Uniones Josephson basadas en nanohilos de Majorana encapsulados

Trabajo de Fin de Grado Tutorizado

Carlos Payá

Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid (UAM), Madrid, España.

Tutora: Elsa Prada

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM), Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Madrid, España

Tutor académico: Eduardo J.H. Lee

Departamento de Física de la Materia Condensada e

Instituto de Física de la Materia Condensada (IFIMAC),

Universidad Autónoma de Madrid (UAM), Madrid, España

(Dated: 20 de mayo de 2021)

Resumen

Los nanohilos híbridos superconductor-semiconductor han ostentado un lugar prominente en física de la materia condensada durante la última década, ya que son una plataforma ideal para estudiar superconductividad topológica unidimensional y la creación de estados de borde fraccionales conocidos como modos de Majorana. Típicamente, el superconductor convencional que se usa para inducir superconductividad cubre parcialmente el hilo. Recientemente, se ha sintetizado una nueva generación de hilos híbridos encapsulados en los que el superconductor es crecido epitaxialmente alrededor de todo el hilo, de forma que presentan ciertas ventajas sobre sus homólogos de recubrimiento parcial.

En este trabajo analizamos primero la densidad local de estados en el extremo del hilo en función de un campo magnético aplicado. Cuando el hilo es atravesado por un número impar de cuantos de flujo, observamos la aparición de una anomalía a energía cero que señala la presencia de un modo de Majorana en el extremo del hilo. Con ayuda de las bandas del hilo en el espacio de Nambu, analizamos la estructura completa de la densidad de estados así como la transición topológica del sistema híbrido.

En una segunda parte, combinamos dos de estos hilos y estudiamos (por primera vez para hilos encapsulados) el efecto Josephson a través de la unión superconductor-normal-superconductor. En particular, hallamos el espectro Andreev mediante cálculos de la densidad local de estados en la unión. Cuando el sistema pasa a la fase topológica, detectamos la presencia de Majoranas en la unión a través de un doblamiento del periodo de los niveles de Andreev con la diferencia de fase superconductora. Asimismo, estudiamos el comportamiento de estos estados en función del flujo de campo magnético. Este tipo de diseño de doble hilo es esencial para la realización de un qubit lógico formado por cuatro Majoranas, y para la interpretación de los últimos resultados experimentales en nanohilos de Majorana encapsulados.

CONTENTS

I.	Introducción	3
II.	Modelo	7
	A. Hamiltoniano de un hilo híbrido encapsulado	7
	B. Simulación de la LDOS	9
		4.0
111.	Resultados	10
	A. Nanohilo semi-infinito	10
	B. Unión Josephson	13
IV.	Conclusiones	18
	Agradecimientos	20
	71gradeeliineliios	40
	Referencias	20

I. INTRODUCCIÓN

Los materiales conocidos como superconductores topológicos llevan fascinando a la comunidad científica desde principios de siglo, puesto que combinan la fase superconductora con las propiedades exóticas de los materiales topológicos [1–6]. En 2001, Kitaev [7] propuso un modelo teórico "de juguete" para describir un superconductor (SC) topológico unidimensional (1D) que resultó ser trascendental para el campo. En este modelo, tras la transición de fase desde el estado trivial del SC a la fase topológica, el sistema 1D desarrolla estados de borde ligados a los extremos del hilo que poseen varias cualidades excepcionales. Son excitaciones de Bogoliubov a energía cero dentro del gap SC, cuyo operador de creación fermiónico es igual a su propio adjunto. Cada estado ligado puede considerarse como medio fermión, de forma que dos de ellos a distancia definen un fermión no local. Cuando se aproximan, se aniquilan como los fermiones de Majorana. Sin embargo, y a diferencia de éstos, poseen estadística no Abeliana ante intercambio. Por este motivo se llaman genéricamente modos de Majorana (MM), y están protegidos topológicamente por la simetría electrón-hueco del SC.

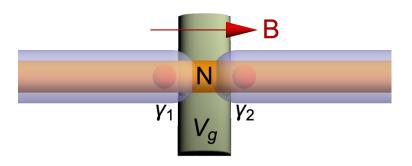


Figura 1. Unión Josephson basada en hilos híbridos encapsulados. Un hilo semiconductor es proximizado en dos regiones con un superconductor convencional crecido epitaxialmente alrededor de todo el hilo, formando una geometría SNS. La aplicación de un campo magnético externo B a lo largo del hilo da lugar al efecto orbital y al efecto Little-Parks (LP) en función del flujo magnético Φ . Aplicando un voltaje de puerta V_g en la zona normal del hilo se controla la transparencia de la unión. Bajo ciertas condiciones, aparecen modos de Majorana en los bordes de la unión, denotados γ_1 y γ_2 .

Según el modelo de Kitaev, existen dos requisitos para generar un superconductor topológico con estas características. Se necesita tener un líquido fermiónico sin espín (o en el que se haya roto la degeneración de espín), y se necesita tener superconductividad, lo que en 1D conlleva generar un estado SC de onda p. Es muy difícil encontrar estos ingredientes en un material de forma natural. Uno de los grandes avances del campo llegó a través de un trabajo de Fu y Kane en 2008 [8] en el que propusieron la creación de una fase superconductora topológica sintética, es decir, generada a través de combinar distintos materiales más sencillos. El fundamento de su planteamiento es la inducción mediante efecto proximidad de superconductividad en la frontera de un aislante topológico. Inspirados en esta idea, Oreg et al. y Lutchyn et al. propusieron en 2010 [9, 10] el uso de un nanohilo semiconductor con fuerte acoplo espín-órbita, en contacto con un SC convencional de onda s que induce superconductividad en el hilo, y en presencia de un campo magnético externo B. Según este modelo, al aumentar B por encima de un cierto valor crítico, la nanoestructura híbrida atraviesa una transición de fase topológica y aparecen MM en sus extremos. Este modelo ha tenido una gran repercusión en la comunidad científica debido a su relativa simplicidad así como por estar basado en materiales accesibles para los laboratorios de hoy en día, por lo que ha generado una gran producción científica tanto teórica como experimental. Se conoce en el campo como el modelo de Oreg-Lutchyn o el nanohilo de Majorana.

