

ІНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМ. М.М. БОГОЛЮБОВА  
НАН УКРАЇНИ

ІНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМ. М.М. БОГОЛЮБОВА  
НАН УКРАЇНИ

Кваліфікаційна наукова  
праця на правах рукопису

**Журавель Денис Віталійович**

УДК 537.9, 538.935, 539.172

**ДИСЕРТАЦІЯ**

**НЕРІВНОВАЖНИЙ ЕЛЕКТРОННИЙ ТРАНСПОРТ В СИСТЕМІ  
КВАНТОВИХ ТОЧОК ТА ВЛАСТИВОСТІ БОЗОННИХ СИСТЕМ  
ПРИ НЕНУЛЬОВИХ ТЕМПЕРАТУРАХ В РАМКАХ МОДЕЛІ  
СЕРЕДНЬОГО ПОЛЯ**

01.04.02 – Теоретична фізика

10 Природничі науки

(104 – Фізика та астрономія)

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання  
ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відпо-  
відне джерело

---

підпис, ініціали та прізвище здобувача

Науковий керівник:

Анчишкін Дмитро Владленович  
доктор фізико-математичних наук,  
провідний науковий співробітник

Київ – 2023



# АНОТАЦІЯ

**Журавель Д. В. Нерівноважний електронний транспорт в системі квантових точок та властивості бозонних систем при ненульових температурах в моделі середнього поля – ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ, 2023.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 01.04.02 – Теоретична фізика. – Рукопис.

Дослідження систем із сильними кореляціями викликають значний інтерес. Зокрема це пов'язано із новітніми теоретичними та експериментальними досягненнями. Одним із прикладів такої системи є нульвимір-на електронна система, де рух електронів обмежений у всіх трьох напрямках. Такі нанорозмірні об'єкти, що складаються зі зв'язаних електронів, зазвичай називають квантовими точками. Якщо квантова точка приєднана до металевих провідників, електрони з яких можуть тунелювати у зв'язані стани на орбіталях КТ, то така система може розглядатись як нанорозмірний електронний пристрій. Рівноважні та, особливо, нерівноважні релаксаційні ефекти у таких системах представляють значний інтерес, пов'язаний з процесами мініатюризації електроніки. Опис електронного транспорту через такий пристрій є досить складною задачею, оскільки між електронами всередині КТ присутня сильна Кулонівська взаємодія, якою не можна знехтувати. Навіть найпростіша одноорбітальна квантова точка може містити два електрони з різними проекціями спіну. Крім того, ще більший інтерес виникає, коли такий транспорт через квантову точку контролюється зовнішніми магнітним або електричним полем, додатковим провідним контактом або квантовою точкою. Такі системи є основою для побудови нанорозмірних транзисторів, кубітів та інших електронних пристроїв.

Для дослідження таких систем зазвичай використовується метод нерівноважних функцій Гріна в рамках формалізму Келдиша. Для

розв'язку задачі із сильними електронними кореляціями застосовують різні чисельні та аналітичні підходи. Наприклад, такі методи як побудова ланцюгів рівнянь руху для функцій Гріна та наближення Хаббарда, неперехресне наближення (NCA), *auxiliary-mode expansion* тощо, зазвичай використовуються для того, щоб отримати аналітичний вигляд функції Гріна квантової точки та аналітично обчислити транспортні величини. Серед чисельних методів які застосовують, варто згадати квантовий метод Монте-Карло (QMC), метод Монте Карло з механізмом руху типу "черв'як" (*inchworm MCM*), залежну від часу чисельну ренорм групу (NRG), групу ренормування матриці густини (DMRG). Такі методи можуть бути використані для безпосереднього отримання транспортних величин, однак недоліком є втрата аналітичної інформації про систему, яка могла б забезпечити більш детальне пояснення певних ефектів.

Іншим прикладом систем з сильними кореляціями є системи взаємодіючих бозе-частинок (піони, каони, глюони), які викликають значний інтерес у зв'язку з дослідженнями нейтронних зірок, важких ядер та зіткнень важких іонів. Фізика гарячих систем із високими густинами енергії має справу з сильно взаємодіючими релятивістськими частинками.

При розгляді Бозе статистики вкрай важливо враховувати крім сильних кореляції між частинками, також і можливість бозе-ейнштейнівської конденсації. Для передбачення та опису різних явищ, пов'язаних із конденсацією піонів у таких системах, використовуються такі методи як обчислення поляризаційного оператора, хіральної теорії збурень, пертурбативна КХД, ґраткова КХД разом із методом допоміжного піонного джерела тощо. Дані наближення використовуються для дослідження конденсації піонів у різних системах, таких як ядерне середовище, система піонів у зовнішньому полі, нейтронні зірки та зіткнення важких ядер.

Перший етап дисертаційної роботи присвячений теоретичному дослідженню нерівноважного електронного транспорту через нанорозмірний пристрій, що складається з однієї квантової точки приєднаної до двох металевих контактів, в рамках формалізму Келдиша. Квантова точка роз-

глядається як однорівнева електронна орбіталь в рамках моделі Андерсона з наявним зовнішнім магнітним полем. Кореляції, які зумовлені кулонівським відштовхуванням між електронами на точці, враховані при розрахунку функції Гріна в наближенні подібному до наближення Хаббарда-I, але яке дозволяє більш точно описувати динаміку. Метод заснований на обриві ланцюга рівнянь руху для функцій Гріна. Схема є точною в так званому атомному наближенні (atomic limit), в рамках якого коефіцієнт тунелювання між точкою та контактами рівний нулю, а також у наближенні без взаємодії, коли Кулонівське відштовхування між електронами дорівнює нулю. Явні аналітичні вирази для струму через таку систему, справедливі для довільних значень магнітного поля, отримані для двох важливих випадків: (i) стаціонарного режиму з постійною напругою зміщення між контактами та (ii) залежного від часу режиму в рамках наближення широкої зони (вважається, що металеві контакти мають постійну та нескінченно широкую густину станів). У таких режимах струм через квантову точку обчислюється чисельно для різних наборів параметрів, а його основні характеристики інтерпретуються з точки зору основних фізичних процесів. Результати порівнюються з неперехресним наближенням (NCA) та діаграмним нерівноважним квантовим Монте-Карло (QMC).

На наступному етапі розглядається пристрій, що складається з подвійної квантової точки з сильними внутрішньо- та міжточковими кулонівськими кореляціями. У такій системі струм може протікати тільки через нижню точку, а верхня точка виступає у ролі затвору. Обидві квантові точки розглядаються як однорівневі електронні орбіталі в рамках моделі Андерсона. Функції Гріна отримані в рамках неперехресного наближення (NCA), яке може описувати низькотемпературні ефекти, такі як транспорт Кондо. Це пов'язано з тим, що таке наближення дозволяє врахувати ефекти перевероту спіну на відміну від наближення Хаббарда-I. Досліджено рівноважний транспорт. Було показано, що при низьких температурах подвійна квантова точка проходить через вузький режим Кондо,

що призводить до дуже чутливих характеристик перемикання між трьома чітко визначеними станами - ізолятором, нормальною провідністю та резонансним тунелюванням.

На наступному етапі дослідження була розглянута система взаємодіючих Бозе частинок і античастинок при кінцевих температурах. Було досліджено термодинамічні властивості такої системи, можливість та умови бозе-конденсації у рамках іграшкової Скірма-подібної моделі середнього поля. Середнє поле містить як притягувальну, так і відштовхувальну компоненти. Отримано співвідношення самоузгодженості між середнім полем і термодинамічними функціями. Досліджено два важливі випадки: 1) система з нульовим хімічним потенціалом, коли кількість частинок дорівнює числу античастинок; 2) випадок збереження ізоспінової густини для всіх температур, що означає, що різниця між частинками та античастинками залишається постійною, як і хімічний потенціал. Кожному випадку присвячено окремий розділ дипломної роботи.

Показано, що при достатньо сильному притягуванні, в системі з нульовим хімічним потенціалом виникає фазовий перехід першого роду в фазу з утворенням бозе-конденсату. Цікавим результатом є те, що конденсована фаза для такої системи характеризується сталою загальною густиною частинок та температурою початку конденсації  $T_c$  відмінною від 0. Показано, що при критичній температурі густина енергії має розрив, що підтверджує той факт, що фазовий перехід є переходом першого роду.

Для системи з ненульовою та сталою густиною ізоспіну, показано, що незалежно від величини притягання середнього поля при критичній температурі  $T_c$  в системі відбувається фазовий перехід другого роду до фази бозе-ейнштейнівського конденсату. Ця фаза існує в інтервалі температур  $0 \leq T \leq T_c$ . Отримано, що у системі частинка-античастинка, теплоємність в точці  $T = T_c$  має розрив першої похідної, і що конденсація відбувається лише для компоненти з більшою густиною числа частинок ( $\Pi^-$ -мезони).

Матеріали дисертації представлено у провідних реферованих закордонних та українських журналах: [1–5].

*Структура дисертації.* Робота складається із вступу, чотирьох розділів – двох розділів, присвячених нерівноважному транспорту через нанорізмірну систему, що складатися з однієї квантової точки та системи квантових точок, та двох розділів, присвячених бозе-ейнштейнівській конденсації у системі взаємодіючих піонів, списку використаних джерел, що містить 120 посилань. Дисертація включає 24 рисунки. Загальний об'єм роботи становить 147 сторінок друкованого тексту.

**Ключові слова:** квантова точка, нерівноважний електронний транспорт, магнітне поле, Кондо фізика, конденсат Бозе-Ейнштейна, модель середнього поля, газ піонів, фазовий перехід.

**Список публікацій здобувача:**

- [1] D. Anchishkin, I. Mishustin, O. Stashko, D. Zhuravel, and H. Stoecker, «Finite-Temperature Bose-Einstein Condensation in Interacting Boson System», *Ukrainian Journal of Physics* **64**, 1118 (2019) DOI: 10.15407/ujpe64.12.1118.
- [2] D. Anchishkin, V. Gnatovskyy, D. Zhuravel, and V. Karpenko, «Relativistic selfinteracting particle-antiparticle system of bosons», *Journal of Physics and Electronics* **28**, 3–18 (2020) DOI: 10.15421/332016.
- [3] D. Zhuravel, D. Anchishkin, R. Hayn, P. Lombardo, and S. Schäfer, «Non-equilibrium electronic transport through a quantum dot with strong Coulomb repulsion in the presence of a magnetic field», *Journal of Physics: Condensed Matter* **32**, 165601 (2020) DOI: 10.1088/1361-648x/ab5ce7.
- [4] P. Lombardo, R. Hayn, D. Zhuravel, and S. Schäfer, «Kondo-assisted switching between three conduction states in capacitively coupled quantum dots», *Physical Review Research* **2**, 033387, ISSN: 2643-1564 (2020) DOI: 10.1103/physrevresearch.2.033387.

- [5] D. Anchishkin, V. Gnatovskyy, D. Zhuravel, and V. Karpenko, «Phase diagram of the selfinteracting particle-antiparticle boson system», *Journal of Physics and Electronics* **29**, 5–14 (2021) DOI: 10.15421/332101.

# ABSTRACT

**Zhuravel D.V. Non-equilibrium electronic transport in the system of quantum dots and properties of bosonic systems at nonzero temperatures in the mean field model – Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2023.**

Thesis for the Doctor of Philosophy degree in speciality 01.04.02 – theoretical physics. – Manuscript.

Systems with strong correlations are of high interest due to recent advancements in theoretical and experimental studies. An example of such system is a zero-dimensional electronic system, where electron movement is confined in all three directions. These nanoscale objects, composed of bound electrons, are commonly referred to as quantum dots. If one consider a quantum dot connected to metallic leads through tunneling, a nanoscale electronic device can be created. Equilibrium and, especially, non-equilibrium relaxation effects are of great interest due to the miniaturization process of electronic devices nowadays. Electronic transport through such devices poses a many-body problem as multiple electrons are typically involved. Even the simplest one-orbital quantum dot can contain two electrons with different spin projections. Moreover, even greater interest arises when such transport through the quantum dot connected to metallic leads is controlled by external magnetic or electrical fields, as well as additional leads and quantum dots. This is how nanoscale transistors, qubits or other microelectronic devices can be implemented.

To study such systems, the non-equilibrium Green's function method within the Keldysh formalism, is commonly employed. To tackle the strong correlations between electrons various numerical and analytical approaches are utilized. For example, such techniques as Green's function expansion and Hubbard approximation, non-crossing approximation, auxiliary-mode expansion, etc. are usually employed to analytically obtain the quantum dot's

Green's function and calculate transport quantities. Alternatively, numerical methods such as the inch-worm algorithm, quantum Monte Carlo (QMC), time-dependent numerical renormalization group (NRG) or density matrix renormalization group (DMRG), can be used to directly obtain transport quantities. However, these numerical methods may lack of the analytical information that could provide a more detailed explanation of certain effects occurring in such systems.

Another example of a system with strong correlations is a system of interacting Bose particles (for example, system of interacting pions, kaons, gluons). These systems have garnered significant interest due to their investigation in heavy ion collisions, neutron stars, and heavy nuclei. In these hot and dense matter systems, relativistic particles interact strongly with each other.

In case of the Bose statistic it is crucial to consider the strong particle correlations as well as the possibility of Bose-Einstein condensation in a Bose particle system. Various methods have been employed to predict and describe different phenomena related to pion condensation in such systems, including the calculation of the polarization operator, chiral perturbation theory, perturbative QCD, lattice QCD, and the method of vanishing pionic source, among others. These methods have been utilized to study and understand pion condensation in different scenarios, such as the nuclear medium, pions subjected to external fields, neutron stars, and hadron collisions.

On the first stage of reseach in this thesis the non-equilibrium electronic transport through a nanoscale device composed of a single quantum dot between two metallic contacts was studied theoretically within the framework of the Keldysh formalism. The quantum dot is considered as a single-level electronic orbital within the Anderson model with external magnetic field applied. A Green's function decoupling scheme is used to treat electron correlations on the dot due to the Coulomb repulsion. This approach is similar to the Hubbard-I approximation scheme, but captures some of the

dynamics beyond and is exact in the so-called atomic limit, defined by vanishing tunneling between contacts and dot, and in the non-interacting limit, where the on-dot Coulomb repulsion is zero. Explicit analytic solutions, valid for arbitrary magnetic fields, are obtained for two important setups: (i) the stationary regime, with constant voltage bias between the leads, and (ii) the time-dependent regime for metallic leads with constant density of states of infinite width. In these regimes, the current through the dot is evaluated numerically for various parameter sets and its main features interpreted in terms of the underlying physical processes. The results are compared to the non-crossing approximation (NCA) and diagrammatic non-equilibrium quantum Monte-Carlo (inchworm QMC) where available.

On the next stage the device consisting of a double quantum dot with strong intra- and interdot Coulomb repulsions was considered. In this design, the current can only flow through the lower dot, but is triggered by the gate-controlled occupancy of the upper dot. Both quantum dots are considered as a single-level electronic orbitals within the Anderson model. Green's functions are obtained using non-crossing approximation (NCA) which can describe low-temperature effects such as Kondo transport. This is due to the fact that such an approximation allows one to take into account the spin flip effects unlike the Hubbard-I approximation. Equilibrium transport is considered. At low temperatures, the calculations predict the double dot to pass through a narrow Kondo regime, resulting in highly sensitive switching characteristics between three well-defined states – insulating, normal conduction and resonant conduction.

Lastly, the system of interacting boson particles and antiparticles at finite temperatures was considered. Thermodynamical properties, possibility and conditions of Bose condensation in such system were studied at finite temperatures within the framework of the Skyrme-like mean-field toy model. The mean field contains both attractive and repulsive terms. Self-consistency relations between the mean field and thermodynamic functions were derived. Two important cases were investigated: 1) system with zero chemical

potential, when number of particles is equal to number of antiparticles; 2) conservation of the isospin density for all temperatures, which means that difference between particles and antiparticles is constant as well as chemical potential. A separate section of the thesis is devoted to each case.

It was shown that, for sufficiently strong attractive interactions, system with a zero chemical potential develops a first-order phase transition via the formation of a Bose condensate. An interesting prediction of the model is that the condensed phase is characterized by a constant total density of particles and by a temperature of phase transition  $T_c$  that is different from 0 in this case. It is shown that the energy density exhibits a jump at the critical temperature.

For the system with non-zero and conserved isospin density it is shown that, independently of the strength of the attractive mean field, at the critical temperature  $T_c$  the system undergoes the phase transition of second order to the Bose-Einstein condensate, which exists in the temperature interval  $0 \leq T \leq T_c$ . It was obtained that the condensation phase represents a discontinuity of the derivative of the heat capacity at  $T = T_c$ , and condensate occurs only for the component with a higher particle-number density ( $\Pi^-$ -mesons) in the particle-antiparticle system.

*Structure of the thesis.* This thesis consists of Introduction, two chapters, which correspond to a non-equilibrium transport through a nanoscale device, consisting of a single quantum dot and a quantum dot system, and two chapters on Bose-Einstein condensation in interacting pion systems, Bibliography that contains 120 references. Thesis includes 24 figures. The overall volume of the thesis is 147 pages of printed text.

Research, this thesis is based on, was published in leading international and Ukrainian peer-reviewed journals [1–5].

**Keywords:** quantum dot, non-equilibrium electron transport, magnetic field, Kondo physics, Bose-Einstein condensation, mean-field model, pion gas, phase transition.

**List of publications:**

- [1] D. Anchishkin, I. Mishustin, O. Stashko, D. Zhuravel, and H. Stoecker, «Finite-Temperature Bose-Einstein Condensation in Interacting Boson System», *Ukrainian Journal of Physics* **64**, 1118 (2019) DOI: 10.15407/ujpe64.12.1118.
- [2] D. Anchishkin, V. Gnatovskyy, D. Zhuravel, and V. Karpenko, «Relativistic selfinteracting particle-antiparticle system of bosons», *Journal of Physics and Electronics* **28**, 3–18 (2020) DOI: 10.15421/332016.
- [3] D. Zhuravel, D. Anchishkin, R. Hayn, P. Lombardo, and S. Schäfer, «Non-equilibrium electronic transport through a quantum dot with strong Coulomb repulsion in the presence of a magnetic field», *Journal of Physics: Condensed Matter* **32**, 165601 (2020) DOI: 10.1088/1361-648x/ab5ce7.
- [4] P. Lombardo, R. Hayn, D. Zhuravel, and S. Schäfer, «Kondo-assisted switching between three conduction states in capacitively coupled quantum dots», *Physical Review Research* **2**, 033387, ISSN: 2643-1564 (2020) DOI: 10.1103/physrevresearch.2.033387.
- [5] D. Anchishkin, V. Gnatovskyy, D. Zhuravel, and V. Karpenko, «Phase diagram of the selfinteracting particle-antiparticle boson system», *Journal of Physics and Electronics* **29**, 5–14 (2021) DOI: 10.15421/332101.



# ЗМІСТ

<b>Перелік умовних позначень, скорочень і термінів</b>	<b>17</b>
<b>Вступ</b>	<b>19</b>
<b>Розділ 1 Електронний транспорт. Однорівнева модель Андерсона при наявності зовнішнього магнітного поля</b>	<b>31</b>
1.1 Вступ . . . . .	31
1.2 Модельний гамільтоніан . . . . .	35
1.3 Електронний транспорт через квантову точку . . . . .	38
1.3.1 Запізнювальна функція Гріна . . . . .	39
1.3.2 Аналітичне продовження і "менша" кореляційна функція . . . . .	46
1.4 Стаціонарний струм . . . . .	47
1.5 Нерівноважний струм . . . . .	50
1.6 Чисельні результати . . . . .	54
1.7 Висновки . . . . .	70
<b>Розділ 2 Електронний транспорт. Подвійна квантова точка</b>	<b>73</b>
2.1 Вступ . . . . .	73
2.2 Гамільтоніан системи та метод розв'язку . . . . .	74
2.3 Чисельні результати . . . . .	78
2.3.1 Аналіз спектральної густини . . . . .	81
2.4 Висновки . . . . .	82
<b>Розділ 3 Термодинамічні властивості системи взаємодіючих бозонів при нульовому хімічному потенціалі</b>	<b>85</b>
3.1 Вступ . . . . .	85
3.2 Термодинамічно узгоджена модель середнього поля . . .	86

3.3	Бозе-конденсація у взаємодіючій системі піонів із нульовим ізотопічним спіном . . . . .	92
3.3.1	Параметризація Скірма для середнього поля. . . . .	93
3.3.2	Густина частинок, густина енергії та тиск при “слабкому притяганні” . . . . .	96
3.3.3	Самоузгоджений розв’язок для змішаної фази. . . . .	96
3.3.4	Тиск та густина енергії у змішаній фазі. . . . .	101
3.4	Висновки . . . . .	103

#### **Розділ 4 Термодинамічні властивості системи взаємодіючих бозонів при ненульовому хімічному потенціалі 105**

4.1	Вступ . . . . .	105
4.2	Модель середнього поля для системи бозонів та антибозонів . . . . .	106
4.3	Параметризація Скірма для середнього поля . . . . .	110
4.4	Термодинамічні властивості системи бозонів-антибозонів зі “слабким притягання” . . . . .	113
4.4.1	Чисельні розрахунки . . . . .	115
4.5	Висновки . . . . .	126

#### **Список використаних джерел 129**

#### **Додаток А Список публікацій за темою та відомості про апробацію 145**

## ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ

KT(QD)	квантова точка (англ. <b>Quantum Dot</b> )
NCA	неперехресне наближення (англ. <b>Non-Crossing Approximation</b> )
QMC	квантовий метод Монте-Карло (англ. <b>Quantum Monte Carlo</b> )
Inchworm QMC	діаграмний нерівноважний метод Монте Карло з механізмом руху типу "черв'як"(англ. <b>inchworm Quantum Monte Carlo</b> )
NRG	залежна від часу чисельна ренорм група (англ. <b>time-dependent Numerical Renormalization Group</b> )
KХД(QCD)	квантова хромодинаміка (англ. <b>Quantum ChromoDynamics</b> )
БЕК	Бозе-Ейнштейнівський конденсат



# Вступ

**Актуальність теми.** Протягом трьох десятиліть з моменту появи перших гетероструктур арсеніду галію, в яких окремі електрони можуть нести транспортні сигнали [6–9], ентузіазм щодо дослідження квантових точок (QD), як нині прийнято називати дані пристрої, постійно збільшується. Зокрема завдяки експериментальним реалізаціям, які на даний момент включають такі речовини як, наприклад, кремнієві [10, 11] та вуглецеві нанотрубки [12]. Такі регульовані ”штучні атоми”забезпечують ідеальні умови для перевірки квантової теорії в діапазонах параметрів недоступних у звичайних системах. Досліджувані явища варіюються від кулонівської блокади, квантового ефекту Холла [13], Кондо-ефекту [10, 14], термоелектрики [15–19] до фазових переходів та квантової критичності [20–22]. Крім очевидного фундаментального інтересу, транспортні властивості QD можуть бути використані у прикладних цілях, включаючи польові транзистори [23], фотоефект [24] та інструменти візуалізації молекулярних процесів у нейродослідженнях [25].

Нанорозмірні транзистори на основі квантових точок та квантові ефекти в них є напрямком активних досліджень, які мотивовані насамперед процесами мінітюаризації електроніки. QD зазвичай моделюються як однорівнева або багаторівнева орбіталь, що приєднана до двох металевих контактів. Електрони у квантовій точці взаємодіють між собою за допомогою кулонівського відштовхування, внаслідок чого у системі виникають сильні електронні кореляції, для яких точні рішення недоступні, а наближення неминучі. Серед останніх наближень, які застосовувались для розгляду подібних систем, варто згадати теорію ефективного поля Смірнова та Грифоні [26] у рамках формалізма Келдиша. За допомогою цього наближення вони досліджували ерозію резонансу Кондо як наслідок наявності зовнішнього магнітного поля у системі; так званий i-DFT ефект. У подальшому цей ефект було використано Стефануччі та Кур-

том [27] для дослідження переходу від Кондо до режиму блокади Кулона; схеми роз'єднання нерівноважних функцій Гріна, такі як розширення допоміжного режиму Кроя та Заалмана (auxiliary-mode expansion) [28], або SOQRE на основі техніки підкорених бозонів (slave-bosons) [29].

Паралельно було розроблено велику різноманітність чисельних підходів, починаючи від чисельної ренормгрупи (NRG), над ренормгрупою матриці щільності (DMRG) до методу квантового Монте-Карло (QMC). Усі ці алгоритми дають чудові практично точні результати для ситуації рівноваги, але кожен з них стикається з власними технічними проблемами - наприклад, змішування високо- і низькоенергетичних станів у методах на основі RG, проблеми "динамічного" додатково до внутрішнього ферміонного знака в QMC - при розгляді динаміки нерівноважної системи на довгих часових масштабах, що тягне за собою нестабільність і експоненційне зростання обчислювальних витрат (див. Ref.[30] та посилання в ньому). Нещодавно Cohen з іншими авторами [30] за допомогою "inchworm" реалізація діаграмної QMC, змогли зменшити цю проблему для часів еволюції, які не є надто довгими, тому метод використаний в даній роботі буде порівняний з їх результатами.

Один з основних недоліків чисельних методів полягає в тому, що вони майже не дають інформації про основні фізичні процеси, які можуть бути головним чином відповідальними за ті чи інші процеси. Крім того, література, яка пропагує такі методи, як правило, зосереджується на технічних аспектах, як-от збіжність розглянутої числової схеми, приділяючи при цьому значно меншу увагу таким важливим характеристикам як, наприклад, релаксація після нескінченного імпульсу або вимкнення.[30, 31] Залишається дещо незрозумілим, наскільки такі методи здатні обробляти більш складні експериментальні установки.

Для опису таких систем зазвичай використовується домішкова модель, введена Андерсоном понад 50 років тому [32] для дослідження, здавалося б, не пов'язаної теми локалізованих магнітних моментів у перехідних металах. На відміну від систем, які Андерсон мав на меті описати своєю

моделлю, досліджувана QD не перебуває в тепловій рівновазі, а знаходиться у зовнішньому електричному полі, прикладеному між провідними контактами. Таким чином, транспорт через квантову точку має бути описаний відповідним нерівноважним формалізмом, таким як, наприклад, формалізм Келдиша [33–35]. Теоретичний аналіз в даній роботі проведений аналогічно до [36], але, на відміну від останнього, враховує магнітне поле та кулонівське відштовхування між електронами всередині квантової точки.

Подолання кулонівської блокади і відновлення провідності через такий пристрій як квантова точка, що приєднана до провідних контактів, є необхідною умовою функціонування нанорозмірного транзистора. Для досягнення такого ефекту можливі різні конфігурації зовнішніх полів або включення додаткових керуючих провідників та квантових точок. Одним з прикладів такого керуючого зовнішнього поля, що першим спадає на думку, є зовнішнє магнітне поле.

Частина роботи присвячена дослідженню нерівноважного електронного транспорту через одноорбітальну QD, приєднану до двох металевих контактів. Електрони у точці взаємодіють між собою за допомогою кулонівського відштовхування, а також із зовнішнім магнітним полем, яке знімає спінове виродження орбіталі (ефект Зеемана). Контакти або провідники, навпаки, моделюються як ідеальні некорельовані метали, які не взаємодіють із зовнішнім магнітним полем. У досліджуваному режимі Кондо фізика не спостерігається, оскільки, як відомо, колективне екранування спіну на точці електронами провідників витримує лише температури, напруги зміщення та магнітні поля порядку шкали Кондо [12]. Розглянуто зміну провідності в залежності від прикладеного зовнішнього магнітного поля, а також релаксаційні процеси, які виникають при прикладанні до такого пристрою імпульсу напруги та магнітного поля.

Іншим способом керування провідністю каналу QD може бути додаткова квантова точка, яка приєднана ємнісним зв'язком. Можливість

спостерігати електронний транспорт завдяки наявному ефекту Кондо через квантову точку приєднану до контактів (без даного ефекту транспорт заблокований кулонівською взаємодією), спирається на той факт, що рівень точки зайнятий одним електроном доступний для резонансного тунелювання від контактів, і, таким чином, зазвичай безпосередньо керується напругою затвору. [37–39] Для такого L-подібного пристрою, схематично зображеного на рис. 2.1, затвор (вивід 2) безпосередньо не контролює енергетичний рівень  $\epsilon_1$  квантової точки 1 у каналі провідності між лівим (L) і правим (R) контактами. Але завдяки зміні напруги на затворі змінюється заселеність квантової точки 2 і саме ця зміна зрештою ініціює початок струму через провідний канал завдяки наявному кулонівському відштовхуванню між електронами на різних КТ.

В наступній частині дисертаційної роботи, яка присвячена системі квантових точок із ємнісним зв'язком, показано, що при достатньо низькій температурі така система з подвійною квантовою точкою дає можливість побудувати квантовий транзистор, здатний з високою чутливістю перемикатися між трьома станами замість двох: ізолятора, нормальної провідності та резонансної провідності за допомогою ефекта Кондо.

Іншим прикладом систем із сильними кореляціями, які мають бути враховані при дослідженні, є система мезонів. Інформація про фазову структуру мезонної системи при скінченних температурах та густинах ізоспіну має вирішальне значення для розуміння широкого спектру явищ: від ядро-ядерних зіткнень до нейтронних зірок і космології. Ця область є важливою частиною досліджень гарячої і щільної адронної матерії, яка привертає в останні роки значну наукову увагу [40]. Водночас дослідження мезонних систем має свою специфіку, зумовлену можливістю бозе-ейнштейнівської конденсації взаємодіючих бозонних частинок.

У другій половині дослідження увага концентрується на вивченні властивостей взаємодіючих бозонних систем в рамках термодинамічно узгодженої моделі середнього поля. Основними задачами є оцінка масштабу та відношення між притягальною та відштовхувальною компонентами потенціалу взаємодії та дослідження умов, при яких можлива поява Бозе-конденсату у системі взаємодіючих частинок. Проблема Бозе-конденсації пі-мезонів у ядерній матерії вивчалася починаючи з піонерських робіт Мігдала та інших авторів [41]). Пізніше дану тематику досліджувало багато авторів з використанням різних моделей і методів. Формування класичних піонних полів при зіткненні важких іонів обговорено в [42–45]. Системи піонів і К-мезонів зі скінченим ізоспіновим хімічним потенціалом розглядалися в більш сучасних дослідженнях [46–51]. Граткові розрахунки, які спираються на першопринципи, забезпечують надійну основу розуміння поведінки системи мезонів при скінчених температурах. Використовуючи такі методи, було отримано нові цікаві результати для піонних систем з великою густиною [52–54].

У дисертаційній роботі розглядається релятивістська систем взаємодіючих Бозе частинок-античастинок при нульовому ізоспіновому заряді  $n_I$  і скінченній температурі, а також при ненульовому ізоспіновому заряді, який зберігається. Бозонні частинки, які були вибрані для дослідження є  $\pi$ -мезони. Вибір був зроблений саме на користь цих частинок тому, що заряджені  $\pi$ -мезони є найлегшими адронами які мають ізоспіновий хімічний потенціал відмінний від нуля. З іншого боку, піони є найлегшими бозе-частинками які приймають участь у ядерних взаємодіях, тому врахування народження теплових пар таких частинок при збільшенні температури є актуальною проблемою, яку вирішує квантова статистика.

Для врахування взаємодії між бозонами було введено феноменологічне середнє поле  $U(n)$  подібне до поля Скирма, яке залежить лише від повної густини мезонів  $n$ . Це середнє поле відображає наявність інших сильно взаємодіючих частинок в системі, таких як, наприклад,  $\rho$ -мезони,

пари нуклон-антинуклон, глюони або пари кварк-антикварк при високих температурах,  $T > T_{\text{qgp}} \approx 160$  MeV. Розрахунки для невзаємодіючого адронного резонансного газу свідчать про те, що густина частинок може досягати значень  $(0,1 - 0,2) \text{ fm}^{-3}$  при температурах  $100 - 160$  MeV, які є нижчими фазового переходу деконфайнменту (див. напр. [55, 56]).

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами, грантами.** Дисертаційна робота виконувалась у відділі Фізики високих густин енергії Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України в рамках держбюджетних науково-дослідних робіт (2016–2019 рр.): “Пошук нових форм сильновзаємодійної матерії в зіткненнях адронів та ядер за високих енергій” (РК № 0118U003197); та у відділі Теорії ядра і квантової теорії поля Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України в рамках держбюджетних науково-дослідних робіт (2019–2022 рр.): “Використання теоретико-польового підходу для вивчення квантових систем із сильною взаємодією” (РК № 0117U000237). Дисертаційна робота також виконувалась в рамках цільової програми Відділення фізики і астрономії НАН України (2017–2022 рр.): “Структура та динаміка статистичних та квантово-польових систем” (РК No. 0117U000240).

**Мета і задачі дослідження.** Метою дисертаційної роботи є вивчення властивостей систем із сильними кореляціями, таких як квантові точки із сильним кулонівським відштовхуванням між електронами (метод нерівноважних функцій Гріна) та системи бозонів з сильною взаємодією (термодинамічно узгоджена модель середнього поля).

Для її досягнення було поставлено такі задачі:

- узагальнення транспортних рівнянь для випадку наявного зовнішнього магнітного поля, що діє на квантову точку в моделі Андерсона;
- отримання аналітичного виразу для функції Гріна однорівневої квантової точки приєднаної до провідних контактів в зовнішньому магнітному полі;

- чисельні розрахунки рівноважного струму для різних значень зовнішнього магнітного поля та відгуку такої системи на прикладений скінченний імпульс напруги та магнітного поля;
- отримання аналітичного виразу для функції Гріна Т-подібного пристрою, що складається з двох квантових точок із ємнісним зв'язком (провідний канал та керуючий затвор), та дослідження провідності такої системи при температурах нижче температури Кондо;
- отримання самоузгоджених рівнянь для системи взаємодіючих релятивістських Бозе-частинок та -античастинок у рамках термодинамічного підходу для нульового ізоспінового заряду та ненульового, але фіксованого ізоспінового заряду;
- дослідження можливості та умов виникнення Бозе-конденсату у системі взаємодіючих частинок та античастинок із нульовим ізоспіновим числом в залежності від співвідношення між притягальною та відштовхувальною компонентами потенціалу взаємодії;
- дослідження можливості та умов виникнення Бозе-конденсату у системі взаємодіючих частинок та античастинок із ненульовим ізоспіновим числом в залежності від співвідношення між притягальною та відштовхувальною компонентами потенціалу взаємодії, але для випадку “слабкого” притягання.

*Об'єктом дослідження* є системи квантових точок із сильним кулонівським відштовхуванням між електронами та системи бозонів з сильною взаємодією.

*Предметом дослідження* є: нерівноважний електронний транспорт через нанорозмірний пристрій, що складається з однієї квантової точки або системи квантових точок, що приєднані до металевих контактів; властивості сильновзаємодіючої матерії, що народжується у ядроядерних та протон-протонних зіткненнях та пояснення існуючих ефектів пов'язаних з явищем Бозе-конденсації.

**Методи дослідження.** Для дослідження рівноважного та нерівноважного транспорту через квантову точку та систему квантових точок в

зовнішньому магнітному полі використано метод нерівноважних функцій Гріна в рамках формалізму Келдиша. Даний метод застосовано до квантової точки в моделі Андерсона та Т-подібної системи з двох квантових точок з емнісним зв'язком також в моделі Андерсона. Для отримання аналітичних виразів для функцій Гріна було використано розширене наближення Хаббарда, наближення NCA та наближення широкої зони. Для дослідження термодинамічних властивостей бозонних систем при ненульових температурах було використано термодинамічно узгоджений метод середнього поля. Середнє поле параметризоване потенціалом подібним до потенціалу в моделі Скірма. Чисельні методи використано для розв'язку нелінійних алгебраїчних та диференціальних рівнянь та обчислення інтегралів.

**Наукова новизна одержаних результатів.** В дисертаційній роботі отримано наступні оригінальні результати:

1. Отримано функцію Гріна для однорівневої квантової точки в моделі Андерсона та при наявності зовнішнього магнітного поля в рамках наближення Хаббарда та наближення широкої зони;
2. Обчислено стаціонарний та залежний від часу релаксаційний струм, що протікає через квантову точку при прикладанні до контактів імпульсу зовнішнього потенціалу та імпульсу зовнішнього магнітного поля, оцінено період затухання сигналу;
3. Показано, що частоти осциляцій затухаючого струму співпадають зі зміною енергії електрона при тунелюванні з контакту до квантової точки через одноелектронний рівень;
4. Отримано функції Гріна для системи із двох квантових точок, що взаємодіють між собою, в рамках неперехресного наближення (NCA) та наближення широкої зони;
5. Показано, що при температурах  $T < T_K$  спостерігається перехід провідності квантової точки від стану ізолятора, до резонансного тунелювання та до стану провідника при збільшенні запираючого

потенціалу затвору, причому резонансний пік розмивається для температур  $T > T_K$ ;

6. В рамках термодинамічного підходу отримано самоузгоджені рівняння для системи взаємодіючих релятивістських бозонів та антибозонів;
7. Для системи пі-мезонів із потенціалом взаємодії подібним до потенціалу Скірма та нульовим ізоспіном показано, що Бозе-конденсація можлива лише для значень параметра притягання більших за критичне значення  $\kappa > \kappa = 1$ ;
8. Показано, що Бозе-конденсат може існувати лише в проміжку температур  $T_c < T < T_2$ , причому  $T_c > 0$ ;
9. Для системи пі-мезонів із потенціалом взаємодії подібним до потенціалу Скірма та ненульовим ізоспіном показано, що для “слабкого” притягання, тобто  $\kappa < \kappa = 1$ , у Бозе-конденсаті може знаходитись лише компонента системи з більшою густиною, тобто частинки, в той час як античастинки завжди перебувають у тепловій фазі.

#### **Особистий внесок здобувача.**

У роботах [3, 4]: 1) транспортні рівняння узагальнені для випадку наявного зовнішнього магнітного поля, що діє на квантову точку в моделі Андерсона; 2) отримано функцію Гріна для однорівневої квантової точки в моделі Андерсона та при наявності зовнішнього магнітного поля в рамках наближення Хаббарда та наближення широкої зони; 3) обчислено стаціонарний та залежний від часу релаксаційний струм, що протікає через квантову точку при прикладанні до контактів імпульсу зовнішнього потенціалу та імпульсу зовнішнього магнітного поля, оцінено період затухання сигналу; 4) проведено порівняння наближення Хаббарда з наближеннями NCA та inchworm QMC; 5) отримано функції Гріна для  $\perp$ -подібної системи із двох квантових точок, що взаємодіють між собою, в рамках неперехресного наближення (NCA) та наближення широкої зони.

У роботах [1, 2, 5]: 1) в рамках термодинамічного підходу для системи релятивістських  $\pi$ -мезонів із потенціалом взаємодії подібним до потенціалу Скірми та масою  $m = 140 \text{ MeV}$  отримано розв'язки самоузгоджених рівнянь для густини частинок в залежності від температури; 2) отримано залежність температури початку Бозе-конденсації  $T_c$  від параметру взаємодії  $\kappa$  для системи із нульовим ізоспіном; 3) отримано значення температури виходу з конденсатної фази  $T_2$  для системи з нульовим та ненульовим значенням ізоспіну, показано що дана температура слабо залежить від параметру взаємодії  $\kappa$ ; 4) обчислено термодинамічні величини системи, такі як густина енергії та теплоємність, та показано, що фазовий перехід в точці  $T_c$  є фазовим переходом першого роду, а фазовий перехід в точці  $T_2$  є фазовим переходом другого роду.

### **Практичне значення отриманих результатів.**

Робота має теоретичний характер. Отримані результати можуть бути використані: 1) при дослідженні транспортних властивостей мікроелектронних пристроїв та релаксаційних ефектів; 2) для дослідження властивостей сильновзаємодіючої матерії, що народжується у ядроядерних та протон-протонних зіткненнях та пояснення існуючих ефектів пов'язаних з явищем Бозе-конденсації.

