_u \mp I \pm 2t_d), & c_u^{\pm} &= A(\nu_u \mp A), \\ \nu_g &= \sqrt{(A - I - 2t_d)^2 + A(I + 2t_d)}, & \nu_u &= \sqrt{(A - I + 2t_d)^2 + A(I - 2t_d)}. \end{aligned}$$

Тогда в рамках принятой нумерации одноэлектронных состояний их энергии записываются как

$$\begin{aligned} E_{5(9)} &= \xi_d + \frac{A+I}{4} \pm t_d, & E_{13(15)} &= \xi_d - \frac{A+I}{4} \pm \frac{\nu_g}{2}, \\ E_{17(19)} &= \xi_d - \frac{A+I}{4} \pm \frac{\nu_u}{2}. \end{aligned} \quad (34)$$

Учитывая явный вид базисных функций устройства, нетрудно показать, что параметры представления оператора $a_{1\uparrow}$ через операторы Хаббарда определяются следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \gamma_{1\uparrow}(3, 5) &= \gamma_{1\uparrow}(3, 9) = \frac{1}{\sqrt{2}}, & \gamma_{1\uparrow}(2, 6) &= \gamma_{1\uparrow}(2, 10) = \frac{1}{\sqrt{3}}, \\
 \gamma_{1\uparrow}(4, 7) &= \gamma_{1\uparrow}(4, 11) = \frac{1}{\sqrt{6}}, & \gamma_{1\uparrow}(1, 13(15)) &= \frac{C_{g\uparrow}^{+(-)} - C_{g\downarrow}^{+(-)}}{\sqrt{2}}, \\
 \gamma_{1\uparrow}(1, 17(19)) &= \frac{C_{u\uparrow}^{+(-)} - C_{u\downarrow}^{+(-)}}{\sqrt{2}}, & \gamma_{1\uparrow}(2, 13(15)) &= -\frac{C_{gg}^{+(-)}}{\sqrt{2}}, \\
 \gamma_{1\uparrow}(2, 17(19)) &= \frac{C_{uu}^{+(-)}}{\sqrt{2}}, & \gamma_{1\uparrow}(4, 14(16)) &= \sqrt{2}\gamma_{1\uparrow}(2, 13(15)), \\
 \gamma_{1\uparrow}(4, 18(20)) &= \sqrt{2}\gamma_{1\uparrow}(2, 17(19)).
 \end{aligned} \tag{35}$$

Для рассматриваемого нами устройства $|\gamma_{2\uparrow}(\alpha)| = |\gamma_{1\uparrow}(\alpha)|$, причем для половины переходов $\gamma_{2\uparrow}(\alpha) = -\gamma_{1\uparrow}(\alpha)$. Эти свойства параметров представления будут использованы в дальнейшем при нахождении тока и кинетических уравнений. Параметры $\gamma_{1,2\downarrow}(\alpha)$ вычисляются аналогично.

5. НЕРАВНОВЕСНЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА, СПЕКТРАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ УСТРОЙСТВА, СПЕКТРАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ ТУННЕЛЬНОЙ СВЯЗИ

При использовании операторов Хаббарда выражение для тока в атомном представлении записывается в виде

$$J = \left(\frac{-ie}{\hbar} \right) \sum_{k\sigma, \alpha} \gamma_{1\sigma}(\alpha) [t_{Lk}(t) \langle c_{1\sigma}^+(t) X^\alpha(t) \rangle_I - t_{Lk}^*(t) \langle X^{-\alpha}(t) c_{1\sigma}(t) \rangle_I], \tag{36}$$

позволяющем использовать диаграммную форму теории возмущений. С этой целью введем неравновесные функции Грина, построенные на фермиевских операторах, на операторах Хаббарда, а также функции, содержащие произведение фермиевского оператора и оператора Хаббарда:

$$\begin{aligned}
 G_{Lk\sigma}^{ab}(\tau, \tau') &= -i \langle T_C c_{k\sigma}(\tau_a) c_{k\sigma}^+(\tau'_b) \rangle_0, \\
 D_{\alpha, \beta}^{ab}(\tau, \tau') &= -i \langle T_C X^\alpha(\tau_a) X^{-\beta}(\tau'_b) S_C \rangle_0, \\
 R_{k\sigma, \alpha}^{ab}(\tau, \tau') &= -i \langle T_C c_{k\sigma}(\tau_a) X^{-\alpha}(\tau'_b) S_C \rangle_0, \\
 R_{\alpha, k\sigma}^{ab}(\tau, \tau') &= -i \langle T_C X^\alpha(\tau_a) c_{k\sigma}^+(\tau'_b) S_C \rangle_0,
 \end{aligned} \tag{37}$$