En 2012, Mourik et al. llevaron esta idea al laboratorio por primera vez. A través de medidas de conductancia diferencial, midieron anomalías a voltaje cero compatibles en principio con la existencia de un MM en el extremo del hilo proximizado [11]. Sin embargo, múltiples trabajos posteriores [3], tanto teóricos como experimentales, han demostrado que la realidad experimental es más compleja de lo que predecían los primeros modelos mínimos. Existen desafortunadamente diversos fenómenos físicos triviales que imitan la presencia de Majoranas, especialmente en dispositivos basados en medidas locales. Si bien se ha avanzado enormemente en este campo tanto desde el punto de vista teórico como experimental, todavía no se considera que se haya demostrado inequívocamente la presencia de modos de Majorana en el laboratorio. Por este motivo, en los últimos años se están explorando materiales de mayor calidad, nuevas geometrías y dispositivos experimentales más sofisticados que permitan la producción y detección de los exóticos modos de Majorana de forma incuestionable.

Uno de los inconvenientes de los nanohilos de Oreg-Lutchyn es que, al aplicar los campos magnéticos intensos requeridos para alcanzar la fase topológica, se destruye el gap del SC padre [12]. De esta forma, la heteroestructura deja de estar en la fase superconductora antes de poder hacerse topológica. Recientemente, se ha propuesto un nuevo modelo [13] para la creación de Majoranas en el que el SC padre recubre completamente el semiconductor, formando lo que se conocen como hilos híbridos encapsulados, a diferencia del modelo mínimo en donde el SC cubre sólo parcialmente el hilo. Este nuevo modelo no se basa en el efecto Zeeman de B, como el modelo original, sino en el efecto orbital producido por el flujo magnético Φ que atraviesa la sección finita del hilo, en combinación con el acoplo espínórbita. Este sistema alternativo posee ciertas ventajas ya que, según las predicciones teóricas, los campos magnéticos necesarios para la transición topológica son sustancialmente menores (en torno al 10%), y además los MM aparecen a valores muy concretos de Φ , lo cual podría facilitar su creación y detección inequívoca. Interesantemente, además del efecto orbital, el flujo a través del hilo también genera una modulación periódica del gap SC conocido como el efecto Little-Parks (LP) [14]. Aunque el efecto LP se detectó experimentalmente en cortezas superconductoras y se estudió en los años 60, no fue hasta hace una década cuando se desarrolló la teoría que aquí usamos [14-16]. Este tipo de hilos híbridos encapsulados son ya una realidad experimental y se usaron por primera vez para intentar demostrar la presencia de MM en 2020 [13].

En cuanto a aplicaciones y utilidades, cabe destacar que se ha conjeturado que los MM en estas nanoestructuras podrían ser usados como qubits de un futuro ordenador cuántico protegido topológicamente ante decoherencia a nivel del hardware. En principio, un qubit físico consta de dos MM. En la práctica, y debido a la regla de superselección que implica la conservación de la paridad en el SC, se necesitan al menos cuatro MM para generar un qubit lógico [1] y, por tanto, geometrías basadas en al menos dos hilos de Majorana. Uno de los dispositivos más sencillos para generar estos cuatro MM es una unión Josephson superconductor-normal-supercoductor (SNS). El efecto Josephson consiste en la aparición de una corriente sin voltaje aplicado en una unión SNS gracias a la diferencia de fase del potencial de apareamiento entre ambos SC. Es una de las consecuencias de la superconductividad más importantes y utilizada en diferentes aplicaciones. Fue descubierta [17] poco después de la aparición de las teorías BCS [18] y de Ginzburg-Landau [19], esenciales en la historia de los SC. En el modelo original de Kitaev [7] se predecía la aparición de una súper-corriente Josephson anómala en la fase topológica, con período 4π , en lugar del común periodo 2π de la fase trivial, que también se ha estudiado para el hilo parcialmente cubierto [20]. Se considera por tanto que la observación de este efecto es una prueba de la presencia de MM en los extremos de la zonas híbridas del nanohilo [1].

En este trabajo estudiamos el efecto Josephson en uniones basadas en hilos encapsulados, véase la Fig. 1. Nótese que hasta la fecha sólo hay dos estudios teóricos sobre la fase topológica en estos hilos [13, 21], donde se analiza un solo hilo encapsulado. Por lo tanto, estamos considerando por primera vez la combinación de dos hilos encapsulados, en concreto en una geometría Josephson. En particular, llevamos a cabo simulaciones numéricas del espectro Andreev mediante cálculos de la densidad local de estados (LDOS) en la unión. Consideraremos la dispersión de los estados ligados de Andreev (Andreev Bound States en inglés, ABS) en función de la diferencia de fase entre las dos zonas superconductoras y para distintos valores del flujo magnético aplicado a través de los hilos. De esta manera, y junto con el estudio de las bandas del sistema en el espacio de Nambu, describimos cómo se comporta la LDOS en ausencia y en presencia de MM en la unión. De forma previa, estudiamos también la LDOS en el extremo de un solo hilo para entender su comportamiento en función del flujo de campo magnético.

Este report se estructura de la siguiente manera: en la sección II describimos el modelo

teórico, el efecto LP y cómo se ha implementado computacionalmente el hamiltoniano y la unión Josephson; en la sección III discutimos los resultados obtenidos en la LDOS y sus bandas asociadas tanto para un solo nanohilo encapsulado como para la unión SNS; y, finalmente, en la sección IV presentamos las conclusiones del trabajo.

II. MODELO

A. Hamiltoniano de un hilo híbrido encapsulado

Queremos describir el dispositivo SNS más sencillo posible basado en hilos híbridos encapsulados. Para ello hacemos una serie de conjeturas y aproximaciones. Consideramos que la zona normal N es muy corta (unión Josephson corta) y que la unión es transparente. Las zonas proximizadas son semi-infinitas. Consecuentemente, en la fase topológica aparecerá un MM en cada extremo de la unión, Fig. 1. Esta es una buena aproximación cuando las zonas S son muy largas (en comparación con la longitud de decaimiento de los MM), de forma que los Majoranas internos, γ_1 y γ_2 , se desacoplan de forma efectiva de los Majoranas externos en los otros extremos de cada hilo (no mostrados). Finalmente, consideramos que estos hilos encapsulados pueden ser descritos por la aproximación de corteza cilíndrica [13]. Aunque los nanohilos experimentales tienen sección hexagonal y son tubos sólidos, se ha demostrado que el modelo de cilindro hueco es una buena aproximación para situaciones en las que la función de onda del semiconductor está principalmente localizada cerca del SC padre. Esto es posible cuando el hilo semiconductor tiene de partida un potencial químico pequeño. Debido al combamiento de la banda en la interfaz SC-semiconductor, la función de onda en este caso se localiza fundamentalmente en la frontera entre ambos materiales. Alternativamente, el modelo hueco que aquí estudiamos podría construirse experimentalmente creciendo una fina capa del semiconductor sobre un núcleo aislante, y sobre esta capa, el SC.