### **Апробація результатів дисертації.**

Результати освітлені у дисертації доповідалися на семінарах Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова Національної академії наук України, а також міжнародних конференціях, що проводились у м. Будапешт, м. Марсель та м. Києві.

### **Публікації.**

Результати даної дисертаційної роботи представлено у 5 журнальних публікаціях [1–5].

### **Структура дисертації та об'єм дисертації.**

Дисертаційна робота складається із вступу, чотирьох розділів, що відпо- відають логічно завершеним етапам досліджень, висновків та

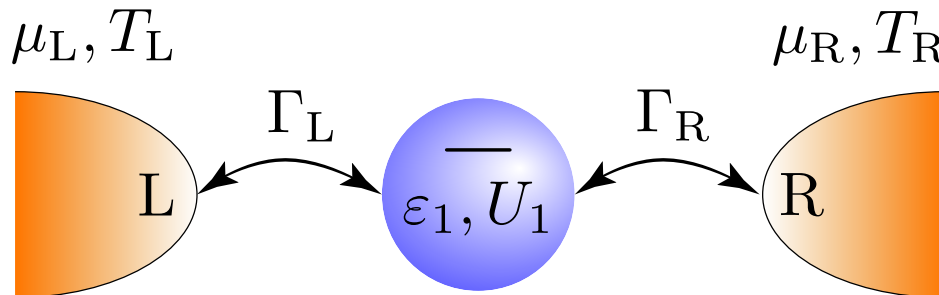
бібліографії, яка містить 120 посилань. Дисертація включає 24 рисунки. Загальний обсяг роботи становить 147 сторінку друкованого тексту.



# Розділ 1 ЕЛЕКТРОННИЙ ТРАНСПОРТ. ОДНОРІВНЕВАМОДЕЛЬ АНДЕРСОНА ПРИ НАЯВНОСТІ ЗОВНІШНЬОГО МАГНІТНОГО ПОЛЯ

## 1.1. Вступ

У цьому розділі розглядається електронний транспорт через одноорбітальну QD, приєднану до двох металевих контактів (рис. 1.1). Електрони

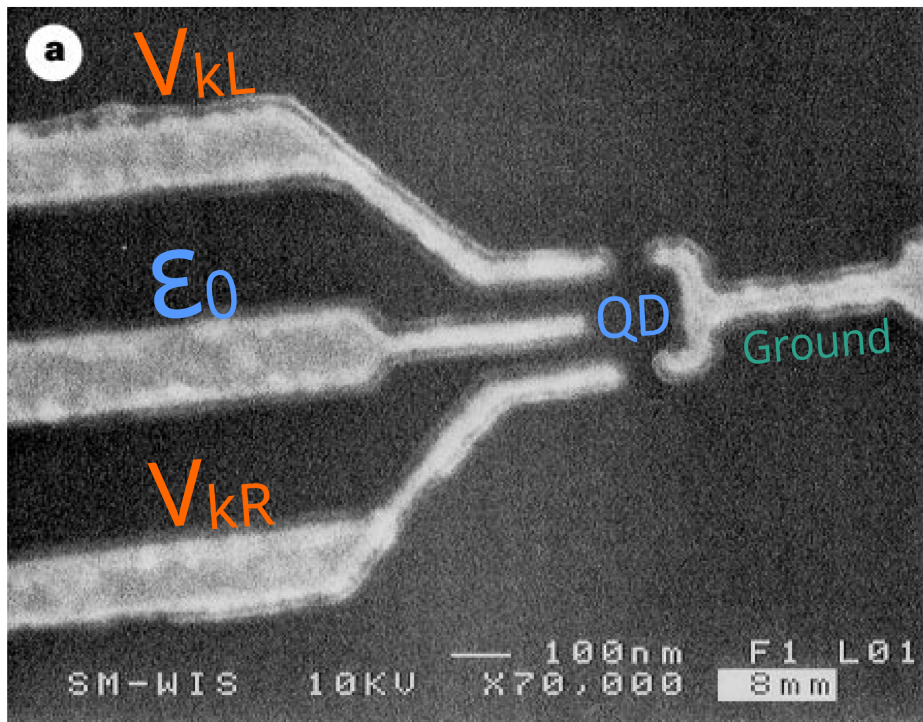


**Рис. 1.1** Одноорбітальна квантова точка, приєднану до двох металевих контактів

у точці взаємодіють між собою за допомогою кулонівського відштовхування, а також із зовнішнім магнітним полем. Контакти або провідники, навпаки, моделюються як ідеальні некорельовані метали, які не взаємодіють із зовнішнім магнітним полем. Для дослідження такої системи буде використана модель Андерсона[32] в рамках формалізму Келдиша[33–35]. Теоретичний аналіз проведений аналогічно до [36], але із врахуванням магнітного поля та кулонівського відштовхування між електронами всередині квантової точки.

Експериментально транспорт через подібну систему із однієї квантової точки або системи квантових точок без магнітного поля, або у його

присутності, досліджувався багатьма авторами у роботах [6–14] та інших. Серед даних робіт хотілось би відмітити, наприклад, роботу [14], в якій було досліджено провідність квантової точки в режимі Кондо. В даній установці автори реалізували на практиці можливість керування такими параметрами системи як висота тунелюючих бар'єрів, запираючий потенціал та зовнішнє магнітне поле (рис.1.2). Було показано, що



**Рис. 1.2** Зображення, отримане методом скануючої електронної мікроскопії, на якому показано вид зразка зверху. Правий електрод, нижній та верхній електроди зліва керують величинами енергетичних бар'єрів між провідними контактами та квантовою точкою. Середній електрод зліва використовується як затвор та керує енергетичним рівнем квантової точки. Провідні контакти, приєднані до квантової точки, не зображені на рисунку. Взято зі статті [14] (модифіковано).

при збільшенні температури, Кондо пік на графіку провідності зникає (лівий стовпчик рис.1.3), а при збільшенні магнітного поля - розщеплюється (правий стовпчик рис.1.3). В цілому дана експериментальна установка цілком відповідає теоретичній моделі описаній в даному розділі, але для достатньо великих температур, оскільки як буде показано ниж-

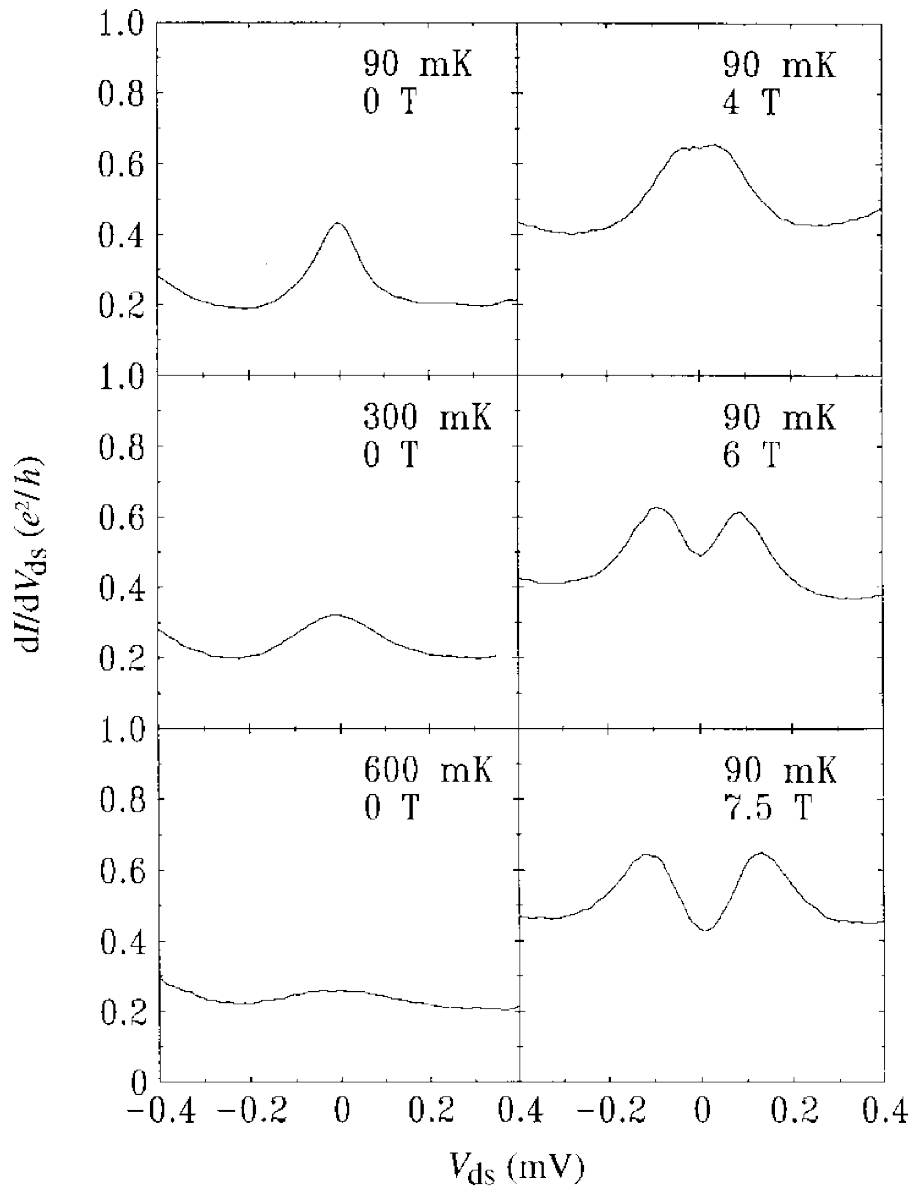
че, наближення, яке буде розглянуте в даному розділі, не може бути застосоване для опису Кондо ефектів. Проте наближення НСА, яке буде розглянуте в наступному розділі, здатне описувати подібні ефекти.

У даному розділі увага зосереджена на нерівноважному транспорті за наявності магнітного поля та не нульової температури. У досліджуваному режимі параметрів Кондо фізика не спостерігається, оскільки, як відомо, колективне екранування спіну на точці електронами провідників витримує лише температури, напруги зміщення та магнітні поля порядку шкали Кондо [12]. Оцінка останнього дається виразом Холдейна [57, 58],

$$E_K \simeq \sqrt{\Gamma U} \exp \left[ -\frac{\pi |\epsilon_0| |\epsilon_0 + U|}{2\Gamma U} \right], \quad (1.1)$$

де  $\epsilon_0$  – енергетичний рівень орбіталі, виміряний відносно енергії Фермі електронів у контактах, яка вважається рівною нулю. Розрахунок за допомогою 1.1 показує, що енергія Кондо на кілька порядків нижче температури та напруги, які буде досліджено, навіть за відсутності магнітного поля.

Для діапазону значень параметрів, які ми маємо намір вивчити, внесок спінових флуктуацій на точці, таким чином, є малим, в той час як флуктуації заряду залишаються важливими: при наявності лише одного правого контакту, хімічний потенціал якого є фіксованим і рівним нулю, квантова точка буде в рівновазі в режимі порожньої електронної орбіталі; однак зміщення напруги, прикладене до лівого контакту, гарантує, що рівні  $\epsilon_0$  або  $\epsilon_0 + U$  будуть зайняті і система перейде у режим змішаної валентності (mixed valence regime). [58] Виходячи з цього, для дослідження такої системи буде застосовано метод обриву ланцюгів рівнянь для функцій Гріна у наближенні, яке подібне до наближення Хаббарда (Hubbard-I approximation) [59, 60], але з більш точним описом динаміки. Ця схема вже використовувалася деякими авторами [61] за



**Рис. 1.3** Залежність диференціальної провідності при нульовому зміщенні напруги в режимі Кондо-резонансу від температури (лівий стовпчик) та магнітного поля (правий стовпчик). Значення температури та магнітного поля, при яких було проведено експеримент, зображені в верхньому правому кутку кожного рисунку. Взято зі статті [14].

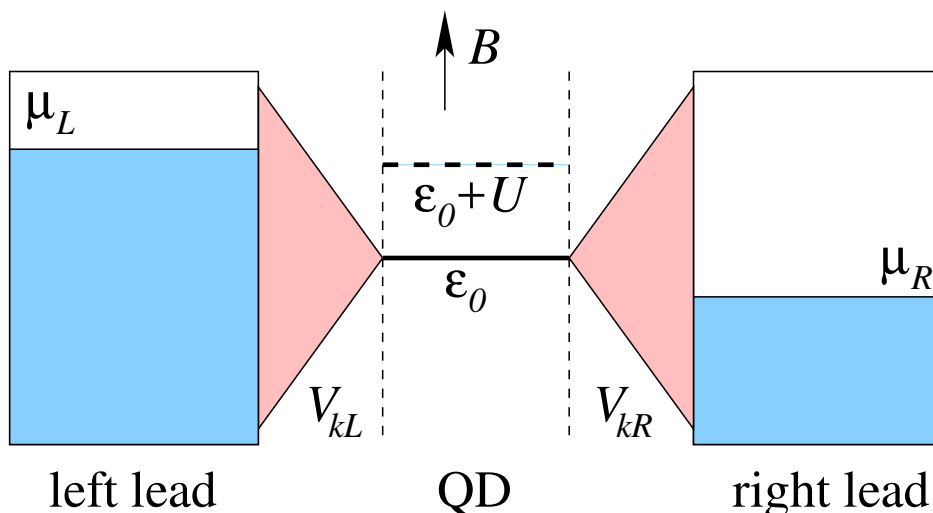
відсутності магнітного полів. Було показано, що вона дає результати близькі до результатів неперехресного наближення (NSA)[62, 63].

Розширений метод Хаббарда має такі переваги: (i) він справедливий для будь-якого значення магнітного поля та кулонівського відштовхування; (ii) стає точним при вимкненні кулонівського відштовхування та тунелювання між квантовою точкою і провідниками; (iii) для важливого випадку стаціонарного струму або залежного від часу струму із нескінченно широкою та постійною густиною станів провідників (наближення WBL), метод дає явні замкнуті вирази для струму через квантову точку; (iv) всі внески до функції Гріна можуть бути візуалізовані, таким чином пропонуючи інтерпретації спостережуваних спектральних особливостей з точки зору фізичних процесів; (v) метод коректно описує асиметрію спектральної ваги двох рівнів Хаббарда[64, 65]; (vi) метод може бути використаний для опису динаміки системи на великих часових інтервалах, на відміну від розбіжних числових методів[30]; (vii) досить простий у реалізації, не потребує значних обчислювальних ресурсів та може бути адаптований до великої різноманітності експериментально цікавих систем.

У даному розділі увага буде зосереджена на взаємовідношенні між величиною Кулонівського відштовхування та величиною магнітного поля. При цьому електрон-фононна взаємодія не приймається до уваги. Але варто відмітити, що фононний внесок у спектр потрібно було б включити перед порівнянням з експериментом. Типовими електрон-фононними внесками є бічні смуги та розширені резонанси в транспортних спектрах, які при цьому не вносять якісно нових ефектів у систему та не впливають на загальні властивості тунелювання між контактами та квантовою точкою.[36, 66]

## **1.2. Модельний гамільтоніан**

У даному розділі вивчається квантова точка, приєднана до двох металевих контактів. Схема установки показана на Рис. 1.4. Гамільтоніан систе-



**Рис. 1.4** Квантова точка (QD) з одноелектронним рівнем  $\epsilon_0$ , під'єднана до двох металевих контактів. Кулонівське відштовхування  $U$  і магнітне поле  $\mathbf{B}$  діють лише на електрони всередині квантової точки. Одноелектронна енергія  $\epsilon_0$ , енергія електронів у провідниках  $\epsilon_{k\alpha}$ , елементи тунельної матриці  $V_{k\alpha}$  та зовнішнє магнітне поле є параметрами системи та можуть залежати від часу.

ми електронів складається з трьох частин

$$H = H_{\text{leads}} + H_{\text{tun}} + H_{\text{dot}}, \quad (1.2)$$

перший з яких описує металеві контакти,

$$H_{\text{leads}} = \sum_{k\alpha\sigma} \epsilon_{k\alpha}(t) \mathbf{c}_{k\alpha\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{k\alpha\sigma}, \quad (1.3)$$

де  $\epsilon_{k\alpha}(t)$  залежні від часу рівні енергії в лівому ( $\alpha = L$ ) і правому ( $\alpha = R$ ) контактах.  $\mathbf{c}_{k\alpha\sigma}^\dagger$  і  $\mathbf{c}_{k\alpha\sigma}$  — оператори народження та знищення у представленні вторинного квантування для електронів зі спіном  $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\} \equiv \{+, -\}$  відносно напрямку квантування, заданого магнітним полем. Електрони на провідниках вважаються не взаємодіючими між собою та із магнітним полем.

Другий доданок,

$$H_{\text{tun}} = \sum_{k\alpha\sigma} \left[ V_{k\alpha}(t) \mathbf{c}_{k\alpha\sigma}^\dagger \mathbf{d}_\sigma + V_{k\alpha}^*(t) \mathbf{d}_\sigma^\dagger \mathbf{c}_{k\alpha\sigma} \right], \quad (1.4)$$

описує тунелювання між контактами та квантовою точкою.  $\mathbf{d}_\sigma^\pm$  - оператори народження та знищення у представленні вторинного квантування для електронів зі спіном  $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\} \equiv \{+, -\}$  у квантовій точці. Останній доданок описує квантову точку,

$$H_{\text{dot}} = \varepsilon_0(t) \sum_{\sigma} \mathbf{n}_\sigma + \mu_B B(t) [\mathbf{n}_\uparrow - \mathbf{n}_\downarrow] + U \mathbf{n}_\uparrow \mathbf{n}_\downarrow, \quad (1.5)$$

де  $\mathbf{n}_\sigma = \mathbf{d}_\sigma^\dagger \mathbf{d}_\sigma$  — оператор числа електронів у квантовій точці. Перші два доданки описують один залежний від часу енергетичний рівень  $\varepsilon_0(t)$  (одноелектронний рівень). Третій доданок описує взаємодію електронів із зовнішнім магнітним полем та відповідає за ефект Зеемана. Магнітне поле  $B(t)$  також є залежним від часу, а  $\mu = \mu_B [\mathbf{n}_\uparrow - \mathbf{n}_\downarrow]$  магнітний момент квантової точки.  $\mu_B$  — магнетон Бора, включаючи коефіцієнт Ланде. Останній член описує Кулонівське відштовхування  $U(> 0)$  між електронами у квантовій точці (двоелектронний рівень). Кулонівське відштовхування є співрозмірним або навіть перевищує  $\varepsilon_0$  — діапазон параметрів, що явно виходить за рамки теорії збурень.

Залежність від часу входить трьома незалежними способами: (i) через енергетичний рівень  $\varepsilon_0(t)$  квантової точки та/або магнітне поле  $B(t)$ ; (ii) через залежний від часу загальний зсув усіх енергетичних рівнів у кожному провіднику,  $\varepsilon_{k\alpha}(t) = \varepsilon_k^0 + \Delta_\alpha(t)$ ; (iii) через елементи матриці тунелювання, які наближено є добутком деякої функції, що залежить від часу, на матричні елементи без часової залежності, а саме  $V_{k\alpha}(t) = u_\alpha(t) V_{k\alpha}^0$ . Крім того, як і в [36], використано припущення, що елементи тунельної матриці залежать від  $k$  лише через енергії  $\varepsilon_k$ , а саме  $V_{k\alpha}^0 = V(\varepsilon_{k\alpha}^0)$ . Це припущення допускає подальші спрощення.

Експериментально часова залежність вищеописаних параметрів може бути реалізована шляхом прикладання залежної від часу напруги зміщення та напруги затвора, а також увімкнення зовнішнього магнітного поля.

### 1.3. Електронний транспорт через квантову точку

Цей розділ присвячений опису залежного від часу електронного транспорту через квантову точку на основі формалізму Келдиша [33] та відповідних нерівноважних функцій Гріна.

Далі буде використано позначення та загальні результати зі згаданої вище статті [36], в якій описано електронний транспорт через QD без кулонівської взаємодії. Струм, що тече від лівого контакту до точки, пов'язаний зі швидкістю зменшення електронів на лівому контакті [36]

$$J_L(t) = -e \left\langle \frac{d}{dt} N_L(t) \right\rangle = i \frac{e}{\hbar} \langle [N_L, H] \rangle, \quad (1.6)$$

де  $N_L = \sum_k \mathbf{c}_{kL}^\dagger \mathbf{c}_{kL}$  – загальна кількість електронів на лівому контакті. Треба зауважити, що усереднення відбувається по квантовим та тепловим станам. У другій частині попереднього рівняння було використано рівняння руху Гайзенберга для операторів

$$i\hbar \frac{\partial \mathbf{A}(t)}{\partial t} = [\mathbf{A}(t), H(t)] \quad (1.7)$$

У [36] було показано, що середні значення в рівнянні (1.6) можна виразити через нерівноважні функції Гріна квантової точки, а саме

$$J_L(t) = -2 \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \text{Im} \sum_{\sigma} \left\{ e^{-i\varepsilon(t_1-t)} \times \right. \\ \left. \times \Gamma^L(\varepsilon, t_1, t) [G_{\sigma\sigma}^<(t, t_1) + f_L(\varepsilon) G_{\sigma\sigma}^r(t, t_1)] \right\}, \quad (1.8)$$

де  $f_L(\varepsilon)$  – розподіл Фермі, а  $\Gamma^L(\varepsilon, t_1, t)$  – ширина бар'єру лівого контакту,

$$\Gamma^\alpha(\varepsilon, t_1, t) = 2\pi\rho(\varepsilon)u_\alpha(t)u_\alpha(t_1)V_\alpha(\varepsilon_\alpha(t))V_\alpha^*(\varepsilon_\alpha(t_1)) \times \exp\left[i\int_{t_1}^t dt_2\Delta_\alpha(t_2)\right], \quad (1.9)$$

для  $\alpha \in \{L, R\}$ .  $\Delta_\alpha(t)$  – залежний від часу зсув енергетичних рівнів провідника, а  $\rho(\varepsilon)$  – густина станів провідника, яка вважається однаковою для обох контактів  $\alpha = L, R$ .

Нарешті, в рівнянні (1.8) також було використано меншу кореляційну функцію та запізнювальну функцію Гріна квантової точки, які визначені наступним чином

$$G_{\sigma\sigma}^<(t, t') = +\frac{i}{\hbar} \left\langle \mathbf{d}_\sigma^\dagger(t') \mathbf{d}_\sigma(t) \right\rangle \quad (1.10)$$

та

$$G_{\sigma\sigma}^r(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') \left\langle \left\{ \mathbf{d}_\sigma(t), \mathbf{d}_\sigma^\dagger(t') \right\} \right\rangle = \square \text{ --- } \bullet, \quad (1.11)$$

де фігурні дужки означають антикомутатори для ферміонних функцій Гріна. У графічному зображенні в останньому рівнянні квадрат репрезентує провідний контакт, а горизонтальна лінія — енергетичний рівень квантової точки, який займає один  $\sigma$ -електрон, зображений у вигляді синього круга. Надалі приймаються одиниці  $\hbar = k_B = 1$ .

### 1.3.1. Запізнювальна функція Гріна

В даному розділі буде застосовано техніку рівнянь руху для запізнювальної одноелектронної функції Гріна квантової точки, визначеної в (1.11). Цей метод дає замкнену систему рівнянь і, отже, точну функцію Гріна для КТ без взаємодій. Однак, за наявності ненульового кулонівського доданку на точці,  $U\mathbf{n}_\uparrow\mathbf{n}_\downarrow$ , техніка рівнянь руху утворює нескінченний ланцюг функцій Гріна. Тому необхідно штучно обрізати цю ієрархію, щоб отримати замкнуту систему рівнянь. В даному розділі обрано схему розв'язку, подібну до наближення Хаббарда-I: на першому кроці даного

наближення лише  $\sigma$ -електронам (або діркам) дозволяється тунелювати, тоді як  $V_{k\alpha} = 0$  для протилежної проекції спіну електрона,  $\bar{\sigma}$ ; після цього симетрія між обома видами електронів відновлюється шляхом перемикання ролей  $\sigma$  і  $\bar{\sigma}$ . Таким чином, таке наближення точне для  $U = 0$  і при відсутньому тунелюванні,  $V_{k\alpha} = 0$  (також відоме як атомне наближення).

Додатково до функції Гріна квантової точки, введеної в рівнянні (1.11), дана схема використовує функції Гріна більш високого порядку, перша з яких описує  $\sigma$ -електрон після тунелювання до контакту, друга і третя  $\bar{\sigma}$ -флуктуацію на точці плюс, відповідно,  $\sigma$ -електрон на точці або на провіднику:

$$G_{k\alpha\sigma\sigma}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \left\langle \left\{ \mathbf{c}_{k\alpha\sigma}(t), \mathbf{d}_{\sigma}^{\dagger}(t') \right\} \right\rangle = \boxed{\bullet} \text{ — ,} \quad (1.12)$$

$$G_{\sigma\sigma,U}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \left\langle \left\{ \mathbf{d}_{\sigma}(t) \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(t) \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}(t), \mathbf{d}_{\sigma}^{\dagger}(t') \right\} \right\rangle = \boxed{\bullet\bullet\circ} \text{ , and} \quad (1.13)$$

$$G_{k\alpha\sigma\sigma,U}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \left\langle \left\{ \mathbf{c}_{k\alpha\sigma}(t) \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(t) \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}(t), \mathbf{d}_{\sigma}^{\dagger}(t') \right\} \right\rangle = \boxed{\bullet} \text{ — } \bullet\circ \text{ .} \quad (1.14)$$

Знову ж таки, на графічних ілюстраціях обидва контакти зображені як єдиний квадрат, точка — горизонтальною лінією, електрони й дірки — кругами та порожніми колами, а напрямки проекції спіну  $\sigma$  і  $\bar{\sigma}$  — синім і червоним кольорами, що відображаються як чорний і сірий для чорно-білого варіанту друку відповідно. Далі всі рівняння руху отримані з лівих частин функцій Гріна відносно часу  $t$ . Таким чином, праві частини функцій Гріна, що містять оператори в момент  $t'$ , ніколи не змінюються, і їх буде опущено на діаграмах.

Почнемо з рівняння руху для функції Гріна (1.11),

$$\left[ i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_0(t) - \mu_B B \sigma \right] G_{\sigma\sigma}^r(t, t') = \delta(t - t') + \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(t) G_{k\alpha\sigma\sigma}^r(t, t') + U G_{\sigma\sigma, U}^r(t, t'), \quad (1.15a)$$

або графічно

$$\square \text{---} \bullet \Rightarrow V \times \square \text{---} \bullet + U \times \square \text{---} \bullet \circ. \quad (1.15b)$$

Застосувавши аналогічну процедуру до першої з вищих функцій Гріна,  $G_{k\alpha\sigma\sigma}^r(t, t')$ , отримаємо початкову функцію Гріна:

$$\left[ i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_{k\alpha}(t) \right] G_{k\alpha\sigma\sigma}^r(t, t') = V_{k\alpha}(t) G_{\sigma\sigma}^r(t, t') \quad (1.16a)$$

$$\square \text{---} \bullet \Rightarrow V \times \square \text{---} \bullet. \quad (1.16b)$$

Динаміка іншої функції Гріна другого порядку у рівнянні 1.15,  $G_{\sigma\sigma, U}^r(t, t')$ , є складнішою, оскільки електрони та дірки обох спінових проекцій можуть тунелювати до точки,

$$\begin{aligned} \left[ i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_0(t) - U - \mu_B B \sigma \right] G_{\sigma\sigma, U}^r(t, t') = & \\ & \delta(t - t') n_{\bar{\sigma}}(t) + \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(t) G_{k\alpha\sigma\sigma, U}^r(t, t') \\ & - i\theta(t - t') \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}(t) \left\langle \left\{ \mathbf{c}_{k\alpha\bar{\sigma}}^\dagger(t) \mathbf{d}_\sigma(t) \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}(t), \mathbf{d}_\sigma^\dagger(t') \right\} \right\rangle \\ & - i\theta(t - t') \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(t) \left\langle \left\{ \mathbf{c}_{k\alpha\bar{\sigma}}(t) \mathbf{d}_\sigma(t) \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}^\dagger(t), \mathbf{d}_\sigma^\dagger(t') \right\} \right\rangle, \quad (1.17a) \end{aligned}$$

де введено позначення  $n_{\bar{\sigma}}(t) \equiv \langle \mathbf{n}_{\bar{\sigma}}(t) \rangle$ . Графічно це можна проілюструвати наступним чином

$$\square \text{---} \bullet \circ \Rightarrow V \times \square \text{---} \bullet \circ + V \times \square \text{---} \circ \bullet + V \times \square \text{---} \bullet \circ. \quad (1.17b)$$

Щоб отримати замкнену систему рівнянь, необхідно знехтувати двома останніми функціями Гріна, які введені в останньому рівнянні. Фізична мотивація такого наближення наступна: (i) для великого  $U$ , яке нас цікавить, система буде прагнути уникати подвійного заселення точки, а отже, пригнічувати амплітуду ймовірності, що містять  $\mathbf{d}_\sigma \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}$  доданки у другій функції Гріна правої частини рівняння (1.17); (ii) досить велике магнітне поле фіксує бажаний напрямок проекції спіну, а, отже, пригнічує внески перевероту спіну, за які відповідає оператор  $\mathbf{d}_\sigma \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}^\dagger$ , що входить у останню функцію Гріна у правій стороні (1.17). Тому у розглянутому наближенні виживає лише домінуюча перша функція Гріна в (1.17),  $G_{k\alpha\sigma\sigma,U}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \left\langle \left\{ \mathbf{c}_{k\alpha\sigma}(t) \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}^\dagger(t) \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}(t), \mathbf{d}_\sigma^\dagger(t') \right\} \right\rangle$ , яка описує звичайну динаміку  $\sigma$ -електронів, хоча й за наявності флуктуацій  $\bar{\sigma}$ -електронів на точці.

Відповідно до стандартної схеми наближення Хаббарда-I [60], функцію Гріна  $G_{k\alpha\sigma\sigma,U}^r(t, t')$  можна було б факторизувати наступним чином  $\left\langle \left\{ \mathbf{c}_{k\alpha\sigma}(t) \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}^\dagger(t) \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}(t), \mathbf{d}_\sigma^\dagger(t') \right\} \right\rangle \simeq n_{\bar{\sigma}}(t) \left\langle \left\{ \mathbf{c}_{k\alpha\sigma}(t), \mathbf{d}_\sigma^\dagger(t') \right\} \right\rangle$ . Однак у даній роботі буде використано більш точну схему розв'язку, яка, хоча і схожа на схему Хаббард-I, але описує динаміку більш точно. Запишемо ще одне рівняння руху:

$$\begin{aligned} \left[ i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_{k\alpha}(t) \right] G_{k\alpha\sigma\sigma,U}^r(t, t') &= V_{k\alpha}(t) G_{\sigma\sigma,U}^r \\ &+ i\theta(t - t') \sum_{k'\alpha'} V_{k'\alpha'}(t) \left\langle \left\{ \mathbf{c}_{k\alpha\sigma}(t) \mathbf{c}_{k'\alpha'\bar{\sigma}}^\dagger(t) \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}(t), \mathbf{d}_\sigma^\dagger(t') \right\} \right\rangle \\ &- i\theta(t - t') \sum_{k'\alpha'} V_{k'\alpha'}^*(t) \left\langle \left\{ \mathbf{c}_{k\alpha\sigma}(t) \mathbf{d}_{\bar{\sigma}}^\dagger(t) \mathbf{c}_{k'\alpha'\bar{\sigma}}(t), \mathbf{d}_\sigma^\dagger(t') \right\} \right\rangle \quad (1.18a) \end{aligned}$$

або

$$\boxed{\bullet} \text{---}\circ \Rightarrow V \times \boxed{\phantom{\bullet}} \text{---}\circ + V \times \boxed{\bullet\circ} \text{---}\bullet + V \times \boxed{\bullet\bullet} \text{---}\circ. \quad (1.18b)$$

Аналогічно до того як було зроблено раніше та подібно до того, що було використано Андерсоном [32], збережено лише динаміку (синього)  $\sigma$ -електрона, що означає нехтування другим і третім внеском у правій частині 1.18. З цими наближеннями система диференціальних рівнянь (1.15) – (1.18) тепер є замкненою.

Введемо ”вільні” функції Гріна нульового тунелювання або, еквівалентно, атомного наближення для квантової точки і кожного провідника,

$$g_{0(U),B}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \exp \left[ -i \int_{t'}^t dt_1 \varepsilon_{0(U)}(t_1) - i \int_{t'}^t dt_1 \mu_B B \sigma \right] \quad (1.19)$$

$$g_{k\alpha}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \exp \left[ -i \int_{t'}^t dt_1 \varepsilon_{k\alpha}(t_1) \right], \quad (1.20)$$

де введено позначення  $\varepsilon_U \equiv \varepsilon_0 + U$  для двоелектронної енергії, тобто коли на точці одночасно знаходиться два електрона. Тепер рівняння руху можна переписати у вигляді замкненої системи інтегральних рівнянь:

$$G_{\sigma\sigma}^r(t, t') = g_{0,B}^r(t, t') + \int_{t'}^t dt_1 g_{0,B}^r(t, t_1) \times \\ \times \left[ \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(t_1) G_{k\alpha\sigma\sigma}^r(t_1, t') + U G_{\sigma\sigma,U}^r(t_1, t') \right] \quad (1.21)$$

$$G_{k\alpha\sigma\sigma}^r(t, t') = \int_{t'}^t dt_1 g_{k\alpha}^r(t, t_1) V_{k\alpha}(t_1) G_{\sigma\sigma}^r(t_1, t') \quad (1.22)$$

$$G_{\sigma\sigma,U}^r(t, t') = g_{U,B}^r(t, t') n_{\bar{\sigma}}(t') + \int_{t'}^t dt_1 g_{U,B}^r(t, t_1) \times \\ \times \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(t_1) G_{k\alpha\sigma\sigma,U}^r(t_1, t') \quad (1.23)$$

$$G_{k\alpha\sigma\sigma,U}^r(t, t') = \int_{t'}^t dt_1 g_{k\alpha}^r(t, t_1) V_{k\alpha}(t_1) G_{\sigma\sigma,U}^r(t_1, t'). \quad (1.24)$$

Рівняння Дайсона (1.21)–(1.24) є основним результатом цього розділу, який може бути використаний з деякими незначними спрощеннями. По-перше, немає кореляцій на провідниках, і відповідні ступені вільності можуть бути інтегровані. Підставляючи відповідно (1.22) у (1.21) та (1.24) у (1.23), отримуємо

$$G_{\sigma\sigma}^r(t, t') = g_{0,B}^r(t, t') + \int dt_1 dt_2 g_{0,B}^r(t, t_1) \Sigma^r(t_1, t_2) G_{\sigma\sigma}^r(t_2, t') + U \int dt_1 g_{0,B}^r(t, t_1) G_{\sigma\sigma,U}^r(t_1, t') , \quad (1.25)$$

$$G_{\sigma\sigma,U}^r(t, t') = g_{U,B}^r(t, t') n_{\bar{\sigma}}(t') + \int dt_1 dt_2 g_{U,B}^r(t, t_1) \Sigma^r(t_1, t_2) G_{\sigma\sigma,U}^r(t_2, t') , \quad (1.26)$$

де  $\Sigma^r(t, t_1)$  запізнювальна власна енергія тунелювання або гібридизації

$$\begin{aligned} \Sigma^r(t, t') &= \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(t) g_{k\alpha}^r(t, t') V_{k\alpha}(t') = \\ &= -i \theta(t - t') \sum_{\alpha} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-i\varepsilon(t-t')} \Gamma^{\alpha}(\varepsilon, t, t') . \end{aligned} \quad (1.27)$$

По-друге, система інтегральних рівнянь (1.25) та (1.26) може бути розділена: для цього подіємо оберненим оператором атомного наближення  $\mathbf{g}_{0(U),B}^{-1} = [i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_{0(U)}(t) - \mu_B B \sigma]$  зліва і, помітивши, що  $\mathbf{g}_{U,B}^{-1} = \mathbf{g}_{0,B}^{-1} - U$ , отримаємо

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{0,B}^{-1} G_{\sigma\sigma}^r(t, t') &= \delta(t - t') + \\ &+ \int dt_1 \Sigma^r(t, t_1) G_{\sigma\sigma}^r(t_1, t') + U G_{\sigma\sigma,U}^r(t, t') \end{aligned} \quad (1.28)$$

та

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{0,B}^{-1} G_{\sigma\sigma,U}^r(t, t') = & \delta(t - t') n_{\bar{\sigma}}(t) + \\ & + \int dt_1 \Sigma^r(t, t_1) G_{\sigma\sigma,U}^r(t_1, t') + U G_{\sigma\sigma,U}^r(t, t') . \end{aligned} \quad (1.29)$$

Віднявши (1.29) від (1.28) можна отримати два незалежних рівняння Дайсона, а саме (1.26) і

$$\begin{aligned} G_{\sigma\sigma,0}^r(t, t') = & g_{0,B}^r(t, t') [1 - n_{\bar{\sigma}}(t')] + \\ & + \int dt_1 dt_2 g_{0,B}^r(t, t_1) \Sigma^r(t_1, t_2) G_{\sigma\sigma,0}^r(t_2, t') , \end{aligned} \quad (1.30)$$

де  $G_{\sigma\sigma,0}$  – нова допоміжна функція Гріна, визначена як

$$G_{\sigma\sigma,0}^r(t, t') = G_{\sigma\sigma}^r(t, t') - G_{\sigma\sigma,U}^r(t, t') . \quad (1.31)$$

І, по-третє, можна ввести скорочене позначення,

$$\tilde{G}_{\sigma\sigma,0}^r(t, t') = \frac{G_{\sigma\sigma,0}^r(t, t')}{1 - n_{\bar{\sigma}}(t')} \quad (1.32a)$$

та

$$\tilde{G}_{\sigma\sigma,U}^r(t, t') = \frac{G_{\sigma\sigma,U}^r(t, t')}{n_{\bar{\sigma}}(t')} , \quad (1.32b)$$

яке дозволяє позбавити ”вільні” функції Гріна в рівняннях (1.26) та (1.30) від множників  $n_{\bar{\sigma}}$  і  $(1 - n_{\bar{\sigma}})$ .

Таким чином остаточно маємо

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\sigma\sigma,0}^r(t, t') = & g_{0,B}^r(t, t') + \\ & + \int dt_1 dt_2 g_{0,B}^r(t, t_1) \Sigma^r(t_1, t_2) \tilde{G}_{\sigma\sigma,0}^r(t_2, t') \end{aligned} \quad (1.33a)$$

та

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\sigma\sigma,U}^r(t,t') = g_{U,B}^r(t,t') + \\ + \int dt_1 dt_2 g_{U,B}^r(t,t_1) \Sigma^r(t_1,t_2) \tilde{G}_{\sigma\sigma,U}^r(t_2,t') . \end{aligned} \quad (1.33b)$$

Система 1.33 без магнітного поля та пов'язаного з ним ефектом Зеемана  $\mu_B B(t)\sigma$ , присутнього у “вільних” функціях Гріна  $g_{0,B}^r$  та  $g_{U,B}^r$ , і “Кулонівського зсуву”  $\varepsilon_0(t) \rightarrow \varepsilon_U \equiv \varepsilon_0(t) + U$ , що входить лише в останню функцію, узгоджується з рівнянням Дайсона для QD без кулонівської взаємодії.[36]

### 1.3.2. Аналітичне продовження і “менша” кореляційна функція

Для того, щоб узагальнити отримані рівняння Дайсона для випадку нерівноважного транспорту, використаємо теорему Лангрета [67, 68]. За її допомогою можна отримати вираз для меншої кореляційної функції Гріна,

$$\begin{aligned} G^< &= [1 + G^r \Sigma^r] G_0^< [1 + \Sigma^a G^a] + G^r \Sigma^< G^a = \\ &= G^r \Sigma^< G^a , \end{aligned} \quad (1.34)$$

у якому часові згортки опущені. У правій частині першого рядку перший доданок зникає[69]: у рівнянні Дайсона для запізнювальної функції Гріна,  $G^r = [1 + G^r \Sigma^r] G_0^r$ , член у дужках дорівнює  $G^r [G_0]^{-1}$ , де обернені вільні функції Гріна можна розглядати як оператор, що дає  $\delta(\tau - \tau')$  при його дії на впорядковану на контурі вільну функція Гріна  $G_0$ . Для  $\tau$  на верхній і  $\tau'$  на нижній гілці контуру Келдиша маємо  $G_0 = G_0^<$ , отже,  $[G_0]^{-1} G_0^< = 0$ .