для которых каждый из верхних индексов a и b может принимать два значения: $+$ или $-$. Первому индексу a соответствует время τ_a у первого оператора, стоящего в упорядоченном по Келдышу среднем. Это означает, что при $a = +(-)$ оператор $c_{k\sigma}(\tau_a)$ или $X^\alpha(\tau_a)$ в представлении взаимодействия берется в момент времени τ на нижней (верхней) ветви контура Келдыша. Аналогично при $b = +(-)$ оператор $X^{-\alpha}(\tau'_b)$ или $c_{k\sigma}^+(\tau'_b)$ берется в момент времени τ' на нижней (верхней) ветви контура Келдыша.

Введенные функции Грина (37) позволяют представить выражение для тока в удобной для применения теории возмущений форме:

$$J = \left(\frac{e}{\hbar}\right) \sum_{k\sigma, \alpha} t_{Lk} \gamma_{1\sigma}(\alpha) \{e^{ieVt/2} R_{Lk\sigma, \alpha}^{++}(t, t + \delta) - e^{-ieVt/2} R_{\alpha, Lk\sigma}^{++}(t, t + \delta)\}, \quad \delta \rightarrow +0. \quad (38)$$

Анализ диаграммного ряда, возникающего при разложении матрицы рассеяния S_C в (37), показывает, что функции Грина $R_{Lk\sigma, \alpha}^{++}(t, t')$ и $R_{\alpha, Lk\sigma}^{++}(t, t')$ могут быть представлены в виде интегральных сверток неравновесных функций Грина для левого контакта с неравновесными функциями Грина для устройства, записанными в атомном представлении:

$$\begin{aligned} R_{Lk\sigma, \alpha}^{++}(t, t') &= \sum_{\beta} t_{Lk} \gamma_{1\sigma}(\beta) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \{G_{Lk\sigma}^{++}(t - \tau) D_{\alpha\beta}^{++}(\tau - t') - G_{Lk\sigma}^{+-}(t - \tau) D_{\alpha\beta}^{-+}(\tau - t')\} e^{-ieV\tau/2\hbar}, \\ R_{\alpha, Lk\sigma}^{++}(t, t') &= \sum_{\beta} t_{Lk} \gamma_{1\sigma}(\beta) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \{D_{\alpha\beta}^{++}(t - \tau) G_{Lk\sigma}^{++}(\tau - t') - D_{\alpha\beta}^{+-}(t - \tau) G_{Lk\sigma}^{-+}(\tau - t')\} e^{+ieV\tau/2\hbar}. \end{aligned} \quad (39)$$

Проводя фурье-преобразование для неравновесных функций

$$\begin{aligned} G_{Lk\sigma}^{ab}(\tau - \tau') &= \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(\tau - \tau')} G_{Lk\sigma}^{ab}(\omega), \\ D_{\alpha\beta}^{ab}(\tau - \tau') &= \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(\tau - \tau')} D_{\alpha\beta}^{ab}(\omega), \end{aligned} \quad (40)$$

получим, что ток выражается через спектральные функции системы:

$$J = \left(\frac{e}{\hbar}\right) \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega [M_{1\sigma}^{+-}(\omega) W_{1\sigma}^{+-}(\omega) - M_{1\sigma}^{+-}(\omega) W_{1\sigma}^{-+}(\omega)], \quad (41)$$

для которых использованы следующие определения.