Comenzamos nuestro estudio con un solo hilo encapsulado en aproximación de cilindro hueco, inmerso en un campo magnético a lo largo del hilo. Bajo un flujo longitudinal, el parámetro de orden SC desarrolla un número entero de bucles (winding en inglés) con la coordenada angular φ alrededor del hilo: $\Delta = |\Delta| e^{i\phi} e^{-in\varphi}$, donde $n = \lfloor \Phi/\Phi_0 \rfloor$ es el entero más cercano del flujo Φ normalizado al cuanto de flujo $\Phi_0 = \frac{h}{2e}$. Este número n se

corresponde con el número de vórtices superconductores que atraviesan el hilo o también llamados "fluxoides". Por otro lado, ϕ es la fase superconductora, que se define como el conjugado del número de partículas en el SC. Además, surge el denominado efecto LP por el cual el gap superconductor $|\Delta|$ se modula. Usando el formalismo de Bogoliubov-de Gennes (BdG) [22] para la descripción de un sistema SC, el hamiltoniano se puede escribir como [13]

$$H_{0} = \begin{bmatrix} (\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^{2} \\ 2m^{*} \end{bmatrix} - \mu(r) + \boldsymbol{\alpha}(r) \cdot \boldsymbol{\sigma} \times [\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})] ,$$

$$H = \begin{pmatrix} H_{0}(\mathbf{A}) & -i\sigma_{y}\Delta(\mathbf{r}) \\ i\sigma_{y}\Delta^{*}(\mathbf{r}) & -H_{0}(-\mathbf{A})^{*} \end{pmatrix},$$

$$(1)$$

expresado en la base de Nambu de operadores de partícula y hueco $\Psi = (\psi_{\uparrow}, \psi_{\downarrow}, \psi_{\uparrow}^{\dagger}, \psi_{\downarrow}^{\dagger})$, donde $\{\uparrow, \downarrow\}$ distinguen el espín y $\{\psi, \psi^{\dagger}\}$ los cuasi-electrones y sus cuasi-huecos asociados. Aquí \mathbf{p} es el vector momento lineal, \mathbf{r} el vector de posición, m^* la masa efectiva, $\mu(r)$ el potencial químico, $\alpha(\mathbf{r}) = \alpha(r)\hat{\mathbf{r}}$ el acoplo SO de tipo Rashba (ambos dependen solo de la coordenada radial r), $\boldsymbol{\sigma}$ el vector de matrices de Pauli para el grado de libertad del espín y $\Delta(\mathbf{r})$ el potencial de apareamiento SC inducido en el hilo por la corteza superconductora que lo envuelve. \mathbf{A} es el potencial vector; en coordenadas cilíndricas y en el gauge simétrico vale $\mathbf{A} = \Phi(r)/2\pi r\hat{\boldsymbol{\varphi}}$, donde $\Phi(r) = \pi B r^2$. Nótese que se desprecia el campo Zeeman en H_0 ya que éste da una contribución pequeña para los campos magnéticos explorados.

Como anticipamos, este sistema presenta el llamado efecto LP [23, 24] que modula la temperatura crítica superconductora T_c y, por lo tanto, el potencial de apareamiento, en función de Φ con periodicidad Φ_0 , de forma que el gap es máximo para $\frac{\Phi}{\Phi_0}$ entero y mínimo si es semientero, pudiendo llegar a cerrarlo si nos encontramos en el denominado régimen destructivo. Para la geometría que nos interesa, Schwiete y Oreg [14] demostraron que el efecto se puede estudiar de forma análoga a la introducción de impurezas paramagnéticas, por lo que la modulación de la temperatura crítica viene dada por

$$\ln\left(\frac{T_c(\Phi)}{T_c^0}\right) + \mathcal{D}\left(\frac{1}{2} + \frac{\Lambda_n(\Phi)}{2\pi T_c(\Phi)}\right) - \mathcal{D}\left(\frac{1}{2}\right) = 0,\tag{2}$$

con T_c^0 la temperatura crítica a $B=0,\,\mathcal{D}$ la función digamma y $\Lambda_n[25]$ es

$$\Lambda_n(\varphi) = \frac{T_c^0}{\pi} \frac{\xi^2}{R^2} \left[4 \left(n - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + \frac{d^2}{R^2} \left(\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} + \left(\frac{1}{3} + \frac{d^2}{20R^2} \right) \right) n^2 \right],\tag{3}$$

siendo d, R el grosor y radio del cilindro SC hueco, respectivamente, y ξ la longitud de coherencia superconductora. Estas relaciones solo son válidas en el régimen $R/\xi < 0.6$,

que respetamos en nuestro modelo. Además, al estar en la aproximación del cilindro hueco, $d \ll R$, por lo que $I_c \propto T_c^{3/2}$, y así podemos tomar [26]:

$$\frac{|\Delta(\Phi)|}{|\Delta(\Phi=0)|} = \left(\frac{T_c(\Phi)}{T_c^0}\right)^{3/2}.$$
 (4)

B. Simulación de la LDOS

Una vez establecido el modelo teórico, nuestro objetivo es el cálculo de la LDOS en el borde del nanohilo semi-infinito, donde se liga el estado de Majorana. Para ello, suponemos que el hilo está compuesto por una sucesión de anillos, todos idénticos entre sí, formando un cilindro hueco. El borde es por lo tanto el último anillo, los demás componen el denominado contacto. En el marco de la teoría de transporte cuántico [27], podemos calcular la función de Green de este sistema de scattering (anillo + contacto), $G = (\omega - H)^{-1}$, a partir del hamiltoniano (1). Tenemos entonces que LDOS = $-\frac{1}{\pi}$ Im[Tr(G)].

Para resolver numéricamente la LDOS, discretizamos espacialmente cada anillo para obtener un sistema tipo tight-binding (TB) con el que poder trabajar computacionalmente mediante el paquete de cálculo MathQ [28]. En el hamiltoniano discretizado podemos distinguir dos tipos de términos: de salto (hopping) y de sitio (on-site). Los hoppings establecen la relación entre sitios de la cadena TB, y por tanto vienen dados por el término cinético 4t y el de Rashba de H, ambos multiplicados por la fase de Peierls (proveniente de la discretización de A) y situados en las posiciones no diagonales. Los on-site, en la diagonal y antidiagonal, vienen dados por el término cinético, el potencial químico y el potencial de apareamiento con su fase. El término cinético adopta la forma habitual del método TB

$$t = \frac{\hbar^2}{2m^*a^2},\tag{5}$$

con a el parámetro de discretización, que tomamos $a \sim 0.1R$. Al trabajar en un sistema bidimensional, aparece un factor 4 sobre este término. Por otra parte, el efecto LP lo introducimos implementando las ecuaciones (2) y (4) a la hora de calcular $\Delta(\mathbf{r})$.

