

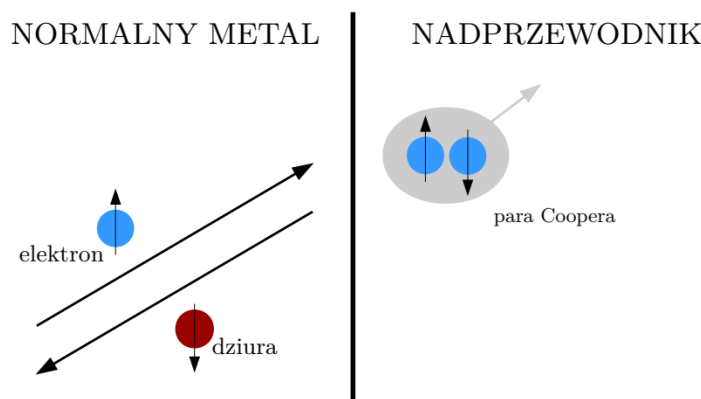
Złącze metal(ferromagnetyk)/nadprzewodnik. Odbicia Andreeva.

P. Wójcik

3 kwietnia 2022; ostatnia aktualizacja 22 maja 2023

1 Wstęp

Korzystając z pakietu KWANT wykonamy symulacje transportu elektronowego w złączu metal (ferromagnetyk)/nadprzewodnik (NM(FM)/SC) w 1D. W złączach tego typu dochodzi do tzn. odbić Andreeva, w których elektron z warstwy metalu, o energii mniejszej niż przerwa nadprzewodząca (Δ), odbija się na granicy metal/nadprzewodnik jako dziura o przeciwnym spinie. Dzieje się tak dlatego, że elektron padający na granicę NM/SC podlega parowaniu w obszarze SC tworząc tam parę Coopera z elektronem o przeciwnym spinie. Elektron ten pochodzi z warstwy normalnego metalu, a zatem w obszarze tym pojawia się dziura o spinie przeciwnym do padającego elektronu. Co ciekawe, odbicie Andreeva prowadzi do podwojenia konduktancji mierzonej eksperymentalnie w złączach metal/nadprzewodnik.



Rysunek 1: Schemat przedstawiający rozpatrywany układ wraz z odbiciem Andreeva na złączu NM/SC.

W mechanice kwantowej równanie opisujące nadprzewodnictwo, a tym samym transport w złączu NM/SC, nosi nazwę równania Bogoliubova-de Gennesa i przyjmuje postać

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) - \mu - h(x) & \Delta(x) \\ \Delta(x) & -\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) - \mu + h(x)\right] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_e^\uparrow(x, y) \\ \psi_h^\downarrow(x, y) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_e^\uparrow(x, y) \\ \psi_h^\downarrow(x, y) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

gdzie $V(x)$ to potencjał rozpraszania na styku NM/SC, m to masa elektronu w metalu, μ to potencjał chemiczny, $h(x)$ to pole wymiany, którego użyjemy w przypadku, gdy symulowanym złączem będzie złącze ferromagnetyk/nadprzewodnik, $\Delta(x)$ to energia przerwy nadprzewodzącej w SC, zaś $\psi_e^\uparrow(x, y)$, $\psi_h^\downarrow(x, y)$ to odpowiednio część elektronowa i część dziurowa funkcji falowej.

Widzimy, że równanie (1), podobnie jak równanie Pauliego analizowane na poprzednich zajęciach, ma formę macierzy 2×2 , a zatem odpowiednie całki przeskoku na i międzywęzłowego będą miały formę macierzy 2×2 .

2 Implementacja układu w pakiecie KWANT

Implementując układ w pakiecie KWANT należy założyć, że:

1. funkcje onsite() oraz hopping() zwracają macierze o wymiarze 2×2 będące energiami przeskoku,

2. pracujemy na siatce 1D (chain) o wymiarze Δx . Postać Hamiltonianu (1) wskazuje, że w tym przypadku na każdym z węzłów mamy dwa orbitale: jeden odpowiadający elektronowi o spinie up i jeden odpowiadający dziurze o spinie down. Definiując układ należy ustawić $norb = 2$ i przyjąć typ sieci 'chain'

```
lat=kwant.lattice.chain(dx, norbs=2)
```

Dla sieci tego typu określenie położenia węzła wykonuje się poleceniem (ważny przecinek)

```
x,=sitei.pos
```