Левосторонние $W_{1\sigma}^{ab}(\omega)$ и правосторонние $W_{2\sigma}^{ab}(\omega)$ спектральные функции устройства выражаются через атомные функции посредством соотношений

$$W_{1\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_{\alpha\beta} \gamma_{1\sigma}(\alpha) \gamma_{1\sigma}(\beta) D_{\alpha\beta}^{ab}(\omega), \quad W_{2\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_{\alpha\beta} \gamma_{2\sigma}(\alpha) \gamma_{2\sigma}(\beta) D_{\alpha\beta}^{ab}(\omega). \quad (42)$$

Название введенных функций связано с параметрами представления для оператора уничтожения электрона на узле, участвующем в туннельной связи с левым или с правым контактом соответственно. Кроме того, введены также левосторонние и правосторонние спектральные функции туннельной связи контактов с устройством:

$$M_{1\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_k t_{Lk}^2 G_{Lk\sigma}^{ab} \left(\omega + \frac{eV}{2\hbar} \right), \quad M_{2\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_p t_{Rp}^2 G_{Rp\sigma}^{ab} \left(\omega - \frac{eV}{2\hbar} \right), \quad (43)$$

где $G_{Lk\sigma}^{ab}$ и $G_{Rp\sigma}^{ab}$ – неравновесные функции Грина левого и правого контактов соответственно. При этом

$$\begin{aligned} G_{Lk\sigma}^{++}(\omega) &= \frac{n_{Lk\sigma}}{\omega - \xi_{Lk\sigma} - i\delta} + \frac{1 - n_{Lk\sigma}}{\omega - \xi_{Lk\sigma} + i\delta}, \\ G_{Lk\sigma}^{--}(\omega) &= -\frac{n_{Lk\sigma}}{\omega - \xi_{Lk\sigma} + i\delta} - \frac{1 - n_{Lk\sigma}}{\omega - \xi_{Lk\sigma} - i\delta}, \\ G_{Lk\sigma}^{+-}(\omega) &= 2\pi i n_{Lk\sigma} \delta(\omega - \xi_{Lk\sigma}), \quad G_{Lk\sigma}^{-+}(\omega) = 2\pi i (n_{Lk\sigma} - 1) \delta(\omega - \xi_{Lk\sigma}), \end{aligned}$$

где

$$n_{Lk\sigma} = \{1 + e^{(\varepsilon_{Lk\sigma} - \mu)/T}\}^{-1}.$$

Функции $G_{Rp\sigma}^{ab}$ определяются аналогично, с той лишь разницей, что вместо индекса левого контакта L надо использовать индекс правого контакта R.

Формула (41) сводит задачу вычисления туннельного тока к задаче вычисления спектральных функций устройства $W_{1\sigma}^{+-}(\omega)$ и $W_{1\sigma}^{-+}(\omega)$. Заметим, что входящие в определения этих функций суммы по α и β соответствуют учету вкладов в ток от процессов, связанных с переходами между состояниями $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_{N_D}$ устройства.

6. ЭФФЕКТИВНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УСТРОЙСТВА В АТОМНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

Вычисление спектральных функций устройства $W_{1\sigma}^{ab}$ и $W_{2\sigma}^{ab}$ связано с решением системы уравнений для неравновесных функций Грина $D_{\alpha\beta}^{ab}$. Получение такой системы заметно упрощается, если учесть, что слагаемые ряда теории возмущений для $D_{\alpha\beta}^{ab}(\tau - \tau')$ отличны от нуля только в том случае, если оператор туннелирования входит в среднее четное число раз. При этом из аддитивности H_0 по подсистемам контактов и устройства следует независимость вычисления средних от фермиевских операторов и от операторов Хаббарда. Это позволяет в каждом порядке теории возмущений провести явное вычисление средних от фермиевских операторов. После этого возникает ренормированный ряд, позволяющий получить точное представление для неравновесных функций Грина $D_{\alpha\beta}^{ab}$ в следующем виде:

$$D_{\alpha\beta}^{ab}(\tau - \tau') = -i \langle T_C X^\alpha(\tau_a) X^{-\beta}(\tau'_b) \tilde{S}_C \rangle_0. \quad (44)$$

Здесь ренормированная матрица рассеяния

$$\tilde{S}_C = T_C \exp \left\{ -i \int_C d\tau_1 \int_C d\tau_2 \sum_{\alpha\beta} \tilde{V}_{\alpha\beta}(\tau_1 - \tau_2) X^{-\alpha}(\tau_1) X^\beta(\tau_2) \right\} \quad (45)$$

определяется через эффективное взаимодействие, которое зависит от разности временных аргументов на контуре Келдыша. Элементы эффективного взаимодействия выражаются через характеристики контактов и интенсивностей туннельных связей устройства с левым и правым контактами:

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{\alpha\beta}(\tau_1 - \tau_2) &= \sum_{k\sigma} \gamma_{1\sigma}(\alpha) \gamma_{1\sigma}(\beta) t_{Lk}^2 e^{ieV(\tau_1 - \tau_2)/2} G_{Lk\sigma}(\tau_1 - \tau_2) + \\ &+ \sum_{p\sigma} \gamma_{2\sigma}(\alpha) \gamma_{2\sigma}(\beta) t_{Rp}^2 e^{-ieV(\tau_1 - \tau_2)/2} G_{Rp\sigma}(\tau_1 - \tau_2). \end{aligned} \quad (46)$$

Полученное представление для $D_{\alpha\beta}^{ab}(\tau - \tau')$ вместе с явными выражениями для $\tilde{S}_C$ и для $\tilde{V}_{\alpha\beta}(\tau_1 - \tau_2)$ позволяет при нахождении неравновесных функций устройства применять только диаграммную технику для операторов Хаббарда, в которой временная зависимость операторов определена на контуре Келдыша.

7. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ДЛЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА УСТРОЙСТВА

Для учета переходов электронов с контактов на устройство и обратно во всех порядках теории возмущений воспользуемся хорошо известным в теории сильно коррелированных систем беспетлевым приближением. Его специфика в теории неравновесных функций $D_{\alpha\beta}^{ab}(\omega)$ определяется двумя факторами. Первый фактор связан с временной зависимостью эффективного взаимодействия, что проявляется в появлении частотной зависимости матричных элементов взаимодействия. Второй фактор обусловлен тем, что временная эволюция операторов происходит на контуре Келдыша C . Это усложняет структуру уравнений, записанных в частотном представлении.

Применив метод Келдыша, запишем первую систему уравнений для неравновесных функций Грина в атомном представлении $D_{\alpha\beta}^{+-}(\omega)$ и $D_{\alpha\beta}^{--}(\omega)$:

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}^{+-}(\omega) &= \sum_{\nu} D_{\alpha}(\omega) [\tilde{V}_{\alpha\nu}^{++}(\omega) D_{\nu\beta}^{+-}(\omega) - \tilde{V}_{\alpha\nu}^{+-}(\omega) D_{\nu\beta}^{--}(\omega)], \\ D_{\alpha\beta}^{--}(\omega) &= -\delta_{\alpha\beta} D_{\alpha}(\omega) - \sum_{\nu} D_{\alpha}(\omega) [\tilde{V}_{\alpha\nu}^{--}(\omega) D_{\nu\beta}^{--}(\omega) - \tilde{V}_{\alpha\nu}^{-+}(\omega) D_{\nu\beta}^{+-}(\omega)]. \end{aligned} \quad (47)$$

Вторая система уравнений для $D_{\alpha\beta}^{-+}(\omega)$ и $D_{\alpha\beta}^{++}(\omega)$ получается аналогично и представляется следующим образом:

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}^{-+}(\omega) &= \sum_{\nu} D_{\alpha}(\omega) [\tilde{V}_{\alpha\nu}^{-+}(\omega) D_{\nu\beta}^{++}(\omega) - \tilde{V}_{\alpha\nu}^{--}(\omega) D_{\nu\beta}^{-+}(\omega)], \\ D_{\alpha\beta}^{++}(\omega) &= \delta_{\alpha\beta} D_{\alpha}(\omega) + \sum_{\nu} D_{\alpha}(\omega) [\tilde{V}_{\alpha\nu}^{++}(\omega) D_{\nu\beta}^{++}(\omega) - \tilde{V}_{\alpha\nu}^{+-}(\omega) D_{\nu\beta}^{-+}(\omega)]. \end{aligned} \quad (48)$$

При получении этих уравнений использовались затравочные неравновесные функции устройства

$$\begin{aligned} D_{0\alpha}^{++}(\omega) &= \frac{N_n}{\omega + \alpha E + i\delta} + \frac{N_m}{\omega + \alpha E - i\delta}, & D_{0\alpha}^{+-}(\omega) &= 2\pi i N_m \delta(\omega + \alpha E), \\ D_{0\alpha}^{--}(\omega) &= -\frac{N_n}{\omega + \alpha E - i\delta} - \frac{N_m}{\omega + \alpha E + i\delta}, & D_{0\alpha}^{-+}(\omega) &= -2\pi i N_n \delta(\omega + \alpha E). \end{aligned} \quad (49)$$