Para calcular la LDOS en la unión Josephson, utilizamos un sistema de scattering unido a dos contactos (las dos zonas proximizadas del hilo semi-infinitas, a izquierda y a derecha). En el caso del hilo aislado el sistema era semi-infinito y la zona de scattering era un anillo; en la unión Josephson el sistema es infinito y la zona de scattering son los dos anillos centrales. El hamiltoniano a cada lado es el descrito en la sección II A, con los parámetros

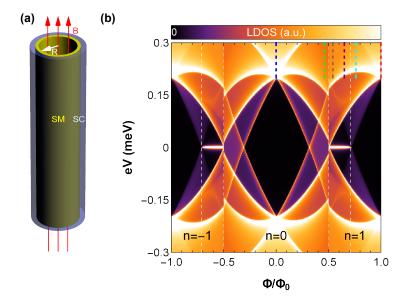


Figura 2. Efecto Little-Parks en un hilo encapsulado semi-infinito. (a) Esquema de un nanohilo híbrido encapsulado de radio R en la aproximación de cilindro hueco y atravesado por líneas de campo magnético B. (b) Simulación numérica de la densidad local de estados (LDOS) [en unidades arbitrarias (a.u.)] de un hilo semi-infinito como el de (a) en función de la energía eV (en meV) y del flujo magnético Φ (en unidades del cuanto de flujo Φ_0). El hilo está en el régimen LP destructivo. Anomalías a energía cero aparecen en los extremos de los lóbulos LP impares, como consecuencia de la presencia de un MM en el extremo del hilo. Parámetros: $m^* = 0.026m_e$, $\mu = 2|\Delta|$, $\alpha = 20$ meV·nm, R = 43nm, $\xi = 100$ nm, $|\Delta| = 0.2$ meV y $T_c = 1.2$ K.

correspondientes a cada hilo híbrido, y con una diferencia de fase superconductora ϕ entre ellos. Una vez construido el sistema combinado, podemos construir la función de Green en la unión como hemos dicho antes y, a partir de ella, la LDOS.

III. RESULTADOS

A. Nanohilo semi-infinito

Comenzamos analizando un solo hilo híbrido encapsulado semi-infinito, ver Fig. 2(a), aplicando la teoría anterior. Queremos analizar la LDOS que se mediría en el extremo del hilo colocando por ejemplo una sonda local y realizando medidas de conductancia diferencial

túnel. En la Fig. 2(b) representamos la LDOS (en unidades arbitrarias) en función de la diferencia de voltaje aplicado entre la sonda y el hilo, eV, y del flujo normalizado, Φ/Φ_0 . Los parámetros de H están dados en el pie de la figura y se corresponden con un hilo semiconductor de InAs, proximizado por un SC padre de Al.

Como podemos observar, el gap inducido en el hilo oscila de forma periódica con el flujo normalizado, siendo máximo para valores enteros de Φ/Φ_0 y muy próximo a cerrarse para valores semienteros. Por este motivo, sabemos que el hilo se encuentra cerca del régimen destructivo del efecto LP. Dependiendo del número de cuantos de flujo que atraviesen el cilindro, el espectro desarrolla distintos lóbulos, siendo n=0 el lóbulo central, $n=\pm 1$ los lóbulos siguientes a derecha e izquierda, $n=\pm 2$ los siguientes (no mostrados), etc.

Los parámetros α y μ escogidos son tales que es posible la transición a la fase topológica (consúltese Ref. 13 para ver el diagrama de fases completo). De esta forma, el hilo semiinfinito desarrolla un MM en su extremo que puede verse como un pico a energía cero en
los lóbulos impares del efecto LP. En la aproximación de cilindro hueco que estamos usando
aquí, la anomalía a energía cero se extiende sólo para valores de Φ/Φ_0 cercanos a números
semienteros [$\pm 0,5$ en Fig. 2(b)], como se estudió en la Ref. 21. Si hubiésemos considerado la
aproximación de cilindro sólido [13, 21], habríamos encontrado que la anomalía a energía cero
producida por el MM puede extenderse a todos los valores de flujo de los lóbulos impares,
especialmente para parámetros del hilo para los cuales la función de onda ocupa toda la
sección del mismo.

Nótese que en la LDOS de nuestro sistema híbrido, el efecto LP por la cual el gap inducido en el hilo se cierra y se abre periódicamente con el flujo es relativamente complejo, posee estructura. (Este efecto, cuando es medido sólo en la corteza puramente superconductora, es mucho más sencillo [13].) En la Fig. 2(b) podemos observar que existen diferentes bordes de gap que se cierran y abren a distintos valores del flujo. Observamos que sólo existe gap real (zonas negras de la LDOS) en estos hilos híbridos con aproximación de cilindro hueco en las zonas centrales de los lóbulos, y en la zona donde se desarrolla el nivel a energía cero de Majorana (llamado minigap o gap topológico).

Queremos entender el origen de los diferentes rasgos de la LDOS, y para ello en la Fig. 3 los relacionamos con la estructura de bandas del hilo infinito, idéntico por lo demás al de la Fig. 2. En la Fig. 3(a) mostramos la LDOS al flujo concreto $\Phi/\Phi_0 = 0.5$, justo donde empieza el lóbulo n=1 y, por lo tanto, donde aparece el pico a energía cero asociado con el

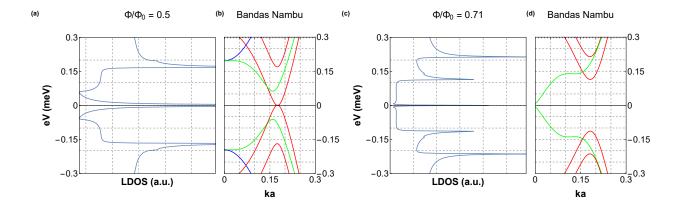


Figura 3. Análisis de la LDOS con la estructura de bandas Nambu. (a) LDOS del hilo semi-infinito de la Fig. 2 para flujo $\Phi/\Phi_0 = 0.5$, es decir, en el extremo izquierdo del lóbulo n=1. $\varsigma(b)$ Estructura de bandas Nambu versus el momento k (a lo largo del hilo) de un hilo idéntico pero infinito. Diferentes colores corresponden a diferentes sub-bandas angulares (el color no distingue el espín). Los diferentes rasgos de la LDOS se pueden asociar a los diversos bordes de las sub-bandas. No hay cierre de gap a k=0 como se esperaría en una transición topológica, sin embargo, sí lo hay a un k finito. (c) LDOS para $\Phi/\Phi_0 = 0.71$, flujo donde desaparece la anomalía a energía cero correspondiente al MM. (d) Bandas Nambu asociadas a (c). En este caso hay cierre de gap a k=0, señalando una transición topológica. En (b,d) las mismas sub-bandas tienen el mismo color.