Тепер рівняння Келдиша (1.34) набуває вигляду

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{\sigma\sigma,0(U)}^<(t,t') &= \\ &= \int dt_1 dt_2 \tilde{G}_{\sigma\sigma,0(U)}^r(t,t_1) \Sigma^<(t_1,t_2) \tilde{G}_{\sigma\sigma,0(U)}^a(t_2,t') ,\end{aligned}\quad (1.35)$$

де  $\Sigma^<(t,t')$  менша власна енергія

$$\begin{aligned}\Sigma^<(t,t') &= \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^*(t) g_{k\alpha}^<(t,t') V_{k\alpha}(t') = \\ &= i \sum_{\alpha} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} f_{\alpha}(\omega) \Gamma^{\alpha}(\omega,t,t') .\end{aligned}\quad (1.36)$$

Випереджаючу функцію Гріна можна отримати за допомогою комплексного спряження:

$$\tilde{G}_{\sigma\sigma,0(U)}^a(t,t') = \left[ \tilde{G}_{\sigma\sigma,0(U)}^r(t',t) \right]^* . \quad (1.37)$$

Остаточно можна записати загальний вираз для функції Гріна на квантовій точці у наступному вигляді

$$G_{\sigma\sigma}^x(t,t') = \tilde{G}_{\sigma\sigma,0}^x(t,t') [1 - n_{\bar{\sigma}}(t')] + \tilde{G}_{\sigma\sigma,U}^x(t,t') n_{\bar{\sigma}}(t') , \quad (1.38)$$

де  $x$  це  $r, a, <$  або  $>$ . Нарешті, залежну від часу заселеність точки  $n_{\sigma}(t)$  можна отримати наступним шляхом

$$n_{\sigma}(t) = \text{Im } G_{\sigma\sigma}^<(t,t) . \quad (1.39)$$

## 1.4. Стаціонарний струм

У цьому розділі наведені вище результати буде застосовано для окремого випадку незалежного від часу струму через квантову точку. Більш загальний випадок нестационарного та залежного від часу струму буде розглянуто в наступному розділі.

Стаціонарний струм протікає через таку систему у випадку, коли до контактів прикладається постійна напруга, а також коли висота бар'єрів та магнітне поле також незалежні від часу. Без явної залежності від часу, коли  $\frac{\partial}{\partial t} V_{k\alpha}(t) = \frac{\partial}{\partial t} \varepsilon_{k\alpha}(t) = \frac{\partial}{\partial t} \Delta_{\alpha}(t) = \frac{\partial}{\partial t} B(t) = 0$ , усі функції Гріна залежать лише від різниці часових змінних  $t - t'$ , і рівняння Дайсона (1.33) може бути розв'язане аналітично за допомогою перетворення Фур'є,  $t - t' \rightarrow \omega$ .

Вільна запізнювальна (випереджаюча) функція Гріна контактів визначається як

$$g_{k\alpha}^{r(a)}(\omega) = \frac{1}{\omega \pm \varepsilon_{k\alpha} \pm i0^+} \quad (1.40)$$

де  $\pm i0^+$  переводить граничні умови в область Фур'є. Запізнювальна, випереджаюча та менша власна енергія, введені в рівнянні (1.27), таким чином, набувають вигляду

$$\begin{aligned} \Sigma^{r(a)}(\omega) &= \sum_{k\alpha} |V_{k\alpha}|^2 g_{k\alpha}^{r(a)}(\omega) = \\ &= [\Lambda^L(\omega) + \Lambda^R(\omega)] \mp \frac{i}{2} [\Gamma^L(\omega) + \Gamma^R(\omega)] = \\ &= \Lambda(\omega) \mp \frac{i}{2} \Gamma(\omega) \end{aligned} \quad (1.41a)$$

та

$$\begin{aligned} \Sigma^<(\omega) &= \sum_{k\alpha} |V_{k\alpha}|^2 g_{k\alpha}^<(\omega) = \\ &= i [\Gamma^L(\omega) f_L(\omega) + \Gamma^R(\omega) f_R(\omega)] . \end{aligned} \quad (1.41b)$$

Рівняння Дайсона (1.33) для допоміжних функцій Гріна тепер є алгебраїчними,

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\sigma\sigma,0(U)}^{r(a)}(\omega) &= g_{0(U),B}^{r(a)}(\omega) + \\ &+ g_{0(U),B}^{r(a)}(\omega) \Sigma^{r(a)}(\omega) \tilde{G}_{\sigma\sigma,0(U)}^{r(a)}(\omega), \end{aligned} \quad (1.42)$$

і, таким чином, легко розв'язуються,

$$\tilde{G}_{\sigma\sigma,0(U)}^{r(a)}(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{0(U)} - \mu_B B\sigma - \Lambda(\omega) \pm \frac{i}{2}\Gamma(\omega)}. \quad (1.43)$$

За допомогою рівняння (1.38) можна відновити початкову функцію Гріна квантової точки,

$$G_{\sigma\sigma}^{r(a)}(\omega) = \frac{1 - n_{\bar{\sigma}}}{\omega - \varepsilon_0 - \mu_B B\sigma - \Lambda(\omega) \pm \frac{i}{2}\Gamma(\omega)} + \frac{n_{\bar{\sigma}}}{\omega - \varepsilon_U - \mu_B B\sigma - \Lambda(\omega) \pm \frac{i}{2}\Gamma(\omega)}. \quad (1.44)$$

Відповідна спектральна функція

$$A_{\sigma}(\omega) = i [G_{\sigma\sigma}^r(\omega) - G_{\sigma\sigma}^a(\omega)] = \quad (1.45)$$

$$= \Gamma(\omega) \left[ \frac{1 - n_{\bar{\sigma}}}{[\omega - \varepsilon_0 - \mu_B B\sigma - \Lambda(\omega)]^2 + \left[\frac{1}{2}\Gamma(\omega)\right]^2} + \frac{n_{\bar{\sigma}}}{[\omega - \varepsilon_U - \mu_B B\sigma - \Lambda(\omega)]^2 + \left[\frac{1}{2}\Gamma(\omega)\right]^2} \right] \quad (1.46)$$

дає можливість переписати рівняння для меншої функції Гріна квантової точки наступним чином

$$G_{\sigma\sigma}^<(\omega) = i A_{\sigma}(\omega) \frac{[\Gamma^L(\omega)f_L(\omega) + \Gamma^R(\omega)f_R(\omega)]}{\Gamma(\omega)}, \quad (1.47)$$

і рівняння (1.39) для заселеності квантової точки як

$$n_{\sigma} = \int \frac{d\omega}{2\pi} A_{\sigma}(\omega) \frac{[\Gamma^L(\omega)f_L(\omega) + \Gamma^R(\omega)f_R(\omega)]}{\Gamma(\omega)}. \quad (1.48)$$

У стаціонарному випадку самоузгоджений розв'язок останнього рівняння може бути отриманий аналітично у вигляді

$$n_{\sigma} = \frac{n_{\sigma}^0 - n_{\sigma}^0(n_{\sigma}^0 - n_{\sigma}^U)}{1 - (n_{\sigma}^0 - n_{\sigma}^U)(n_{\sigma}^0 - n_{\sigma}^U)} , \quad (1.49)$$

де

$$n_{\sigma}^{0(U)} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\Gamma^L(\omega)f_L(\omega) + \Gamma^R(\omega)f_R(\omega)}{[\omega - \varepsilon_{0(U)} - \mu_B B\sigma - \Lambda(\omega)]^2 + \left[\frac{1}{2}\Gamma(\omega)\right]^2} . \quad (1.50)$$

Остаточно, явна залежність струму від часу в рівнянні (1.8) зникає після інтегрування по змінній  $t_1$  (див. [36]), і вираз набуває вигляду

$$\begin{aligned} J_{L(R)} &= -\frac{e}{\hbar} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \sum_{\sigma} \Gamma^{L(R)}(\varepsilon) \times \\ &\quad \times \left[ G_{\sigma\sigma}^<(\varepsilon) + f_{L(R)}(\varepsilon) [G_{\sigma\sigma}^r(\varepsilon) - G_{\sigma\sigma}^a(\varepsilon)] \right] = \\ &= -\frac{e}{\hbar} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \sum_{\sigma} \frac{\Gamma^L(\varepsilon)\Gamma^R(\varepsilon)}{\Gamma(\varepsilon)} \times \\ &\quad \times [f_{R(L)}(\varepsilon) - f_{L(R)}(\varepsilon)] A_{\sigma}(\varepsilon) . \end{aligned} \quad (1.51)$$

Варто зауважити, що результати приведені в цьому розділі є точними у наближенні без взаємодії (коли  $U \rightarrow 0$ ), а також у атомному наближенні (коли  $V_{k\alpha} \rightarrow 0$ ) для будь-якого значення магнітного поле  $B$ .

## 1.5. Нерівноважний струм

У цьому розділі буде розглянуто залежний від часу струм через КТ. Для металевих контактів, як правило, можна з упевненістю припустити, що деталі зонної структури не мають великого значення, і що обидва провідника характеризуються постійною та нескінченно широкою густиною станів, іншими словами  $\rho(\varepsilon) = \text{const}$  – наближення,

яке зазвичай називають наближенням "широкої зони".<sup>1</sup> Подальші спрощення виникають, якщо припустити, що коефіцієнти тунелювання між точкою та контактами однакові для всіх станів провідників, тобто незалежні від  $k$ . Тоді коефіцієнти матриці тунелювання можуть бути записані як  $V_{k\alpha}(t) = u_{\alpha}(t)V_{\alpha}$ , при чому залежність від часу міститься виключно у функції  $u_{\alpha}(t)$ , яка може бути різною для різних контактів.

З цими наближеннями ширина бар'єру (1.9) стає незалежною від  $\epsilon$ ,

$$\Gamma^{\alpha}(t_1, t) = 2\pi\rho u_{\alpha}(t)u_{\alpha}(t_1)|V_{\alpha}|^2 \exp \left[ i \int_{t_1}^t dt_2 \Delta_{\alpha}(t_2) \right]. \quad (1.52)$$

Використовуючи цей факт можна виконати перетворення Фур'є в (1.27), яке стає тривіальним, та отримати вираз для власної енергії,

$$\Sigma^r(t, t') = -\frac{i}{2} \Gamma(t) \delta(t - t'), \quad (1.53)$$

де  $\Gamma(t) = \sum_{\alpha} \Gamma^{\alpha}(t, t) = 2\pi\rho \sum_{\alpha} u_{\alpha}^2(t)|V_{\alpha}|^2$ . Крім того позначимо  $\Gamma^{\alpha} = 2\pi\rho |V_{\alpha}|^2$ , і надалі будемо використовувати позначення  $\Gamma(t) = \sum_{\alpha} \Gamma^{\alpha} u_{\alpha}^2(t)$ .

$\delta$ -функція в  $\Sigma^r$  дозволяє виконати одне з двох інтегрувань по часу у рівнянні Дайсона (1.33) для допоміжних функцій Гріна,

$$\tilde{G}_{\sigma\sigma,0(U)}^r(t, t') = g_{0(U),B}^r(t, t') - \frac{i}{2} \int dt_1 g_{0(U),B}^r(t, t_1) \Gamma(t_1) \tilde{G}_{\sigma\sigma,0(U)}^r(t_1, t'). \quad (1.54)$$

Розв'язком останнього рівняння є "вільні" функції Гріна, домножені на затухаючу експоненту, що фізично означає скінченність часу тунелюва-

---

<sup>1</sup>У іншому випадку надзвичайно вузьких зон густини станів очікується, що провідність буде характеризуватись наявністю додаткових піків та бічних смуг[70–72]

ння електрона,

$$\tilde{G}_{\sigma\sigma,0(U)}^r(t,t') = g_{0(U),B}^r(t,t') \exp \left[ -\frac{1}{2} \int_{t'}^t \Gamma(t_1) dt_1 \right]. \quad (1.55)$$

Використавши (1.38), отримаємо вихідну функцію Гріна квантової точки у вигляді

$$G_{\sigma\sigma}^r(t,t') = \left[ g_{0,B}^r(t,t') [1 - n_{\bar{\sigma}}(t')] + g_{U,B}^r(t,t') n_{\bar{\sigma}}(t') \right] \times \\ \times \exp \left[ -\frac{1}{2} \int_{t'}^t \Gamma(t_1) dt_1 \right]. \quad (1.56)$$

Як вже було показано вище, заселеність квантової точки може бути отримана з уявної частини меншої функції Гріна при однакових часових змінних (див. eq. (1.39)), у результаті чого

$$n_{\sigma}(t) = \sum_{\alpha} \Gamma^{\alpha} \int \frac{d\omega}{2\pi} f_{\alpha}(\omega) \times \\ \times \left[ [1 - n_{\bar{\sigma}}(t)] |A_{\alpha,\sigma}^0(\omega, t)|^2 + n_{\bar{\sigma}}(t) |A_{\alpha,\sigma}^U(\omega, t)|^2 \right] \quad (1.57)$$

де

$$A_{\alpha,\sigma}^{0(U)}(\omega, t) = \int_{-\infty}^t dt_1 u_{\alpha}(t_1) \tilde{G}_{\sigma\sigma,0(U)}^r(t, t_1) \times \\ \times \exp \left[ i\omega(t - t_1) + i \int_{t_1}^t dt_2 \Delta_{\alpha}(t_2) \right] \quad (1.58)$$

позначає відповідну спектральну функцію.

Вираз (1.57) визначає систему лінійних рівнянь відносно  $n_{\sigma}$  і  $n_{\bar{\sigma}}$ , яка, вводячи скорочення

$$n_{\sigma}^{0(U)}(t) = \sum_{\alpha} \Gamma^{\alpha} \int \frac{d\omega}{2\pi} f_{\alpha}(\omega) |A_{\alpha,\sigma}^{0(U)}(\omega, t)|^2, \quad (1.59)$$

може бути записана у вигляді

$$n_{\sigma}(t) = [1 - n_{\bar{\sigma}}(t)] n_{\sigma}^0(t) + n_{\bar{\sigma}}(t) n_{\sigma}^U(t) . \quad (1.60)$$

Її розв'язок аналогічний розв'язку для стаціонарного випадку, eq. (1.49), але тепер із залежними від часу  $n_{\sigma}^0$  і  $n_{\sigma}^U$ .

Позначивши

$$B_{\alpha,\sigma}^0(\omega, t) = \int_{-\infty}^t dt_1 [1 - n_{\bar{\sigma}}(t_1)] u_{\alpha}(t_1) \tilde{G}_{\sigma\sigma,0}^r(t, t_1) \times \\ \times \exp \left[ i\omega(t - t_1) + i \int_{t_1}^t dt_2 \Delta_{\alpha}(t_2) \right] , \quad (1.61a)$$

$$B_{\alpha,\sigma}^U(\omega, t) = \int_{-\infty}^t dt_1 n_{\bar{\sigma}}(t_1) u_{\alpha}(t_1) \tilde{G}_{\sigma\sigma,U}^r(t, t_1) \times \\ \times \exp \left[ i\omega(t - t_1) + i \int_{t_1}^t dt_2 \Delta_{\alpha}(t_2) \right] , \quad (1.61b)$$

струм між контактами та квантовою точкою, заданий виразом (1.8), може бути записаний у наближенні широкої зони як

$$J_{\alpha}(t) = -\frac{e}{\hbar} \Gamma^{\alpha} u_{\alpha}^2(t) \sum_{\sigma} \left[ n_{\sigma}(t) + \right. \\ \left. + \int \frac{d\omega}{\pi} f_{\alpha}(\omega) \text{Im} [B_{\alpha,\sigma}^0(\omega, t) + B_{\alpha,\sigma}^U(\omega, t)] \right] . \quad (1.62)$$

Доданок в першому рядку описує струм, що тече від точки до контакту та отримується з меншої функції Гріна (обидва інтегрування в (1.8) можуть бути проведені завдяки тому, що бар'єрні функції не залежать від енергії). Цей доданок пропорційний заселеності точки. Другий рядок у (1.62) є результатом інтегрування запізнювальної функції Гріна в (1.8) і представляє собою струм у зворотному напрямку: член, що включає  $B_{\alpha,\sigma}^0$  представляє тунелювання від контакту  $\alpha$  до порожньої точки, а член із  $B_{\alpha,\sigma}^U$  до точки, яка вже зайнята електроном  $\bar{\sigma}$ .

## 1.6. Чисельні результати

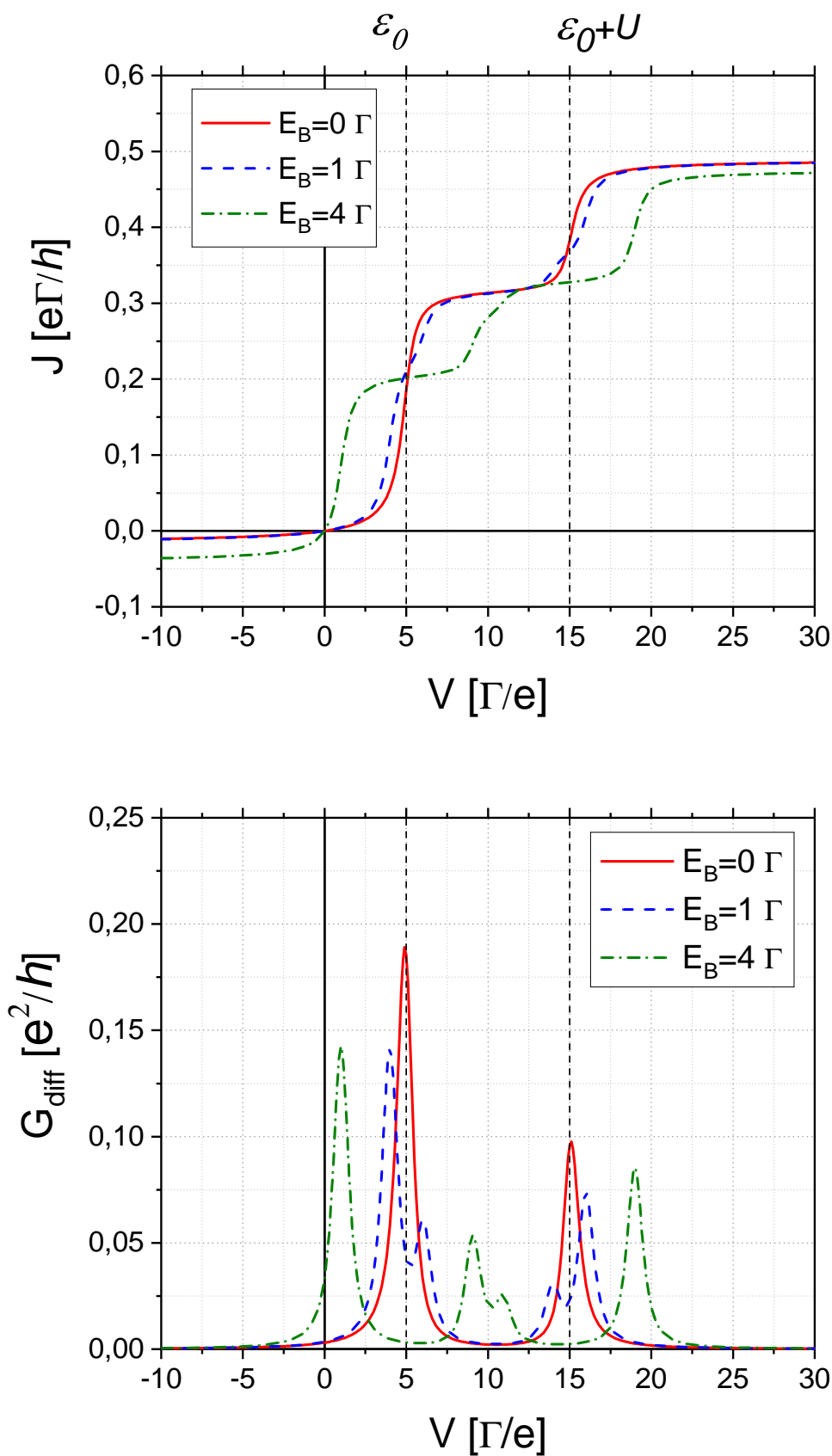
У попередніх двох розділах було отримано вирази для струму  $J_\alpha$ , що протікає від провідних контактів до квантової точки для стаціонарного випадку, вираз (1.51), і залежний від часу струм у рамках наближення широкої зони, вираз (1.62). В обох випадках заселеність точки задається аналітичним виразом (1.49). Таким чином рівняння для струмів  $J_\alpha$  в результаті залежать лише від інтегралів від відомих функцій та є самоузгодженими.

Даний розділ присвячено схемі чисельного розрахунку струмів  $J_\alpha$ , у випадку коли провідні контакти характеризуються постійною та нескінченно широкою густиною станів, і коли кожен стан контакту має однакову ймовірність тунелювання до точки. У цьому випадку власна енергія (1.53) буде мати вигляд  $\Sigma^r(t, t') = -\frac{i}{2} \sum_\alpha \Gamma^\alpha \delta(t - t')$  з константою  $\Gamma^\alpha$ , для якої можна застосувати перетворення Фур'є

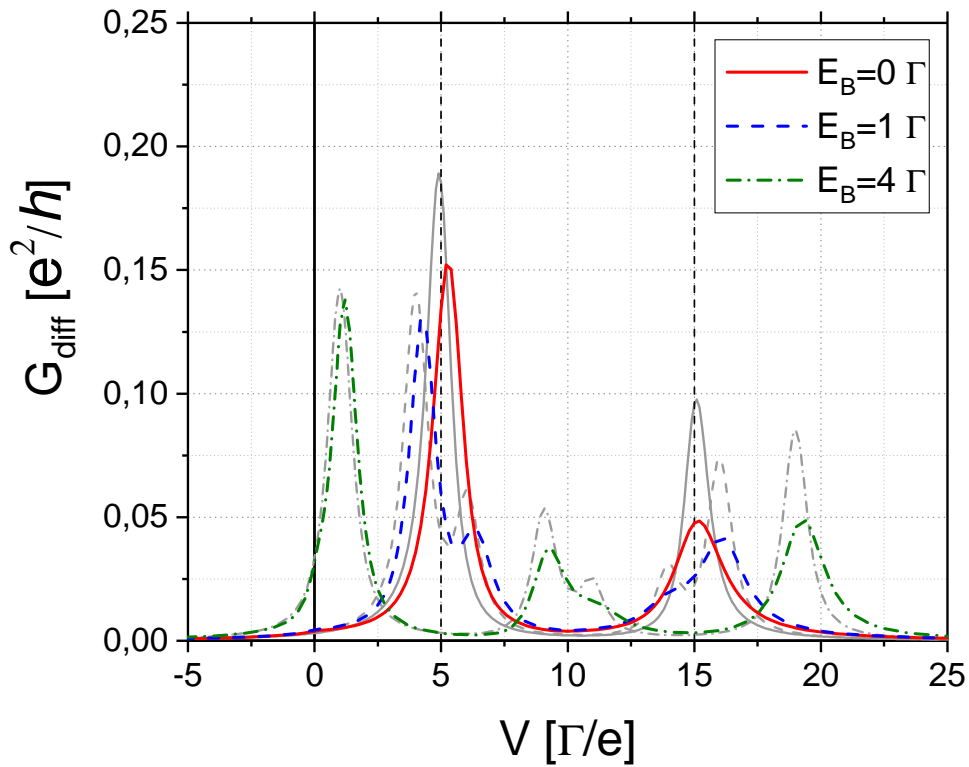
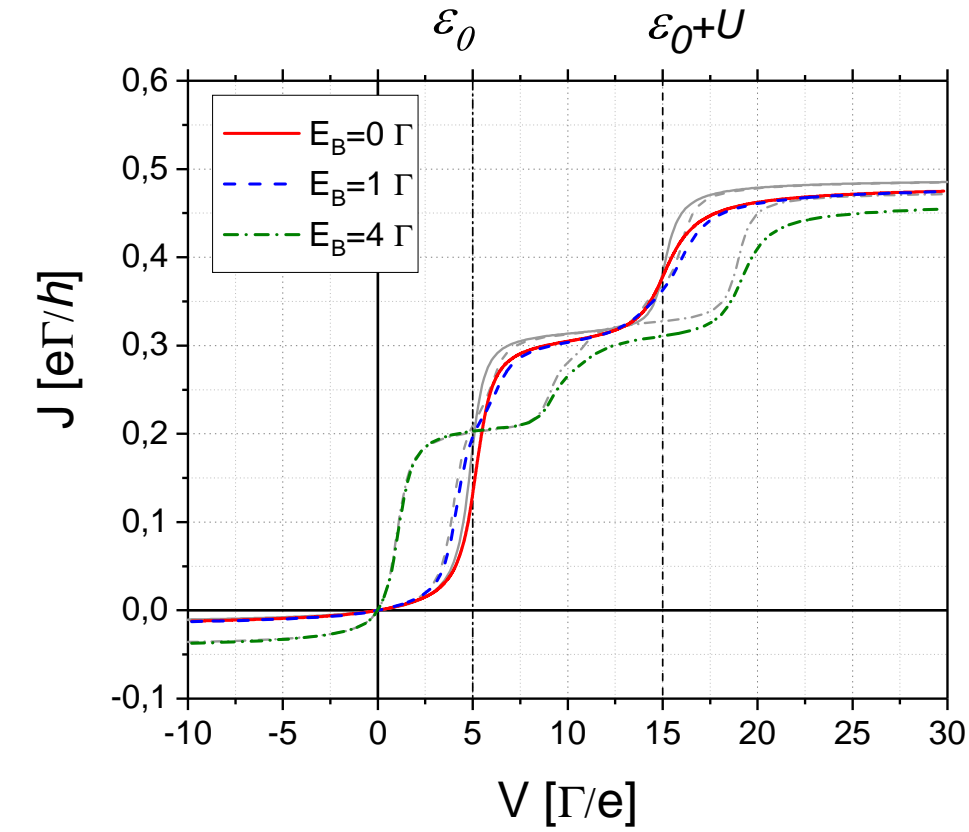
$$\Lambda^\alpha(\omega) \equiv 0 \quad \text{and} \quad \Gamma^\alpha(\omega) \equiv \Gamma^\alpha. \quad (1.63)$$

Введемо позначення  $\Gamma = \sum_\alpha \Gamma^\alpha$ . Надалі всі величини будуть розраховані у одиницях  $\Gamma$ , тобто такий комбінований коефіцієнт тунелювання є новою одиницею виміру енергії.

У першій частині цього розділу розглянемо струм через квантову точку в стаціонарному режимі, коли до системи прикладена постійна напруга,  $eV = \mu_L - \mu_R$ , і постійне зовнішнє магнітне поле (виражене через енергетичний еквівалент  $E_B = \mu_B B$ ). Після цього буде досліджено залежний від часу відгук системи на прикладений імпульс напруги та магнітного поля. Усі розрахунки виконуватимуться для симетричних бар'єрів,  $\Gamma^L = \Gamma^R = \frac{1}{2}\Gamma$ , і при температурі  $T = 0.1\Gamma$ . Система буде виведена з рівноваги шляхом прикладання напруги до лівого контакту та зміни рівня енергії точки та магнітного поля. Правий контакт залишатиметься при сталому хімічному потенціалі  $\mu_R = 0$  і  $\Delta_R(t) = 0$  увесь час, таким чином слугуючи заземленням.



**Рис. 1.5** Стаціонарний струм через квантову точку (верхня панель) і відповідна диференціальна провідність (нижня панель) як функції напруги. Параметри системи  $\mu_L = eV$ ,  $\mu_R = 0$  Г,  $\varepsilon_0 = 5$  Г,  $U = 10$  Г. Суцільна (червона), пунктирна (синя) і пунктирна (зелена) лінії зображають результати обчислень для різних значень зовнішнього магнітного поля  $B = 0, 1$  та  $4$  Г/ $\mu_B$  відповідно.



**Рис. 1.6** Стаціонарний струм та диференціальна провідність як функції напруги розраховані в рамках наближення NCA для тих самих параметрів як на рис. 1.5. Для порівняння результати розрахунку методом розширеного наближення Хаббарда з рис. 1.5 зображені сірим кольором.

Розглянемо стаціонарний режим, при якому до КТ прикладена постійна напруга. Квантова точка характеризується параметрами  $\epsilon_0 = 5$  Г і  $U = 10$  Г. Для таких значень параметрів характерна енергія конденсації Кондо, обчислена за допомогою виразу Холдейна (1.1), є рівною  $E_K \simeq 2.4 \cdot 10^{-5}$  Г, що значно нижче вибраної температури,  $T = 0,1$  Г. Таким чином, навіть за відсутності магнітного поля, система знаходиться далеко за межами режиму Кондо. На рис. 1.5 показано симетризовані струми через точку,  $J = \frac{1}{2}(J_L - J_R)$ , і відповідні диференціальні електропровідності,  $G_{\text{diff}} = dJ/dV$ , як функції напруги зміщення  $\mu_L = eV$  для різних значень магнітного поля. А на рис. 1.6 показано відповідні результати обчислені в рамках більш складного наближення NCA. Не складно бачити, що обидва методи дають дуже схожі результати. Як і очікувалося, отримано струм, що зростає стрибкоподібно зі збільшенням напруги. Крім того, положення сходинок і їх висота збігаються для обох методів. Незважаючи на те, що метод NCA також може бути застосований у режимі Кондо та є більш точним у цьому сенсі, його диференціальна провідність при досліджуваній температурі не має якісних та кількісних відмінностей у положенні резонансів. Таким чином це є додатковим підтвердження попереднього висновку, що в досліджуваному діапазоні параметрів Кондо фізика не спостерігається.

Без магнітного поля (суцільна червона лінія) перший стрибок виникає, коли  $eV$  досягає значення  $\epsilon_0$  і рівень порожньої точки стає енергетично доступним для тунельних процесів від лівого контакту. Такі процеси відбуваються з однаковою ймовірністю для обох напрямків проєкції спіну, і, отже, являють собою два канали провідності. Для  $eV > \epsilon_0$  ці канали являються відкритими і можуть бути зайняті одним електроном(одноелектронний рівень). Для  $eV > \epsilon_0 + U$  енергія електронів на контактах стає достатньою, щоб подолати кулонівське відштовхування електронів всередині квантової точки, і другий електрон може зайняти двоелектронний рівень, при тому що на КТ вже розміщений один еле-

ктрон. Але останній процес представляє лише один додатковий канал провідності, оскільки інший блокується принципом Паулі. Таким чином, другий стрибок суцільної червоної лінії струму на верхній панелі рис. 1.5, при  $\epsilon_0 + U = 15$  Г, становить лише половину висоти стрибку при  $\epsilon_0 = 5$  Г. На графіку диференціальної провідності або густині станів, показаних на нижній панелі, це призводить до появи нижньої смуги Хаббарда при  $\epsilon_0$ . Спектральна вага цієї смуги в два рази більше, ніж у верхньої смуги Хаббарда при  $\epsilon_0 + U$ . При досить низькій температурі ширина обох смуг Хаббарда визначається елементами тунельної матриці  $t$ , таким чином, визначається як  $\Gamma$ .

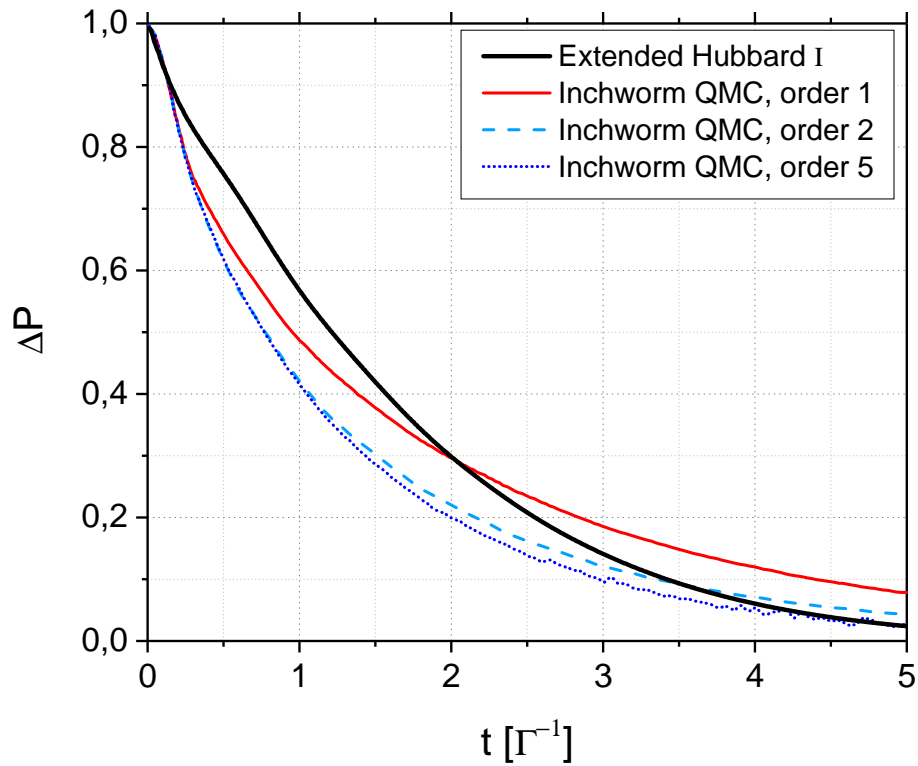
Результати обчислень методом NCA, показані на рис. 1.6, підтверджують цю асиметрію спектральної ваги. Така асиметрія також спостерігається і при розрахунку за допомогою інших методів, в яких враховується сильна електронна кореляція[64, 65], де функція перенесення ваги залежить від енергії Фермі. Детальне порівняння диференційної провідності обчисленої методом NCA та обчисленої за допомогою методу розширеного Хаббарда I (представленого сірими лініями на рис. 1.6) показує, що обидва методи по суті збігаються щодо опису форми нижніх смуг Хаббарда, тоді як NCA створює, як правило, більш м'які верхні смуги Хаббарда. Ці висновки залишаються справедливими і у випадку наявного зовнішнього магнітного поля і можуть бути пов'язані з тим, що NCA охоплює частину спінової динаміки, якою нехтують у розширеному наближенні Хаббарда I. Проте порівняння обох методів із QMC (далі в цьому розділі) навпаки вказує на те, що опис динаміки в методі Хаббарда дещо кращий, ніж у NCA.

Для ненульових магнітних полів ситуація залишається подібною, хоча енергетично вигідніший рівень  $\downarrow$ -спіну буде доступним раніше його  $\uparrow$ -спінового аналога. Таким чином, кожен із вищезазначених стрибків струму розділяється на два при енергіях  $\pm E_B$  відносно положення без магнітного поля. Таке Зееманівське розщеплення при  $E_B = 1$  Г краще спостерігається на графіках диференціальної провідності,

представлених пунктирною синьою лінією на нижній панелі рис. 1.5. При  $E_B = 4\text{ Г}$  (пунктирно-штриховані зелені лінії) розщеплення набагато більше: Зеєманівські компоненти нижньої смуги Хаббарда спостерігаються при  $\varepsilon_0 - E_B = 1\text{ Г}$  та  $\varepsilon_0 + E_B = 9\text{ Г}$ , а верхньої смуги Хаббарда при  $\varepsilon_0 + U - E_B = 11\text{ Г}$  та  $\varepsilon_0 + U + E_B = 19\text{ Г}$ .

Слід зауважити, що для обох значень магнітного поля,  $E_B = 1$  і  $4\text{ Г}$ , розщеплення між найближчими рівнями становить лише  $2\text{ Г}$  і, таким чином, є достатньо малим, щоб дві близькі сходинки на графіку струму (верхня панель рис. 1.5) можна було чітко розрізнити візуально. Але на графіках диференційної провідності на нижній панелі, навпаки, всі особливості є досить наглядними.

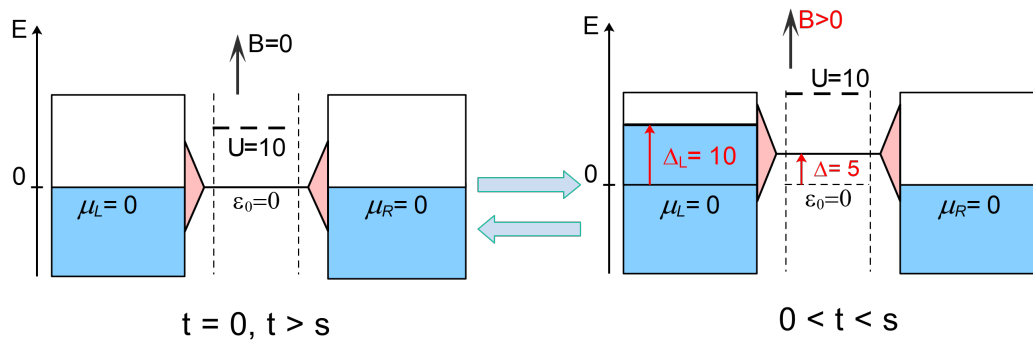
Далі розглянемо залежний від часу режим. Першим кроком буде порівняння досліджуваного методу із діаграмними результатами QMC, отриманими за допомогою так званого алгоритму Inchworm, розробленого Коеном та іншими авторами у [30]. В даній роботі автори досліджували еволюцію в часі величини,  $\Delta P = n_\uparrow - n_\downarrow$ , після вимикання магнітного поля. Ця величина є різницею заселеності електронів з різною проекцією спіна і характеризує степінь поляризації квантової точки. Величину кулонівської взаємодії автори обрали рівною  $U = 8\text{ Г}$ . Встановимо аналогічні початкові умови: почнемо з повністю поляризованого стану, отриманого прикладанням до квантової точки великого магнітного поля,  $B = 90\text{ Г}/\mu_B$ , яке вимикається при  $t = 0$ . Як показано на рис. 1.7, метод, розглянутий в даній роботі, (неперервна чорна лінія) відтворює загальну форму та залежність від часу релаксації до немагнітного стану, передбаченого Inchworm QMC. Навіть якщо деякі кількісні відмінності існують на проміжних масштабах часу, стає очевидним, що удосконалений метод Хаббарда на відміну від більшості інших, суто чисельних методів, обговорених Коеном [30] — є стабільним і дає адекватні результати при розрахунках на великих проміжках часу. Використавши факт, що  $n$ -й порядок алгоритму Inchworm QMC приблизно відповідає наближенню NCA  $n - 1$ -го порядку [30], та результати зображені на рис. 1.7,



**Рис. 1.7** Релаксація від повністю поляризованого до немагнітного стану в залежності від часу для параметрів  $\epsilon_0 = -0.5 \text{ Г}$  і  $U = 8 \text{ Г}$ . Розширений метод Хаббард I (суцільна чорна лінія) порівняно з різними порядками діаграмного Inchworm QMC (суцільна червона, пунктирна блакитна та пунктирна темно-синя лінії). Дані обчислень для методу Inchworm QMC взяті із Рис. 3 у [30].