Кроме того, был введен пропагатор $D_{\alpha}(\omega) = b(\alpha)/[\omega + \alpha E]$, в котором концевой множитель $b(\alpha) = N_n + N_m$, если $\alpha = \alpha(n, m)$. Этот множитель определяется суммой чисел заполнения $N_n = \langle X^{nn} \rangle$ и $N_m = \langle X^{mm} \rangle$ состояний устройства $|\Psi_n\rangle$ и $|\Psi_m\rangle$, между которыми иницируется переход. Фурье-образ матричного элемента взаимодействия $\tilde{V}_{\alpha\beta}^{ab}(\omega)$ определяется, как и ранее для функций Грина, в виде

$$\tilde{V}_{\alpha\beta}^{ab}(t - t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \tilde{V}_{\alpha\beta}^{ab}(\omega). \quad (50)$$

8. ВЫЧИСЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ УСТРОЙСТВА

Решение систем уравнений (47) и (48) существенно упрощается, если учесть, что матричные элементы взаимодействия $\tilde{V}_{\alpha\beta}^{ab}(\omega)$ можно записать в виде суммы четырех слагаемых, каждое из которых по индексам α и β имеет расщепленный характер:

$$\tilde{V}_{\alpha\beta}^{ab}(\omega) = \sum_{j=1}^2 \sum_{\sigma} \gamma_{j\sigma}(\alpha) \gamma_{j\sigma}(\beta) M_{j\sigma}^{ab}(\omega). \quad (51)$$

При этом интенсивность взаимодействия каждого из четырех слагаемых определяется как значениями параметров представления, так и значениями левосторонних и правосторонних спектральных характеристик туннельных связей устройства (43).

Фактор расщепленности позволяет ввести линейные комбинации

$$\Phi_{j\sigma\beta}^{ab}(\omega) = \sum_{\nu} \gamma_{j\sigma}(\nu) D_{\nu\beta}^{ab}(\omega) \quad (52)$$

и для них получить замкнутые системы уравнений. Тогда из (47) для четырех введенных выше комбинаций $\Phi_{1\sigma\beta}^{+-}(\omega)$, $\Phi_{1\sigma\beta}^{--}(\omega)$, $\Phi_{2\sigma\beta}^{+-}(\omega)$, $\Phi_{2\sigma\beta}^{--}(\omega)$ легко получить систему четырех уравнений, которую для краткости запишем в матричном виде:

$$\hat{\Lambda}_{\sigma}(\omega) \cdot \Pi_{\sigma\beta}^{(1)}(\omega) = -\Upsilon_{\sigma\beta}^{(1)}(\omega), \quad (53)$$

где четырехмерный вектор $\Pi_{\sigma\beta}^{(1)}(\omega)$ составлен из четырех введенных комбинаций

$$\tilde{\Pi}_{\sigma\beta}^{(1)}(\omega) = [\Phi_{1\sigma\beta}^{--}(\omega), \Phi_{2\sigma\beta}^{--}(\omega), \Phi_{1\sigma\beta}^{+-}(\omega), \Phi_{2\sigma\beta}^{+-}(\omega)], \quad (54)$$

а динамическая матрица $\hat{\Lambda}_{\sigma}(\omega)$ равна

$$\begin{bmatrix} 1 + L_{11}^{\sigma}(\omega) M_{1\sigma}^{--}(\omega) & L_{12}^{\sigma}(\omega) M_{2\sigma}^{--}(\omega) & -L_{11}^{\sigma}(\omega) M_{1\sigma}^{+-}(\omega) & -L_{12}^{\sigma}(\omega) M_{2\sigma}^{+-}(\omega) \\ L_{12}^{\sigma}(\omega) M_{1\sigma}^{--}(\omega) & 1 + L_{11}^{\sigma}(\omega) M_{2\sigma}^{--}(\omega) & -L_{12}^{\sigma}(\omega) M_{1\sigma}^{+-}(\omega) & -L_{11}^{\sigma}(\omega) M_{2\sigma}^{+-}(\omega) \\ L_{11}^{\sigma}(\omega) M_{1\sigma}^{+-}(\omega) & L_{12}^{\sigma}(\omega) M_{2\sigma}^{+-}(\omega) & 1 - L_{11}^{\sigma}(\omega) M_{1\sigma}^{++}(\omega) & -L_{12}^{\sigma}(\omega) M_{2\sigma}^{++}(\omega) \\ L_{12}^{\sigma}(\omega) M_{1\sigma}^{+-}(\omega) & L_{11}^{\sigma}(\omega) M_{2\sigma}^{+-}(\omega) & -L_{12}^{\sigma}(\omega) M_{1\sigma}^{++}(\omega) & 1 - L_{11}^{\sigma}(\omega) M_{2\sigma}^{++}(\omega) \end{bmatrix},$$