MM. En la Fig. 3(b) mostramos la estructura de bandas frente al momento k a lo largo del hilo, para el mismo flujo. Esta estructura de bandas está en el espacio de Nambu, donde las bandas con energía positiva se corresponden a estados de cuasi-electrones, y las de energía negativa con cuasi-huecos. Podemos observar que las energías de los distintos rasgos (picos) de la LDOS se corresponden con los bordes de las distintas sub-bandas. Estas sub-bandas poseen distinto espín y momento angular orbital y evolucionan de forma distinta con el flujo magnético. Por lo tanto, las estructura intrincada de líneas luminosas en la Fig. 2 se forma por la presencia de una densidad de estados incrementada en los bordes de las distintas sub-bandas. En el gap real (negro en la Fig. 2), no hay ninguna sub-banda a esas energías y por lo tanto el sistema es aislante, dando lugar a una LDOS nula. Sin embargo, en las regiones con tonos morados y naranjas, existen algunas sub-bandas a esas energías, dando lugar a un sistema conductor solamente para los modos del momento angular correspondiente.

En la Fig. 3(c) pintamos la LDOS para $\Phi/\Phi_0 = 0.71$, justo donde acaba la región topológica y el MM está a punto de desaparecer. Este punto se corresponde con un cierre de gap en el punto de simetría de k=0, ver línea verde en Fig. 3(d). Es decir, éste es un cierre de gap topológico y para valores mayores del flujo el sistema pasa al estado trivial. Sin embargo, es muy interesante notar que donde comenzaba el MM a flujo $\frac{\Phi}{\Phi_0}=0.5$, el cierre de gap se producía a momento finito, ver la sub-banda roja de la Fig. 3(b). Por lo tanto, ese cierre de gap no es topológico. Es decir, en el lóbulo n=0 el sistema es trivial, y al comenzar el lóbulo n=1, el sistema desarrolla un MM de forma brusca y, consecuentemente, está en la fase topológica, aunque no se ha producido una transición topológica con el aumento del flujo de forma aparente. La situación es por supuesto completamente simétrica para flujos negativos.

Lo que sucede en este sistema es que, al aumentar el flujo, en el hilo se producen transiciones de fase de Landau (no topológicas) para cada flujo semi-entero, cada vez que entra un nuevo fluxoide en la sección del hilo. Éstas son transiciones de primer orden, donde el estado fundamental del hilo cambia de forma brusca (entre un cuanto de flujo y otro), lo que se manifiesta en saltos en las características de la LDOS (ver Fig. 2(b) en torno a flujos semi-enteros), así como en la estructura de bandas. Por lo tanto, el hilo es trivial para n = 0, y pasa a ser topológico de forma repentina para n = 1. Sin embargo, si el hilo se mantiene en un estado metaestable con un fluxoide, pero en el que se disminuye el flujo magnético por debajo de $\Phi/\Phi_0 = 0.5$ de forma adiabática, es posible encontrar la transición de fase a k = 0 que señala el comienzo de la fase topológica (no mostrado).

B. Unión Josephson

Estudiamos ahora una unión SNS basada en hilos híbridos encapsulados en aproximación de cilindro hueco. Consideramos que la longitud de la zona N, la parte no proximizada del hilo, es corta (respecto de la longitud de coherencia del SC), y que las zonas S son semi-infinitas. Consideramos también que la unión es simétrica y con transparencia perfecta. En la Fig. 4 calculamos la LDOS en función de la diferencia de fase entre las dos zonas proximizadas del hilo, ϕ , así como las bandas en el espacio de Nambu asociadas. Hemos estudiado el comportamiento de esta LDOS con el flujo magnético y en la Fig. 4 representamos cuatro situaciones de interés (a-h), correspondientes a los valores de Φ/Φ_0 marcados por líneas discontinuas de colores en la Fig. 2.

Comenzamos con el análisis del caso de flujo nulo, Fig. 4(a,b). En la LDOS vemos un

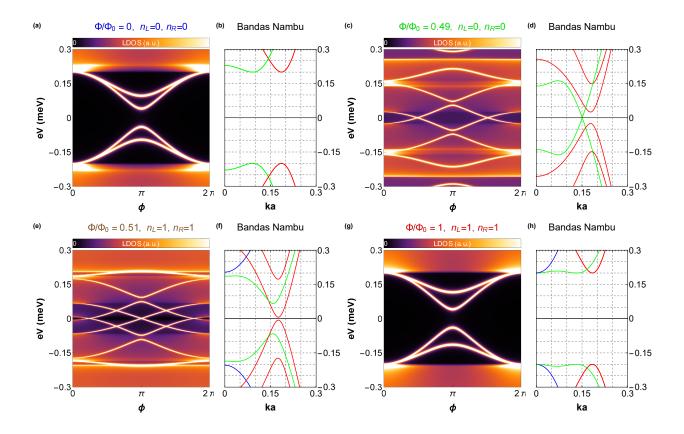


Figura 4. Espectro Andreev en uniones Josephson de hilos encapsulados. Simulación numérica de la LDOS (a.u.) en una unión SNS corta, transparente y simétrica, donde cada zona S es un hilo híbrido semi-infinito como el de la Fig. 2. Se representa la LDOS en función de la energía eV y de la diferencia de fase ϕ , para distintos valores del flujo magnético señalados con líneas de colores discontinuas en Fig. 2. También se representa la estructura de bandas Nambu asociada a cada zona del hilo encapsulada (ambas zonas S son idénticas). Sub-bandas con distinto momento angular orbital se representan con distintos colores. (a,b) Resultados a campo cero, (c,d) en el borde del lóbulo $n_L = n_R = 0$, (e,f) en el borde del lóbulo $n_L = n_R = 1$, y (g,h) en el centro del lóbulo $n_L = n_R = 1$. En los distintos paneles de la LDOS aparecen diversos ABS con periodicidad 2π en la fase ϕ , excepto en (e) donde además aparecen dos ABS con periodicidad 4π (y que se cruzan en $\phi = \pi$) asociados a la presencia de sendos MM a los lados de la unión. L, R distinguen los hilos.