3. jeśli w kontakcie chcemy rozróżniać stany zdegenerowane ze względu na orbitalne stopnie swobody (w naszym przypadku ze względu na przestrzeń elektron - dziura) i pozwala na to postać Hamiltonianu (ma on charakter blokowy), w poszczególnych kontaktach możemy zdefiniować parametr *conservation_low*. Podstawiamy pod niego macierz kwadratową o rozmiarze odpowiadającym liczbie orbitali na węźle i wartościach własnych różnych dla różnych separowalnych bloków (orbitali). W rozpatrywanym przypadku, parametru *conservation_low* należy użyć dla lewego kontaktu, którym jest metal lub ferromagnetyk

```
left_lead=kwant.Builder(kwant.TranslationalSymmetry((-dx,)),conservation_low=sigma_low)
```

gdzie macierz *sigma_low* może mieć postać

$$\sigma_{low} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

W prawym kontakcie odpowiadającym nadprzewodnikowi zdefiniowane parametru *conservation_low* nie jest możliwe, gdyż parametr Δ występuje w elementach pozadiagonalnych i miesza część elektronową i dziurową funkcji falowej,

4. gdy w kontaktach zdefiniujemy zmienną *conservation_low*, przy obliczaniu współczynnika transmisji możemy odwoływać się nie tylko do numeru kontaktu, ale również do numeru orbitala w danym kontakcie. Przykładowy kod

```
sys=make_system(nw)
smatrix = kwant.smatrix(sys, energy)
rhe=smatrix.transmission((0,1), (0,0))
```

realizuje obliczenie współczynnika odbicia Andreeva.

3 Zadania do wykonania

3.1 Zadanie 1

Rozważmy układ metal(ferromagnetyk)/nadprzewodnik 1D, taki jak przedstawiono na rys. 1. Aby poprawnie opisać nasz układ założymy, że

$$h(x) = \begin{cases} P\mu & \text{dla obszaru ferromagnetyka (metal)}, \\ 0 & \text{dla obszaru nadprzewodnika,} \end{cases}$$

gdzie $P \in (0, 1)$ określa polaryzację spinową na poziomie Fermiego (w modelu Stonera) w ferromagnetyku i dla normalnego metalu $P = 0$, zaś

$$\Delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla obszaru ferromagnetyka (metal)}, \\ \Delta & \text{dla obszaru nadprzewodnika.} \end{cases}$$

Bardzo często zakładając, że układ nie jest idealny, tzn. na styku NM(FM)/SC powstają pewne zanieczyszczenia, wprowadzamy do naszego układu potencjał rozpraszania $V(x)$ zlokalizowany dokładnie na styku NM(FM)/SC, w postaci

$$V(x) = Z\mu \exp\left(\frac{-(x - x_{NM/SC})^2}{2a^2}\right), \quad (2)$$

gdzie $x_{NM/SC}$ określa położenie styku NM(FM)/SC, μ to potencjał chemiczny, a to parametr rozmycia, oraz Z to bezwymiarowy parametr określający siłę rozpraszania na złączu NM(FM)/SC.

1. Postępując analogicznie, jak na ćwiczeniu z poprzedniego tygodnia dokonaj dyskretyzacji równania (1) na sieci 1D.
2. Zakładając $P = 0$ i $Z = 0$ wykonaj obliczenia współczynnika odbicia normalnego R_{ee} (elektron-elektron) oraz Andreeva R_{he} (elektron-dziura), jak i współczynnika transmisji T (elektron - kwazicząstka) w funkcji padającego elektronu.
3. Dla opisywanego złącza konduktancja dana jest wzorem

$$G(E) = \frac{e^2}{h}(1 - R_{ee}(E) + R_{he}(E)), \quad (3)$$

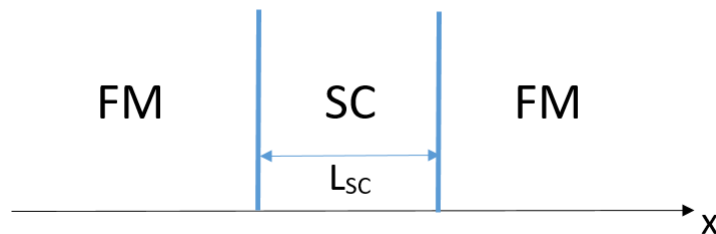
gdzie $R_{ee}(E)$ to prawdopodobieństwo normalnego odbicia, zaś $R_{he}(E)$ to prawdopodobieństwo odbicia Andreeva. Dla $P = 0$ i $Z = 0$ wykonaj obliczenia konduktancji w funkcji padającego elektronu. Czy na wykresie obserwuje się zjawisko podwojenia konduktancji ?