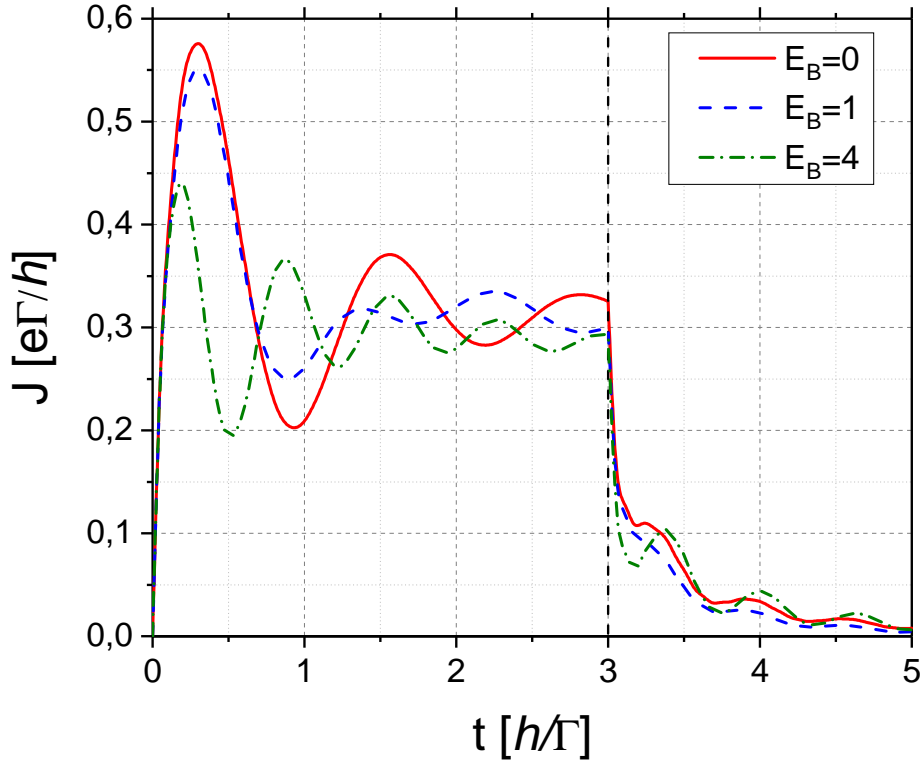
можна зробити висновок, що розширене наближення Хаббард I є більш точним, ніж перший порядок Inchworm (що відповіде NCA) на більших часових проміжках та описує частину динаміки, охопленої лише вищими порядками схеми Inchworm.

Тепер розглянемо більш цікаву з експериментальної точки зору часову залежність, при якій незбурена система, із заданими параметрами  $\mu_L = \mu_R = \varepsilon_0 = 0$  Г, виводиться з рівноваги одночасним імпульсом напруги та магнітного поля (рис. 1.8). Імпульс має прямокутну форму, тобто



**Рис. 1.8** Схема збурення КТ зовнішнім прямокутним імпульсом напруги та магнітного поля. В початковий момент часу, тобто при  $t = 0$ , система знаходиться в рівновазі з заданими параметрами  $\mu_L = \mu_R = \varepsilon_0 = 0$  Г. Імпульс зовнішньої напруги  $\Delta_L(t) = 10$  Г,  $\Delta(t) = 5$  Г та магнітного поля  $B > 0$  тривалістю  $s$  діє на часовому проміжку  $0 < t < s$ . В момент часу  $t = s$  імпульс вимикається і система повертається до рівноважного стану як і при  $t < 0$ .

величини  $\Delta_L(t) = 10$  Г і  $\Delta(t) = 5$  Г додаються до енергії рівнів незбуреної квантової точки. Відповідно збільшується енергія лівого контакту і КТ, тоді як правий контакт залишається заземленим,  $\mu_R = \Delta_R(t) = 0$  Г. Також під час дії імпульсу напруги вмикається зовнішнє магнітне поле. Параметри такі, що під час збурення система перебуває у тих самих умовах, що й для напруги зміщення  $eV = 10$  Г у дослідженому вище стаціонарному режимі (рис. 1.5).



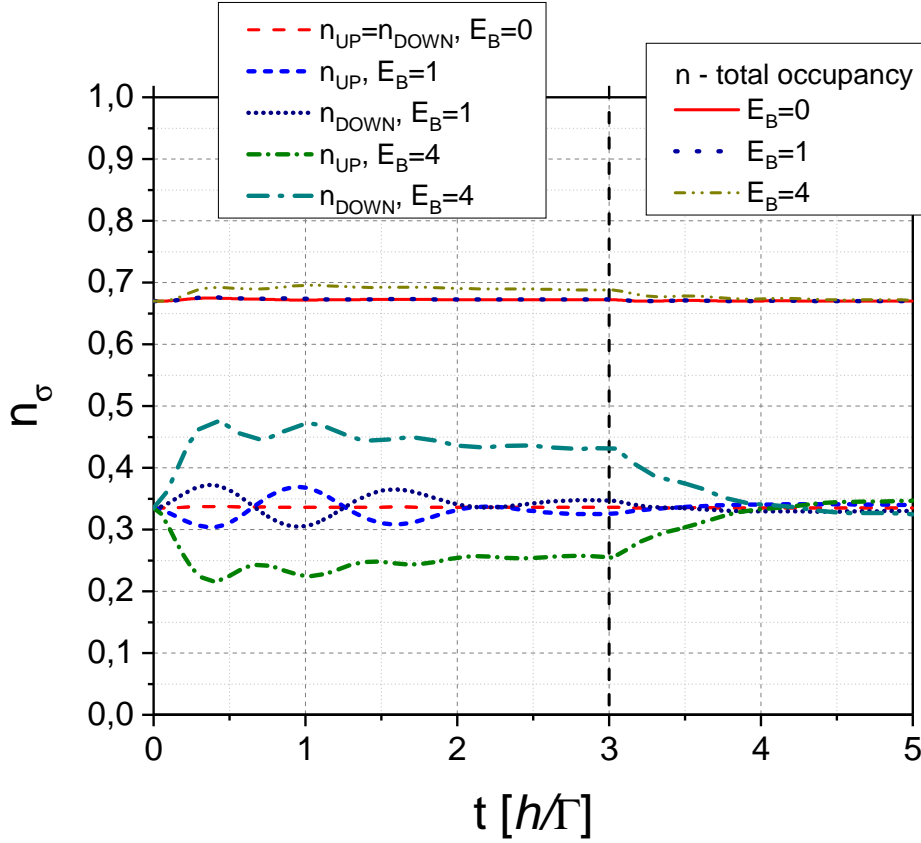
**Рис. 1.9** Залежність від часу симетризованого струму через КТ, збуреного одночасними імпульсами напруги та магнітного поля, які прикладено між  $t = 0$  і  $t_{\text{pulse}} = 3 \hbar/\Gamma$ . У незбуреному стані система характеризується параметрами  $\mu_L = \mu_R = 0 \Gamma$ ,  $\varepsilon_0 = 0 \Gamma$  і  $U = 10 \Gamma$ . Під час прямокутного імпульсу напруги енергетичні рівні лівого контакту збільшуються на  $\Delta_L = 10 \Gamma$ , а рівень квантової точки на  $\Delta = 5 \Gamma$ . Суцільна червона, пунктирна синя і пунктирно-точкова зелена лінії зображають результати розрахунку для різних значень зовнішнього магнітного імпульсу  $B = 0, 1$  і  $4 \Gamma/\mu_B$  відповідно.

Як показано на рис. 1.9, струм починає протікати з початком імпульсу в  $t = 0$ . Через деякий час  $J(t)$  релаксує та прямує до певного стаціонарного значення (якщо імпульс вважати нескінченним), навколо якого відбуваються затухаючі коливання по закону  $\exp(-\Gamma t)$ . Характерний час затухання визначається оберненим коефіцієнтом тунелюванням  $\Gamma^{-1}$ , який однаковий для всіх магнітних полів, але деталі коливань і значення стаціонарного струму залежать від величини магнітного поля. З рис. 1.9 можна знайти приблизно  $J_{\text{stat}} \simeq 0,3 e\Gamma/\hbar$  для  $E_B = 0$  і  $1$  Г, і трохи менше для  $E_B = 4$  Г, що узгоджується зі значеннями для  $J(eV = 10$  Г) з рис. 1.5. Однак розглянутий імпульс має скінченну довжину і вимикається до повного досягнення стаціонарного стану, при  $t_{\text{pulse}} = 3 \hbar/\Gamma$ . Після цього система повертається до початкової рівноваги.

На рис. 1.10 показані результати обчислення сумарної заселеності (три верхні криві) і окремо для кожної проекції спіну (нижні криві) при  $E_B = 0, 1$  і  $4$  Г. Очевидно, що за відсутності імпульсу та при  $\epsilon_0 = 0$  три конфігурації є виродженими: порожня, зайнята  $\uparrow$ - і  $\downarrow$ -електроном точка виникають з однаковою ймовірністю, таким чином пояснюючи стаціонарне значення заселеності  $2/3$ . З рисунку також видно, що за відсутності магнітного поля цей стаціонарний стан залишається незмінним навіть після початку імпульсу напруги, і в результаті відповідні червоні криві залишаються на своїх рівноважних значеннях.

Для помірних магнітних полів, наприклад  $E_B = 1$  Г (сині криві на рис. 1.10), зовнішній імпульс виводить систему з рівноваги. Після його завершення заселеності різних проекцій спіну характеризуються виникненням затухаючих коливань, які прямують до рівноважного значення. При цьому загальна заселеність рівня залишається постійною через зсув фази на величину  $\pi$  між  $\uparrow$  і  $\downarrow$ -проекціями.

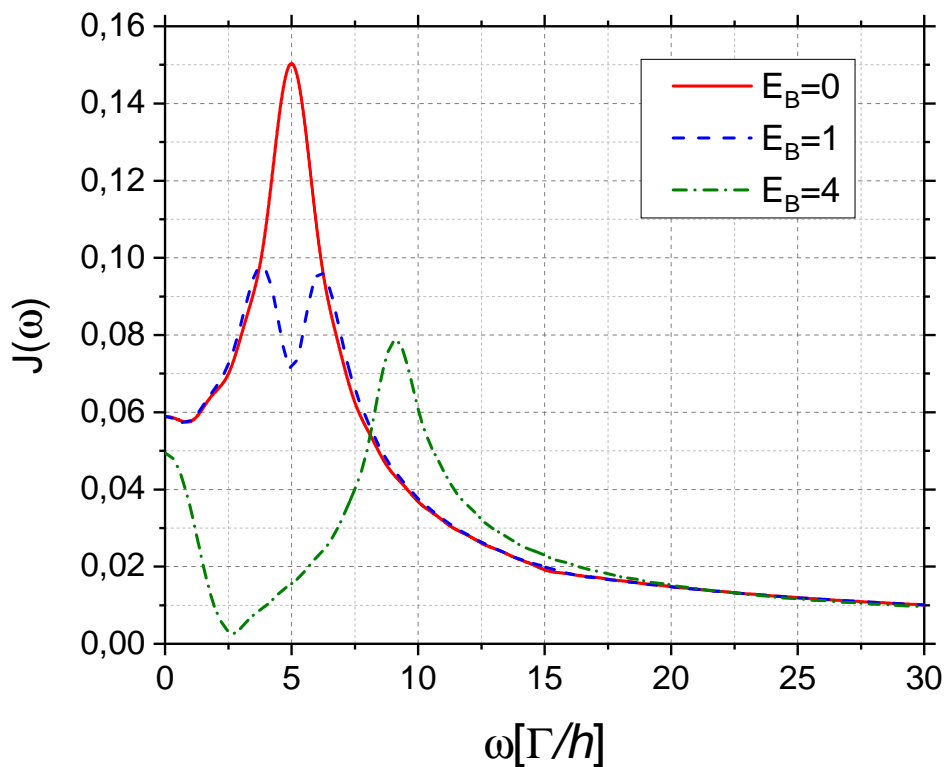
Для значення імпульсу магнітного поля  $E_B = 4$  Г, показаного жовтою та зеленими кривими, відхилення від рівноважного положення набагато сильніше. Що більш важливо, виникає збурена рівновага,



**Рис. 1.10** Залежність від часу сумарної заселеності (верхня панель) та заселеностей розрахованих для різних напрямків проекції спіну електрона (нижня панель) для КТ при тих самих параметрах, що й на рис. 1.9. Прямокутний імпульс напруги та магнітного поля діє між  $t = 0$  і  $t_{\text{pulse}} = 3 \hbar/\Gamma$ . Суцільні червоні, пунктирні/точкові сині і пунктирно-точкові зелені лінії зображають результати розрахунку для різних значень зовнішнього магнітного імпульсу  $B = 0, 1$  і  $4 \Gamma/\mu_B$  відповідно.

яка відрізняється від незбуреного стану: при напрузі імпульсу  $eV = 10 \text{ Г}$ , Зееманівська компонента верхньої зони Хаббарда з проекцією спіна  $\downarrow$  має енергію  $E = 11 \text{ Г}$  (див. рис. 1.5) і таким чином стає частково доступною для тунелювання. Таким чином, заселеності, які відповідають різним проекціям спіну, значно відхиляються від своїх незбурених значень, навіть якщо зміна сумарної заселеності відносно мала.

Далі дослідимо коливальну поведінку струмів. З рис. 1.9 очевидно, що магнітне поле впливає на період затухаючих коливань. Для дослідження



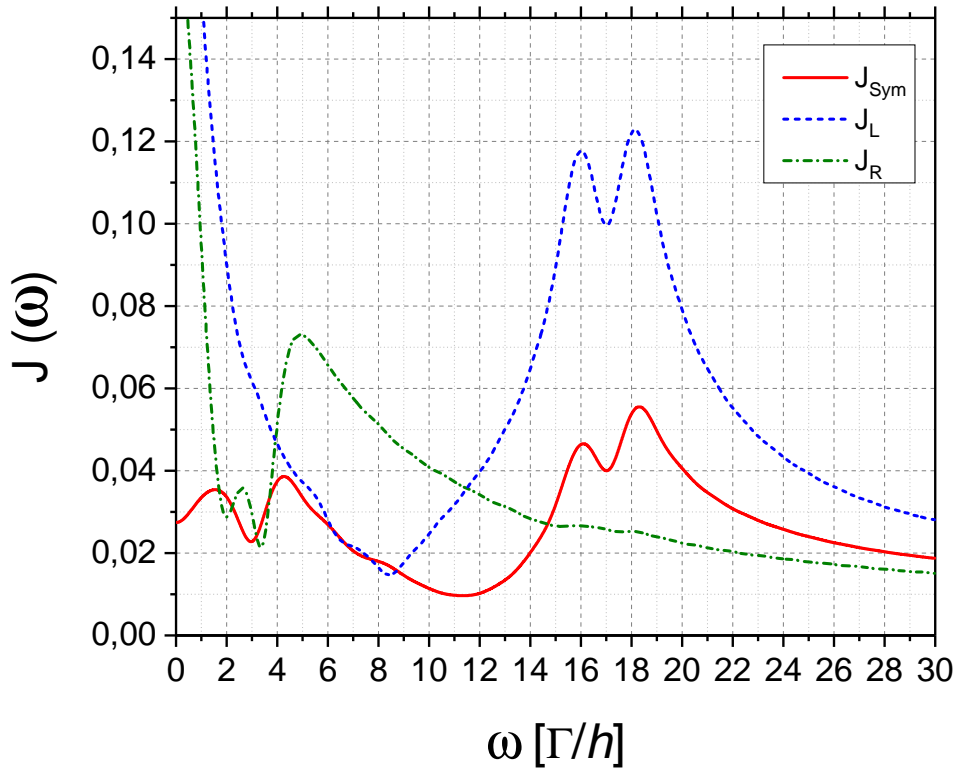
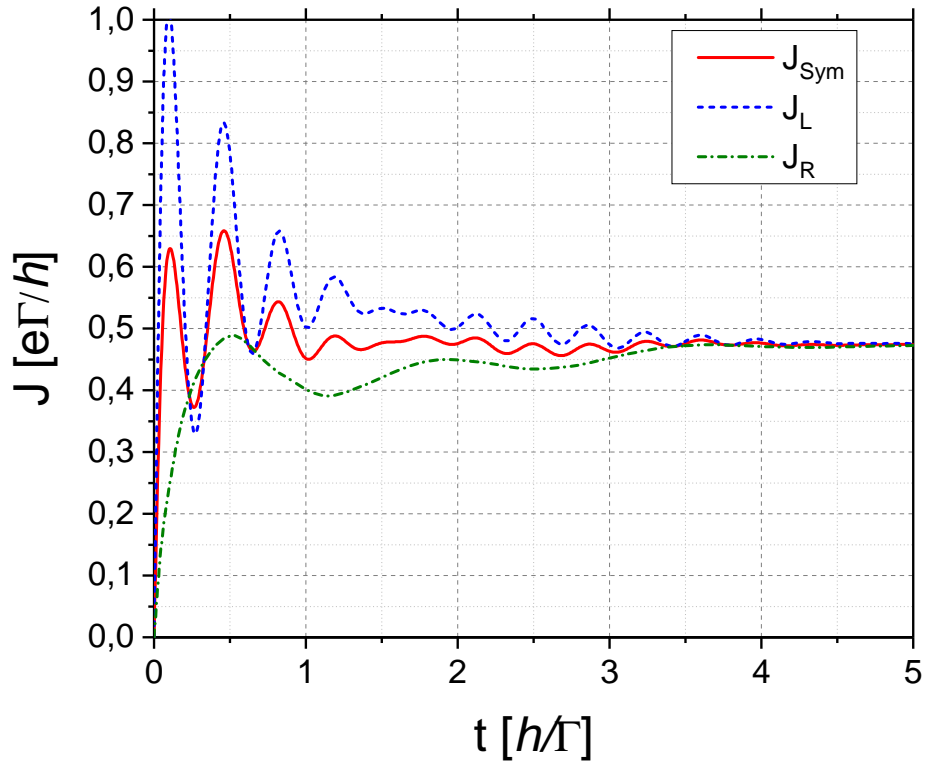
**Рис. 1.11** Перетворення Фур'є залежного від часу струму через точку для тих самих параметрів, що й на рис. 1.9, але при імпульсі тривалістю  $t_{\text{pulse}} = 10 \hbar/\Gamma$ . Імпульс обирається достатньо довгим для того, щоб осциляції затухли і система перейшла до стаціонарного стану.

цього ефекту зручно використати Фур'є перетворення і перейти від часового до частотного простору. На рис. 1.11 зображено струм в

частотному просторі для параметрів системи, які були використані на Рис. 1.9, за винятком тривалості імпульсу, який тепер становить  $t_{\text{pulse}} = 10 \hbar/\Gamma$  замість  $3 \hbar/\Gamma$ . Довший імпульс був обраний для того, щоб коливання повністю зникали, таким чином створивши умови для аналізу спектра саме у збуреному випадку. Як видно з рис. 1.11, Фур'є обаз  $J(\omega)$  для значення магнітного поля  $E_B = 0 \Gamma$  (червона суцільна лінія) має пік при  $\varepsilon_0 = 5 \Gamma$ , що енергетично відповідає нижній смузі Хаббарда. При ввімкненні магнітного поля дана смуга відповідним чином розщеплюється і піки спостерігаються при значеннях близьких до  $\varepsilon_0 - E_B = 4 \Gamma$  та  $\varepsilon_0 + E_B = 6 \Gamma$  для  $E_B = 1 \Gamma$  (синя пунктирна крива). Для значення магнітного поля  $E_B = 4 \Gamma$  (зелена пунктирно-крапкова крива) піки відповідно спостерігаються при значеннях близьких до  $\varepsilon_0 - E_B = 1 \Gamma$  та  $\varepsilon_0 + E_B = 9 \Gamma$ . Інтенсивність піків у  $J(\omega)$ , однак, не відповідає вазі у густині станів — факт, який не дивує, оскільки перетворення Фур'є не зберігає площі під функціями, а радше інтегрили від квадратів функцій (теорема Планшереля).

Варто зауважити, що верхня смуга Хаббарда на малюнку не спостерігається, оскільки, як зазначалося раніше, заповнення квантової точки двома електронами відбувається лише для достатньо великих значень напруги на контактах. Для досліджуваного вище випадку збуреної імпульсом  $eV = 10 \Gamma$  системи, верхня зона лежить поза "вікном" енергій між правим та лівим контактом (за винятком  $E_B = 4 \Gamma$ , де нижня зееманівська компонента верхньої смуги Хаббарда з центром у  $E = 11 \Gamma$  може бути частково залучена у провідність).

На завершення дослідимо ситуацію, коли прямокутний імпульс напруги  $\Delta_L = 20 \Gamma$  і магнітний імпульс  $B = 1 \Gamma/\mu_B$  прикладаються до КТ, між  $t = 0$  і  $t_{\text{pulse}} = 10 \hbar/\Gamma$ . Розглянемо окремо струм, що протікає між лівим контактом та квантовою точкою  $J_L$ , та струм, що протікає між правим контактом та квантовою точкою  $J_R$ . Рівноважний стан системи характеризується параметрами  $\mu_L = \mu_R = \varepsilon_0 = 0 \Gamma$ . У такій системі двоелектронний енергетичний рівень стає доступним і всі

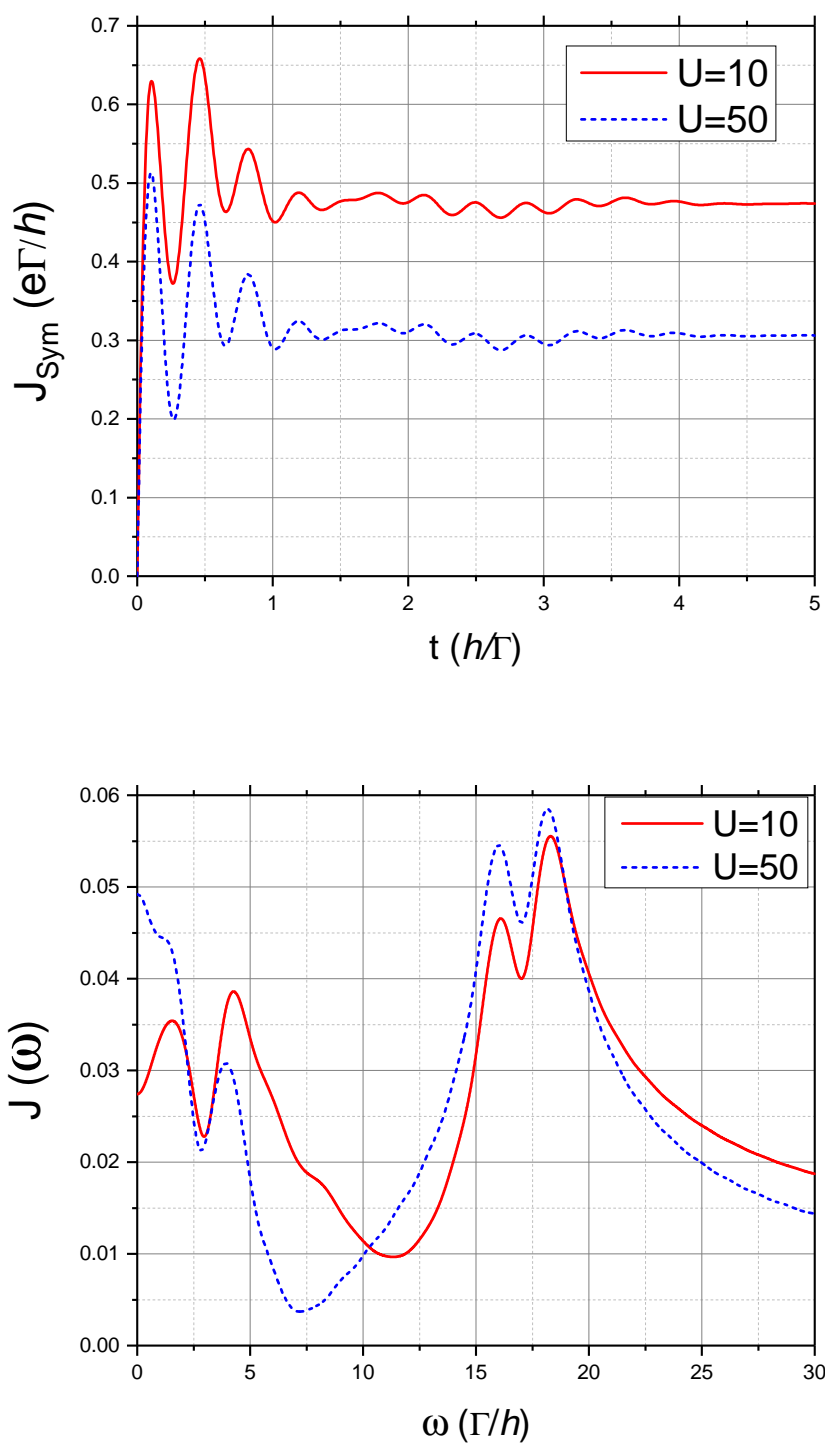


**Рис. 1.12** Залежний від часу струм (верхня панель) та його Фур'є-образ (нижня панель) для КТ, збуреної одночасним імпульсом напруги та магнітного поля між  $t = 0$  і  $t_{\text{pulse}} = 10 \hbar / \Gamma$ . У рівноважному стані без зовнішнього поля система характеризується параметрами  $\mu_L = \mu_R = 0 \Gamma$ ,  $\varepsilon_0 = 0 \Gamma$  і  $U = 10 \Gamma$ . Під час прикладання прямокутного імпульсу енергетичні рівні лівого контакту збільшуються на  $\Delta_L = 20 \Gamma$ , рівень точки на  $\Delta = 3 \Gamma$ , а магнітне поле становить  $B = 1 / \mu_B$ . Симетричний

транспортні канали відкриті. Внаслідок цього струм  $J(t)$  зображений на верхній панелі рис. 1.12 осцилює навколо значення  $\frac{1}{2} e\Gamma/\hbar$  замість  $\frac{1}{3} e\Gamma/\hbar$  як на рис. 1.9. Коли імпульс напруги увімкнено, тунелювання електронів від лівого контакту до порожньої точки через одноелектронний рівень вивільняє енергію  $\Delta_L - \varepsilon_0 - \Delta \mp \sigma\mu_B B$ , що становить 16 Г для  $\uparrow$ - і 18 Г для  $\downarrow$ -електронів. Завдяки цьому на графіку Фур'є-образу струму  $J_L$  (позначеному пунктирною синьою лінією на рис. 1.12) виникають помітні піки. Аналогічно, тунелювання від лівого контакту до квантової точки зайнятої одним електроном через двоелектронний рівень вивільняє  $\Delta_L - \varepsilon_0 - \Delta - U \mp \sigma\mu_B B$ , але Фур'є-образ  $J_L$  характеризується досить слабким збуренням навколо очікуваних значень 6 і 8 Г. Це свідчить про те, що при доступній двоелектронній конфігурації, струм який протікає через двоелектронний рівень в основному стаціонарний і не робить значний внесок у динаміку. Аналіз струму між КТ та правим контактом підтверджує дане припущення: в залежності від напрямку проекції спіну, одноелектронний рівень має енергію  $\varepsilon_0 + \Delta \pm \sigma\mu_B B - \Delta_R = 4$  або 2 Г, в той час як енергія правого контакту становить  $\mu_R = 0$  Г, що створює чітко виражену структуру на графіку Фур'є-образу від  $J_R$  (пунктирна зелена крива на рис. 1.12). В той час як піки пов'язані з провідністю через двоелектронний рівень навколо очікуваних значень 12 або 14 Г майже не помітні.

Виходячи з вище сказаного можна висунути наступне припущення: транспорт через верхню смугу Хаббарда є переважно стаціонарним і не дає вклад в осциляції. Даний факт підтверджується додатковими розрахунками струму при тих самих параметрах, але з кулонівським відштовхуванням  $U = 50$  Г (рис. 1.13). В такому випадку подвійно зайнятий стан точки недосяжний, залежність від часу  $J(t)$  майже ідентична випадку з  $U = 10$  Г, але коливання відбуваються навколо значення  $\frac{1}{3} e\Gamma/\hbar$  замість  $\frac{1}{2} e\Gamma/\hbar$ .

У низькочастотній області Фур'є-образ струму  $J_\alpha(\omega)$  (рис. 1.12) характеризується сильними піками, які є результатом наявного затухання.



**Рис. 1.13** Залежний від часу симетризований струм (верхня панель) та його Фур'є-образ (нижня панель) для КТ. Червона крива розрахована для параметрів системи як на рис.1.12. Синя крива розрахована для тих самих параметрів, але значно сильнішої кулонівської взаємодії  $U = 50\Gamma$ , при якій двоелектронний рівень не приймає участь у транспорті при збуренні зовнішнім імпульсом напруги та магнітного поля. Незмінний характер осциляцій при збуренні для різних значень кулонівського відштовхування свідчить, що транспорт через двоелектронних рівень є стаціонарним і не дає вклад в осциляції.

Плавне  $1 - \exp(-\Gamma t)$ -подібне затухання, що лежить в основі затухаючих коливань на верхній панелі рисунку, в результаті перетворення Фур'є дає лоренціан з піком в точці  $\omega = 0$ . Що і спостерігається в низькочастотній області нижньої панелі рис. 1.12.

## 1.7. Висновки

У даному розділі було досліджено електронний транспорт через однорівневу КТ із сильним кулонівським відштовхуванням між електронами всередині квантової точки. Орбіталь приєднана до двох некорельованих металевих контактів і знаходиться у зовнішньому магнітному полі. Розглянуто стаціонарний випадок, для якого всі параметри, такі як напруга на контактах, енергія орбіталі, величина зовнішнього магнітного поля, коефіцієнти тунелювання, є незалежними від часу, а отже і обчислений струм є стаціонарним і незмінним в часі. А також нестаціонарний випадок, коли система збуджується імпульсом напруги та магнітного поля, створюючи залежний від часу відгук.

Електронний транспорт досліджено за допомогою методу нерівноважних функцій Гріна у рамках формалізму Келдиша. Дана схема подібна до методів, запропонованих Яухо [36], але, на відміну від останнього, бере до уваги прикладене зовнішнє магнітне поле, і, що більш важливо, сильні кореляції між електронами з різними напрямками проекції спіну всередині орбіталі, які виникають внаслідок взаємодії Кулона  $U$ . Для даного випадку точних рішень немає. Наближення, яке використовується, було запропоноване у статті [61] та узагальнене для випадку наявного зовнішнього магнітного поля. Основна схема роз'єднання функцій Гріна має багато спільного з так званим наближенням Хаббард-I, але охоплює частину динаміки, яка не розглядається останнім. У даному розділі метод адаптовано до ситуацій, коли квантова точка перебуває під дією ненульового магнітного поля. Розділ також містить графічне представлення рівнянь руху, яке допомагає краще зрозуміти основні фізичні процеси.

Розглянута неканонічна або розширена схема Хаббард-I може бути застосована для випадку великих  $U$  та є точною в атомній границі, для якої елементи тунельної матриці між точкою та контактами є рівними нулю. Крім того, вона також є точною для випадку відсутнього кулонівського відштовхування  $U$  на енергетичному рівні КТ для будь-якого магнітного поля.

Після інтегрування ступенів вільності провідних контактів утворюється замкнена система рівнянь (1.25) та (1.26), яку потрібно розв'язувати самоузгоджено. Для двох випадків, досліджених у даному розділі, а саме (i) незалежна від часу система з постійним магнітним полем і зміщенням напруги, (ii) залежна від часу система з густиною станів, яку можна вважати константою, процедура ітерації не потрібна. Явний розв'язок може бути отриманий у вигляді інтегралів по відомим функціям, які задають зовнішні параметри системи: ці вирази можуть бути записані як (1.51) і (1.62), відповідно, для випадку (i) і (ii).

Чисельні методи інтегрування були використані для побудови графіків за допомогою вищезгаданих виразів. Для стаціонарного випадку було отримано очікуване ступінчасте зростання струму через квантову точку, причому перший стрибок виникає як наслідок появи каналу провідності через раніше незайняту точку, а другий - від тунелювання через уже зайнятий рівень, який передбачає подолання  $U$  Кулона. Важливо також зауважити, що для вже зайнятої квантової точки принцип Паулі блокує одну з проекцій спіну, і тому друга сходинка має удвічі меншу висоту ніж перша. У присутності магнітного поля ефект Зеемана розщеплює кожную сходинку на дві менших підсходинки. Ці висновки підтверджені незалежними розрахунками NCA.

Для випадку залежного від часу режиму було показано, що даний метод удосконаленого наближення Хаббарда I добре відтворює динаміку релаксацій заселеності квантової точки, яка спостерігалася в нещодавніх результатах отриманих за допомогою методу inchworm QMC[30]. Далі було розглянуто більш складну залежність від часу, коли КТ виводиться

з рівноваги одночасним прямокутним імпульсом напруги та магнітного поля. Після початку імпульсу струм через квантову точку релаксує до нового рівноважного значення у вигляді затухаючих коливань. Природу цих коливань було досліджено за допомогою Фур'є-аналізу. Як і очікувалося, було показано, що коливання регулюються різницею рівнів енергії, а отже, неявно магнітним полем. Що більш важливо, аналіз Фур'є дозволив показати, які електронні конфігурації приймають участь у динамічних процесах, а які дають переважно стаціонарний вклад у транспортний сигнал.

Однією з головних переваг даного методу є те, що він дозволяє пояснити фізичну природу кожного піку в спектрі. Наприклад, було встановлено, що для обраних параметрів динаміка струму регулюється тунелюванням через одно-електронний рівень, тоді як транспорт, що включає тимчасово зайнятий дво-електронний рівень, дає стаціонарний внесок у провідність.

## РОЗДІЛ 2 ЕЛЕКТРОННИЙ ТРАНСПОРТ.

### ПОДВІЙНА КВАНТОВА ТОЧКА

#### 2.1. Вступ

Невдовзі після появи перших одноелектронних транзисторів наприкінці 1980-х [73, 74], з диференціальними графіками провідності, що регулюються характерними кулонівськими діамантами завдяки послідовному накачуванню електронами центрального квантового острова [13, 75], стало зрозуміло, що ефект Кондо [58] може бути використаний для подолання кулонівської блокади та відновлення нормальної провідності. Відтоді фізику Кондо спостерігали у багатьох нанорозмірних пристроях, починаючи від гетероструктур GaAs/AlGaAs[37] та Si/SiGe[38] до більш екзотичних пристроїв із одномолекулярними переходами[76–79] або вуглецевих нанотрубок [80]. Наявність різкого супутнього нульового піку або резонансу Абрикосова-Зула-Кондо на графіку диференціальної провідності [37, 38, 76, 80–83], дає можливість реалізувати пристрій з високочутливими комутаційними властивостями, який, наприклад, може бути використаний в молекулярній електроніці [39, 84].

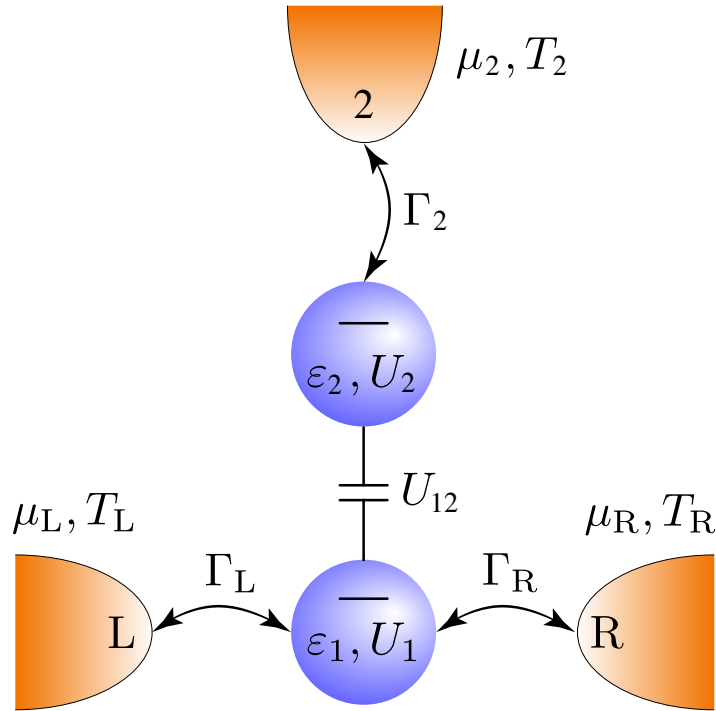
Як і інші квантові явища, резонансні спин-фліп-кореляції, що лежать в основі ефекту Кондо, обмежені дуже низькими температурами та зберігаються лише до кількох десятків мілікельвінів у звичайних напівпровідникових пристроях або, в кращому випадку, до кількох десятків Кельвінів у молекулярній електроніці [39, 79]. Хоча, наприклад, у роботах [85, 86] автори вказують, що для магнітних домішок на поверхні температура Кондо може сягати 100 К.

Можливість спостерігати електронний транспорт завдяки наявному ефекту Кондо через квантову точку, приєднану до контактів (без даного ефекту транспорт заблокований кулонівською взаємодією), спирається на той факт, що рівень точки, зайнятий одним електроном, доступний

для резонансного тунелювання від контактів, і, таким чином, зазвичай безпосередньо керується напругою затвору [37–39]. Для  $\perp$ -подібного пристрою, запропонованого в цьому розділі та схематично зображеного на рис. 2.1, затвор (вивід 2) безпосередньо не контролює енергетичний рівень  $\epsilon_1$  квантової точки 1 у каналі провідності між лівим (L) і правим (R) контактами. Але завдяки зміні напруги на затворі, змінюється заселеність квантової точки 2, і саме ця зміна зрештою ініціює початок струму через провідний канал завдяки наявному кулонівському відштовхуванню між електронами на різних КТ. Експериментально реалізувати квантові точки з ємнісним зв'язком без міжточкового тунелювання можливо, наприклад, у гетероструктурах GaAs/AlGaAs [87, 88]. Також за допомогою двошарового графену на кремнієвій підкладці було створено систему з регульованими міжточковими зв'язками з мінімальним залишковим міжточковим тунелюванням [89]. Як буде показано нижче, при достатньо низькій температурі така система з подвійною квантовою точкою дає можливість побудувати квантовий транзистор, здатний з високою чутливістю перемикатися між трьома станами замість двох: ізолятора, нормальної провідності та резонансної провідності за допомогою ефекта Кондо. Хоча експериментальна реалізація такого приладу є безперечно більш складною задачею.

## 2.2. Гамільтоніан системи та метод розв'язку

Для опису системи запропонованої на рис. 2.1, як і в попередньому розділі, буде використано односторонню модель Андерсона [90] в рамках наближення NCA [91–93]. Гамільтоніан моделі містить внески від контактів, точок і від тунелювання між контактами та точками,  $H = H_{\text{leads}} + H_{\text{dots}} + H_{\text{tun}}$ . Три некорельовані між собою металеві контакти,



**Рис. 2.1** Нанорозмірний транзистор, у якому дві однорівневі КТ,  $\varepsilon_1$  і  $\varepsilon_2$ , з внутрішньоточковим кулонівським відштовхуванням  $U_1$  і  $U_2$  і міжточковою кулонівською взаємодією  $U_{12}$ , з'єднані з трьома некорельованими металевими контактами. Електрони можуть тунелювати з лівого (L) контакту через нижню точку до правого (R) контакту, таким чином представляючи собою канал транзистора. Верхній контакт контролює заряд та заселеність верхньої КТ, яка, хоча і ізольована від каналу, запускає струм через останній і, таким чином, діє як затвор. Тунелювання між контактами та їх відповідними точками описується функціями гібридизації  $\Gamma_\alpha$ , де  $\alpha \in \{L, R, 2\}$ .

$\alpha \in \{L, R, 2\}$ , описуються наступним чином:

$$H_{\text{leads}} = \sum_{\alpha k \sigma} \varepsilon_{\alpha k} \mathbf{c}_{\alpha k \sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{\alpha k \sigma}, \quad (2.1a)$$

де  $\mathbf{c}_{\alpha k \sigma}^{\dagger}$  та  $\mathbf{c}_{\alpha k \sigma}$  оператори народження та знищення  $\sigma$ -електрону в стані  $k$  на контакті  $\alpha$ . Внесок від квантових точок записується як

$$H_{\text{dots}} = \sum_{i \in \{1, 2\}} (\varepsilon_i \mathbf{n}_i + U_i \mathbf{n}_{i\uparrow} \mathbf{n}_{i\downarrow}) + U_{12} \mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2, \quad (2.1b)$$

де  $\mathbf{n}_i = \mathbf{n}_{i\uparrow} + \mathbf{n}_{i\downarrow}$  — загальна заселеність квантової точки  $i$ ,  $\mathbf{n}_{i\sigma} = \mathbf{d}_{i\sigma}^{\dagger} \mathbf{d}_{i\sigma}$  кількість  $\sigma$ -електронів на точці, а  $\mathbf{d}_{i\sigma}^{\dagger}$  ( $\mathbf{d}_{i\sigma}$ ) відповідні оператори народження (знищення). Таким чином, сума у наведеному вище виразі описує дві окремі КТ у моделі Андерсона, причому верхня точка служить затвором,  $V_g \equiv \varepsilon_2$ , а нижня являє собою канал провідності,  $V_{\text{ch}} \equiv \varepsilon_1$ . Останній доданок у рівнянні (2.1b) враховує ємнісний зв'язок між обома квантовими точками та може бути реалізований експериментально, як описано в [87–89].