gap efectivo de aproximadamente 0.2~meV y unos ABS por debajo del gap que dispersan con la fase ϕ . Los ABS son estados ligados que se localizan fundamentalmente en la zona N. Los estados por encima del gap efectivo son estados de cuasi-partícula que se deslocalizan

por todo el hilo, incluyendo las zonas híbridas. Hacemos notar que la LDOS es simétrica respecto de energía cero, es decir, existe una relación entre los estados de cuasi-electrón (a energías positivas) y los de cuasi-hueco (a energías negativas), no son independientes. Este tipo de simetría electrón-hueco vienen del doblamiento del hamiltoniano BdG, esencial para el estudio de SC. De forma experimental, la LDOS de la unión es proporcional a la conductancia diferencial dI/dV en el límite túnel que se mediría con una sonda local túnel en la zona N, por lo que podemos entender ambos sectores como corriente en un sentido o en otro.

Para los parámetros del hilo escogidos (que pueden consultarse en el pie de figura de la Fig. 2), a flujo cero existen dos sub-bandas de distinto momento angular degeneradas en espín, véase líneas verdes y rojas en Fig. 4(b). De los bordes de gap de estas sub-bandas aparecen en Fig. 4(a) cuatro ABS degenerados de espín, dos de ellos con energía positiva, y dos de ellos simétricos con energía negativa. Centrándonos en energía positiva, cada ABS degenerado dispersa con la fase más o menos fuertemente. El ABS asociado a la banda roja, cuyo borde de gap aparece a mayor momento k, dispersa más fuertemente, y el ABS asociado a la banda verde, cuyo gap aparece a menor momento k, dispersa más lentamente. Por otro lado, notamos que un máximo en la estructura de bandas (como se da por ejemplo a k=0 en la banda verde) da lugar a la formación de un estado cuasi-ligado en la zona del continuo de cuasi-partículas que apenas dispersa, como puede verse por la señal luminosa sobre fondo naranja en (a) 1 .

Notamos además que los ABS se descuelgan del borde del gap en $\phi = 0, 2\pi$ y disminuyen de energía según se acercan a $\phi = \pi$, donde tienen su mínimo, con periodicidad 2π . Este comportamiento es característico de los ABS en uniones Josephson triviales y se observa también en el resto de casos estudiados. Como estamos lejos del límite Andreev (μ no es mucho mayor que Δ), nunca pueden cruzarse a energía cero y $\phi = \pi$.

Aumentamos el flujo y pasamos a analizar en la Fig. 4(c,d) el siguiente caso, $\Phi/\Phi_0 = 0,49$. Estamos todavía en la zona de fluxoide nulo para ambas zonas encapsuladas, $n_L = n_R = 0$. Al aumentar el flujo la degeneración de espín se rompe y las bandas de Nambu se mueven hacia arriba y hacia abajo según su espín, véase Fig. 4(d). (Sub-bandas con el mismo momento angular pero distinto espín las representamos con el mismo color, véase por ejemplo las dos

¹ Al hablar de máximos y mínimos de la estructura de bandas, siempre nos referimos al sector de cuasielectrones, en el de cuasi-huecos es al contrario.

sub-bandas rojas en (d). La compañera de espín opuesto de la sub-banda verde se ha movido a energías por encima de la zona representada.) De forma equivalente, los ABS se mueven hacia arriba y hacia abajo en energía, llegando a cruzarse a energía cero, pero por lo demás dispersan con la fase de forma equivalente a (a). Al haberse cruzado una de las bandas con su simétrica a energía cero, el sistema es ahora conductor para ese modo de momento angular, por lo que en realidad los ABS no son estados ligados, sino cuasi-ligados sobre el continuo. De nuevo, notamos que los ABS que dispersan significativamente solo se descuelgan de los bordes de gap de las sub-bandas, o sea, de los mínimos de la sub-banda, no de los máximos, aunque aquí tenemos una sub-banda de electrones en el sector de huecos y viceversa (las representadas en verde). Por otra parte, para el correcto análisis de los resultados, debemos tener en cuenta que la sub-banda simétrica no lo es respecto al cero de energías para campos magnéticos no enteros, de forma que en (d) la compañera de la sub-banda de electrones roja más cercana al cero no es la más cercana al cero en huecos, sino la más alejada. Lo mismo aplica por lo tanto a los ABS, su compañero es aquel con el que anticruza en $\phi = \pi$.

Para fluxoide unidad, como ya notábamos en la sección anterior, se produce un salto brusco en las características de la LDOS ya que al entrar un cuanto de flujo en el hilo, el sistema atraviesa una transición de fase (no topológica) de primer orden. Por lo tanto, las bandas de Fig. 4(f) a $\Phi/\Phi_0 = 0.51$ no se conectan de forma continua con las de (d) a $\Phi/\Phi_0 = 0.49$. En la Fig. 4(e) los ABS tienen periodicidad 2π como en casos anteriores, salvo uno de ellos (y su simétrico en energía) que presenta periodicidad 4π y se cruza en $\phi = \pi$. Estos ABS están asociados a la presencia de dos MM γ_1 y γ_2 que se forman a los lados de la unión, en el borde de cada región proximizada del hilo (véase Fig. 1). En el esquema de bandas (f), este estado se descuelga de uno de los gaps producido por la sub-banda verde a k finito. Más adelante estudiamos en detalle este estado y la transición topológica que lo destruye. Es importante señalar también que la sub-banda azul ha cruzado al sector contrario, por lo que su señal asociada en la LDOS no da lugar a un estado dispersivo con la fase. Enfatizamos que el ABS topológico se cruza a energía cero con su compañero en $\phi = \pi$, a diferencia de los cruces a energía cero de los ABS triviales en (e) y (c), que siempre se producen a $\phi \neq \pi$ y se dan entre ABS pertenecientes a sub-bandas con distinto momento angular.

Cuando llegamos al flujo entero $\Phi/\Phi_0 = 1$ en Fig. 4(g,h), el estado de periodicidad 4π ha desaparecido y retornamos a una situación muy similar a la de flujo nulo (a,b). Sin embargo,

en la propia LDOS se pueden observar pequeñas diferencias, como la ausencia de una señal no dispersiva y continua por encima de 0,2meV (hay una señal luminosa sólo en torno a $\phi=0,2\pi$). En las bandas Nambu (h), la diferencia es más evidente, ya que no tenemos dos sino tres tipos de sub-bandas. La roja está degenerada como en (a), pero la verde no lo está (su compañera de espín está a energías superiores). Por otro lado, existe una sub-banda nueva, en azul, que sí está degenerada de espín. Como ya hemos visto al analizar (e,f), la sub-banda azul no da lugar a un ABS dispersivo. Por su parte, la sub-banda verde no degenerada tiene dos gaps a k=0 y a k finito, que producen dos ABS (a energía positiva) que curiosamente están degenerados.