4. Zakładamy, że układ nie jest idealny. Dla $Z = 0; 0.5; 1.0; 1.5$ wykonaj wykres konduktancji w funkcji energii padającego elektronu, zakładając $P = 0$. Wykonaj wykres poszczególnych współczynników odbicia i transmisji R_{ee} , R_{he} i T w funkcji parametru Z . Skomentuj otrzymane wyniki.
5. Następnie, w naszym układzie metal zastąpimy ferromagnetykiem (FM), który opisany jest poprzez parametr P . Zakładając brak rozpraszania na styku FM/SC ($Z = 0$) wykonaj wykres konduktancji w funkcji energii padającego elektronu dla $P = 0; 0.5; 0.8; 0.99$.
6. Wykonaj wykres poszczególnych współczynników odbicia i transmisji R_{ee} , R_{he} i T w funkcji parametru P zmieniającego się w zakresie $(0, 0.99999)$ dla energii padającego elektronu bliskiej zeru np. $E = 1e - 6$ eV. Skomentuj otrzymane wyniki, odpowiadając na pytanie dlaczego prawdopodobieństwo odbić Andreeva spada wraz ze wzrostem P .

Obliczenia wykonaj, zakładając następujące wartości parametrów: $m = 1$, $\mu = 10$ meV, $\Delta = 0.25$ meV, $dx = 0.2$ nm, $a = 1$ nm, zaś długość obszaru normalnego i nadprzewodzącego $L_{NM,SC} = 250$ nm. Na wykresach w funkcji energii ogranicz się do zakresu $[0, 0.5]$ meV.

3.2 Zadanie 2

Rozważmy układ ferromagnetyk/nadprzewodnik/ferromagnetyk, jak przedstawiono na rys. 2. Aby poprawnie



Rysunek 2: Schemat przedstawiający rozpatrywany układ FM/SC/FM.

opisać nasz układ założymy, że

$$h(x) = \begin{cases} P_l \mu & \text{dla obszaru ferromagnetyka po lewej,} \\ 0 & \text{dla obszaru nadprzewodnika,} \\ P_r \mu & \text{dla obszaru ferromagnetyka po prawej,} \end{cases}$$

gdzie $P_{l,r} \in (0,1)$ określa polaryzację spinową na poziomie Fermiego (w modelu Stonera) w lewym i prawym obszarze ferromagnetyka, zaś

$$\Delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla obszarów ferromagnetyka,} \\ \Delta & \text{dla obszaru nadprzewodnika.} \end{cases}$$

Obliczenia przeprowadzić dla $dx = 1$ nm. Przy odpowiednio dobranych parametrach układzie takim można zaobserwować zjawisko skośnych odbić Andreeva (CAR), w których elektron padający z lewego obszaru ferromagnetyka 'odbija się' jako dziura w prawym obszarze ferromagnetyka. Zjawisko to może mieć miejsce tylko wtedy, gdy długość obszaru SC jest mniejsza od tzn. długości koherencji w nadprzewodniku.

1. Zauważmy, że w tym przypadku oba kontakty są kontaktami, w których można zdefiniować parametr *conservation_law* i obliczyć prawdopodobieństwa odbicia i transmisji elektronu jako elektronu oraz jako dziury, to znaczy odpowiednio R_{ee} , R_{he} , T_{ee} oraz T_{he} .
2. Dla rozpatrywanego układu bez rozpraszania na styku FM/SC ($Z = 0$), proszę wyznaczyć współczynniki odbicia i transmisji elektronu R_{ee} , R_{he} , T_{ee} oraz T_{he} w funkcji energii padającego elektronu dla dwóch różnych długości obszaru nadprzewodzącego $L_{SC} = 10, 250$ nm. Proszę założyć $P_l = P_r = 0$. Długości obszarów ferromagnetycznych pozostawiamy bez zmian $L_{FM} = 250$ nm.
3. Dla energii padającego elektronu poniżej przerwy nadprzewodzącej np. $E = 0.1$ meV proszę policzyć współczynniki R_{ee} , R_{he} , T_{ee} oraz T_{he} w funkcji długości obszaru nadprzewodzącego, zakładając ($Z = 0$ i $P_r = P_l = 0$).
4. Następnie, zakładając $Z = 0$ oraz $P_r = 0$ i $P_l = 0.995$ policzyć współczynniki R_{ee} , R_{he} , T_{ee} oraz T_{he} w funkcji długości obszaru nadprzewodzącego L_{SC} dla energii padającego elektronu poniżej przerwy nadprzewodzącej, np. $E = 0.1$ meV. Czy można tam zaobserwować zjawisko skośnych odbić Andreeva ?