Фінальний внесок від тунелювання електронів з точки на провідники і навпаки запишеться як

$$H_{\text{tun}} = \sum_{\substack{\alpha \in \{L, R\} \\ k \sigma}} \left( t_{\alpha k} \mathbf{d}_{1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{\alpha k \sigma} + t_{\alpha k}^* \mathbf{c}_{\alpha k \sigma}^{\dagger} \mathbf{d}_{1\sigma} \right) + \sum_{k \sigma} \left( t_{2k} \mathbf{d}_{2\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{2k \sigma} + t_{2k}^* \mathbf{c}_{2k \sigma}^{\dagger} \mathbf{d}_{2\sigma} \right), \quad (2.1c)$$

де перший рядок описує зв'язок електронів у точці 1 із лівим і правим контактами, а другий рядок забезпечує тунелювання електронів з точки 2 до верхнього провідника. Для більшості практичних випадків амплітуди тунелювання  $t_{\alpha k}$  залежать від  $k$  лише неявно через відповідну енергію рівня,  $\varepsilon_{\alpha k}$ , тому тунелювання до кожного контакту повністю визначається через силу гібридизації [36]  $\Gamma_{\alpha}(\varepsilon) = 2\pi |t_{\alpha}(\varepsilon)|^2 N_{\alpha}(\varepsilon)$  де

$N_\alpha(\epsilon)$  — підсумована за напрямками спіну густина станів контакту  $\alpha$  ( $\in \{L, R, 2\}$ ). Надалі буде використано припущення, що всі три контакти є ідентичними металами, з густиною станів, що характеризується єдиною широкою зоною, і що тунелювання між будь-яким контактом і відповідною квантовою точкою визначається однаковими фізичними процесами і лише слабко залежним від енергії, таким чином, що всі три сили гібридизації однакові,  $\Gamma_L(\epsilon) = \Gamma_R(\epsilon) = \Gamma_2(\epsilon)$ . Зокрема, густина станів обирається у вигляді широкого гаусіана із напівшириною  $D = 70\Gamma$ , де  $\Gamma = \Gamma_L(\bar{\mu}) + \Gamma_R(\bar{\mu})$  — загальна сила гібридизації нижньої точки при середньому хімічному потенціалі  $\bar{\mu} = \frac{1}{2}(\mu_L + \mu_R)$ .  $\Gamma$ , як і в минулому розділі, буде слугувати основною одиницею енергії. Крім того, припускається нульове зміщення напруги та температури таке, що  $\bar{\mu} = \mu_L = \mu_R$  і  $T_L = T_R$ .

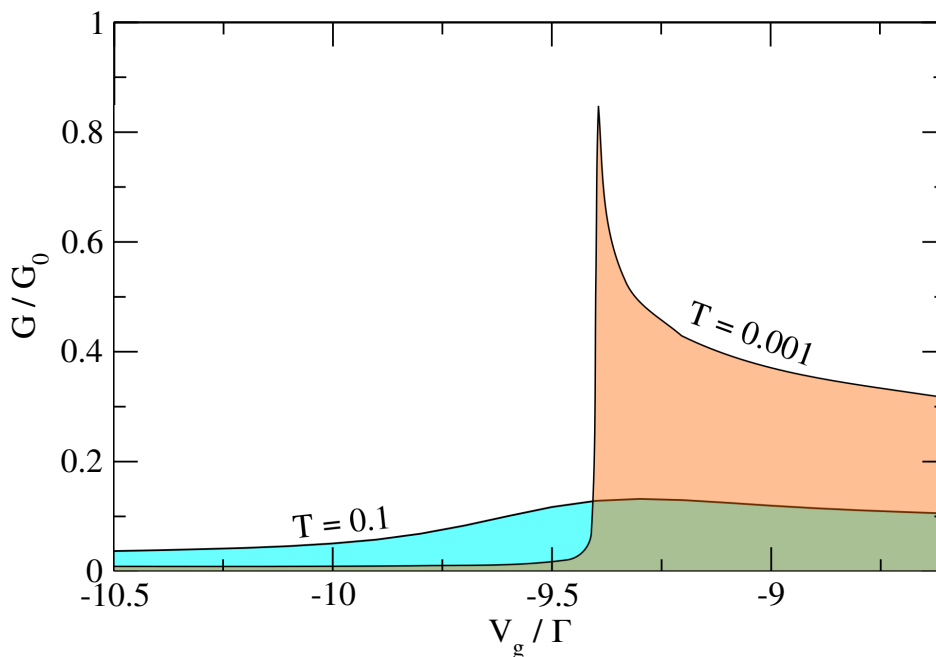
Провідність  $G(T) = e^2 I_0(T)$  і коефіцієнт Зеєбека  $S(T) = -I_1(T)/[eT I_0(T)]$  виражені через моменти різних порядків [94],

$$I_n(T) = \frac{2}{h} \int \epsilon^n \left( -\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \tau^{\text{eq}}(\epsilon) d\epsilon. \quad (2.2)$$

Підінтегральний вираз складається з розподілу Фермі  $f(\epsilon)$  і рівноважної транспортної функції  $\tau^{\text{eq}}(\epsilon) = \frac{\pi}{4} A_1(\epsilon)$  ( $\epsilon$ ). Аналогічно, заселеність точок  $j = 1, 2$  також виражається через розподіл Фермі та спектральні функції квантових точок  $A_j(\epsilon)$  [95]

$$n_j = \int f(\epsilon - \mu_j) A_j(\epsilon) d\epsilon.$$

$A_j(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_\sigma G_{j\sigma}^r(\epsilon + i\delta)$  легко отримати з відповідних точкових функцій Гріна  $G_{j\sigma}^r(\epsilon + i\delta) = \langle\langle \mathbf{d}_{j\sigma}; \mathbf{d}_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle$ . В атомній границі точкові функції Гріна мають різкі переходи між 4 локальними власними станами кожної точки. Проте гібридизація з контактами та міжточкове кулонівське відштовхування створюють кореляції та флуктуації між цими 16 локаль-

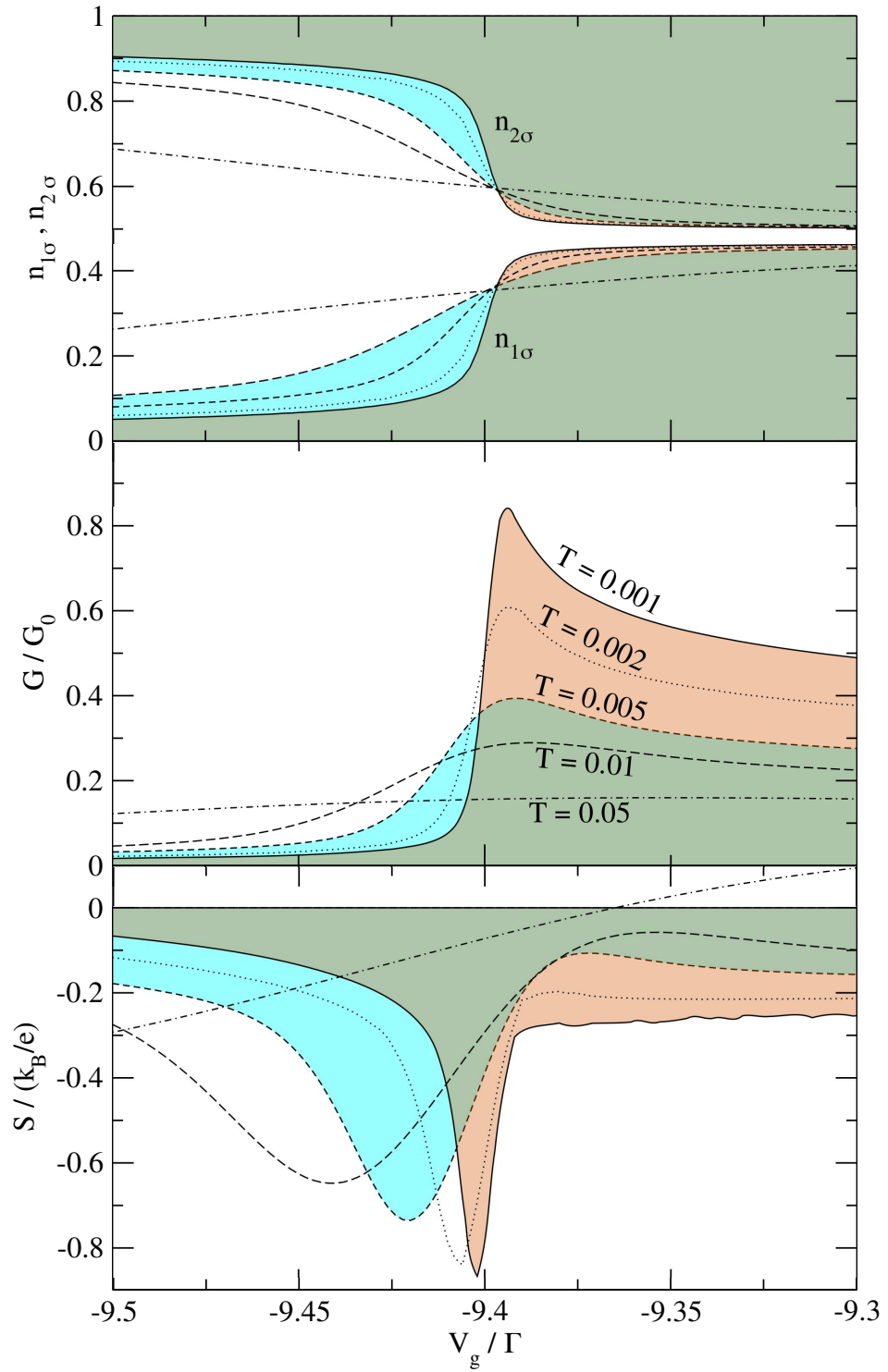


**Рис. 2.2** Залежність провідності від напруги затвора  $V_g \equiv \varepsilon_2$  для високих і низьких температур. Параметри (в одиницях  $\Gamma$ )  $V_{ch} \equiv \varepsilon_1 = -7.5 \Gamma$ , внутрішньоточкова кулонівська взаємодія  $U_1 = U_2 = 8 \Gamma$  і міжточкова взаємодія  $U_{12} = 6 \Gamma$ . При високих температурах провідність плавно змінюється від ізолятора до металевої. При низьких температурах спостерігається різкий резонанс провідності при переході від ізолятора до звичайного металевого стану.

ними станами. Останні розглядаються в рамках наближення NCA, яке використовуватись для розгляду резонансного тунелювання зі спіновими флуктуаціями, що лежать в основі ефекту Кондо. Даний ефект може бути спостережений для значень параметрів системи, які розглядаються.

## 2.3. Чисельні результати

У даному випадку розглядається досить велике внутрішньоточкове кулонівське відштовхування,  $U_1 = U_2 = 8 \Gamma$ , і помітний, але не надто великий ємнісний міжточковий зв'язок,  $U_{12} = 6 \Gamma$ . Рівень енергії провідного каналу нижньої точки фіксований на рівні  $V_{ch} \equiv \varepsilon_1 = -7.5 \Gamma$ , тоді як рівень верхньої точки,  $V_g \equiv \varepsilon_2$ , змінюється. Обчислена загальна провідність зображена на рис. 2.2. При високій температурі графік демонструє плавний перехід між слабким ізолятором



**Рис. 2.3** Заселеність точки для різних проекцій спіну (верхня панель), провідність (середня панель) і коефіцієнт Зеебека або термо-ЕРС (нижня панель) як функції  $V_g \equiv \varepsilon_2$ . Криві розраховані для тих самих параметрів, що й на рис. 2.2. Діапазон значень обраний у вузькій смузі в області переходу і для різних температур. Варто зауважити, що загальна заселеність у два рази перевищує  $n_{j\sigma}$  (зображена на верхній панелі) як для нижньої точки (1), так і для верхньої точки (2).

та слабкою провідністю. При низьких температурах ізоляційний і металевий стан набагато ближче до своїх визначальних характеристик, і перехід дуже різкий. Крім того, існує додатковий вузький режим підвищеної провідності прямо над напругою переходу,  $V_g^c \approx -9.4$  Г, у якому  $G$  наближається до свого теоретичного максимуму, визначеного квантом провідності  $G_0 = \frac{2e^2}{h}$ . Варто зауважити, що така поведінка є універсальною у тому сенсі, що не залежить від конкретного вибору параметрів.

Для того, щоб більш детально дослідити поведінку поблизу переходу між ізолятором та металевою провідністю було побудовано графіки заселеності квантових точок, провідності і термо-ЕРС для тих самих параметрів, що й на рис. 2.2, але у набагато вужчому діапазоні напруги на затворі (рис. 2.3). Як показано на верхній панелі, верхня точка майже подвійно зайнята для  $V_g \ll V_g^c$ , що зменшує заселеність нижньої точки, таким чином перешкоджаючи транспорту заряду через канал. Для  $V_g \gg V_g^c$  обидві точки близькі до одноелектронного заповнення і виникає звичайний металевий стан, який за низької температури має провідність приблизно  $\frac{1}{3}G_0$ . Крім того, для низьких температур спостерігається сильне збільшення провідності на металевій стороні переходу поблизу  $V_g \gtrsim -9.4$  Г. Для найнижчої температури, яка розглядається,  $T = 0.001$  Г, пік провідності має виражений максимум, близький до  $G_0$ . На малюнку також видно, що максимум сильно розмивається з підвищенням температури. Це, а також той факт, що підвищена провідність спостерігається лише в дуже вузькому режимі напруги на затворі, вказує на те, що резонансні спінові флуктуації, що лежать в основі ефекту Кондо, є ймовірною причиною виникнення такої поведінки. Для такої системи можна оцінити температуру Кондо як  $T_K \approx 8 \cdot 10^{-3}$  Г, що ідеально відповідає спостережуваній ерозії максимуму провідності. Такі висновки додатково підтверджуються розрахунками термо-ЕРС, відображеними на останній панелі Рис. 2.3. Негативна

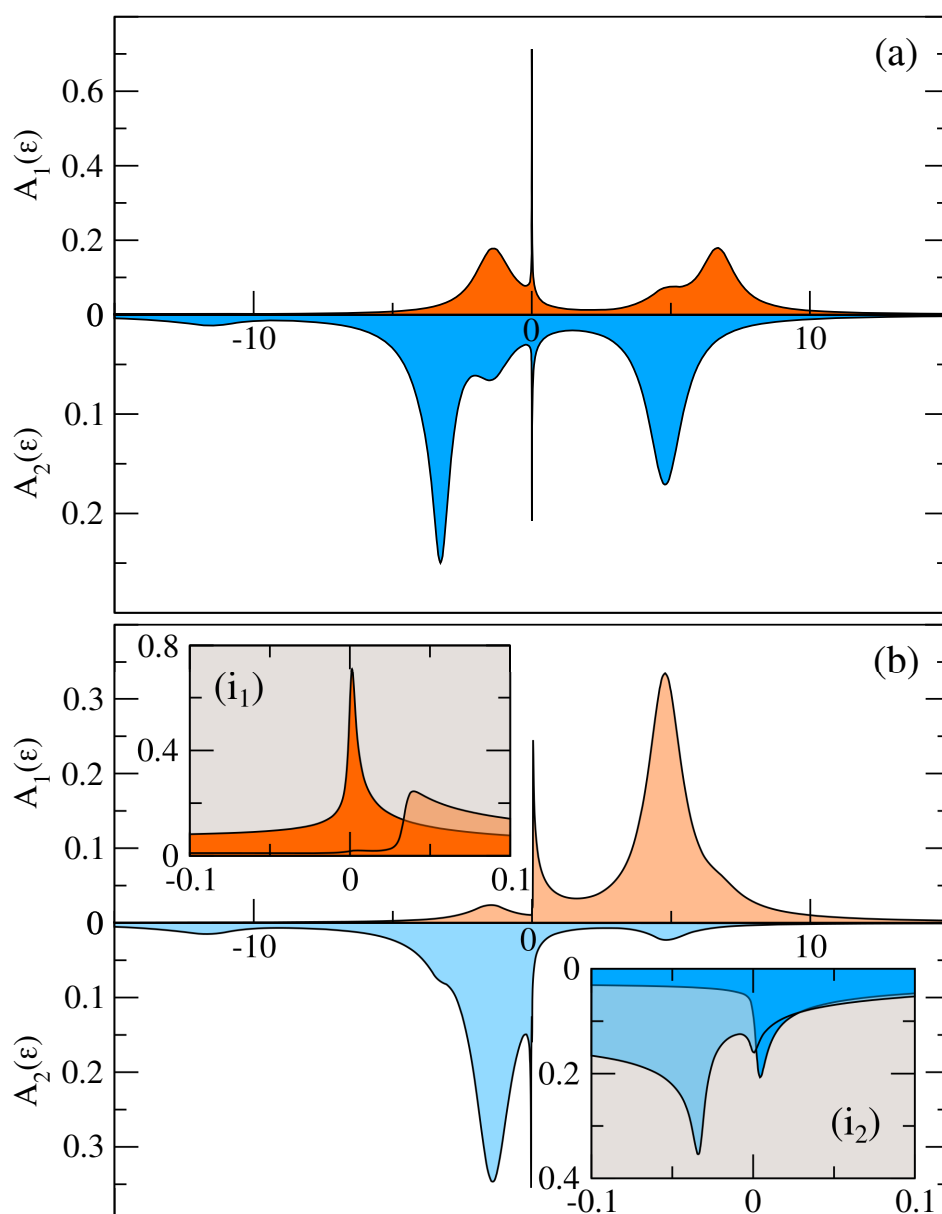
термо-ЕРС або термо-ЕРС, що змінює знак, є іншою ознакою транспорту в режимі Кондо [96].

### 2.3.1. Аналіз спектральної густини

Спектральні функції при низьких температурах зображені на рис. 2.4, є додатковим підтвердженням того, що підвищена провідність в металевій області пов'язана з ефектом Кондо. Також вони розкривають деталі раптового перемикання поведінки від практично відсутньої до майже ідеальної провідності. Частина (а) зображає спектральну густину нижньої квантової точки (червоний колір) і верхньої квантової точки (синій колір) на стороні металевої провідності переходу,  $V_g \approx V_g^c + 0.04$ . Для обох графіків основний вклад дають верхня та нижня смуги Хаббарда, розділені внутрішньоточковою кулонівською взаємодією  $U_1 = U_2 = 8 \Gamma$ , як і очікувалося для приблизно наполовину заповнених точок в моделі Андерсона. Що більш важливо, гострий Кондо резонанс присутній в обох спектральних густинах саме на рівні Фермі (це найбільш очевидно з вставок у нижній частині малюнка). Таким чином, саме внесок Кондо провідності в спектральну густину на рівні Фермі дозволяє подолати кулонівську блокаду та відновити ідеальну металеву поведінку — ефект, який вже спостерігався в інших системах Кондо при низькій температурі [97]. В області (b) на рис. 2.4, де провідний канал перебуває у стані ізолятора,  $V_g \approx V_g^c - 0.04$ , спектральна вага нижньої КТ переноситься на верхню смугу Хаббарда (червоний колір), що означає малу заселеність цієї точки. Тоді як спектральна густина верхньої точки знаходиться переважно в її нижній смузі Хаббарда (синій колір), що вказує на майже повністю зайняту точку затвору. Деякі внески Кондо все ще присутні поблизу рівня Фермі, але їх недостатньо для збереження металевої провідності в системі: як видно зі вставки  $i_1$ , залишковий пік Кондо (світло-червоний колір) лежить набагато вище рівня Фермі і тому не дає значного внеску у провідність через нижню квантову точку.

## 2.4. Висновки

В даному розділі було досліджено електронний транспорт через подвійну квантову точку із сильним внутрішньо- та міжточковим кулонівським відштовхуванням у  $\perp$ -подібній пристрої. У такій системі струм може протікати від витoku до стоку лише через нижню точку. Верхня точка відіграє роль затвору та завдяки наявному міжточковому кулонівському відштовхуванню керує потоком електронів через провідний канал нижньої точки. Щоб досягти цього, напруга верхнього контакту регулює заселеність верхньої точки. При низьких температурах спостерігається дуже різке перемикання при підвищенні напруги на затворі: спочатку зі стану ізолятора точка раптово переходить у режим резонансного тунелювання, де провідність близька до теоретичного максимуму  $G_0 = 2e^2/h$ , а потім у стан нормальної металеві провідності. Розрахунки коефіцієнта Зеєбека та спектральних густин підтверджують, що ця особлива поведінка перемикання тісно пов'язана з ефектом Кондо та його різким резонансом поблизу рівня Фермі. При підвищенні температури Кондо пік розмивається і перехід стає більш плавним, а стани менш вираженими: при збільшенні напруги затвору при температурах  $T \gtrsim T_K$  провідний канал плавно переходить зі стану "поганого" провідника до стану поганого "ізолятора".



**Рис. 2.4** Спектральні густини нижньої та верхньої точки поблизу переходу,  $A_1(\epsilon)$  і  $A_2(\epsilon)$ , де частина (a) представляє сторону із металевою провідністю,  $V_g \approx V_g^c + 0.04$ , а частина (b) область ізолятора,  $V_g \approx V_g^c - 0.04$ , для параметрів як на рис. 2.2 у низькотемпературному режимі  $T = 0.001$ . Вставки на нижній панелі зображають масштабовану частину графіку нижньої ( $i_1$ ) і верхньої ( $i_2$ ) точкових спектральних функцій поблизу рівня Фермі, причому темнішим кольором зображена частина графіку із металевою провідністю, а світлішим сторона ізолятора.



# **РОЗДІЛ 3 ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СИСТЕМИ ВЗАЄМОДІЮЧИХ БОЗОНІВ ПРИ НУЛЬОВОМУ ХІМІЧНОМУ ПОТЕНЦІАЛІ**

## **3.1. Вступ**

У останніх двох розділах даної дисертації буде досліджено властивості взаємодіючої системи бозонів в рамках іграшкової моделі з використанням термодинамічно узгодженого методу середнього поля. Дослідження має на меті визначити можливість та умови Бозе-Ейнштейнівської конденсації в такій системі в залежності від співвідношення між притягувальним і відштовхувальним внесками у взаємодію середнього поля.

Дослідженню даної тематики присвячена, наприклад, серія піонерських робіт Мігдала [98–101] та більш пізніх робіт інших авторів. В роботі [99] були досліджені умови виникнення піонного конденсату в нейтронній матерії та ядерній матерії. Показано, що конденсат виникає при густинах  $n > n_c^{\pm} \approx 0.8 n_0$  для нейтронної матерії та при густинах  $n > n_c \approx 0.6 n_0$  для ядерної матерії, де  $n_0$  - характерна густина ядерної матерії. Можливе утворення класичних піонних полів у релятивістських ядро-ядерних зіткненнях обговорювалось у посиланні [42–45]. У роботах [46–50] було розглянуто систему піонів зі скінченим хімічним ізоспіновим потенціалом при низьких температурах. Цікаві нові результати також були отримані при вивченні систем піонів при великих густинах за допомогою ґраткових методів [52, 53].

У даному розділі досліджується взаємодіюча бозонна системи при нульовому хімічному потенціалі. Температура може сягати достатньо великих значень, а отже і концентраціях теплових частинок може

бути доволі великою. Елементарні розрахунки для невзаємодіючого адронного резонансного газу показують, що густина частинок може досягати значень  $(0.1 - 0.2) \text{ fm}^{-3}$  при температурах  $100 - 150 \text{ MeV}$ , які знаходяться нижче фазового переходу деконфайнменту, див. [55, 56].

За таких умов ефекти взаємодії починають відігравати значну роль. Феноменологічне середнє поле  $U(n)$ , подібне до так званого потенціалу Скірма, введене для врахування взаємодії між бозонами. Дане поле залежить тільки від густини частинок  $n$ . Термодинамічно узгоджені співвідношення (самоузгоджене рівняння відносно густини частинок), отримані в рамках даного методу, можуть бути використані для обчислення густини частинок, густини енергії та тиску як функцій температури. Важливою відмінністю розглянутої системи є те, що на відміну від так званої бозонної матерії, кількість бозонів не зберігається, а визначається за допомогою мінімізації термодинамічного потенціалу.

## 3.2. Термодинамічно узгоджена модель середнього поля

Розглянемо систему взаємодіючих частинок із загальної термодинамічної точки зору в рамках канонічного ансамблю аналогічно до [102]. Густина вільної енергії  $\phi(n, T)$ , яка залежить від густини частинок  $n$  і температури  $T$ , містить повну інформацію про систему багатьох частинок. Зокрема основні співвідношення між густиною вільної енергії та іншими термодинамічними величинами можна записати наступним чином:

$$\phi(n, T) = \varepsilon(n, T) - T s(n, T), \quad (3.1)$$

$$\phi(n, T) = n\mu(n, T) - p(n, T), \quad (3.2)$$

де  $\varepsilon(n, T)$  - густина енергії,  $p(n, T)$  – тиск. Варто нагадати, що в роботі використано систему одиниць  $k_B = c = \hbar = 1$ . Величини  $\mu(n, T)$

(хімічний потенціал) і  $s(n, T)$  (густина ентропії) можуть бути записані як часткові похідні від незалежних змінних ( $n, T$ )

$$\mu = \left( \frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_T, \quad s = - \left( \frac{\partial \phi}{\partial T} \right)_n. \quad (3.3)$$

Для системи взаємодіючих частинок густина вільної енергії може бути записана як сума вільної та взаємодіючої частини

$$\phi(n, T) = \phi_0(n, T) + \phi_{\text{int}}(n, T), \quad (3.4)$$

де  $\phi_0$  – густина вільної енергії ідеальної системи без взаємодії. З (3.3) випливає, що хімічний потенціал також можна записати у вигляді суми «вільної» та «взаємодіючої» частини

$$\mu = \mu_0 + \left( \frac{\partial \phi_{\text{int}}}{\partial n} \right)_T, \quad \text{де} \quad \mu_0 \equiv \left( \frac{\partial \phi_0}{\partial n} \right)_T \quad (3.5)$$

Враховуючи рівняння (3.2), (3.4) і (3.5) для системи взаємодіючих частинок, тиск у системі може бути записаний у наступному вигляді

$$p = n \mu(n, T) - \phi(n, T) = p_0(n, T) + n \left( \frac{\partial \phi_{\text{int}}}{\partial n} \right)_T - \phi_{\text{int}}, \quad (3.6)$$

де позначено

$$p_0(n, T) = n \mu_0(n, T) - \phi_0(n, T), \quad (3.7)$$

Незалежні змінні  $n$  і  $T$  відповідають взаємодіючій системі. «Вільний» тиск  $p_0$  в останньому рівнянні (3.7) є тиском ідеального газу, розрахований для тих самих значень термодинамічних змінних  $n$  і  $T$

$$p_0(T, \mu_0) = \frac{g}{3} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{\sqrt{m^2 + k^2}} f_0[k; T, \mu_0(n, T)], \quad (3.8)$$

де  $g$  – фактор виродження,  $f_0(\mathbf{k}; T, \mu_0)$  – функція розподілу ідеального газу (Больцмана, Фермі-Дірака або Бозе-Ейнштейна).

Введемо наступні позначення:

$$U(n, T) \equiv \left[ \frac{\partial \phi_{\text{int}}(n, T)}{\partial n} \right]_T, \quad (3.9)$$

$$P^{\text{ex}}(n, T) \equiv n \left[ \frac{\partial \phi_{\text{int}}(n, T)}{\partial n} \right]_T - \phi_{\text{int}}(n, T). \quad (3.10)$$

Не важко бачити, що між двома введеними вище величинами існує зв'язок

$$n \frac{\partial U(n, T)}{\partial n} = \frac{\partial P^{\text{ex}}(n, T)}{\partial n}. \quad (3.11)$$

Підставивши  $P^{\text{ex}}(n, T)$  з (3.10) у рівняння (3.6), можна отримати

$$p = p_0(T, \mu_0) + P^{\text{ex}}(n, T), \quad (3.12)$$

Очевидно, що якщо в цьому рівнянні  $p_0(T, \mu_0)$  - тиск ідеального газу, то величину  $P^{\text{ex}}(n, T)$  слід розглядати як надлишковий тиск, який виникає через наявність взаємодії.

З рівнянь (3.9) і (3.10) випливає, що знання величин  $U(n, T)$  і  $P^{\text{ex}}(n, T)$  еквівалентне знанню густини вільної енергії, а отже, середнє поле та надлишковий тиск містять повну інформацію про систему.

Далі перейдемо до великого канонічного ансамблю, оскільки він є більш зручним для опису багаточастинкових систем із змінною кількістю частинок. У даному ансамблі незалежними змінними є температура  $T$  і хімічний потенціал  $\mu$ . Тиск  $p(T, \mu)$ , заданий через ці незалежні змінні, містить повну інформацію про систему. Для переходу від канонічного ансамблю до великого канонічного ансамблю необхідно задати умову еквівалентності середніх термодинамічних величин в обох ансамблях. У цьому випадку густина частинок стає функцією  $T$  і  $\mu$ , тобто  $n = n(T, \mu)$ , а тиск  $p(T, \mu)$  визначається з (3.12) як

$$p(T, \mu) = p_0 [T, \mu_0(n, T)] + P^{\text{ex}} [n(T, \mu), T]. \quad (3.13)$$

«Вільний» тиск  $p_0$  визначається виразом (3.8), в якому «вільний» хімічний потенціал  $\mu_0$  може бути виражений через  $T$  і  $\mu$  шляхом підстановки виразу (3.9) у рівняння (3.5)

$$\mu_0(T, \mu) = \mu - U[n(T, \mu), T]. \quad (3.14)$$

Тиск взаємодіючого газу розраховується за допомогою рівнянь (3.12) і (3.8), де у рівнянні (3.8) буде використано вираз для вільного хімічного потенціалу  $\mu_0$  з (3.14). В результаті можна отримати наступний вираз для тиску газу взаємодіючих частинок у великому канонічному ансамблі

$$p(T) = \frac{g}{3} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{\sqrt{m^2 + k^2}} f(k; T, \mu, n) + P_{\text{ex}}(n, T), \quad (3.15)$$

де мається на увазі, що  $n = \frac{\langle N \rangle}{V} = n(T, \mu)$ , а також

$$f(k; T, \mu, n) = \left\{ \exp \left[ \frac{\sqrt{m^2 + k^2} + U(n, T) - \mu}{T} \right] - 1 \right\}^{-1}. \quad (3.16)$$

У певному сенсі присутній перехід від канонічного ансамблю до великого канонічного ансамблю заснований на заміні густини числа частинок  $N/V$ , як незалежної змінної, своїм середнім значенням  $\langle N \rangle/V$ , яке залежить від хімічного потенціалу  $\mu$  і температури  $T$ . Отже, далі під величиною  $n$  приймається середнє значення  $\langle N \rangle/V$ . Такий перехід відповідає перетворенню Лежандра термодинамічних потенціалів, а саме переходу від опису системи за допомогою функції густини вільної енергії  $\phi(n, T)$  до опису за допомогою тиску  $p(T, \mu)$  або термодинамічного потенціалу  $\Omega = -p(T, \mu)V$ . У загальному випадку таке перетворення означає

$$p(T, \mu) = n\mu - \phi(n, T), \quad \text{де} \quad \mu = \left[ \frac{\partial \phi(n, T)}{\partial n} \right]_T. \quad (3.17)$$

Для однокомпонентного газу припущення термодинамічної границі, тобто  $N/V = \text{const}$ , коли  $N \rightarrow \infty$  і  $V \rightarrow \infty$ , є необхідним для того, щоб такий перехід був справедливим.

Оскільки вільна енергія була розділена на дві частини,  $\phi(n, T) = \phi_0(n, T) + \phi_{\text{int}}(n, T)$ , перетворення Лежандра у такому випадку виглядає наступним чином

$$p(T, \mu) - p_0(T, \mu_0) = n(\mu - \mu_0) - \phi_{\text{int}}(n, T),$$

$$\text{де } \mu - \mu_0 = \left[ \frac{\partial \phi_{\text{int}}(n, T)}{\partial n} \right]_T. \quad (3.18)$$

Друге рівняння в (3.18) не розв'язується явно, а зберігається в неявній формі з використанням скорочених позначень (3.9) і (3.10). Після чого рівняння 3.18 набуває вигляду

$$p(T, \mu) = p_0[T, \mu - U(n, T)] + P^{\text{ex}}(n, T), \quad (3.19)$$

де густина частинок  $n(T, \mu)$  неявно залежить від температури та хімічного потенціалу. Наступним кроком буде визначення функції  $U(n, T)$  або функції  $P^{\text{ex}}(n, T)$  за допомогою іншого підходу. Наприклад, можна визначити ці функції з віріального розкладу потенціалу взаємодії у системі багатьох частинок, або з якогось феноменологічного рівняння стану, яке описує реальні гази в канонічному ансамблі. Задача вважається сформульованою, коли отримано функцію  $U(n, T)$  або функцію  $P^{\text{ex}}(n, T)$  в явному вигляді.

Вираз (3.15) для тиску містить густину частинок  $n(T, \mu)$ , яка досі є невідомою величина, при заданих  $T$  і  $\mu$ . Для визначення  $n(T, \mu)$  використаємо наступну термодинамічну тотожність

$$n(T, \mu) = \frac{\partial p(T, \mu)}{\partial \mu} \quad (3.20)$$

Обчисливши похідну по  $\mu$  у виразі (3.15) і використовуючи співвідношення (3.11), можна отримати

$$n = g \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} f(\mathbf{k}; T, \mu, n). \quad (3.21)$$

В рамках даного підходу статистичну механіку, що розглядається, можна вважати нелінійною, оскільки права частина виразу (3.21) для густини частинок  $n$  явно залежить від  $n$ . Отже, отриманий вираз фактично є нелінійним рівнянням відносно  $n$ . Також можна бачити, що функція  $f(\mathbf{k}; T, \mu, n)$ , задана в (3.16), яка з'являється в (3.21), може розглядатися як функція розподілу з дисперсійним співвідношенням  $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k}) + U(n, T)$ , де  $\epsilon_0(\mathbf{k}) = \sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$ . Отже,  $U(n, T)$  можна інтерпретувати як термодинамічне середнє поле, яке вносить поправку у вільний одночастинковий спектр  $\epsilon_0(\mathbf{k})$ , шляхом врахування взаємодії у системі багатьох частинок.

Для початку розглянемо систему взаємодіючих бозонів без конденсату при нульовому хімічному потенціалі  $\mu = 0$ , що еквівалентно нульовому значенню густини ізоспіну  $n_I = 0$  або однаковій кількості частинок та античастинок в системі. Будемо називати цей стан газо-рідинною фазою, щоб відрізнити його від слабо взаємодіючого газу піонів. Використаємо термодинамічну модель середнього поля розглянуту вище (також див. [103, 104]). Середнє поле  $U(n, T)$  в (3.16) вважається незалежним від температури. Таким чином одночастинкова енергія має наступний вигляд

$$E(\mathbf{k}, n) = \sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2} + U(n). \quad (3.22)$$

З рівняння (3.15) отримуємо вираз для повного тиску однорідної системи взаємодіючих бозонів при  $\mu = 0$

$$p(T) = \frac{g}{3} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{k}^2}{\sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}} f(\mathbf{k}; T) + P_{\text{ex}}(n), \quad (3.23)$$

де функція розподілу тепер має вигляд

$$f(\mathbf{k}; T) = \left\{ \exp \left[ \frac{E(\mathbf{k}, n)}{T} \right] - 1 \right\}^{-1}. \quad (3.24)$$

Густина енергії у газо-рідинній фазі може бути отримана зі співвідношення Ейлера  $\varepsilon + p = T s + \mu n$ , де густина ентропії це похідна  $s = \partial p(T) / \partial T$ . Таким чином густина енергії може бути записана у вигляді

$$\varepsilon(T) = g \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \sqrt{m^2 + k^2} f(\mathbf{k}; T) + \varepsilon_{\text{ex}}(n),$$

де  $\varepsilon_{\text{ex}}(n) \equiv n U(n) - P_{\text{ex}}(n)$ . (3.25)

Для випадку нульового хімічного потенціалу самоузгоджене рівняння (3.21) може бути записане у вигляді

$$n = \frac{g}{2\pi^2} \int_0^\infty dk k^2 \left\{ \exp \left[ \frac{E(\mathbf{k}, n)}{T} \right] - 1 \right\}^{-1}. \quad (3.26)$$

Дане рівняння відносно  $n$  необхідно розв'язувати для кожної заданої температури  $T$ .

### 3.3. Бозе-конденсація у взаємодіючій системі піонів із нульовим ізотопічним спіном

З функції розподілу Бозе-Ейнштейна (3.24) випливає, що при імпульсах  $\mathbf{k} = 0$  одночастинкова енергія (3.22) повинна задовольняти умові  $E(0, n) \geq -m$ , інакше функція розподілу (3.24) приймає від'ємні значення. Саме ця умова визначає інтервал температур, де відбувається Бозе-конденсація.

Гранична густина теплових частинок,  $n_{\text{lim}}(T)$ , безпосередньо перед утворенням Бозе-конденсату, тобто при  $U(n) = -m$ , така сама, що й в

ідеальному релятивістському газі при  $\mu = m$

$$n_{\text{lim}}(T) = \frac{g}{2\pi^2} \int_0^\infty dk k^2 \left[ \exp\left(\frac{\sqrt{m^2 + k^2} - m}{T}\right) - 1 \right]^{-1}. \quad (3.27)$$

На рис. 3.1 (Права панель) ця залежність зображена як червона пунктирна лінія, яка розділяє нормальну фазу (яка містить лише теплові частинки) та фазу з Бозе-конденсатом (яка містить як теплові частинки, так і конденсовані частинки). Виходячи з вищесказаного, можна зробити наступний загальний висновок: для величини потенціалу середнього поля меншої ніж  $-m$ , у рівноважній системі бозонів з нульовим хімічним потенціалом утворюється Бозе-конденсат.

### 3.3.1. Параметризація Скірма для середнього поля.

Формалізм, розглянутий у розділі 3.2, може бути застосований для кількох цікавих із фізичної точки зору систем, наприклад, адрон-резонансний газ [102] та піонний газ [105]. Далі підхід термодинамічно узгодженої моделі середнього поля буде узагальнено на випадок бозонної системи, у якій може утворюватись Бозе-конденсат. Розглянемо потенціал взаємодії між частинками, подібний до потенціалу взаємодії у моделі Скірма [41], який має вигляд

$$U(n) = -A n + B n^2, \quad (3.28)$$

де  $n$  - густина частинок,  $A > 0$  і  $B > 0$  - додатньо визначені параметри. Таким чином досліджувана бозонна система характеризується доволі загальними властивостями: між частинками присутнє як притягання, так і відштовхування (3.28). Причому частина середнього поля, яка відповідає за відштовхування має більшу степінь у показнику при густині частинок. Такий вибір зроблено для того, щоб при великих густинах частинок в системі не відбувався колапс. З фізичної точки зору внесок у притягуючу компоненту середнього поля на високих

енергіях або при високих температурах ( $T \propto 150$  MeV) частково може забезпечуватись також наявністю інших адронів у реальній фізичній системі.