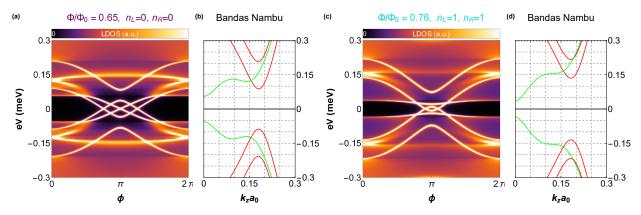


Figura 5. Espectro Andreev en uniones Josephson en torno a la transición topológica. Simulación numérica de la LDOS y de la estructura de bandas Nambu similar a la de Fig. 4 (con un cuanto de flujo a través del hilo). (a,b) $\Phi/\Phi_0 = 0,65$, valor del flujo donde existe un MM a cada lado de la unión. (c,d) $\Phi/\Phi_0 = 0,76$, valor del flujo posterior a la transición topológica y, por lo tanto, donde no existen MM. Las bandas (b,d) y las LDOS (a,c) son muy similares para ambos flujos, salvo que en el primer caso (a) hay un par de ABS extra que se cruzan en $\phi = \pi$ y por tanto tienen una periodicidad de 4π con la fase, como en Fig. 4(e). Los valores de flujo analizados se han marcado mediante líneas discontinuas de colores en la Fig. 2(b).

Por último vamos a analizar la unión Josephson cuando nos encontramos en torno a la transición topológica que se produce en $\Phi/\Phi_0 = 0.71$ en la Fig. 2, y que discutimos en la sección anterior [véase Fig. 3(c,d)]. En la Fig. 5 representamos la LDOS y las bandas de Nambu de forma similar a la Fig. 4, pero ahora justo antes y después de la transición topológica. Observamos en primer lugar en (a,b) que ya no es un gap a k finito el que domina el MM, sino a k nulo (en la sub-banda verde), como es de esperar en torno a una transición

topológica según lo estudiado en la Ref. 29. Es notoria la aparición como estado cuasi-ligado sobre el continuo de un ABS que sí se origina en el gap a k finito de la sub-banda verde. Esta señal sigue presente después de la transición topológica (c), junto con un ABS invertido originado por el máximo de la sub-banda de color verde. Esta sub-banda por lo tanto está dando lugar a tres estados ligados/cuasi-ligados diferentes en (a), asociados a cada uno de sus extremos. Como habíamos visto en la Fig. 2(d), esta misma banda es la que al cerrarse a k=0 produce la transición topológica, extinguiendo el MM. En su lugar aparece un ABS usual que apenas dispersa en torno a $\phi=\pi$, aunque luego acabará degenerado en uno de los estados ya estudiados de la Fig. 4(g). Para este modelo de cilindro hueco que estamos estudiando aquí, el MM solo puede aparecer dentro de un gap real (conocido como gap topológico o minigap),nunca sobre un continuo, de ahí que distingamos entre la señal producida en el interior del gap real y sus "colas" fuera de él.

Es notorio también que las sub-bandas representadas en color rojo a lo largo de las figuras 4 y 5, dan lugar a dos ABS siempre visibles en las LDOS. Esto se debe a que los modos de momento angular a los que están asociados estas bandas no se ven tan afectados por el flujo magnético como las demás bandas, que incluso llegan a desaparecer de la región estudiada. Está claro además que muchos ABS se cruzan accidentalmente a energía cero, como se ve en la Fig. 5, pero nunca con su compañero simétrico, y además no en $\phi = \pi$, por lo que no tienen mayor interés.

IV. CONCLUSIONES

En este trabajo hemos analizado una geometría Josephson basada en hilos híbridos encapsulados en aproximación de cilindro hueco. En primer lugar, hemos estudiado la LDOS de un solo hilo semi-infinito en el extremo del hilo en función del flujo de campo magnético que atraviesa el hilo. Hemos comprobado que está gobernada por efectos orbitales del campo, así como por el efecto LP, que da lugar a diferentes lóbulos con una configuración significativamente compleja. Gracias al análisis de las bandas Nambu, hemos verificado que esa intrincada estructura se debe a la presencia de diferentes gaps para cada modo de momento angular y de espín (también llamados sub-bandas), que se encuentran degeneradas de espín para flujos normalizados enteros. Hemos visto cómo se desarrolla una fase topológica con anomalías a energía cero, asociadas a la presencia de un MM en el extremo del hilo,

solamente en los bordes de los lóbulos de fluxoide impar, como ya se había estudiado en las Ref. 13 y 21. De nuevo a través de las bandas Nambu, hemos advertido que para $\Phi/\Phi_0 = 0.5$ no se da una transición topológica al no cerrarse ningún gap en k = 0, sino en k finito. Es decir, el sistema pasa de ser trivial para el lóbulo n=0, a ser topológico para n=1 de forma brusca (sin atravesar una transición topológica con el flujo). Sin embargo, aumentando el flujo un poco más dentro del primer lóbulo, en $\Phi/\Phi_0 = 0.71$ sí que se da una transición topológica, desapareciendo el MM en el resto del lóbulo que pasa a la fase trivial.

En el estudio de la unión SNS, encontramos de nuevo una LDOS intrincada en la unión. Mediante el estudio de las bandas Nambu podemos entender la presencia de ABS, estados cuasi-ligados y regiones de continuo de estados al poder asociar cada señal con los máximos y los mínimos de energía de las sub-bandas y al seguir su comportamiento frente al flujo. Para la energía a la que una sub-banda trivial de buen momento angular orbital tiene un borde de gap, en la LDOS se descuelga un ABS que dispersa con la diferencia de fase superconductora con periodicidad 2π . Este ABS toca al continuo de estados por encima del gap en $\phi = 0, 2\pi$, y tiene un mínimo en $\phi = \pi$. Al aumentar el flujo, este tipo de ABS triviales suben y bajan en energía, y pueden cruzarse a energía cero con los ABS de otras sub-bandas triviales. Conspicuamente, estos cruces siempre se producen a $\phi \neq \pi$. Sin embargo, cuando entramos en la fase topológica que posee un MM a cada lado de la unión, aparece un ABS extra dentro del gap que se cruza con su compañero (de energía negativa) en $\phi = \pi$. Este estado tiene por lo tanto una periodicidad 4π con la fase y podría ser detectado al medir una corriente Josephson anómala, como predijo Kitaev en su modelo homónimo "de juguete" [7].