где были введены функции

$$L_{ij}^{\sigma}(\omega) = \sum_{\alpha} \gamma_{i\sigma}(\alpha) \gamma_{j\sigma}(\alpha) D_{\alpha}(\omega).$$

В правой части матричного уравнения (53) стоит вектор $\Upsilon_{\sigma\beta}^{(1)}(\omega)$ такой, что

$$\tilde{\Upsilon}_{\sigma\beta}^{(1)}(\omega) = [\gamma_{1\sigma}(\beta), \gamma_{2\sigma}(\beta), 0, 0] \cdot D_{\beta}(\omega). \quad (55)$$

Из приведенных уравнений следует, что

$$\Phi_{1\sigma\beta}^{+-}(\omega) = \frac{\gamma_{2\sigma}(\beta) \Delta_{\sigma}^{23}(\omega) - \gamma_{1\sigma}(\beta) \Delta_{\sigma}^{13}(\omega)}{\Delta_{\sigma}(\omega)} D_{\beta}(\omega), \quad (56)$$

где $\Delta_{\sigma}(\omega) = \det(\Lambda_{\sigma}(\omega))$, а $\Delta_{\sigma}^{nm}(\omega)$ – детерминант третьего порядка, получающийся из $\Delta_{\sigma}(\omega)$ посредством вычеркивания строки с номером n и столбца с номером m .

Используя определение левосторонней спектральной функции устройства, находим для нее решение

$$W_{1\sigma\beta}^{+-}(\omega) = \sum_{\beta} \gamma_{1\sigma}(\beta) \Phi_{1\sigma\beta}^{+-}(\omega) = \frac{L_{12}^{\sigma}(\omega) \Delta_{\sigma}^{23}(\omega) - L_{11}^{\sigma}(\omega)(\beta) \Delta_{\sigma}^{13}(\omega)}{\Delta_{\sigma}(\omega)}. \quad (57)$$

Решение второй системы (48) можно провести аналогично. Если ввести векторы

$$\begin{aligned} \tilde{\Pi}_{\sigma\beta}^{(2)}(\omega) &= [\Phi_{1\sigma\beta}^{-+}(\omega), \Phi_{2\sigma\beta}^{-+}(\omega), \Phi_{1\sigma\beta}^{++}(\omega), \Phi_{2\sigma\beta}^{++}(\omega)], \\ \tilde{\Upsilon}_{\sigma\beta}^{(2)}(\omega) &= [0, 0, \gamma_{1\sigma}(\beta), \gamma_{2\sigma}(\beta)] \cdot D_{\beta}(\omega), \end{aligned} \quad (58)$$

то получим уравнение

$$\hat{\Lambda}_{\sigma}(\omega) \cdot \Pi_{\sigma\beta}^{(2)}(\omega) = \Upsilon_{\sigma\beta}^{(2)}(\omega). \quad (59)$$

Отсюда следует, что интересующая нас спектральная интенсивность равна

$$W_{1\sigma\beta}^{-+}(\omega) = \frac{L_{11}^{\sigma}(\omega) \Delta_{\sigma}^{31}(\omega) - L_{12}^{\sigma}(\omega)(\beta) \Delta_{\sigma}^{41}(\omega)}{\Delta_{\sigma}(\omega)}. \quad (60)$$

9. ТОК И КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ЧИСЕЛ ЗАПОЛНЕНИЯ

Используя полученные решения, после несложных вычислений находим выражение для тока

$$J = 4 \frac{e}{h} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{[L_{12}^{\sigma}(\omega - eV/2)]^2}{\Delta_{\sigma}(\omega - eV/2)} \Gamma_1(\omega) \Gamma_2(\omega) [n_2(\omega - eV) - n_1(\omega)], \quad (61)$$

где

$$\Gamma_1(\omega) = \pi \sum_k t_{Lk}^2 \delta(\omega - \xi_{Lk\sigma}), \quad \Gamma_2(\omega) = \pi \sum_p t_{Rp}^2 \delta(\omega - eV - \xi_{Rp\sigma}).$$