Надлишковий тиск можна отримати, використавши умову термодинамічної узгодженості (3.11) та підставивши  $U(n)$  з рівняння (3.28),

$$P_{\text{ex}}(n) = \int_0^n dn' n' \frac{\partial U(n')}{\partial n'} = -\frac{1}{2} A n^2 + \frac{2}{3} B n^3. \quad (3.29)$$

Маса частинок, які будуть розглядатись в рамках досліджуваної моделі, обирається рівною  $m = 139$  MeV, а коефіцієнт виродження  $g = 3$ . Ці величини відповідають характеристикам частинок, які називаються “піонами”. Одна із причин такого вибору полягає в тому, що піони є найлегшими мезонами, Бозе-конденсат яких може виникати у ядерній та нейтронній матерії, що було обговорено у Вступі 3.1 до даного розділу.

Основна задача даного розділу це дослідження можливості та умови виникнення Бозе-Ейнштейнівської конденсації в такій системі взаємодіючих піонів в залежності від співвідношення між притягувальним і відштовхувальним внесками у взаємодію середнього поля. З цією метою коефіцієнт відштовхування  $B > 0$  вважається фіксованим при всіх подальших розрахунках. Його величина отримана з оцінки на основі віріального розкладу [106],  $B = 10mb^2$  при  $b$ , що дорівнює чотирьом об’ємам частинки, тобто  $b = 16\pi r_0^3/3$ . Коефіцієнт  $b = 0.45$  fm<sup>3</sup> обирається таким, що відповідає радіусу піона  $r_0 \approx 0,3$  fm. Коефіцієнт притягання  $A$  розглядається як параметр моделі, який буде змінюватись. Потенціал взаємодії  $U(n)$  зображено на рис. 3.1 (верхня панель) для різних значень безрозмірного параметра  $\kappa = A/A_c$ , що характеризує силу притягання у системі. Тут  $A_c = 2\sqrt{mB}$  - критичне значення  $A$ , при якому потенціал досягає мінімального значення  $-m$ . Значення  $\kappa \geq \kappa_c = 1$  призводять до перетину рівня  $-m$  та появи інтервалу густини, де функція  $E(\mathbf{0}, n)$  є

від'ємною. Кінцеві точки цього інтервалу визначаються з рівняння

$$U(n) + m = 0. \quad (3.30)$$

Використавши потенціал  $U(n)$  із (3.28), можна отримати наступні розв'язки

$$\begin{aligned} n_1 &= \sqrt{\frac{m}{B}} \left( \kappa - \sqrt{\kappa^2 - 1} \right), \\ n_2 &= \sqrt{\frac{m}{B}} \left( \kappa + \sqrt{\kappa^2 - 1} \right). \end{aligned} \quad (3.31)$$

На інтервалі  $n_1 < n < n_2$  інтеграл у рівнянні (3.26) не є додатньо визначеним, а тому такі густини не реалізуються в рівноважній системі. При  $\kappa > \kappa_c = 1$  зміна густини піонів від  $n = n_1$  до  $n = n_2$  можлива лише через появу конденсату у системі і переходу частини піонів у стан із нульовим імпульсом  $|k| = 0$ , так що їх загальна густина змінюється стрибком з  $n = n_1$  до  $n = n_2$ . Причому рівняння  $n = n_1$ ,  $n = n_2$  є рівняннями стану для системи з конденсатом і, як буде показано далі, вони задовольняють узагальнене самоузгоджене рівняння 3.32. Як видно з рівняння (3.31) критичне значення параметра  $A$  отримується, коли обидва корені збігаються, тобто коли  $\kappa = 1$  або  $A = A_c = 2\sqrt{mB}$ . Використавши фіксоване значення параметра  $B$ , можна обчислити  $A_c = 2\sqrt{10mb} \approx 396 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$ . При значенні  $\kappa = 1$ , коли вершина праболічного потенціалу дотикається рівня  $-m$ , можна обчислити значення критичної густини піонів в цій точці  $n_0 = A_c/2B = \frac{1}{\sqrt{10b}} \approx 0.7 \text{ fm}^{-3}$ .

Таким чином параметр  $\kappa$  зручно вибрати як варіаційний параметр, тобто параметризувати варіації коефіцієнта притягання  $A$  безрозмірним параметром  $\kappa$ . Всі подальші розрахунки будуть виконані для різних значень параметра  $\kappa$ . Критичне значення параметра  $\kappa_c = 1$  розбиває діапазон його значень на 2 відрізки, для яких, як буде видно далі,

поведінка системи принципово відрізняється. Тому значення  $\kappa_c < 1$  будемо умовно називати “слабким” притяганням, а значення  $\kappa_c > 1$  – “сильним” притяганням.

### 3.3.2. Густина частинок, густина енергії та тиск при “слабкому притяганні”

Для “слабкого” притягання, тобто значень  $\kappa \leq 1$  очікується, що  $U(n) \geq -m$  для всіх  $n$ . Тобто “заборонених” значень густини частинок не виникає і можна очікувати, що самоузгоджене рівняння 3.26 буде мати розв’язки у газо-рідинній фазі для всіх значень температури. Що свідчить про відсутність Бозе-конденсату у системі для таких значень притягання.

Щоб отримати рівняння стану для густини частинок  $n(T)$  треба розв’язати самоузгоджене рівняння (3.26) для фіксованого значення  $\kappa \leq 1$  і для певного набору значень температур з заданого інтервалу. На нижній панелі рис. 3.1 зображено результати розрахунку рівнянь стану піонів для густини залежної від температури для різних значень параметра  $\kappa = 0, 0.55, 0.82, 1$  (чорні суцільні лінії). Видно, що, як і очікувалось, розв’язки самоузгодженого рівняння лежать у газо-рідинній фазі для всіх значень температури, зображених на рисунку. Тобто для випадку “слабкого” притягання Бозе-конденсат у системі взаємодіючих піонів при нульовому заряді ізоспіну  $n_I$  не виникає. Пунктирна чорна крива зображає ідеальний релятивістський піонний газ із  $\mu = 0$ .

Знаючи залежність  $n(T)$ , можна обчислити тиск та густину енергії для “слабкого” притягання у газо-рідинній фазі, використавши рівняння (3.23) та (3.25), з урахуванням виразу для  $P_{ex}(n)$  із (3.29).

### 3.3.3. Самоузгоджений розв’язок для змішаної фази.

Розглянемо випадок “сильного” притягання, тобто коли  $\kappa > 1$ . Як було сказано вище для таких значень  $\kappa$  в системі виникають “заборонені”

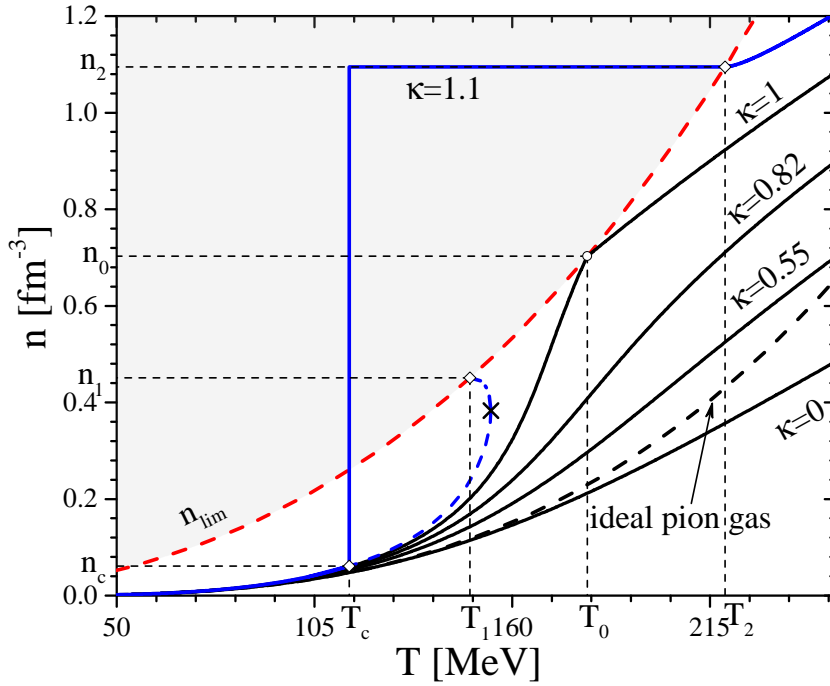
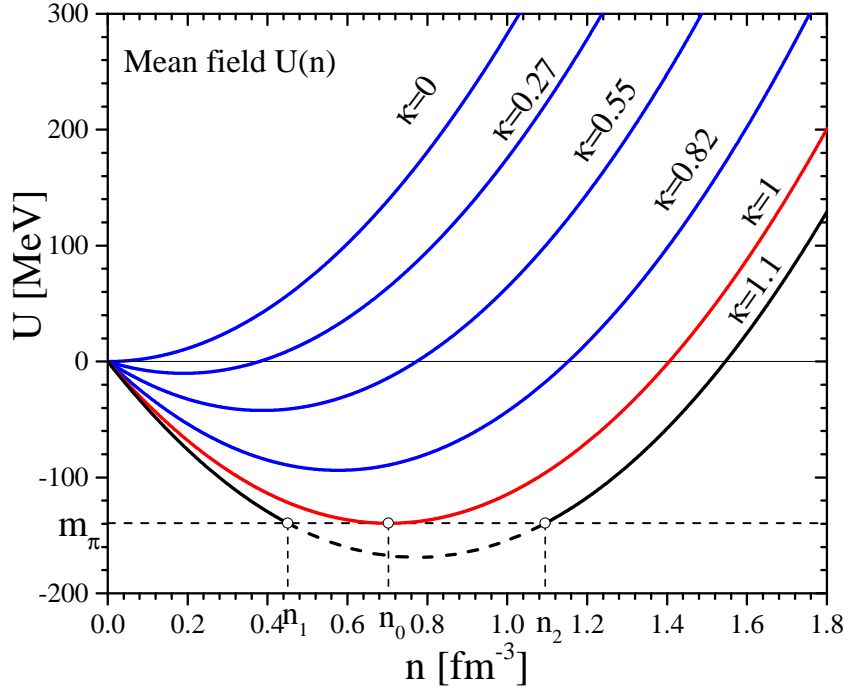
значення густини частинок, тобто значення, для яких  $U(n) < -m$ . У зв'язку з цим можна очікувати, що самоузгоджене рівняння (3.26) буде мати розв'язки не для всіх значень температури. Для тих значень температури, для яких розв'язків не буде, дане рівняння потрібно узагальнити і ввести доданок, який відповідатиме за Бозе-конденсат. Також варто очікувати, що в діапазоні температур “з конденсатом” розв'язки будуть лежати вище граничної густини  $n_{\text{lim}}(T)$ . У класичному розумінні конденсації Бозе-Ейнштейна (див., наприклад, [107]), нище  $T_c$  густина частинок складається з двох внесків: внеску теплових частинок та конденсату. Отже, у змішаній фазі самоузгоджене рівняння (3.26) узагальнюється таким чином (див. [41, 107])

$$n = n_{\text{cond}} + \frac{g}{2\pi^2} \int_{k \neq 0} dk k^2 \left\{ \exp \left[ \frac{E(k, n)}{T} \right] - 1 \right\}^{-1}, \quad (3.32)$$

де  $n$  - загальна густина частинок, яка складається з густини теплових частинок  $n_{\text{th}}$  (другий доданок у правій частині останнього рівняння) та густини конденсованих частинок  $n_{\text{cond}}$ , які мають нульовий імпульс. Необхідно зауважити, що у даній роботі  $T_c$  - це температура початку конденсації, в той час як у підручниках це позначення зазвичай використовується для найбільшої температури, при якій конденсація закінчується.

Розв'язок, отриманий для рівняння стану для значення параметра притягання  $\kappa = 1.1$ , зображено на нижній панелі рис. 3.1 суцільною синьою кривою, яка складається з декількох частин.

Як було сказано вище критичне значення  $\kappa_c = 1$  розділяє два якісно різні режими. При  $\kappa < \kappa_c$  криві  $n(T)$  неперервні, тоді як при  $\kappa > \kappa_c$  вони складаються із двох частин з проміжком між ними. Цей розрив з'являється саме між густинами  $n_1$  і  $n_2$ , де  $U(n) + m < 0$ , див. нижню панель рис. 3.1.

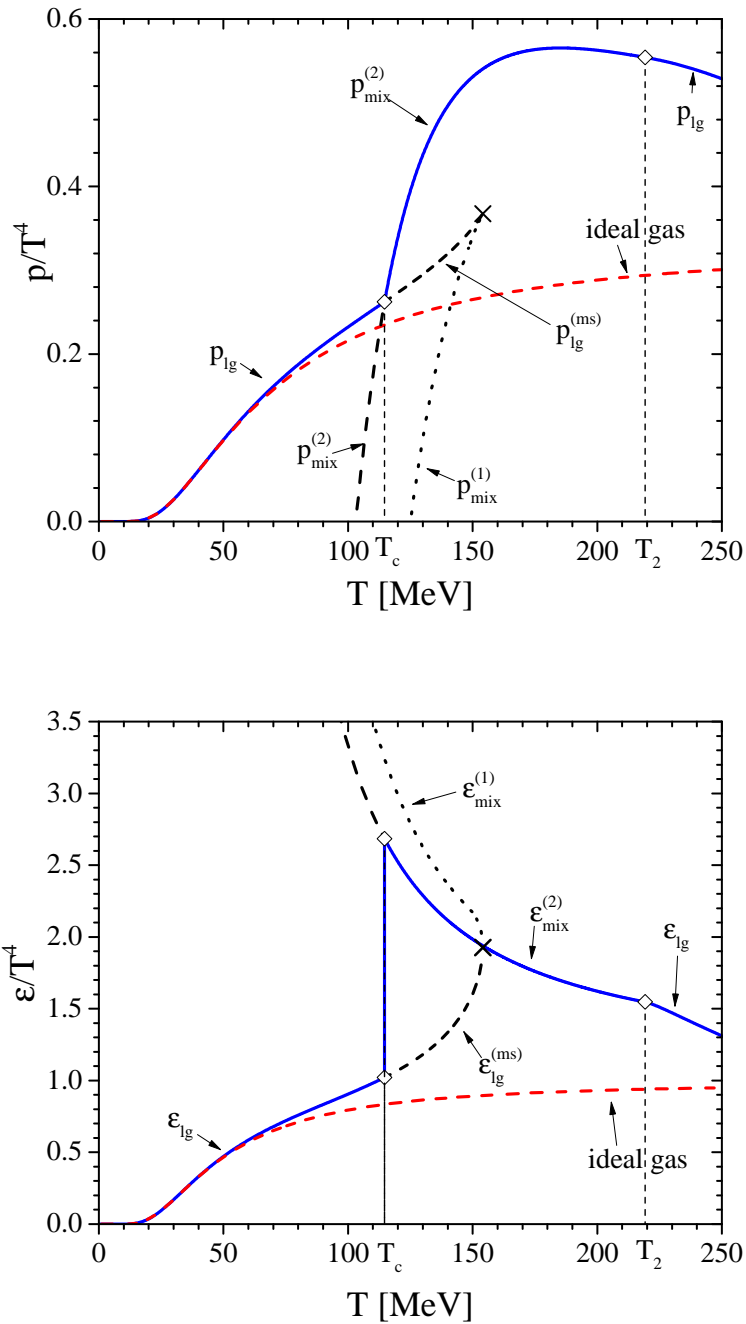


**Рис. 3.1** Верхня панель: Залежність середнього поля  $U(n)$  від густини частинок для різних значень параметра  $\kappa = A/A_c$ . Густини  $n_1$ ,  $n_2$  та  $n_0$  - точки перетину з лінією  $U = -m$ . Нижня панель: Залежність густини частинок від температури для системи взаємодіючих піонів із  $\mu = 0$ . Температури  $T_1$ ,  $T_2$  та  $T_0$  відповідають точкам, де густини  $n_1$ ,  $n_2$  та  $n_0$  перетинають граничну густину  $n_{\text{lim}}(T)$  (червона пунктирна крива).

Фазовий перехід з нижньої гілки самоузгодженого розв'язку в фазу Бозе-кондесату відбувається при критичній температурі  $T = T_c$ . В цій точці відбувається стрибок густини частинок зі значення  $n_c = 0.06 \text{ fm}^{-3}$  до значення  $n_2 = 1.09 \text{ fm}^{-3}$ . Критична температура  $T_c$  визначається із точки перетину кривих тиску для газо-рідинної та змішаної фаз. Тиск у газо-рідинній фазі розрахований для самоузгодженого розв'язку рівняння (3.26) аналогічно до розділу 3.3.2, а у змішаній фазі на рівнянні стану  $n = n_2$ . Обчислення тиску у змішаній фазі буде детально обговорене в розділі 3.3.4. Результати розрахунку тисків показано на верхній панелі рис. 3.2. Оскільки густина змінюється стрибком, це, безумовно, фазовий перехід першого роду. Тобто, якщо досягнути температури  $T_c$  та продовжувати накачувати енергію в багаточастинкову систему піонів, відбудеться фазовий перехід, що призведе до утворення Бозе-кондесату навіть у системі з  $\mu = 0$ . Як наслідок, густина піонів буде мати стрибок по вертикальній лінії  $T = T_c$ . При цьому для утворення конденсату в цій точці, необхідна додаткова кількість енергії, яка є нічим іншим як прихованою енергією фазового переходу, про що свідчить розрив на графіку залежності нормованої густини енергії на нижній панелі рис. 3.2. Що і являється підтвердженням того, що даний фазовий перехід є фазовим переходом першого роду.

При подальшому підвищенні температури, система піонів буде еволюціонувати вздовж горизонтальної лінії  $n = n_2$  від  $T_c = 115 \text{ MeV}$  до  $T_2 = 219 \text{ MeV}$ , як показано на верхній панелі рис. 3.1 (для  $\kappa = 1.1$ ). Рівняння (3.32) є коректним у даному конкретному випадку, де еволюція системи протікає по лінії постійної густини  $n = n_2$ . Дійсно, для кожної температури  $T$  з інтервалу  $T_c < T \leq T_2$  (див. нижню панель рис. 3.1) густина частинок має величину  $n = n_2$  і, таким чином, значення середнього поля дорівнює  $U(n_2) = -m$ . У зв'язку з цим рівняння (3.32) можна переписати як

$$n_2 = n_{\text{cond}}(T) + n_{\text{lim}}(T), \quad (3.33)$$



**Рис. 3.2** *Верхня панель:* Залежність тиску нормованого на  $T^4$  від температури для системи взаємодіючих піонів із  $\mu = 0$  і параметром притягання  $\kappa = 1.1$ . Суцільні сині лінії, позначені як  $p_{lg}$  і  $p_{mix}^{(2)}$ , відповідають тиску у газо-рідинній та змішаній фазах (вздовж  $n = n_2$ ) відповідно, і відображають отримане рівняння стану. *Нижня панель:* Залежність густини енергії нормованої на  $T^4$  від температури при тих самих умовах та значеннях параметрів як на верхній панелі. Синя суцільна крива, яка складається з декількох сегментів, позначена як  $\epsilon_{lg}$  та  $\epsilon_{mix}^{(2)}$  з вертикальним відрізком вздовж  $T = T_c$ , являє собою рівняння стану.

де використано визначення (3.27) величини  $n_{\text{lim}}$ . З рівняння (3.33) можна бачити, що в змішаній фазі загальна густина частинок  $n = n_2$  дійсно складається із внеску конденсату  $n_{\text{cond}}$  та теплових частинок  $n_{\text{th}}$ , які досягають максимально можливого значення  $n_{\text{lim}}(T)$  при заданій  $T$ . Отже, рівняння (3.32) слід розглядати як самоузгоджений опис піонного конденсату в рамках підходу середнього поля.

При  $T > T_c$  гілка самоузгодженого розв'язку для газо-рідинної фази (синя пунктирна лінія на нижній панелі рис. 3.1) стає метастабільною і має поворот (від'ємну похідну) під час наближення до граничної густини  $n_{\text{lim}}(T)$  знизу. Варто зауважити, що верхній сегмент (після точки позначеної хрестом) є нестабільним.

### 3.3.4. Тиск та густина енергії у змішаній фазі.

Як було показано у розділі 3.3.3, у змішаній фазі при наявності Бозе-конденсату загальна густина частинок  $n$  є постійною та рівною  $n = n_2$ . Таким чином тиск у змішаній фазі може бути записаний як

$$p_{\text{mix}}(T) = \frac{g}{3} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{\sqrt{m^2 + k^2}} \times \\ \times \left\{ \exp \left[ \frac{\sqrt{m^2 + k^2} + U(n_2)}{T} \right] - 1 \right\}^{-1} + P_{\text{ex}}(n_2), \quad (3.34)$$

де  $U(n_2) = -m$  та  $P_{\text{ex}}(n)$  задається рівністю (3.29). Слід пам'ятати, що частинки, які знаходяться в конденсаті, мають імпульс  $k = 0$  та не дають внесок у кінетичну частину тиску (перший доданок), але дають вклад у тиск, пов'язаний із взаємодією, через  $P_{\text{ex}}$  (другий доданок). На верхній панелі рисунку 3.2 показані гілки тисків, розраховані для різних фаз. Отримане рівняння стану зображено як суцільна синя крива. Критична температура  $T_c = 115$  MeV отримується із точки перетину двох гілок тиску: тиск газо-рідинної фази для  $\kappa = 1.1$  і тиск змішаної фази при  $n = n_2$ . При  $T > T_c$  гілка, що відповідає газо-рідинній

фазі  $p_{lg}^{(ms)}$ , є метастабільною (пунктирна чорна крива на верхній панелі рис. 3.2). Хрест позначає злам, що відповідає переходу у нестабільну область, тобто тиск розрахований на нестабільному сегменті на графіку залежності густини від температури (на обох графіках використано однакові позначення). Точкова та пунктирна чорні лінії підписані як  $p_{mix}^{(1)}$  та  $p_{mix}^{(2)}$  на верхній панелі рис. 3.2 відповідають метастабільним станам у змішаній фазі для піонних густин  $n = n_1$  та  $n = n_2$  відповідно.

У змішаній фазі густина енергії складається з кінетичної частини,  $\epsilon_{kin}(T)$ , яка відповідає енергії теплових частинок в газо-рідинній фазі з густиною  $n_{lg}(T)$ . Частинки конденсату з густиною  $n_{cond}(T)$  мають нульовий імпульс. Відповідно до самоузгодженого розв'язку рівняння (3.32), у змішаній фазі сума цих густин залишається постійною,  $n_{lg}(T) + n_{cond}(T) = n_2$ . Ця постійна густина  $n_2$  визначає надлишкову густину енергії  $\epsilon_{ex}(n_2)$  у змішаній фазі. Особливість змішаної фази полягає і в тому, що маса конденсованих частинок дає ще один вклад у густину енергії,  $mn_{cond}(T)$ . Використавши рівняння (3.25) із  $U(n_2) = -m$  для того, щоб отримати  $\epsilon_{ex}(n_2) = -mn - P_{ex}(n_2)$ , та рівняння (3.33), щоб визначити  $n_{cond}(T)$ , можна записати густину енергії у змішаній фазі як

$$\epsilon_{mix}^{(2)} = g \int_{|k| \neq 0} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left( \sqrt{m^2 + k^2} - m \right) \times \\ \times \left[ \exp \left( \frac{\sqrt{m^2 + k^2} - m}{T} \right) - 1 \right]^{-1} - P_{ex}(n_2). \quad (3.35)$$

На рис. 3.2 (нижня панель) зображено густину енергії нормовану на  $T^4$  при  $\kappa = 1.1$ , розраховану для різних фаз. Рівняння стану взаємодіючих піонів у температурному інтервалі  $0 < T < 250$  MeV зображене синьою суцільною кривою, яка включає в себе стрибок в точці фазового переходу  $T_c$ . Густина енергії піонів у метастабільному стані  $\epsilon_{mix}^{(1)}$  розрахована при сталій густині  $n = n_1$  у змішаній фазі зображена чорною точковою кривою, яка неперервно переходить у нестабільну ділянку

самоузгодженого розв'язку в газо-рідинній області. Густина енергії метастабільних станів у газо-рідинній фазі  $\epsilon_{lg}^{(ms)}$  зображена чорним пунктиром. Густина енергії ідеального релятивістського газу піонів при  $\mu = 0$  зображена червоною пунктирною кривою. Легко бачити, що для  $\kappa = 1.1$  модель прогнозує стрибок у рівнянні стану густини енергії приблизно на  $30 \text{ MeV/fm}^3$  (приховане тепло) при критичній температурі  $T_c = 115 \text{ MeV}$ . Як вже було зазначено раніше, це є проявом фазового переходу першого порядку.

### 3.4. Висновки

У даному розділі в рамках термодинамічно узгодженої моделі середнього поля було розглянуто систему сильновзаємодіючих бозонів при нульовому ізоспіновому заряді, при високих температурах та густинах частинок. Метод був узагальнений для випадку присутнього у системі Бозе-конденсату та застосований для дослідження системи взаємодіючих піонів із потенціалом взаємодії подібним до потенціалу в моделі Скірма. Було показано, що для конденсатних станів самоузгоджене рівняння (3.26) узагальнюється і замінюється рівнянням (3.32).

Досліджено умови виникнення Бозе-конденсату в системі взаємодіючих піонів в залежності від співвідношення між притягувальним та відштовхувальним внесками в середнє поле  $U(n)$ . Критичне значення безрозмірного коефіцієнта притягання  $\kappa$ , яке рівне  $\kappa_c = 1$ , розбиває діапазон його значень на дві області, для яких поведінка системи принципово відрізняється. У випадку “слабкого” притягання, тобто для значень коефіцієнта  $\kappa < \kappa_c = 1$ , Бозе-конденсація в системі не відбувається і стани системи знаходяться в газо-рідинній фазі для всього діапазону досліджуваних значень температури. Для сильного притягання, коли  $\kappa > \kappa_c = 1$ , умова  $U(n) \geq -m$  перестає виконуватись для густин з інтервалу  $n_1 < n < n_2$ , і в системі виникає Бозе-конденсат при температурі  $T_c = 115 \text{ MeV}$ . Густина частинок змінюється стрибком зі значення  $n_c = 0.06 \text{ fm}^{-3}$  до значення  $n_2 = 1.09 \text{ fm}^{-3}$ . При цьому відбува-

ється перехід першого роду із поглинанням прихованої теплоти в фазу Бозе-конденсату. Підтвердженням цього є розрив на графіку залежності теплоємності від температури.

Варто зауважити, що емпіричні дані та теоретичні розрахунки вказують на те, що піон-піонна взаємодія досить слабка при енергіях  $\leq 100$  MeV. Тим не менш, додатковий внесок у середнє поле може забезпечуватись за рахунок притягуючої взаємодії піонів із нуклонами у відносно холодній ядерній речовині, як показано в [98–101], або за рахунок  $\rho$ -мезонних та баріон-антибаріонних пар при високих температурах, як в [108, 109]. Очевидно, що при високих температурах у адронній матерії буде з'являтися багато інших частинок. Вони можуть вносити додатковий вклад у притягання в середньому полі, який відчують піони. За рахунок цього можуть з'явитись нові доданки у оптичному потенціалі піонів, які будуть пропорційними до густини цих додаткових частинок, див. [108]. За таких умов ефективна маса піонів зменшиться, а отже зменшиться і температурний поріг для появи конденсату піонів, як показано у рівнянні (3.30).

# Розділ 4 ТЕРМНОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СИСТЕМИ ВЗАЄМОДІЮЧИХ БОЗОНІВ ПРИ НЕНУЛЬОВОМУ ХІМІЧНОМУ ПОТЕНЦІАЛІ

## 4.1. Вступ

У даному розділі буде розглянуто взаємодіючу систему Бозе частинок-античастинок при ненульовому та збереженому ізоспіновому заряді  $n_I$  і скінченній температурі. Бозонні частинки умовно назвемо «піонами», аналогічно до минулого розділу 2. Такий вибір зроблено, оскільки  $\pi$ -мезони є, по-перше, найлегшими адронами, які мають ізоспінний хімічний потенціал відмінний від нуля. По-друге, Бозе-конденсат піонів може виникати у ядерній та нейтронній матерії [99–101], що було більш детально обговорено в 3.1. По-третє, піони є найлегшими ядерними бозонами, тому процеси створення ”температурних” пар частинок-античастинок можуть бути описані методами квантової-статистики.

Щоб врахувати взаємодію між бозонами, вводиться феноменологічне середнє поле  $U(n)$  подібне до поля Скірма, яке залежить лише від повної густини мезонів  $n$ , аналогічно до того, як це було зроблено в попередньому розділі. Це середнє поле відображає наявність інших сильно взаємодіючих частинок в системі, таких як, наприклад,  $\rho$ -мезони, пари нуклон-antinуклон при низьких температурах, глюони або пари кварк-антикварк при високих температурах,  $T > T_{\text{qgp}} \approx 160 \text{ MeV}$ .

Дослідження в даній главі є розвитком запропонованого підходу у попередньому розділі 3 та у [41], де розглядалася бозонна система в рамках Великого канонічного ансамблю з нульовим хімічним потенціалом. Тепер термодинамічні властивості такої мезонної системи будуть розгля-

датись у канонічному ансамблі, де канонічними змінними є температура  $T$  та ізоспінова густина  $n_I$ . Досліджувана самовзаємодіюча багаточастинкова система розглядається в рамках іграшкової моделі, яка може допомогти зрозуміти процеси Бозе-Ейнштейнівської конденсації та фазові переходи у широкому діапазоні температур і густин.

Підсумовуючи вищесказане, у даному розділі в рамках Канонічного ансамблю буде розраховано термодинамічні характеристики неідеального гарячого “піонного” газу з фіксованою густиною ізоспіну  $n_I = n_{\pi}^{(-)} - n_{\pi}^{(+)} > 0$ , де  $n_{\pi}^{(\mp)}$  – густина  $\pi^{\mp}$ -мезонів, відповідно.

Даний підхід, який є фізично прозорим і достатньо зрозумілим, має на меті полегшити розуміння більш складної картини фазової структури мезонних систем, що виникають в кварк-мезонних моделях, наприклад, в моделі Намбу-Йона-Ласініо та граткових розрахунках.

## 4.2. Модель середнього поля для системи бозонів та антибозонів

Термодинамічні властивості системи взаємодіючих бозонних частинок та античастинок при кінцевих температурах розглядаються в рамках моделі термодинамічного середнього поля (див. [102–104]), аналогічно до того, як це було зроблено в 3.2. Даний підхід заснований на представленні вільної енергії системи частинок-античастинок у вигляді суми двох доданків: перша частина — це вільна енергія двокомпонентної системи без взаємодії, а друга частина відповідає за взаємодію між усіма частинками. Таким чином густина вільної енергії  $\phi$  двокомпонентної система запишеться як:

$$\phi(n_1, n_2, T) = \phi_1^{(0)}(n_1, T) + \phi_2^{(0)}(n_2, T) + \phi_{\text{int}}(n, T). \quad (4.1)$$

де  $\phi_1^{(0)}$  і  $\phi_2^{(0)}$  — густина вільної енергії для частинок першої та другої компоненти без взаємодії, тоді як густина вільної енергії  $\phi_{\text{int}}$  враховує взаємодія в системі,  $n_1$  і  $n_2$  є густина частинок кожної компоненти

та  $n = n_1 + n_2$ . Далі хімічний потенціал розраховується як похідна  $\mu_i = (\partial\phi/\partial n_i)_T$ , де  $i = 1, 2$ , що в результаті дає  $\mu_i^{(0)} = \mu_i - U(n)$ , де  $\mu_i^{(0)} = \partial\phi_i^{(0)}/\partial n$  і  $U(n) \equiv \partial\phi_{\text{int}}/\partial n$ . Подібним чином можна записати тиск,  $p = \mu_1 n_1 + \mu_2 n_2 - \phi$ , розділивши його на вільну та взаємодіючу частини

$$p(n_1, n_2, T) = p_1^{(0)} + p_2^{(0)} + P(n, T), \quad (4.2)$$

де  $p_i^{(0)} = \mu_i^{(0)} n_i - \phi_i^{(0)}$  — тиск ідеального газу, створений  $i$ -ою компонентою системи, а  $P(n, T) \equiv n(\partial\phi_{\text{int}}/\partial n)_T - \phi_{\text{int}}$  - надлишковий тиск. Легко бачити, що із означення  $U(n)$  і  $P(n)$  випливає диференціальна відповідність між цими величинами, аналогічна до 3.11:

$$n \left[ \frac{\partial U(n, T)}{\partial n} \right]_T = \left[ \frac{\partial P(n, T)}{\partial n} \right]_T. \quad (4.3)$$

Надалі система буде розглядатись за умови, що при фіксованій температурі взаємодіючі бозонні частинки та античастинки знаходяться в динамічній рівновазі щодо процесів анігіляції та народження пар. Оскільки частинки та античастинки мають протилежний знак заряду, їх хімічні потенціали  $\mu_1$  та  $\mu_2$ , відповідно, також мають протилежні знаки (детальніше див. у [102]):

$$\mu_1 = -\mu_2 \equiv \mu. \quad (4.4)$$

Таким чином співвідношення Ейлера, яке буде містити лише густину ізоспіну,  $n_I = n^{(-)} - n^{(+)}$ , може бути записане у наступному вигляді

$$\varepsilon + p = T s + \mu n_I, \quad (4.5)$$

де  $n^{(-)}$  — густина бозонів, а  $n^{(+)}$  — густина антибозонів. Як вже було сказано вище бозонна система частинок-античастинок розглядається при збереженій густині ізоспіну  $n_I$ , в той час як загальна густина

частинок  $n = n^{(-)} + n^{(+)}$  це термодинамічна величина, яка залежить від  $T$  і  $n_I$ .

1

В такій задачі хімічний потенціал керує різницею числа частинок і античастинок  $\mu \rightarrow (N^{(-)} - N^{(+)})$ , тоді як загальна кількість частинок контролюється температурою  $T \rightarrow (N = N^{(-)} + N^{(+)})$ . Дійсно, якщо була створена деяка кількість пар частинка-античастинка  $M$  додатково до існуючих частинок  $N^{(-)}$  і  $N^{(+)}$  в замкнутій системі, то приблизно однакове значення  $\mu$  відповідає  $\mu \rightarrow [(N^{(-)} + M) - (N^{(+)} + M)]$  але  $T' \rightarrow (N^{(-)} + M + N^{(+)} + M)$ , де  $T' > T$ . Цей якісний аналіз вказує на існування однозначної відповідності незалежних пар змінних  $(T, \mu) \Leftrightarrow (N, n_I)$ . Довести, що останнє твердження є справедливим — завдання нескладне для випадку ідеального квантового газу частинок і античастинок. Більш детальне доведення незалежності термодинамічних змінних  $n$  і  $n_I$  у більш загальному випадку, коли середнє поле залежить від цих змінних, не є тривіальним.

В загальному випадку середнє поле  $U$  залежить від обох незалежних змінних  $n, n_I$ , тобто  $U(n, n_I)$ . З іншого боку, можна показати, що середнє поле може бути розділе на частину, яка залежить від  $n$  та частину яка залежить від  $n_I$ . Відповідно у такому випадку середнє поле для частинок і античастинок може бути записане як

$$U^{(-)}(n, n_I) = U(n) - U_I(n_I), \quad (4.6)$$

$$U^{(+)}(n, n_I) = U(n) + U_I(n_I). \quad (4.7)$$

Знаки в рівняннях (4.6) і (4.7) зумовлені непарною залежністю від ізоспінового числа  $n_I$ . Для простоти розгляду частина середнього поля, яка залежить від ізоспінової густини, буде вважатись достатньо малою, тобто використовується припущення, що  $U_I(n_I) = 0$ . В такому

---

<sup>1</sup> Система у стані динамічної рівноваги щодо кількості піонів, утворена на проміжній стадії зіткнення важких іонів, була розглянута у [110–112]

наближенні надлишковий тиск також залежить лише від загальної густини частинок  $P(n)$ , так само як в попередньому розділі 3 для системи з  $n_I = 0$ . Також варто зауважити, що в такій термодинамічній моделі середнього поля не враховується залежність середнього поля від температури, аналогічно до того як така залежність відсутня в наближенні Хартрі.

Відповідно до рівняння (4.2) та з урахуванням того, що  $\mu_1^{(0)} = \mu - U(n)$  та  $\mu_2^{(0)} = -\mu - U(n)$ , повний тиск в такій системі може бути записаний як

$$p = -gT \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \ln \left[ 1 - \exp \left( -\frac{\sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2} + U(n) - \mu}{T} \right) \right] - \\ - gT \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \ln \left[ 1 - \exp \left( -\frac{\sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2} + U(n) + \mu}{T} \right) \right] + \\ + P(n), \quad (4.8)$$

де  $P(n)$  — надлишковий тиск.<sup>2</sup>

Термодинамічна узгодженість моделі середнього поля може бути отримана, якщо поставити у відповідність два вирази, які мають збігатись. Ці вирази записані для густини ізоспінового заряду мають наступний вигляд

$$n_I = \left( \frac{\partial p}{\partial \mu} \right)_T, \quad (4.9)$$

де тиск виражений рівнянням (4.8), і

$$n_I = g \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} [f(E(k, n), \mu) - f(E(k, n), -\mu)]. \quad (4.10)$$

---

<sup>2</sup>Тут і надалі приймається система одиниць  $\hbar = c = 1$ ,  $k_B = 1$

Тут  $E(k, n) = \omega_k + U(n)$  з  $\omega_k = \sqrt{m^2 + k^2}$ , а  $f(E, \mu)$  - функція розподілу Бозе-Ейнштейна, яка має наступний вигляд

$$f(E, \mu) = \left[ \exp \left( \frac{E - \mu}{T} \right) - 1 \right]^{-1}. \quad (4.11)$$

Для того щоб вирази (4.9) і (4.10) збігалися, співвідношення між середнім полем і надлишковим тиском мусить мати наступний вигляд

$$n \frac{\partial U(n)}{\partial n} = \frac{\partial P(n)}{\partial n}. \quad (4.12)$$

Дана умова забезпечує термодинамічну узгодженість моделі. У той же час, як було показано на початку поточного розділу, це диференційне співвідношення впливає з визначень середнього поля  $U(n)$  і надлишкового тиску  $P(n)$ , та є частковим випадком співвідношення 4.3 за умови незалежності поля  $U$  від  $n_I$  та  $T$ .

Коли обидві складові системи  $\pi^-$ - $\pi^+$  знаходяться в тепловій (кінетичній) фазі, вирази для тиску і густини енергії мають наступний вигляд

$$p = \frac{g}{3} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{\omega_k} [f(E(k, n), \mu) + f(E(k, n), -\mu)] + P(n), \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon = & g \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} E(k, n) [f(E(k, n), \mu) + f(E(k, n), -\mu)] - \\ & - P(n). \end{aligned} \quad (4.14)$$

### 4.3. Параметризація Скірма для середнього поля

Термодинамічна модель середнього поля раніше була застосована для деяких фізично цікавих систем таких як: адронно-резонансний газ [102] та піонний газ [105]. Цей підхід було поширено на випадок бозонної системи при  $\mu = 0$ , в якій може виникати бозе-конденсація, у попередньому розділі даної роботи [1, 41]. У даній главі узагальнений

формалізм, наведений у розділі 4.2, буде використаний для опису системи бозе частинок-античастинок, для випадку сталої густини ізоспіну. Як було зазначено в попередньому пункті 4.2, в загальному випадку середнє поле може бути розділене на дві частини: частину залежну лише від повної густини частинок  $n$  та частинку залежну лише від ізоспінової густини  $n_I$  (рівняння (4.6) і (4.7) відповідно). Будемо вважати, що взаємодія між частинками описується середнім полем подібним до поля у моделі Скірма, яке залежить лише від повної густини частинок  $n$ . Грубо кажучи, береться до уваги лише сильна взаємодія. Отже, припускається, що середнє поле має наступний вигляд

$$U(n) = -A n + B n^2, \quad (4.15)$$

де  $A$  і  $B$  — параметри моделі, які необхідно задати. Додаткові внески у притягання середнього поля при високих температурах, ( $T \propto 100 - 160$  MeV), можуть бути забезпечені іншими адронами, присутніми в системі. Це, наприклад,  $\rho$ -мезони [108] або пари баріон-антибаріон [109]. Як було зазначено у вступі 3.1, дослідження властивостей гарячого піонного газу при великих густинах добре мотивоване, наприклад, утворенням середовища з низьким баріонним числом на середніх рапідностях, що було продемонстровано в експериментах на RHIC та LHC [113, 114].