Este trabajo es por lo tanto el inicio de un estudio detallado de la espectroscopía de nanohilos de Majorana encapsulados, así como de su unión Josephson, ambos problemas de relevancia actual en este campo. Aquí hemos realizado una serie de aproximaciones importantes, como trabajar con hilos en aproximación de cilindro hueeo. Será interesante ampliar en el futuro este estudio al modelo del cilindro sólido (o incluso a un modelo de cilindro sólido con sección hexagonal, como son típicamente los hilos en los experimentos). Respecto de la unión SNS, queda por introducir asimetrías entre los hilos, como por ejemplo diferentes radios o flujos, o diferentes parámetros del hilo (como potencial químico, acoplo espín-órbita, etc), así como diferentes transparencias de la unión. Finalmente, también se puede estudiar qué pasa cuando las dos regiones híbridas del sistema SNS tienen longitud finita, ya que aparecerán cuatro MM en vez de dos.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco sinceramente a mi tutora Elsa Prada por el esfuerzo, explicaciones, interés e implicación para la realización de este TFG; y a Pablo San-José y Fernando Peñaranda por haberme introducido al paquete de cálculo Math-Q [28] e interesantes discusiones. Agradezco también a la División de Física de la Materia Condensada de la Real Sociedad Española de Física (GEFES-RSEF) por el premio de investigación que se me ha otorgado para el desarrollo de este proyecto.

[1] C. Beenakker, Search for majorana fermions in superconductors, Annual Review of Condensed Matter Physics 4, 113 (2013).

- [2] R. Aguado, Majorana quasiparticles in condensed matter, La Rivista del Nuovo Cimento 40, 523 (2017).
- [3] E. Prada, P. San-José, M. W. de Moor, A. Geresdi, E. J. Lee, J. Klinovaja, D. Loss, J. Nygard, R. Aguado, and L. P. Kouwenhoven, From andreev to majorana bound states in hybrid superconductor-semiconductor nanowires, Nature Review Physics 2, 575 (2020).
- [4] T. D. Stanescu and S. Tewari, Majorana fermions in semiconductor nanowires: fundamentals, modeling, and experiment, Journal of Physics: Condensed Matter **25**, 233201 (2013).
- [5] M. Sato and Y. Ando, Topological superconductors: a review, Reports on Progress in Physics 80, 076501 (2017).
- [6] M. Leijnse and K. Flensberg, Introduction to topological superconductivity and majorana fermions, Semiconductor Science and Technology 27, 124003 (2012).
- [7] A. Y. Kitaev, Unpaired majorana fermions in quantum wires, Physics-Uspekhi 44, 131 (2001).
- [8] L. Fu and C. L. Kane, Superconducting proximity effect and majorana fermions at the surface of a topological insulator, Phys. Rev. Lett. 100, 096407 (2008).
- [9] Y. Oreg, G. Refael, and F. von Oppen, Helical liquids and majorana bound states in quantum wires, Phys. Rev. Lett. **105**, 177002 (2010).
- [10] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, Majorana fermions and a topological phase transition in semiconductor-superconductor heterostructures, Phys. Rev. Lett. 105, 077001 (2010).

- [11] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, Signatures of majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices, Science 336, 1003 (2012).
- [12] A. C. Potter and P. A. Lee, Engineering a p + ip superconductor: Comparison of topological insulator and rashba spin-orbit-coupled materials, Phys. Rev. B 83, 184520 (2011).
- [13] S. Vaitiekenas, G. W. Winkler, B. van Heck, T. Karzig, M.-T. Deng, K. Flensberg, L. I. Glazman, C. Nayak, P. Krogstrup, R. M. Lutchyn, and C. M. Marcus, Flux-induced topological superconductivity in full-shell nanowires, Science 367, 10.1126/science.aav3392 (2020).
- [14] G. Schwiete and Y. Oreg, Fluctuation persistent current in small superconducting rings, Phys. Rev. B 82, 214514 (2010).
- [15] G. Schwiete and Y. Oreg, Persistent current in small superconducting rings, Phys. Rev. Lett. 103, 037001 (2009).
- [16] G. Schwiete and Y. Oreg, Fluctuations effects in small superconducting rings, in *Perspectives of Mesoscopic Physics*, pp. 265–303.
- [17] B. Josephson, Possible new effects in superconductive tunnelling, Physics Letters 1, 251 (1962).
- [18] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Theory of superconductivity, Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- [19] V. Ginzburg and L. Landau, On the theory of superconductivity, Zh. Eksp. Teor. Tiz. 20, 1064 (1950).
- [20] P. San-Jose, J. Cayao, E. Prada, and R. Aguado, Multiple andreev reflection and critical current in topological superconducting nanowire junctions, New Journal of Physics 15, 075019 (2013).
- [21] F. Peñaranda, R. Aguado, P. San-Jose, and E. Prada, Even-odd effect and majorana states in full-shell nanowires, Phys. Rev. Research 2, 023171 (2020).
- [22] P. de Gennes, Superconductivity of Metals and Alloys (W.A. Benjamin, 1966).
- [23] W. A. Little and R. D. Parks, Observation of quantum periodicity in the transition temperature of a superconducting cylinder, Phys. Rev. Lett. 9, 9 (1962).
- [24] R. D. Parks and W. A. Little, Fluxoid quantization in a multiply-connected superconductor, Phys. Rev. 133, A97 (1964).
- [25] R. P. Groff and R. D. Parks, Fluxoid quantization and field-induced depairing in a hollow superconducting microcylinder, Phys. Rev. 176, 567 (1968).

- [26] M. Valentini, F. Peñaranda, A. Hofmann, M. Brauns, R. Hauschild, P. Krogstrup, P. San-Jose, E. Prada, R. Aguado, and G. Katsaros, Supplementary information for flux-tunable andreev bound states in hybrid full-shell nanowires (2020).
- [27] S. Datta, Quantum Transport: Atom to Transistor (Cambridge University Press, 2005).
- [28] P. San-José, Mathq, a mathematica simulator for quantum systems, Online (2020).
- [29] J. Klinovaja and D. Loss, Composite majorana fermion wave functions in nanowires, Phys. Rev. B 86, 085408 (2012).