В дальнейшем ограничимся рассмотрением часто встречающегося на практике случая широкозонных металлических контактов, когда $t_L, t_R \ll W$, W – ширина зоны контактов. Тогда для определителя динамической матрицы $\hat{\Lambda}_{\sigma}(\omega)$ получим следующее выражение:

$$\Delta_{\sigma}(\omega) = [1 - \Gamma_1(\omega) \Gamma_2(\omega) ([L_{11}^{\sigma}(\omega)]^2 - [L_{12}^{\sigma}(\omega)]^2)]^2 + \Gamma^2(\omega) [L_{11}^{\sigma}(\omega)]^2, \quad (62)$$

где $\Gamma(\omega) = \Gamma_1(\omega) + \Gamma_2(\omega)$.

Отметим, что выражение (61) удовлетворяет очевидным требованиям. Прежде всего это связано с обращением тока в нуль, как только $t_R = 0$ или $t_L = 0$. Более тонкий эффект связан с тем, что для принятой геометрии устройства ток должен равняться нулю, если между узлами устройства нет связи, т. е. при $t_d = 0$. В явном виде параметр t_d не входит в выражение для тока, однако зависимость от него проявляется через функции L_{11}^{σ} и L_{12}^{σ} . В предельном случае, когда $t_d = 0$, получаем $L_{11}^{\sigma} \neq 0$, а $L_{12}^{\sigma} = 0$. Следовательно, ток, как и должно быть, в этом пределе обращается в нуль. Кроме того, если перейти к ситуации с одним узлом в центре, где может находиться электрон, то $L_{11}^{\sigma} = L_{12}^{\sigma} \equiv L_{\sigma}$. В результате выражения (61) и (62) приобретают вид, ранее полученный в работе [14].

Входящие в выражение для тока функции содержат концевые множители, которые определяются через числа заполнения N_m , $m = 1, 2, \dots, N_D$, состояний устройства. Для получения кинетических уравнений, которым должны удовлетворять числа заполнения, воспользуемся неравновесными функциями $D_{\alpha\alpha}^{+-}(t-t')$ с различными α . Из определения (37) следует, что

$$D_{\alpha\alpha}^{+-}(t-t') = i\langle X^{-\alpha}(t')X^{\alpha}(t) \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} D_{\alpha\alpha}^{+-}(\omega). \quad (63)$$

Тогда для $t = t'$ получаем

$$N_m \equiv \langle X^{mm} \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi i} D_{\alpha\alpha}^{+-}(\omega), \quad \alpha = \alpha(n, m). \quad (64)$$

Как видно из (47), функция $D_{\alpha\beta}^{+-}(\omega)$ выражается через введенные выше комбинации $\Phi_{j\sigma\beta}^{+-}(\omega)$ и $\Phi_{j\sigma\beta}^{--}(\omega)$. Решение для $\Phi_{1\sigma\beta}^{+-}(\omega)$ определено формулой (57). Применяя аналогичную методику, нетрудно получить недостающие функции.

После простых, но громоздких вычислений получим искомую систему кинетических уравнений для чисел заполнения

$$N_m = \sum_{\sigma} \int \frac{d\omega}{\pi} \gamma_{1\sigma}^2(\alpha) \frac{D_{\alpha}^2}{\Delta_{\sigma}} K_{\alpha}(\omega), \quad \alpha = \alpha(n, m), \quad (65)$$

где

$$K_{\alpha} = \Gamma_1 n_1 + \Gamma_2 n_2 + \Gamma_1 \Gamma_2 (\Gamma_1 n_2 + \Gamma_2 n_1) [L_{11}^{\sigma} - \Theta_{12}^{\sigma}(\alpha) L_{12}^{\sigma}]^2. \quad (66)$$

Для краткости здесь не указана зависимость от ω , а $\Theta_{12}^{\sigma}(\alpha) = \text{sign}[\gamma_{1\sigma}(\alpha)\gamma_{2\sigma}(\alpha)]$.

10. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленное развитие теории квантового транспорта электронов инициировано проблемой, связанной с большим числом затравочных амплитуд рассеяния в системах атомного масштаба с внутренними степенями свободы при их описании в рамках обычных операторов вторичного квантования.