З цієї причини розглядається загальний випадок  $A > 0$  і досліджується система як з притягальним, так і з відштовхувальним внеском в середнє поле (4.15). Коефіцієнти  $A$  та  $B$  вибираються аналогічно до того, як це було зроблено у попередній главі даної роботи. Коефіцієнт відштовхування  $B$  має фіксоване значення, яке вибирається з оцінки на основі віріального розкладу [106],  $B = 10v_0^2$ , де  $v_0$  дорівнює чотирикратному власному об'єму частинки, тобто  $v_0 = 16\pi r_0^3/3$ . У числових розрахунках приймається  $v_0 = 0,45 \text{ fm}^3$ , що відповідає “радіусу частинки” піона  $r_0 \approx 0,3 \text{ fm}$ . Чисельні розрахунки будуть

проведені для бозонів з масою  $m = 139 \text{ MeV}$ , які умовно називаємо “піонами”. У цьому випадку коефіцієнт відштовхування дорівнює  $B/m = 2,025 \text{ fm}^6$ , і є постійним для всіх подальших розрахунків. (наприклад, у [115] автори використовують значення  $B/m = 21,6 \text{ fm}^6$ .) При цьому коефіцієнт  $A$ , який визначає інтенсивність притягання середнього поля (4.15), буде змінюватися. Коефіцієнт  $A$  бажано параметризувати. Для цього буде використано розв’язок рівняння  $U(n) + m = 0$ , аналогічно до того як це було зроблено у попередній главі та у [1, 41]. Для заданого середнього поля (4.15) є два корені цього рівняння ( $n_{1,2} = (A \mp \sqrt{A^2 - 4mB})/2B$ )

$$n_1 = \sqrt{\frac{m}{B}} \left( \kappa - \sqrt{\kappa^2 - 1} \right), \quad n_2 = \sqrt{\frac{m}{B}} \left( \kappa + \sqrt{\kappa^2 - 1} \right), \quad (4.16)$$

де

$$\kappa \equiv \frac{A}{2\sqrt{mB}}. \quad (4.17)$$

Тоді коефіцієнт притягання може бути параметризований як  $A = \kappa A_c$ , де  $A_c = 2\sqrt{mB}$ . Безрозмірний параметр  $\kappa$  є параметром масштабу моделі. Коли густина ізоспіну фікована, параметр  $\kappa$  визначає фазову структуру системи. Як видно з рівняння (4.16) для значень параметра  $\kappa < 1$  дійсних коренів немає. Критичне значення  $A_c$  отримується, коли обидва корені збігаються, тобто коли  $\kappa = \kappa_c = 1$ , тоді  $A = A_c = 2\sqrt{mB}$ .

Загалом, так само як це було зроблено в розділі 3, можна виділити два інтервали параметра  $\kappa$ . 1) Перший інтервал відповідає  $\kappa \leq 1$ , рівняння  $U(n) + m = 0$  не має дійсних коренів. Ці значення  $\kappa$  умовно назвемо “слабкою” притягальною взаємодією, і в дослідження в даному розділі будуть розглянуті лише варіації коефіцієнта притягання  $A$  для значень  $\kappa$  з цього інтервалу. 2) Другий інтервал відповідає  $\kappa > 1$ , рівняння  $U(n) + m = 0$  має два дійсні кореня. Значення із цього інтервалу будемо умовно називати “сильною” притягальною взаємодією. Даний

інтервал не є предметом даного дослідження і буде розглянутий в інших дослідженнях.

Якщо припустити можливість бозе-ейнштейнівської конденсації в двокомпонентній системи, то доцільно класифікувати фазову структуру такої систему двома основними комбінаціями, які визначають для “слабкого” притягання різні термодинамічні стани: (i) Обидві компоненти, тобто  $\pi^-$  частинки і  $\pi^+$  античастинки, знаходяться в термічній (кінетичній або газовой-рідинній) фазі; (ii) Частинки ( $\pi^-$ ) знаходяться у фазі конденсату, а античастинки ( $\pi^+$ ) знаходяться в термічній (кінетичній або газовой-рідинній) фазі - таку комбінацію можна назвати “перехресним” станом.

Слід зауважити, що вираз “частинки знаходяться у конденсатній фазі” є, звичайно, умовним. Оскільки це фаза суміші, для якої при фіксованій температурі частина  $\pi^-$ -мезонів знаходиться в теплових станах з імпульсом  $|k| > 0$ , а інша частина  $\pi^-$ -компоненти знаходиться у стані бозе-ейнштейнівського конденсату, де всі  $\pi^-$ -мезони мають нульовий імпульс,  $k = 0$ .

Далі ці основні термодинамічні стани системи будуть досліджені з використанням середнього поля (4.15).

## 4.4. Термодинамічні властивості системи бозонів-антибозонів зі “слабким притягання”

У підході середнього поля стан системи бозонів-антибозонів в термічній (кінетичній або газовой-рідинній) фазі визначається сукупністю двох трансцендентних рівнянь ( $n_I = \text{const}$ )

$$n = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} [f(E(k, n), \mu) + f(E(k, n), -\mu)] , \quad (4.18)$$

$$n_I = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} [f(E(k, n), \mu) - f(E(k, n), -\mu)] , \quad (4.19)$$

де функція розподілу Бозе-Ейнштейна  $f(E, \mu)$  означена в (4.11), а  $E(k, n) = \omega_k + U(n)$ . Рівняння (4.18)-(4.19) слід розв'язувати самоузгоджено відносно  $n$  і  $\mu$  для заданої температури  $T$  з урахуванням умови  $n_I = \text{const}$ . Бозонна система розглядається в канонічному ансамблі, де незалежними канонічними змінними є  $T$  та  $n_I$ , спін частинок дорівнює нулю. У цьому підході хімічний потенціал  $\mu$  є термодинамічною величиною, яка залежить від канонічних змінних, тобто  $\mu = \mu(T, n_I)$ .

У випадку перехресного стану, коли частинки, тобто  $\pi^-$ -мезони, знаходяться в фазі конденсату, а античастинки  $\pi^+$  все ще знаходяться в термічній (кінетичній) фазі, рівняння (4.18), (4.19) слід узагальнити та включити компоненту конденсату  $n_{\text{cond}}^{(-)}$ . Крім цього, слід враховувати, що частинки ( $\pi^-$  або компонента високої густини) можуть бути в конденсатному стані лише якщо виконується необхідна умова:

$$U(n) - \mu = -m. \quad (4.20)$$

При зниженні температури від високих значень, для яких  $\pi^-$  і  $\pi^+$  знаходяться в термічній фазі, густина  $\pi^-$ -компоненти, а саме  $n^{(-)}(T, \mu)$ , перетинає критичну криву при температурі  $T_c^{(-)}$ , де починає виконуватись умова (4.20). Останнє означає, що крива  $n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T)$ , яка визначається аналогічно до 3.27 як

$$n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(\omega_k, \mu) \Big|_{\mu=m}, \quad (4.21)$$

є критичною кривою для  $\pi^-$ -мезонів або компоненти високої густини. Тут  $f(\omega_k, \mu)$  — функція розподілу Бозе-Ейнштейна, визначена в (4.11). Як можна бачити, функція (4.21) представляє максимальну густину теплових (кінетичних) бозонів ідеального газу при температурі  $T$ , коли  $\mu = m$ . Отже, критична крива в наближенні середнього поля для бозонних частинок збігається з критичною кривою для ідеального газу

та критичною кривою для випадку  $\mu = 0$  або  $n_I = 0$ , розглянутого в попередньому розділі.

З урахуванням рівнянь (4.20) і (4.21) узагальнена система (4.18), (4.19) може бути записана як

$$n = n_{\text{cond}}^{(-)}(T) + n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T) + \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(E(k, n), -\mu), \quad (4.22)$$

$$n_I = n_{\text{cond}}^{(-)}(T) + n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T) - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(E(k, n), -\mu). \quad (4.23)$$

Використавши співвідношення (4.20) між середнім полем і хімічним потенціалом, дану систему рівнянь можна звести лише до одного рівняння для  $n^{(+)}$ :

$$n^{(+)} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(E(k, n), -\mu) \Big|_{\mu=U(n)+m}, \quad (4.24)$$

де  $U(n) = U(2n^{(+)} + n_I)$  та  $E(k, n) = \omega_k + U(2n^{(+)} + n_I)$ . Розв'язавши рівняння (4.24) для температур  $T$  з інтервалу  $T < T_c^{(-)}$ , можна отримати розв'язок для густини  $n^{(+)}(T)$   $\pi^+$  мезонів.

З рівнянь (4.22), (4.23) легко бачити, що густина частинок  $n^{(+)}$  складається лише з теплових  $\pi^+$  мезонів. Тоді як густина  $n^{(-)}$  визначається двома компонентами: конденсованих частинок ( $\pi^-$  мезонів при  $\mathbf{k} = 0$ ) з густиною  $n_{\text{cond}}^{(-)}(T)$ , і теплових частинок  $\pi^-$  мезонів при  $|\mathbf{k}| > 0$  із густиною  $n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T)$ . Тоді сумарна густина  $\pi^-$  мезонів для цих двох фаз в інтервалі  $T < T_c^{(-)}$  запишеться як

$$n^{(-)} = n_{\text{cond}}^{(-)}(T) + n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T). \quad (4.25)$$

#### 4.4.1. Чисельні розрахунки

При високих температурах, тобто при  $T \geq T_c^{(-)}$ , обидві компоненти бозонної системи знаходяться в тепловій фазі і термодинамічні властивості системи визначаються системою рівнянь (4.18) і (4.19). Розв'язавши да-

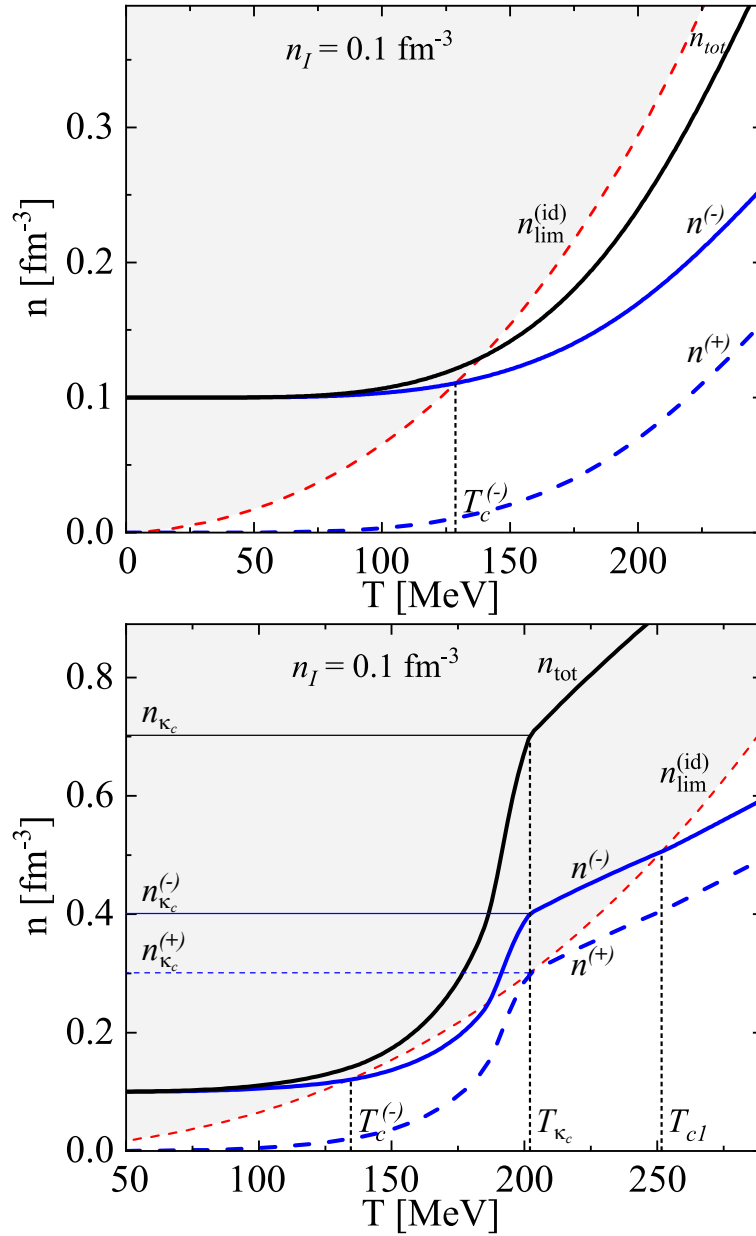
ну систему для заданих значень  $T$  і  $n_I$ , можна отримати функції  $\mu(T, n_I)$  і  $n(T, n_I)$ , а потім інші термодинамічні величини.

При зменшенні температури нижче значення  $T = T_c^{(-)}$ , частинки, які є компонентою високої густини, тобто  $\pi^-$ -мезони, починають “опускатися” в стан конденсату, який характеризується значенням імпульсу  $k = 0$ . У границі, коли  $T = 0$ , усі  $\pi^-$ -мезони, знаходяться в конденсованому стані і  $n^{(-)} = n_I$ . У той же час частинки компоненти низької густини або  $\pi^+$ -мезони перебувають в тепловій фазі при будь-яких значеннях температури. Густина цієї компоненти  $n^{(+)}$  зменшується із зменшенням температура, і вона стає рівною нулю при  $T = 0$ .

Для інтервалу температур  $T < T_c^{(-)}$  рівняння (4.18), (4.19) слід узагальнити. Термодинамічні властивості системи в даному інтервалі визначаються рівнянням (4.24), де враховано, що  $\mu = -U(n) + m$  для всіх температур цього інтервалу, оскільки компонента з густиною  $n^{(-)}$  знаходиться в конденсованому стані. Для іншого інтервалу необхідно розв’язувати систему рівнянь (4.18) і (4.19), в якій  $n^{(-)}$  знаходиться в тепловій (кінетичній) фазі.

Для розв’язку системи рівнянь (4.18), (4.19) для теплової фази та системи (4.24) для “перехресного” термодинамічного стану, були використані наступні параметри системи:  $n_I = 0.1 \text{ fm}^{-3}$ ,  $\kappa = 0.5$  і  $\kappa = 1.0$ . Густина  $n^{(+)}$   $\pi^+$ -мезонів і густина  $n^{(-)}$   $\pi^-$ -мезонів зображені на рис. 4.1. На цьому малюнку також зображена повна густина мезонів  $n = n^{(+)} + n^{(-)}$  в залежності від температури (на рисунку ця густина позначається як  $n_{\text{tot}}$ ).

Аналізуючи поведінку системи при утворенні конденсату (див. рис. 4.1), необхідно зауважити, що лише компонента високої густини у системі частинок та античастинок переходить у фазу із бозе-ейнштейнівським конденсатом. Якщо застосувати ці міркування до піонного газу з  $n_I = n_{\pi}^{(-)} - n_{\pi}^{(+)} > 0$ , це означатиме, що лише  $\pi^-$ -компонент зазнає фазового переходу в конденсат, в той час як компонента низької густини або  $\pi^+$  мезони існує лише в тепловій фазі для всього діапазону



**Рис. 4.1** Верхня панель: Залежність густин частинок  $n^{(+)}$ ,  $n^{(-)}$  і  $n_{\text{tot}} = n^{(+)} + n^{(-)}$  від температури для взаємодіючого  $\pi^+ \pi^-$  піонного газу у моделі середнього поля. Загальна густина ізоспіну вважається сталою,  $n_I = 0.1 \text{ fm}^{-3}$ , параметр притягання  $\kappa = 0.5$ . Максимальна густина  $n_{\text{lim}}^{(\text{id})}$  теплових піонів в ідеальному газі при  $\mu = m_\pi$  зображена червоною пунктирною лінією. Сіра зафарбована область показує можливі стани конденсованих частинок. Бозе-ейнштейнівська конденсація  $\pi^-$ -мезонів відбувається при температурі  $T_c = T_c^{(-)}$ . Нижня панель: Те саме, що на лівій панелі, але з параметром притягання  $\kappa = \kappa_c = 1$ . Тут  $n_1 = n_2 \equiv n_{\kappa_c}$  (див. рівняння (4.16)),  $n_{\kappa_c}^{(-)} = (n_{\text{tot}} + n_I)/2$ ,  $n_{\kappa_c}^{(+)} = (n_{\text{tot}} - n_I)/2$  і  $T_{\kappa_c}$  — температура, при якій крива  $n^{(+)}(T)$  торкається критичної кривої  $n_{\text{lim}}^{(\text{id})}$ .

температур. Отже, для ґраткових розрахунків або в експерименті (наприклад, при зіткненні важких іонів) має сенс шукати температуру фазового переходу  $T_c = T_c^{(-)}$  в фазу із бозе-ейнштейнівським конденсатом лише для  $\pi^-$  мезонів.

Водночас температурна залежність густини частинок  $n^{(+)}$  (див. рис. 4.1) дуже подібна до поведінки густини піонів  $n(T)$  для  $\kappa \leq 1$  отриманій в розділі 3, де піонна система досліджена при  $\mu = 0$ . Варто зауважити, що в даній главі було розглянуто систему піонів лише для “слабкого” притягання, тобто на  $\kappa \leq 1$ . Як було показано в попередньому розділі, а також в [41], поведінка піонної системи при  $\kappa > 1$  кардинально відрізняється. У цьому випадку при підвищенні температури у системі виникає фазовий перехід першого роду при  $T = T_{cd} < T_c$ .

#### 4.4.1.1. Критична температура

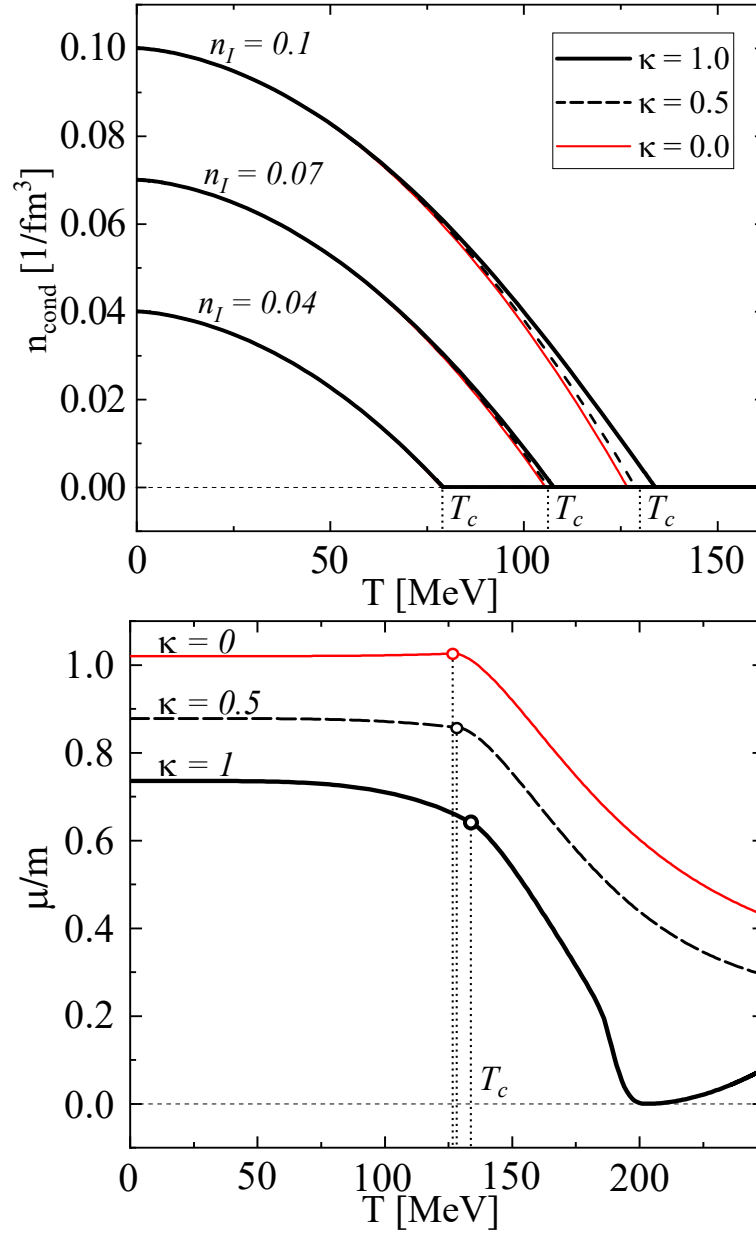
Рівняння (4.22) може бути використане для визначення критичної температури  $T_c^{(-)}$ . Дійсно, в точці перетину з критичною кривою густина конденсату дорівнює нулю,  $n_{\text{cond}}^{(-)}(T_c^{(-)}) = 0$ , а густина теплових  $\pi^-$  частинок стає рівною  $n^{(-)}(T_c^{(-)}) = n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T_c^{(-)})$ . Тоді при температурі  $T = T_c^{(-)}$  в лівій частині рівняння (4.22) маємо  $n = 2n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T_c^{(-)}) - n_I$ . Тоді при даній температурі на критичній кривій рівняння (4.22) відносно  $T$  запишеться так:

$$n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T) - n_I = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(E(k, n), -\mu) \Big|_{\mu=U(n)+m} \quad (4.26)$$

де  $E(k, n) = \omega_k + U(2n_{\text{lim}}^{(\text{id})} - n_I)$ .

Розв’язавши рівняння (4.26) при  $n_I = 0.1 \text{ fm}^{-3}$ , для  $\kappa = 0.5$  і  $\kappa = \kappa_c = 1$  можна отримати значення критичної температури  $T_c^{(-)} = 129 \text{ MeV}$  і  $T_{c1}^{(-)} = 251 \text{ MeV}$  відповідно. Ці результати зображено на рис. 4.1, верхня та нижня панелі відповідно.

Критична температура  $T_c^{(-)}$  визначає фазовий перехід з утворенням БЕК не для всієї системи піонів, оскільки античастинки або  $\pi^+$ -мезони,



**Рис. 4.2** Верхня панель: Залежність густини конденсату від температури в системі взаємодіючих частинок-античастинок для трьох значень густини ізоспіну,  $n_I = 0.04, 0.07, 0.1 \text{ fm}^{-3}$ . Нижня панель: Залежність хімічного потенціалу від температури для значень параметру притягання  $\kappa = 0.0, 0.1, 0.5, 1.0$  і густини ізоспіну  $n_I = 0.1 \text{ fm}^{-3}$ . Позначені точки на кривих відповідають критичній температурі  $T_c^{(-)}$ . На обох панелях використано середнє значення  $T_c = \langle T_c^{(-)} \rangle$ .

які являються компонентою низької густини  $n^{(+)}(T)$ , перебувають повністю в тепловому стані для всіх температури. Таким чином, конденсат утворюють лише частинки або  $\pi^-$ -мезони, тобто  $n_{\text{cond}} = n_{\text{cond}}^{(-)}$ , і ця густина числа частинок відіграє роль параметра порядку.

Густина конденсату як функція температури, отримана в рамках нашої моделі для трьох значень параметра притягання,  $\kappa = 0.0, 0.5, 1.0$ , та для трьох значень ізоспінової густини  $n_I = 0.04, 0.07, 0.1 \text{ fm}^{-3}$ , зображена на рис. 4.2, верхня панель. При зміні параметра притягання  $\kappa$  критична температура  $T_c^{(-)}$  майже не змінюється. Найбільша різниця не перевищує 4 MeV для  $n_I = 0.1 \text{ fm}^{-3}$  і є набагато меншою, як можна бачити на рис. 4.2, для менших ізоспінових густин. В такому випадку корисно визначити лише одне середнє значення  $T_c^{(-)}$  як

$$T_c = \langle T_c^{(-)} \rangle. \quad (4.27)$$

Наприклад, для  $n_I = 0.1 \text{ fm}^{-3}$  усереднення дає  $T_c \approx 129 \text{ MeV}$ . Температура  $T_c$  “сигналізує” про утворення конденсату, коли температура знижується і перетинає це значення. Варто зауважити, що критична температура  $T_c$  майже не залежить від параметра притягання  $A$  середнього поля (4.15). Іншими словами, середнє притягання між частинками в системі слабо впливає на критичну температуру.

Залежність хімічного потенціалу від температури зображена на рис. 4.2 на правій панелі для трьох значень параметра притягання,  $\kappa = 0.0, 0.1, 0.5, 1.0$ . Перш за все, варто зауважити, що хімічний потенціал майже не залежить від температури, коли в системі є конденсат, тобто в інтервалі  $0 < T \leq T_c$ . Значення  $\mu$  змінюється від  $1.02m_\pi$  за відсутності притягання,  $\kappa = 0$ , до  $\mu = 0.74m_\pi$  для критичного параметра притягання  $\kappa = 1.0$ . Отже, для  $0 \leq \kappa \leq 1$  хімічний потенціал в конденсатній фазі знаходиться в діапазоні  $103 \leq \mu \leq 142 \text{ MeV}$ . Цікаво нагадати, що при спробах апроксимувати  $p_T$  спектри  $\pi^-$ -мезонів у зіткненнях O+Au при 200 AGeV/нуклон (при середніх рапідностях) розподілом ідеального

газу Бозе-Ейнштейна були отримані значення  $\mu \approx 126$  MeB,  $T \approx 167$  MeB а в зіткненнях S+S при 200 AGeV/нуклон  $\mu \approx 118$  MeB,  $T \approx 164$  MeB [116]. Отже, згідно з експериментальними даними необхідний хімічний потенціал піона знаходиться в діапазоні  $\mu \approx 115 - 130$  MeB що формально можна порівняти зі значеннями хімічного потенціалу отриманими за допомогою моделі, яка розглядається в даній роботі.

#### 4.4.1.2. Теплоємність

Похідна хімічного потенціалу від температури має стрибок у точках позначених на кривих маленькими чорними кружечками (див. нижню панель на рис. 4.2). Ці точки на кривих  $\mu(T)$  відповідають  $T_c^{(-)}$ , значення яких відрізняються одна від одної не більше ніж на  $\Delta T = 4$  MeB. Як було раніше показано, це температура фазового переходу (див. рівняння (4.27)), яка практично не залежить від інтенсивності притягання. Щоб показати, що це фазовий перехід другого роду, було обчислено теплоємність  $c_v$  як <sup>3</sup>

$$c_v = -T \frac{\partial^2 \phi}{\partial T^2}, \quad (4.28)$$

де  $\phi(T, n_I) = -p(T, n_I) + n_I \mu(T, n_I)$  — густина вільної енергії. Величина  $\phi(T, n_I)$  розрахована для двох термодинамічних сценаріїв, коли  $T \geq T_c$  та  $T < T_c$ .

Розв'язавши рівняння (4.18), (4.19), та використавши рівняння (4.13), можна розрахувати тиск для випадку, коли частинки і античастинки знаходяться в тепловій фазі, тобто  $T \geq T_c$ . У цьому випадку густина вільної енергії має вигляд

$$\phi = n_I \mu(T, n_I) - \frac{1}{3} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{k}^2}{\omega_k} [f(E(k, n), \mu) + f(E(k, n), -\mu)] - y - P(n), \quad (4.29)$$

<sup>3</sup> Обчислена величина це об'ємна теплоємність, тобто теплоємність  $C_v$  системи, поділена на об'єм  $V$ , або  $c_v = C_v/V$ .

де функції  $n(T, n_I)$  та  $\mu(T, n_I)$  відомі. Надлишковий тиск  $P(n)$  отримується шляхом інтегрування рівняння (4.12) для Скірм-подібної параметризації середнього поля (4.15):

$$P(n) = -\frac{A}{2} n^2 + \frac{2B}{3} n^3, \quad (4.30)$$

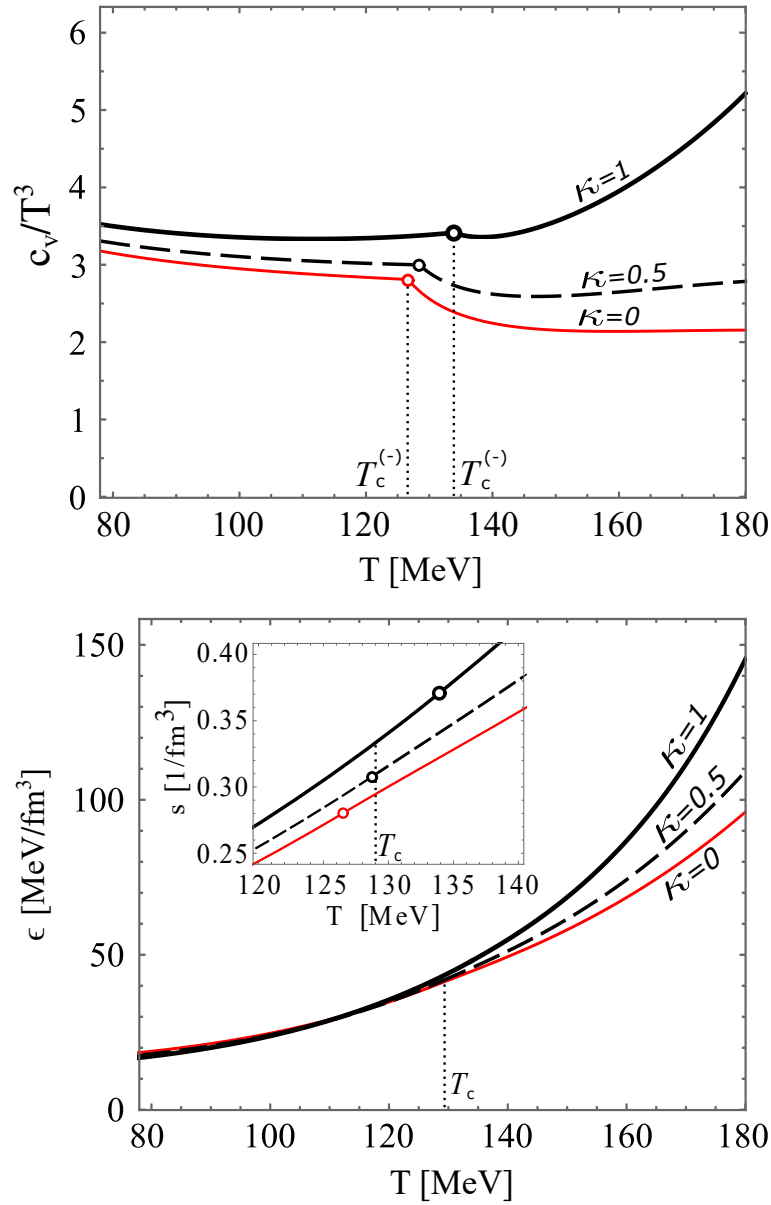
де враховано умову  $P(n = 0) = 0$ .

Для температур менших ніж  $T_c$ , коли компонента високої густини піонного газу ( $\pi^-$  мезони) знаходиться у фазі конденсату, а компонента низької густини ( $\pi^+$  мезони) знаходиться в тепловій фазі, густина вільної енергії має наступний вигляд

$$\begin{aligned} \phi = n_I [U(n) + m] - \frac{1}{3} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{k}^2}{\omega_k} f(\omega_k, \mu) \Big|_{\mu=m} - \\ - \frac{1}{3} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{k}^2}{\omega_k} f(E(k, n), -\mu) \Big|_{\mu=U(n)+m} - P(n). \end{aligned} \quad (4.31)$$

Тут повна густина піонів становить  $n = 2n^{(+)} + n_I$ ,  $\mu = U(n) + m$ , як у рівнянні (4.24),  $E(k, n) = \omega_k + U(n)$  та  $n^{(+)}(T, n_I)$  є розв'язком рівняння (4.24).

Використавши у рівнянні 4.28 вираз для густини вільної енергії (4.29) для температур  $T > T_c$ , а вираз (4.31) для температур  $T < T_c$ , можна обчислити теплоємність нормовану на  $T^3$  як функцію температури при  $n_I = 0.1 \text{ fm}^{-3}$  для трьох значень параметра притягання  $\kappa = 0, 0.5, 1.0$ . Ці залежності зображено на Рис. 4.3 на верхній панелі. Температурна залежність теплоємності є неперервною функцією. Однак похідна цієї функції має скінченний розрив, що вказує на те, що це фазовий перехід другого роду. Густина конденсату являє собою параметр порядку (строго кажучи, це фазовий перехід третього роду). Щоб переконатися, що це дійсно фазовий перехід другого роду без виділення прихованої теплоти при температурі  $T_c$ , було обчислено густину енергії  $\varepsilon$  для того самого



**Рис. 4.3** *Верхня панель:* Теплоємність, нормована на  $T^3$ , як функція температури в системі взаємодіючих  $\pi^- - \pi^+$  мезонів. Густина ізоспіну вважається сталою,  $n_I = 0.1 \text{ fm}^{-3}$ . Криві позначені параметром притягання  $\kappa$ . *Нижня панель:* Залежність густини енергії від температури для тієї самої мезонної системи та при тих самих параметрах, що й на лівій панелі. Залежність густини ентропії від температури в околі  $T_c$  відображається на маленькій панелі для параметрів притягання  $\kappa = 0, 0.5, 1.0$ . Вважається, що  $T_c = \langle T_c^{(-)} \rangle$ .

набору параметрів  $\kappa$ . Залежності  $\varepsilon(T)$  показані на рис. 4.3 на нижній панелі.

Для того щоб перевірити, що перша похідна вільної енергії дійсно є гладкою функцією, було обчислено густину ентропії  $s = -\partial\phi(T, n_I)/\partial T$ . Її залежність від температури в околі  $T_c$  показана на додатковому вікні на рис. 4.3 на нижній панелі для трьох значень параметра притягання  $\kappa = 0, 0.5, 1.0$ . Дійсно, можна побачити, що температурні залежності густини енергії і густини ентропії є неперервними та гладкими при  $T = T_c$ , що доводить, що в системі відбувається фазовий перехід другого роду при цій температурі. Цікаво також відзначити, що густина енергії в температурному інтервалі  $0 < T \leq T_c$  практично не залежить від “слабкого” притягання ( $0 \leq \kappa \leq 1$ ) між частинками.

Тепер відмітимо деякі подібності між поведінкою, отриманою вище для взаємодіючої двокомпонентної системи частинок-античастинок при  $n_I = \text{const}$ , та поведінкою однокомпонентного ідеального релятивістського газу, для якого густина частинок  $n$  вважається сталою. По-перше, поведінка компоненти високої густини в “конденсаті” в температурному інтервалі  $T \leq T_c$  в системі з взаємодією, подібна до поведінки однокомпонентного ідеального газу ( $m = m_\pi$ ) при  $n = \text{const}$ . Дійсно, це видно, якщо порівняти залежність  $n = n^{(-)}(T)$  на рис. 4.1 та залежність  $n = \text{const}$  на рис. 4.4 на лівій панелі. Далі варто порівняти теплоємність у цих двох бозонних системах. Особливий інтерес викликає поведінка теплоємності в околі критичної температури.

Для випадку ідеального газу природньо досліджувати систему в канонічному ансамблі, де канонічними змінними є  $T$  і  $n$ . При зниженні температури критична температура  $T_c$  є точкою появи конденсату. Для заданої густини  $n$  ця температура може бути отримана з роз’язку трансцендентного рівняння  $n = n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T_c)$ , де  $n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T)$  визначено в (4.21).

Густина енергії ідеального релятивістського газу у конденсатній фазі складається з двох вкладів:

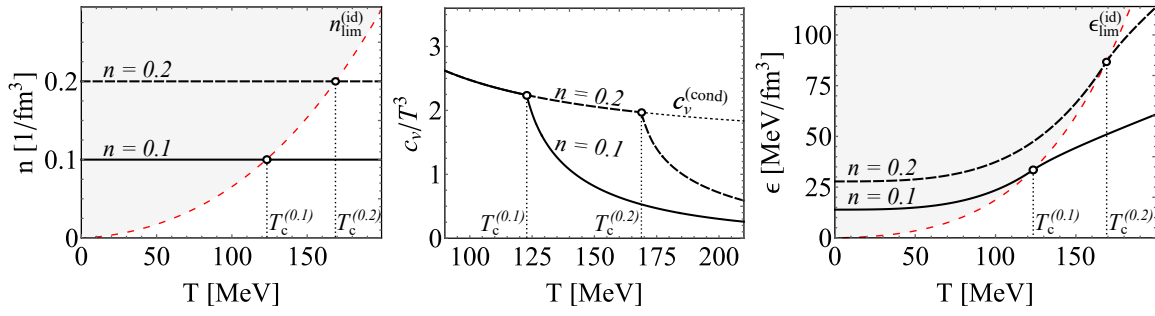
$$\varepsilon = m n_{\text{cond}}(T) + \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \omega_k f(\omega_k, \mu) \Big|_{\mu=m}, \quad (4.32)$$

де  $n_{\text{cond}}(T) = n - n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T)$ . У конденсатній фазі теплоємність  $c_v = d\varepsilon(T, n)/dT$ , може бути записана як

$$c_v^{(\text{cond})} = \frac{1}{4T^2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left[ \frac{E_{\text{kin}}}{\sinh(E_{\text{kin}}/T)} \right]^2, \quad (4.33)$$

де  $E_{\text{kin}} = \omega_k - m$  — кінетична енергія однієї частинки. Легко бачити, що залежність теплоємності  $c_v^{(\text{cond})}(T)$  у фазі конденсату носить універсальний характер. У цій фазі теплоємність ідеального газу не залежить від густини частинок  $n$ . Для кожного конкретного значення  $n$  крива  $c_v^{(\text{cond})}(T)$  (визначена в (4.33)) обмежена справа значенням  $T_c$ , яке, у свою чергу, залежить від заданої густини числа частинок  $n$ . Ця функція зображена на рис. 4.4 на середній панелі, де розглянуто два значення густини  $n = 0.1, 0.2 \text{ fm}^{-3}$ . Нескладно бачити, що похідна теплоємності має скінченний розрив, що може свідчити про фазовий перехід третього роду. Щоб переконатися в цьому, було обчислено густину енергії для тих самих значень густини частинок. Функції  $\varepsilon(T)$  зображені на рис. 4.4 на правій панелі. Ці функції неперервні та гладкі при  $T = T_c$ , тому при критичній температурі виділення прихованої теплоти не відбувається.

Коротко підсумуємо результати, отримані для взаємодіючої системи бозе-частинок та -античастинок, у якій густина ізоспіну (заряду)  $n_I$  зберігається, а також для однокомпонентного ідеального релятивістського газу, для якого густина частинок  $n$  залишається постійною. Для початку варто зауважити, що обидві системи мають однакову критичну криву  $n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T)$ . Крім того, коли  $n^{(-)}(T)$ , отримане для взаємодіючої системи, і  $n(T)$ , отримане для ідеального газу, перетинають критичну криву  $n_{\text{lim}}^{(\text{id})}(T)$ ,



**Рис. 4.4** *Ліва панель:* Залежність густини частинок від температури для ідеального однокомпонентного релятивістського газу. Горизонтальні лінії відповідають двом значенням постійної густини частинок,  $n = 0.1, 0.2 \text{ fm}^{-3}$ . Значення критичної температури для таких густин  $T_c^{(0.1)}$ ,  $T_c^{(0.2)}$  відповідно. *Середня панель:* Залежність теплоємності нормованої на  $T^3$  від температури в ідеальному однокомпонентному релятивістському газі, для якого густина частинок залишається постійною. *Права панель:* Залежність густини енергії від температури для тієї самої системи та за умов як на лівій панелі. Червона пунктирна лінія, позначена як  $\epsilon_{\text{lim}}^{(\text{id})}$ , представляє густину енергії для станів, які належать критичній кривій  $n_{\text{lim}}^{(\text{id})}$ , зображених на лівій панелі.

обидві системи зазнають фазовий перехід другого роду або, за класифікацією Еренфеста, третього порядку.

Відомо (див. [117]), що бозе-ейнштейнівська конденсація дійсно є фазовим переходом третього роду за класифікацією загальних типів переходів між фазами речовини, введеною Полом Еренфестом у 1933 році [118, 119]. Отже, отримана температура  $T_c$  дійсно є температурою фазового переходу другого роду (за сучасною термінологією), а густина конденсату  $n_{\text{cond}} = n_{\text{cond}}^{(-)}$ , який виникає для  $\pi^-$  компоненти, є параметром порядку.

## 4.5. Висновки

У цьому розділі було представлено термодинамічно узгоджений метод опису бозонної системи при кінцевих температурах та високих густинах, яка складається з взаємодіючих частинок та античастинок при фіксованій густині ізоспіну  $n_I$ . Було розглянуто систему мезонних частинок з  $m = m_\pi$  і нульовим спіном, які умовно були названі “піонами”, оскільки

заряджені  $\pi$ -мезони є найлегшими ядерними частинками і найлегшими адронами, які з'єднуються з ізоспіновим хімічним потенціалом.

Було показано, що введена безрозмірна величина  $\kappa = A/2\sqrt{mB}$ , яка сама по собі є комбінацією параметрів середнього поля  $A$ ,  $B$  та маси частинки, є масштабним параметром моделі аналогічно до попереднього розділу. Крім того, цей параметр визначає різні можливі фазові сценарії, які реалізуються в системі бозе-частинок та -античастинок. Коефіцієнт притягання  $A = \kappa A_c$ , де  $A_c \equiv 2\sqrt{mB}$ , було параметризовано за допомогою  $\kappa$  таким чином, щоб  $\kappa = 1$  відповідало критичному значенню, яке розділяє режим “слабкого притягання” ( $\kappa \leq 1$ ) та режим “сильного притягання” ( $\kappa > 1$ ). В даному розділі було розглянуто лише випадок “слабкого притягання”.

Було показано, що в мезонній системі частинок-античастинок, де густина ізоспіну  $n_I$  зберігається, виникає бозе-ейнштейнівський конденсат в інтервалі температур  $0 \leq T \leq T_c$ . Це є результатом фазового переходу другого роду, що відбувається при температурі  $T_c$ , а густина конденсату є параметром порядку<sup>4</sup>. Це твердження суперечить висновкам, які були отримані в минулому розділі та відомим результатам [1, 41, 115, 120], де досліджувалася система з нульовим хімічним потенціалом  $\mu = 0$ . Дійсно, в цих роботах було показано, що в разі досить сильного притягання середнього поля ( $\kappa > 1$ ), у багатобозонній системі виникає фазовий перехід першого роду і, як наслідок, утворюється бозе-конденсат, починаючи з кінцевої температури.

Отже, незалежно від параметрів середнього поля, мультибозонна система розвиває бозе-конденсат тільки для компоненти високої густини (частинок). Це означає, що в піонному газі, де  $n_I = n_{\pi}^{(-)} - n_{\pi}^{(+)} > 0$ , лише  $\pi^-$ -мезони зазнають фазового переходу до бозе-ейнштейнівського конденсату. У той же час  $\pi^+$ -мезони існують лише в тепловій фазі для всього діапазону температур. Виходячи з вищесказаного, можна зробити

---

<sup>4</sup>Варто звернути увагу, що хіральна теорія збурень передбачає, що перехід між вакуумом і БЕК є фазовим переходом другого роду з класом універсальності  $O(2)$  [46].

висновок, що в експерименті має сенс шукати Бозе-конденсат лише для  $\pi^-$ -мезонів.

Для опису термодинамічних властивостей система розглядалась в рамках канонічного ансамблю, для якого хімічний потенціал  $\mu$  є термодинамічною величиною, яка залежить від канонічних змінних  $(T, n_I)$ . Було розраховано залежність хімічного потенціалу від температури для різних значень параметра притягання  $\kappa$  і показано, що  $\mu \approx \text{const}$  в “конденсатному” інтервалі температур  $0 \leq T \leq T_c$ . Величина хімічного потенціалу  $\mu \approx \text{const}$  в цій області залежить від інтенсивності притягання. Водночас температура  $T_c^{(-)}$  фазового переходу до бозе-ейнштейнівського конденсату  $\pi^-$ -мезонів (компонента високої густини) слабо залежить від  $\kappa$ , що можна побачити на рис. 4.2 на верхній панелі. Для всіх значень  $0 \leq \kappa \leq 1$ , які були розглянуті, критичні температури відрізняються одна від одної не більше ніж на 4 MeV. Тому можна ввести певне середнє значення  $T_c = \langle T_c^{(-)} \rangle$  переходу до фази бозе-ейнштейнівського конденсату.

Отримані результати відповідають відомим властивостям ідеального релятивістського бозе-газу: конденсація Бозе-Ейнштейна являє собою фазовий перехід третього роду або розрив похідної теплоємності [117]. В рамках представленої моделі було отримано, що таким же чином похідна теплоємності зазнає розриву при температурі  $T_c$ , як видно на верхній панелі на рис. 4.3. Плавні залежності густини енергії та густини ентропії від температури і відсутність прихованого виділення теплоти при  $T_c$  на нижній панелі рис. 4.3 доводять, що в системі насправді виникає фазовий перехід другого роду при цій температурі.

Внесок нейтральних піонів виходить за рамки досліджень проведених в даній роботі. Розглянутий в даному розділі аналіз можна покращити, розглянувши ці питання більш детально і узагальнивши розрахунки додаванням внеску, який залежить від  $n_I$ , в середнє поле.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] D. Anchishkin, I. Mishustin, O. Stashko, D. Zhuravel, and H. Stoecker, «Finite-Temperature Bose-Einstein Condensation in Interacting Boson System», *Ukrainian Journal of Physics* **64**, 1118 (2019) DOI: 10.15407/ujpe64.12.1118.
- [2] D. Anchishkin, V. Gnatovskyy, D. Zhuravel, and V. Karpenko, «Relativistic selfinteracting particle-antiparticle system of bosons», *Journal of Physics and Electronics* **28**, 3–18 (2020) DOI: 10.15421/332016.
- [3] D. Zhuravel, D. Anchishkin, R. Hayn, P. Lombardo, and S. Schäfer, «Non-equilibrium electronic transport through a quantum dot with strong Coulomb repulsion in the presence of a magnetic field», *Journal of Physics: Condensed Matter* **32**, 165601 (2020) DOI: 10.1088/1361-648x/ab5ce7.
- [4] P. Lombardo, R. Hayn, D. Zhuravel, and S. Schäfer, «Kondo-assisted switching between three conduction states in capacitively coupled quantum dots», *Physical Review Research* **2**, 033387, ISSN: 2643-1564 (2020) DOI: 10.1103/physrevresearch.2.033387.
- [5] D. Anchishkin, V. Gnatovskyy, D. Zhuravel, and V. Karpenko, «Phase diagram of the selfinteracting particle-antiparticle boson system», *Journal of Physics and Electronics* **29**, 5–14 (2021) DOI: 10.15421/332101.
- [6] U. Meirav, M. A. Kastner, and S. J. Wind, «Single-electron charging and periodic conductance resonances in GaAs nanostructures», *Physical Review Letters* **65**, 771–774 (1990) DOI: 10.1103/physrevlett.65.771.
- [7] M. A. Kastner, «Artificial Atoms», *Physics Today* **46**, 24–31 (1993) DOI: 10.1063/1.881393.

- [8] B. L. Altshuler, P. A. Lee, and W. Richard Webb, *Mesoscopic Phenomena in Solids, Modern Problems in Condensed Matter Sciences* (Elsevier Science, London, England, 2014).
- [9] R. C. Ashoori, «Electrons in artificial atoms», *Nature* **379**, 413–419 (1996) DOI: 10.1038/379413a0.
- [10] S. J. Chorley, M. R. Galpin, F. W. Jayatilaka, C. G. Smith, D. E. Logan, and M. R. Buitelaar, «Tunable Kondo Physics in a Carbon Nanotube Double Quantum Dot», *Phys. Rev. Lett.* **109**, 156804 (2012) DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.156804.
- [11] S. A. Dyakov, D. M. Zhigunov, A. Marinins, O. A. Shalygina, P. P. Vabishchevich, M. R. Shcherbakov, D. E. Presnov, A. A. Fedyanin, P. K. Kashkarov, S. Popov, N. A. Gippius, and S. G. Tikhodeev, «Plasmon induced modification of silicon nanocrystals photoluminescence in presence of gold nanostripes», *Scientific Reports* **8**, DOI: 10.1038/s41598-018-22633-x (2018) DOI: 10.1038/s41598-018-22633-x.
- [12] C. H. L. Quay, J. Cumings, S. J. Gamble, R. d. Picciotto, H. Kataura, and D. Goldhaber-Gordon, «Magnetic field dependence of the spin- $\frac{1}{2}$  and spin-1 Kondo effects in a quantum dot», *Phys. Rev. B* **76**, 245311 (2007) DOI: 10.1103/PhysRevB.76.245311.
- [13] M. A. Kastner, «The single-electron transistor», *Rev. Mod. Phys.* **64**, 849–858 (1992) DOI: 10.1103/RevModPhys.64.849.
- [14] D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner, «Kondo effect in a single-electron transistor», *Nature* **391**, 156–159 (1998) DOI: 10.1038/34373.
- [15] T. A. Costi and V. Zlatić, «Thermoelectric transport through strongly correlated quantum dots», *Physical Review B* **81**, DOI: 10.1103/physrevb.81.235127 (2010) DOI: 10.1103/physrevb.81.235127.

- [16] Y. Dubi and M. Di Ventra, «Colloquium: Heat flow and thermoelectricity in atomic and molecular junctions», *Rev. Mod. Phys.* **83**, 131–155 (2011) DOI: 10.1103/RevModPhys.83.131.
- [17] J. Azema, A.-M. Daré, S. Schäfer, and P. Lombardo, «Kondo physics and orbital degeneracy interact to boost thermoelectrics on the nanoscale», *Phys. Rev. B* **86**, 075303 (2012) DOI: 10.1103/PhysRevB.86.075303.
- [18] R. S. Whitney, «Most Efficient Quantum Thermoelectric at Finite Power Output», *Phys. Rev. Lett.* **112**, 130601 (2014) DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.130601.
- [19] A.-M. Daré and P. Lombardo, «Powerful Coulomb-drag thermoelectric engine», *Phys. Rev. B* **96**, 115414 (2017) DOI: 10.1103/PhysRevB.96.115414.
- [20] K. L. Hur, «Quantum dots and the Kondo effect», *Nature* **526**, 203–204 (2015) DOI: 10.1038/526203a.
- [21] Z. Iftikhar, S. Jezouin, A. Anthore, U. Gennser, F. D. Parmentier, A. Cavanna, and F. Pierre, «Two-channel Kondo effect and renormalization flow with macroscopic quantum charge states», *Nature* **526**, 233–236 (2015) DOI: 10.1038/nature15384.
- [22] A. J. Keller, L. Peeters, C. P. Moca, I. Weymann, D. Mahalu, V. Umansky, G. Zaránd, and D. Goldhaber-Gordon, «Universal Fermi liquid crossover and quantum criticality in a mesoscopic system», *Nature* **526**, 237–240 (2015) DOI: 10.1038/nature15261.
- [23] F. Hetsch, N. Zhao, S. V. Kershaw, and A. L. Rogach, «Quantum dot field effect transistors», *Materials Today* **16**, 312–325 (2013) DOI: 10.1016/j.mattod.2013.08.011.
- [24] J. Xu, O. Voznyy, M. Liu, A. R. Kirmani, G. Walters, R. Munir, M. Abdelsamie, A. H. Proppe, A. Sarkar, F. P. G. de Arquer, M. Wei, B. Sun, M. Liu, O. Ouellette, R. Quintero-Bermudez, J. Li, J.

- Fan, L. Quan, P. Todorovic, H. Tan, S. Hoogland, S. O. Kelley, M. Stefik, A. Amassian, and E. H. Sargent, «2D matrix engineering for homogeneous quantum dot coupling in photovoltaic solids», *Nature Nanotechnology* **13**, 456–462 (2018) DOI: 10.1038/s41565-018-0117-z.
- [25] S. Pathak, «Quantum Dot Applications to Neuroscience: New Tools for Probing Neurons and Glia», *Journal of Neuroscience* **26**, 1893–1895 (2006) DOI: 10.1523/jneurosci.3847-05.2006.
- [26] S. Smirnov and M. Grifoni, «Nonequilibrium Kondo transport through a quantum dot in a magnetic field», *New Journal of Physics* **15**, 073047 (2013) DOI: 10.1088/1367-2630/15/7/073047.
- [27] G. Stefanucci and S. Kurth, «AC transport in correlated quantum dots: From Kondo to Coulomb blockade regime», *Phys. Rev. B* **97**, 245415 (2018) DOI: 10.1103/PhysRevB.97.245415.
- [28] A. Croy, U. Saalman, A. R. Hernández, and C. H. Lewenkopf, «Nonadiabatic electron pumping through interacting quantum dots», *Phys. Rev. B* **85**, 035309 (2012) DOI: 10.1103/PhysRevB.85.035309.
- [29] B Dong, G. H. Ding, and X. L. Lei, «Time-dependent quantum transport through an interacting quantum dot beyond sequential tunneling: second-order quantum rate equations», *Journal of Physics: Condensed Matter* **27**, 205303 (2015) DOI: 10.1088/0953-8984/27/20/205303.
- [30] G. Cohen, E. Gull, D. R. Reichman, and A. J. Millis, «Taming the Dynamical Sign Problem in Real-Time Evolution of Quantum Many-Body Problems», *Phys. Rev. Lett.* **115**, 266802 (2015) DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.266802.
- [31] F. B. Anders and A. Schiller, «Real-Time Dynamics in Quantum-Impurity Systems: A Time-Dependent Numerical Renormalization-Group Approach», *Phys. Rev. Lett.* **95**, 196801 (2005) DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.196801.

- [32] P. W. Anderson, «Localized Magnetic States in Metals», *Phys. Rev.* **124**, 41–53 (1961) DOI: 10.1103/PhysRev.124.41.
- [33] L. V. Keldysh, «Diagram technique for nonequilibrium processes», *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **47**, 1515–1527 (1964).
- [34] S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor* (Cambridge University Press, 2005), DOI: 10.1017/cbo9781139164313.
- [35] H. Haug and A. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*, Springer Series in Solid-State Sciences (Springer Berlin Heidelberg, 2010), ISBN: 9783642092695.
- [36] A.-P. Jauho, N. S. Wingreen, and Y. Meir, «Time-dependent transport in interacting and noninteracting resonant-tunneling systems», *Phys. Rev. B* **50**, 5528–5544 (1994) DOI: 10.1103/PhysRevB.50.5528.
- [37] D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner, «Kondo effect in a single-electron transistor», *Nature* **391**, 156–159, ISSN: 1476-4687 (1998) DOI: 10.1038/34373.
- [38] L. J. Klein, D. E. Savage, and M. A. Eriksson, «Coulomb blockade and Kondo effect in a few-electron silicon/silicon-germanium quantum dot», *Appl. Phys. Lett.* **90**, 033103 (2007) DOI: 10.1063/1.2431760.
- [39] P. T. Mathew and F. Fang, «Advances in Molecular Electronics: A Brief Review», *Engineering* **4**, 760 –771, ISSN: 2095-8099 (2018) DOI: <https://doi.org/10.1016/j.eng.2018.11.001>.
- [40] A. Bzdak, S. Esumi, V. Koch, J. Liao, M. Stephanov, and N. Xu, «Mapping the phases of quantum chromodynamics with beam energy scan», *Physics Reports* **853**, 1–87 (2020) DOI: 10.1016/j.physrep.2020.01.005.
- [41] D. Anchishkin, I. Mishustin, and H. Stoecker, «Phase transition in an interacting boson system at finite temperatures», *Journal of Physics G:*

Nuclear and Particle Physics **46**, 035002 (2019) DOI: 10.1088/1361-6471/aafea8.

- [42] A. Anselm and M. Ryskin, «Production of classical pion field in heavy ion high energy collisions», Physics Letters B **266**, 482–484, ISSN: 0370-2693 (1991) DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(91\)91073-5](https://doi.org/10.1016/0370-2693(91)91073-5).
- [43] J.-P. Blaizot and A. Krzywicki, «Soft-pion emission in high-energy heavy-ion collisions», Phys. Rev. D **46**, 246–251 (1992) DOI: 10.1103/PhysRevD.46.246.
- [44] J. D. Bjorken, «A full-acceptance detector for SSC physics at low and intermediate mass scales; An expression of interest to the SSC», International Journal of Modern Physics A; (United States) **7**, 4189–4257, ISSN: 0217-751X (1992) DOI: 10.1142/S0217751X92001885.
- [45] I. N. Mishustin and W. Greiner, «Multi - pion droplets», J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **19**, L101–L109 (1993) DOI: 10.1088/0954-3899/19/7/001.
- [46] D. T. Son and M. A. Stephanov, «QCD at a Finite isospin density: From the pion to quark-antiquark condensation», Physics of Atomic Nuclei **64**, 834–842 (2001) DOI: 10.1134/1.1378872.
- [47] J. B. Kogut and D. Toublan, «QCD at small nonzero quark chemical potentials», Phys. Rev. D **64**, 034007 (2001) DOI: 10.1103/PhysRevD.64.034007.
- [48] D. Toublan and J. Kogut, «Isospin chemical potential and the QCD phase diagram at nonzero temperature and baryon chemical potential», Physics Letters B **564**, 212–216, ISSN: 0370-2693 (2003) DOI: [https://doi.org/10.1016/S0370-2693\(03\)00701-9](https://doi.org/10.1016/S0370-2693(03)00701-9).
- [49] A. Mammarella and M. Mannarelli, «Intriguing aspects of meson condensation», Phys. Rev. D **92**, 085025 (2015) DOI: 10.1103/PhysRevD.92.085025.

- [50] S. Carignano, L. Lepori, A. Mammarella, M. Mannarelli, and G. Pagliaroli, «Scrutinizing the pion condensed phase», *The European Physical Journal A* **53**, DOI: 10.1140/epja/i2017-12221-x (2017) DOI: 10.1140/epja/i2017-12221-x.
- [51] M. Mannarelli, «Meson Condensation», *Particles* **2**, 411–443 (2019) DOI: 10.3390/particles2030025.
- [52] B. B. Brandt and G. Endrodi, «QCD phase diagram with isospin chemical potential», *PoS LATTICE2016*, 039 (2016) DOI: 10.22323/1.256.0039, arXiv: 1611.06758 [hep-lat].
- [53] B. B. Brandt, G. Endrodi, and S. Schmalzbauer, «QCD at finite isospin chemical potential», *EPJ Web Conf.* **175**, edited by M. Della Morte, P. Fritsch, E. Gámiz Sánchez, and C. Pena Ruano, 07020 (2018) DOI: 10.1051/epjconf/201817507020, arXiv: 1709.10487 [hep-lat].
- [54] B. Brandt, G. Endrődi, and S. Schmalzbauer, «QCD phase diagram for nonzero isospin-asymmetry», *Physical Review D* **97**, DOI: 10.1103/physrevd.97.054514 (2018) DOI: 10.1103/physrevd.97.054514.
- [55] L. M. Satarov, M. N. Dmitriev, and I. N. Mishustin, «Equation of state of hadron resonance gas and the phase diagram of strongly interacting matter», *Physics of Atomic Nuclei* **72**, 1390–1415 (2009) DOI: 10.1134/s1063778809080146.
- [56] V. Vovchenko, A. Motornenko, P. Alba, M. I. Gorenstein, L. M. Satarov, and H. Stoecker, «Multicomponent van der Waals equation of state: Applications in nuclear and hadronic physics», *Phys. Rev. C* **96**, 045202 (2017) DOI: 10.1103/PhysRevC.96.045202.
- [57] F. D. M. Haldane, «Scaling Theory of the Asymmetric Anderson Model», *Phys. Rev. Lett.* **40**, 416–419 (1978) DOI: 10.1103/PhysRevLett.40.416.
- [58] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Jan. 1993), DOI: 10.1017/cbo9780511470752.

- [59] «Electron correlations in narrow energy bands», Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **276**, 238–257 (1963) DOI: 10.1098/rspa.1963.0204.
- [60] A. C. Hewson, «Theory of Localized Magnetic States in Metals», Phys. Rev. **144**, 420–427 (1966) DOI: 10.1103/PhysRev.144.420.
- [61] V Vovchenko, D Anchishkin, J Azema, P Lombardo, R Hayn, and A.-M. Daré, «A new approach to time-dependent transport through an interacting quantum dot within the Keldysh formalism», Journal of Physics: Condensed Matter **26**, 015306 (2013) DOI: 10.1088/0953-8984/26/1/015306.
- [62] N. E. Bickers, D. L. Cox, and J. W. Wilkins, «Self-consistent large- $N$  expansion for normal-state properties of dilute magnetic alloys», Phys. Rev. B **36**, 2036–2079 (1987) DOI: 10.1103/PhysRevB.36.2036.
- [63] P. Myöhänen, A. Stan, G. Stefanucci, and R. van Leeuwen, «Kadanoff-Baym approach to quantum transport through interacting nanoscale systems: From the transient to the steady-state regime», Phys. Rev. B **80**, 115107 (2009) DOI: 10.1103/PhysRevB.80.115107.
- [64] H. Eskes, M. B. J. Meinders, and G. A. Sawatzky, «Anomalous transfer of spectral weight in doped strongly correlated systems», Phys. Rev. Lett. **67**, 1035–1038 (1991) DOI: 10.1103/PhysRevLett.67.1035.
- [65] P. Lombardo and G. Albinet, «Transfer of spectral weight in the degenerate Hubbard Model in infinite dimension», Phys. Rev. B **65**, 115110 (2002) DOI: 10.1103/PhysRevB.65.115110.
- [66] N. S. Wingreen, K. W. Jacobsen, and J. W. Wilkins, «Inelastic scattering in resonant tunneling», Phys. Rev. B **40**, 11834–11850 (1989) DOI: 10.1103/PhysRevB.40.11834.
- [67] D. C. Langreth and J. W. Wilkins, «Theory of Spin Resonance in Dilute Magnetic Alloys», Phys. Rev. B **6**, 3189–3227 (1972) DOI: 10.1103/PhysRevB.6.3189.

- [68] D. C. Langreth, «Linear and Nonlinear Response Theory with Applications,» in *Linear and Nonlinear Electron Transport in Solids* (Springer US, 1976), pp. 3–32, DOI: 10.1007/978-1-4757-0875-2\_1.
- [69] J. Maciejko, «An introduction to nonequilibrium many-body theory», University Lecture (2007).
- [70] W. Hofstetter and S. Kehrein, «Symmetric Anderson impurity model with a narrow band», *Phys. Rev. B* **59**, R12732–R12735 (1999) DOI: 10.1103/PhysRevB.59.R12732.
- [71] S. Schäfer and D. E. Logan, «Spectral properties of a narrow-band Anderson model», *Phys. Rev. B* **63**, 045122 (2001) DOI: 10.1103/PhysRevB.63.045122.
- [72] S. Schäfer, «Anderson impurity model with a narrow-band host: From orbital physics to the Kondo effect», *Phys. Rev. B* **83**, 195110 (2011) DOI: 10.1103/PhysRevB.83.195110.
- [73] D. V. Averin and K. K. Likharev, «Coulomb blockade of single-electron tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions», *Journal of Low Temperature Physics* **62**, 345–373, ISSN: 1573-7357 (1986) DOI: 10.1007/BF00683469.
- [74] T. A. Fulton and G. J. Dolan, «Observation of single-electron charging effects in small tunnel junctions», *Phys. Rev. Lett.* **59**, 109–112 (1987) DOI: 10.1103/PhysRevLett.59.109.
- [75] P. Lafarge, H. Pothier, E. R. Williams, D. Esteve, C. Urbina, and M. H. Devoret, «Direct observation of macroscopic charge quantization», *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **85**, 327–332, ISSN: 1431-584X (1991) DOI: 10.1007/BF01307627.
- [76] W. Liang, M. Shores, M Bockrath, J. Long, and H Park, «Kondo resonance in a single-molecule transistor», English, *Nature* **417**, 725–729, ISSN: 0028-0836 (2002) DOI: 10.1038/nature00790.

- [77] G. D. Scott and D. Natelson, «Kondo Resonances in Molecular Devices», *ACS Nano* **4**, 3560–3579, ISSN: 1936-0851 (2010) DOI: 10.1021/nn100793s.
- [78] A. K. Mitchell, K. G. L. Pedersen, P. Hedegård, and J. Paaske, «Kondo blockade due to quantum interference in single-molecule junctions», *Nat. Commun.* **8**, 15210, ISSN: 2041-1723 (2017) DOI: 10.1038/ncomms15210.
- [79] L. H. Yu and D. Natelson, «The Kondo Effect in C60 Single-Molecule Transistors», *Nano Letters* **4**, 79–83, ISSN: 1530-6984 (2004) DOI: 10.1021/nl034893f.
- [80] J. Nygard, D. H. Cobden, and P. E. Lindelof, «Kondo physics in carbon nanotubes», *Nature* **408**, 342–346, ISSN: 0028-0836 (2000) DOI: 10.1038/35042545.
- [81] W. van der Wiel, S. De Franceschi, T. Fujisawa, J. M. Elzerman, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, «The Kondo effect in the unitary limit», *Science* **289**, 2105–2108, ISSN: 0036-8075 (2000) DOI: 10.1126/science.289.5487.2105.
- [82] O. Klochan, A. P. Micolich, A. R. Hamilton, D. Reuter, A. D. Wieck, F. Reininghaus, M. Pletyukhov, and H. Schoeller, «Scaling of the Kondo zero-bias peak in a hole quantum dot at finite temperatures», *Phys. Rev. B* **87**, 201104 (2013) DOI: 10.1103/PhysRevB.87.201104.
- [83] D. P. Daroca, P. Roura-Bas, and A. A. Aligia, «Relation between width of zero-bias anomaly and Kondo temperature in transport measurements through correlated quantum dots: Effect of asymmetric coupling to the leads», *Phys. Rev. B* **98**, 245406 (2018) DOI: 10.1103/PhysRevB.98.245406.
- [84] B. Limburg, J. O. Thomas, J. K. Sowa, K. Willick, J. Baugh, E. M. Gauger, G. A. D. Briggs, J. A. Mol, and H. L. Anderson, «Charge-state assignment of nanoscale single-electron transistors from their current–

- voltage characteristics», *Nanoscale* **11**, 14820–14827 (2019) DOI: 10.1039/C9NR03754C.
- [85] P. Wahl, L. Diekhöner, M. A. Schneider, L. Vitali, G. Wittich, and K. Kern, «Kondo Temperature of Magnetic Impurities at Surfaces», *Phys. Rev. Lett.* **93**, 176603 (2004) DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.176603.
  - [86] M. Tie, S. Gravelins, M. Niewczas, and A. Dhirani, «Large Kondo effect in assemblies of Au nanoparticles linked with alkanedithiol electron bridges», *Nanoscale* **11**, 5395–5401, ISSN: 2040-3364 (2019) DOI: 10.1039/c8nr09280j.
  - [87] I. H. Chan, R. M. Westervelt, K. D. Maranowski, and A. C. Gossard, «Strongly capacitively coupled quantum dots», *Appl. Phys. Lett.* **80**, 1818–1820, ISSN: 0003-6951 (2002) DOI: 10.1063/1.1456552.
  - [88] A. Hübel, J. Weis, W. Dietsche, and K. v. Klitzing, «Two laterally arranged quantum dot systems with strong capacitive interdot coupling», *Appl. Phys. Lett.* **91**, 102101 (2007) DOI: 10.1063/1.2778542.
  - [89] S. Fringes, C. Volk, B. Terrés, J. Dauber, S. Engels, S. Trellenkamp, and C. Stampfer, «Tunable capacitive inter-dot coupling in a bilayer graphene double quantum dot», *Phys. Status Solidi C* **9**, 169–174, ISSN: 1862-6351 (2012) DOI: 10.1002/pssc.201100340.
  - [90] P. W. Anderson, «Localized Magnetic States in Metals», *Phys. Rev.* **124**, 41–53 (1961) DOI: 10.1103/PhysRev.124.41.
  - [91] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and J. Keller, «A non-crossing approximation for the study of intersite correlations», *Euro. Phys. J. B* **13**, 613–624, ISSN: 1434-6028 (2000) DOI: 10.1007/s100510050077.
  - [92] J. Otsuki and Y. Kuramoto, «Extension of the Non-Crossing Approximation for the Anderson Model with Finite Coulomb Repulsion», *J. Phys. Soc. Jpn* **75**, 064707 (2006) DOI: 10.1143/JPSJ.75.064707.

- [93] F. Zamani, T. Chowdhury, P. Ribeiro, K. Ingersent, and S. Kirchner, «Quantum criticality in the two-channel pseudogap Anderson model: A test of the non-crossing approximation», *Phys. Status Solidi B* **250**, 547–552, ISSN: 0370-1972 (2013) DOI: 10.1002/pssb.201200928.
- [94] T.-S. Kim and S. Hershfield, «Thermoelectric effects of an Aharonov-Bohm interferometer with an embedded quantum dot in the Kondo regime», *Phys. Rev. B* **67**, 165313 (2003) DOI: 10.1103/PhysRevB.67.165313.
- [95] N. S. Wingreen, A. P. Jauho, and Y. Meir, «Time-dependent transport through a mesoscopic structure», *Phys. Rev. B* **48**, 8487–8490, ISSN: 0163-1829 (1993) DOI: 10.1103/PhysRevB.48.8487.
- [96] T. A. Costi and V. Zlatić, «Thermoelectric transport through strongly correlated quantum dots», *Physical Review B* **81**, DOI: 10.1103/physrevb.81.235127 (2010) DOI: 10.1103/physrevb.81.235127.
- [97] J. Park, A. N. Pasupathy, J. I. Goldsmith, C. Chang, Y. Yaish, J. R. Petta, M. Rinkoski, J. P. Sethna, H. D. Abruna, P. L. McEuen, and D. C. Ralph, «Coul. blockade and the Kondo eff. in single-atom trans.» *Nature* **417**, 722–725, ISSN: 0028-0836 (2002) DOI: 10.1038/nature00791.
- [98] A. B. Migdal, «Stability of vacuum and limiting fields», *Sov. Phys. JETP* **34**, 2209–2224 (1972).
- [99] A. B. Migdal, O. A. Markin, and I. Mishustin, «The pion spectrum in nuclear matter and pion condensation», *Sov. Phys. JETP* **39**, 212 (1974).
- [100] A. B. Migdal, «Pion fields in nuclear matter», *Rev. Mod. Phys.* **50**, 107–172 (1978) DOI: 10.1103/RevModPhys.50.107.
- [101] A. Migdal, E. Saperstein, M. Troitsky, and D. Voskresensky, «Pion degrees of freedom in nuclear matter», *Physics Reports* **192**, 179–437,

ISSN: 0370-1573 (1990) DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(90\)90132-L](https://doi.org/10.1016/0370-1573(90)90132-L).

- [102] D Anchishkin and V Vovchenko, «Mean-field approach in the multi-component gas of interacting particles applied to relativistic heavy-ion collisions», *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics* **42**, 105102 (2015) DOI: 10.1088/0954-3899/42/10/105102.
- [103] D. Anchishkin, «Particle finite-size effects as a mean-field approximation», *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **75**, 369–378 (1992).
- [104] D. Anchishkin and E. Suhonen, «Generalization of mean-field models to account for effects of excluded volume», *Nuclear Physics A* **586**, 734–754, ISSN: 0375-9474 (1995) DOI: [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(94\)00822-5](https://doi.org/10.1016/0375-9474(94)00822-5).
- [105] R. V. Poberezhnyuk, V Vovchenko, D. V. Anchishkin, and M. I. Gorenstein, «Limiting temperature of pion gas with the van der Waals equation of state», *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics* **43**, 095105 (2016) DOI: 10.1088/0954-3899/43/9/095105.
- [106] J. Hansen and I. R. McDonald, *Virial expansion of the equation of state. In Theory of simple liquids*, en (Academic Press, San Diego, CA, 2006).
- [107] A. J. Leggett, *Quantum Liquids* (Oxford University Press, Sept. 2006), DOI: 10.1093/acprof:oso/9780198526438.001.0001.
- [108] E. V. Shuryak, «Collective interaction of mesons in hot hadronic matter», **533**, 761–788 (1991) DOI: 10.1016/0375-9474(91)90543-F.
- [109] J. Theis, G. Graebner, G. Buchwald, J. Maruhn, W. Greiner, H. Stöcker, and J. Polonyi, «Phase transition of the nucleon-antinucleon plasma in a relativistic mean-field theory», *Phys. Rev. D* **28**, 2286–2290 (1983) DOI: 10.1103/PhysRevD.28.2286.

- [110] E. Kolomeitsev and D. Voskresensky, «Fluctuations in non-ideal pion gas with dynamically fixed particle number», Nuclear Physics A **973**, 89–103 (2018) DOI: 10.1016/j.nuclphysa.2018.02.010.
- [111] E. E. Kolomeitsev, M. E. Borisov, and D. N. Voskresensky, «Particle number fluctuations in a non-ideal pion gas», EPJ Web of Conferences **182**, edited by Y. Aharonov, L. Bravina, and S. Kabana, 02066 (2018) DOI: 10.1051/epjconf/201818202066.
- [112] E. E. Kolomeitsev, D. N. Voskresensky, and M. E. Borisov, *Charge and isospin fluctuations in a non-ideal pion gas with dynamically fixed particle number*, 2019, DOI: 10.48550/ARXIV.1910.09334.
- [113] L. Adamczyk, J. K. Adkins, and G. Agakishiev et al., «Bulk properties of the medium produced in relativistic heavy-ion collisions from the beam energy scan program», Phys. Rev. C **96**, 044904 (2017) DOI: 10.1103/PhysRevC.96.044904.
- [114] B. Abelev, J. Adam, and D. Adamová et al., «Pion, Kaon, and Proton Production in Central Pb-Pb Collisions at  $\sqrt{s_{NN}}=2.76$  TeV», Phys. Rev. Lett. **109**, 252301 (2012) DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.252301.
- [115] O. S. Stashko, D. V. Anchishkin, O. V. Savchuk, and M. I. Gorenstein, «Thermodynamic properties of interacting bosons with zero chemical potential», Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics **48**, 055106 (2021) DOI: 10.1088/1361-6471/abd5a5.
- [116] M. Kataja and P. Ruuskanen, «Non-zero chemical potential and the shape of the  $p_T$ -distribution of hadrons in heavy-ion collisions», Physics Letters B **243**, 181–184 (1990) DOI: 10.1016/0370-2693(90)90836-u.
- [117] F. London, «The  $\lambda$ -Phenomenon of Liquid Helium and the Bose-Einstein Degeneracy», Nature **141**, 643–644 (1938) DOI: 10.1038/141643a0.

- [118] P. Ehrenfest, *Phasenumwandlungen im ueblichen und erweiterten Sinn, classifiziert nach den entsprechenden Singularitaeten des thermodynamischen Potentials* (N. V. Noord-Hollandsche Uitgevers Maatschappij, 1933).
- [119] G. Jaeger, «The Ehrenfest Classification of Phase Transitions: Introduction and Evolution», *Archive for History of Exact Sciences* **53**, 51–81 (1998) DOI: 10.1007/s004070050021.
- [120] I. N. Mishustin, D. V. Anchishkin, L. M. Satarov, O. S. Stashko, and H. Stoecker, «Condensation of interacting scalar bosons at finite temperatures», *Phys. Rev. C* **100**, 022201 (2019) DOI: 10.1103/PhysRevC.100.022201.



## **ДОДАТОК А СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗА ТЕМОЮ ТА ВІДОМОСТІ ПРО АПРОБАЦІЮ**

Результати даної дисертаційної роботи представлено у 5-ох роботах, що опубліковані у провідних фізичних журналах [1–5]

- [1] D. Anchishkin, I. Mishustin, O. Stashko, D. Zhuravel, and H. Stoecker, «Finite-Temperature Bose-Einstein Condensation in Interacting Boson System», *Ukrainian Journal of Physics* **64**, 1118 (2019) DOI: 10.15407/ujpe64.12.1118.
- [2] D. Anchishkin, V. Gnatovskyy, D. Zhuravel, and V. Karpenko, «Relativistic selfinteracting particle-antiparticle system of bosons», *Journal of Physics and Electronics* **28**, 3–18 (2020) DOI: 10.15421/332016.
- [3] D. Zhuravel, D. Anchishkin, R. Hayn, P. Lombardo, and S. Schäfer, «Non-equilibrium electronic transport through a quantum dot with strong Coulomb repulsion in the presence of a magnetic field», *Journal of Physics: Condensed Matter* **32**, 165601 (2020) DOI: 10.1088/1361-648x/ab5ce7.
- [4] P. Lombardo, R. Hayn, D. Zhuravel, and S. Schäfer, «Kondo-assisted switching between three conduction states in capacitively coupled quantum dots», *Physical Review Research* **2**, 033387, ISSN: 2643-1564 (2020) DOI: 10.1103/physrevresearch.2.033387.
- [5] D. Anchishkin, V. Gnatovskyy, D. Zhuravel, and V. Karpenko, «Phase diagram of the selfinteracting particle-antiparticle boson system», *Journal of Physics and Electronics* **29**, 5–14 (2021) DOI: 10.15421/332101.

Матеріали роботи було представлено на семінарах в Інституті теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України. Окремі результати доповідалися на конференціях:

- D. Zhuravel, D. Anchishkin, R. Hayn and S. Schafer, “Nonequilibrium transport of electrons with strong correlations through a quantum dot in the magnetic field”: доповідь на семінарі в Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence, Aix-Marseille Université, Univ. de Toulon, December 15, 2016, Marseille, France.
- D. Zhuravel, D. Anchishkin, R. Hayn and S. Schafer, “Nonequilibrium transport of electrons with strong correlations through a quantum dot in the magnetic field”: VIII Young Scientists Conference Problems of Theoretical Physics, December 12-14, 2017, Kyiv, Ukraine.
- D. Anchishkin, I. Mishustin, O. Stashko, D. Zhuravel, H. Stoecker, “Finite-Temperature Bose-Einstein Condensation in Interacting Boson System”, BGL-2019: Non-Euclidean, Non-Commutative Geometry and Quantum Physics, May 19-24, 2019.
- Журавель Д.В., “Нерівноважні властивості квантових точок”, доповідь на семінарі КАУ (керівник Семенов А.О), Київ, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, 12.10. 2020 р.
- Журавель Д.В., “Бозе-Ейнштейнівська конденсація в системі взаємодіючих бозонів при скінченних температурах”, доповідь на семінарі КАУ (керівник Семенов А.О., Київ, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, 19.10. 2020 р.
- Журавель Д.В., “Нерівноважні властивості квантових точок”, семінар відділу теорії ядра та квантової теорії поля, Київ, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, 29.10.2020 р.
- D. Zhuravel, D. Anchishkin, V. Gnatovskyy, V. Karpenko, Selfinteracting Particle-Antiparticle System of Bosons: the Bose-Einstein Condensation as a Second-Order Phase Transition, Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, Kyiv, February 16, 2021.
- D. Anchishkin, V. Gnatovskyy, D. Zhuravel, V. Karpenko, Phase transitions in relativistic meson systems, 22nd Zimanyi School - Winter Workshop on Heavy Ion Physics, Budapest, Hungary, December 5-9, 2022.

- D. Anchyskin, V. Gnatovskyy, D. Zhuravel, V. Karpenko, Phase transitions in a system of self-interacting particle-antiparticle, XIII Conference of Young Scientists "Problems of Theoretical Physics Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, Kyiv, Ukraine, December 21, 2022.