Решение задачи получено посредством перехода к атомному представлению для гамильтониана устройства и введения операторов Хаббарда. Это позволило точно учесть все взаимодействия в устройстве и представить его гамильтониан в диагональном виде. При таком подходе в качестве возмущения выступает только оператор туннелирования. Существенно, что запись этого оператора в атомном представлении делает возможным применение диаграммной техники для операторов Хаббарда.

Другой важный момент связан с тем, что выражение для тока удастся записать через универсальные спектральные характеристики устройства, определяемые через неравновесные функции Грина в атомном представлении. Для этих функций при учете процессов рассеяния во всех порядках теории возмущений получена система уравнений. Запись матричных элементов взаимодействия в расщепленном виде позволила простым образом получить решение этой системы.

Рассмотрен часто встречающийся на практике случай, когда левый и правый контакты туннельно связаны с разными узлами устройства. Такая геометрия необходима при анализе транспортных характеристик устройств с краевыми состояниями.

Показана выполнимость предельного перехода для тока, когда внутри устройства разрывается связь между ионами, туннельным образом взаимодействующими с контактами.

Для отмеченной геометрии задачи развитый подход позволил вывести замкнутую систему кинетических уравнений для чисел заполнения. Поскольку при этом использовались функции Грина, найденные с учетом процессов многократного рассеяния электронов, то полученная система уравнений пригодна в случае сильной ренормировки чисел заполнения вследствие взаимодействия транспортируемых электронов с внутренними спиновыми степенями свободы.

Список литературы

- [1] C. F. Hirjibehedin, C. P. Lutz, A. J. Heinrich, “Spin coupling in engineered atomic structures”, *Science*, **312**:5776 (2006), 1021–1024.
- [2] H. Ueba, T. Mii, S. G. Tikhodeev, “Theory of inelastic tunneling spectroscopy of a single molecule – competition between elastic and inelastic current”, *Surface Science*, **601**:22 (2007), 5220–5225.
- [3] П. И. Арсеев, Н. С. Маслова, “Взаимодействие электронов с колебательными модами при туннелировании через одиночные молекулы”, *УФН*, **180** (2010), 1197–1216.
- [4] C. F. Hirjibehedin, C.-Y. Lin, A. F. Otte, M. Ternes, C. P. Lutz, B. A. Jones, A. J. Heinrich, “Large magnetic anisotropy of a single atomic spin embedded in a surface molecular network”, *Science*, **317**:5842 (2007), 1199–1203.
- [5] S. Loth, K. von Bergmann, M. Ternes, A. F. Otte, C. P. Lutz, A. J. Heinrich, “Controlling the state of quantum spins with electric currents”, *Nature Phys.*, **6** (2010), 340–344.
- [6] Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, М., 1971.
- [7] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Рёпке, *Статистическая механика неравновесных процессов*, т. 1, 2, Физматлит, М., 2002.
- [8] D. Rogovin, D. J. Scalapino, “Fluctuation phenomena in tunnel junctions”, *Ann. Phys. (N. Y.)*, **86**:1 (1974), 1–90.
- [9] Л. В. Келдыш, “Диаграммная техника для неравновесных процессов”, *ЖЭТФ*, **47**:4 (1965), 1515–1527.
- [10] Р. О. Зайцев, *Введение в современную кинетическую теорию. Курс лекций*, КомКнига, М., 2006.
- [11] П. И. Арсеев, “О диаграммной технике для неравновесных систем: вывод, некоторые особенности и некоторые применения”, *УФН*, **185**:12 (2015), 1271–1321.
- [12] Р. О. Зайцев, “Обобщенная диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном антиферромагнетике”, *ЖЭТФ*, **68**:1 (1975), 207–215; “Диаграммная техника и газовое приближение в модели Хаббарда”, **70**:3 (1976), 1100–1111.
- [13] Н. М. Плакида, Л. Антон, С. Адам, Г. Адам, “Обменный и спин-флуктуационный механизмы сверхпроводимости в купратах”, *ЖЭТФ*, **124**:2 (2003), 367–378.
- [14] В. В. Вальков, С. В. Аксенов, Е. А. Уланов, “Эффекты многократного отражения при неупругом электронном транспорте через анизотропный магнитный атом”, *Письма в ЖЭТФ*, **98**:7 (2013), 459–465.

Поступила в редакцию 2.05.2017,
после доработки 22.05.2017