

## 1 Wstęp

W roku 2016 David J. Thouless, F. Duncan M. Haldane oraz J. Michael Kosterlitz otrzymali nagrodę Nobla za badania teoretyczne nad topologicznymi własnościami materii. Obecnie, badania nad topologicznymi stanami materii, tj. topologiczne izolatory czy nadprzewodniki są przedmiotem badań laboratoriów na całym świecie. Upraszczając, chodzi o materiały, które wykazują pewne własności jedynie na swojej powierzchni, podczas gdy ich wnętrze ma zupełnie inne własności. I tak, izolatory topologiczne przewodzą prąd na powierzchni próbki, podczas gdy ich wnętrze jest izolatorem. W tym względzie szczególnie zainteresowanie wzbudzają nadprzewodniki topologiczne, w których przewidziano występowanie egzotycznych kwazicząstek, będących swoimi antycząstkami, czyli tzn. fermionów Majorany.

Fermiony Majorany zostały zaproponowane teoretycznie w 1937 roku przez włoskiego fizyka Ettore Majoranę w fizyce cząstek elementarnych, jako cząstki elementarne będące swoimi antycząstkami. I chociaż do tej pory nie udało się ich zaobserwować eksperymentalnie, w laboratoriach zajmujących się układami nanoskopowymi, udało się stworzyć kwazicząstki o właściwościach przypominających fermiony Majorany. Stany takie, zwane stanami Majorany, występują na brzegach nadprzewodników topologicznych, a najprostszym modelem opisującym występowanie tych egzotycznych stanów jest model Kitaeva, który opisuje bezspinowy, jednowymiarowy nadprzewodnik (łańcuch fermionów) z parowaniem typu  $p$ .

## 2 Model Kitaeva.

Hamiltonian Kitaeva opisuje jednowymiarowy układ bezspinowych fermionów z parowaniem typu  $p$  (pomiędzy sąsiednimi węzłami) i dany jest wzorem

$$\hat{H} = -\mu\sigma_z|\psi_i\rangle\langle\psi_i| - t\sigma_z|\psi_i\rangle\langle\psi_{i+1}| - t\sigma_z|\psi_i\rangle\langle\psi_{i-1}| + i\Delta\sigma_y|\psi_i\rangle\langle\psi_{i+1}| - i\Delta\sigma_y|\psi_i\rangle\langle\psi_{i-1}|, \quad (1)$$

gdzie  $|\psi_i\rangle = (|\psi_i^e\rangle, |\psi_i^h\rangle)$  to wektor stanu na węźle  $i$ , który składa się z części elektronowej oraz dziurowej,  $\mu$  to potencjał chemiczny,  $t$  to energia przeskoku pomiędzy sąsiednimi węzłami, zaś  $\Delta$  określa energię parowania elektronowego. W obliczeniach, wszystkie energie wyrazimy w jednostkach energii przeskoku  $t$ , zakładając  $t = 1$ . Obliczenia wykonaj dla  $\Delta = 1$  oraz  $L = 25$ , gdzie  $L$  oznacza liczbę węzłów.

W ramach zadania proszę:

1. zaimplementować Hamiltonian Kitaeva, zakładając, że układ jest układem zamkniętym (nie podłączamy kontaktów),
2. wykonać obliczenia energii stanów w funkcji potencjału chemicznego  $\mu$  w zakresie energii  $[0, 4t]$ . W tym celu skorzystaj z funkcji `sparse_eigs_vec(...)` [do ściągnięcia na stronie zajęć], która służy do diagonalizacji macierzy rzadkich (ewentualnie proszę skorzystać z dostępnej w bibliotekach pythona procedury do diagonalizacji). Stany o zerowej energii dla  $\mu < 2t$  odpowiadają stanom Majorany i zlokalizowane są na końcach łańcucha.

Przykład użycia funkcji `sparse_eigs_vec(...)` w pakiecie KWANT:

```
def calculate_energy_mu(nw):
    sys = make_system(nw)
    ham_mat = sys.hamiltonian_submatrix(sparse=True)
    n_values = 30
    e, vecs = sparse_eigs_vec(ham_mat, n_eigs=n_values, n_vec_lanczos=3*n_values+10, sigma=0.0)
    return e, vecs
```

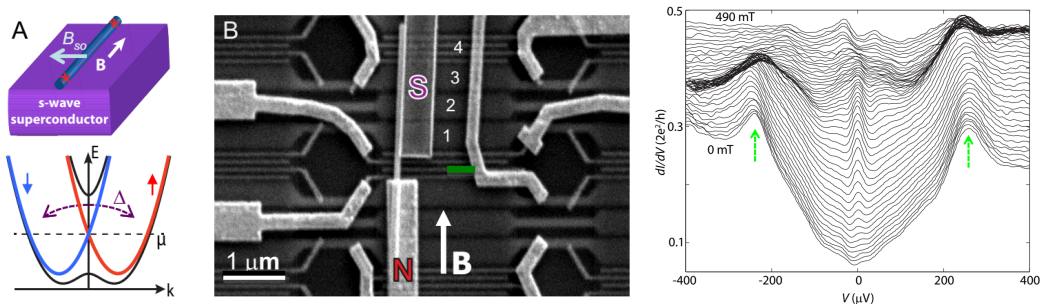
Powyższa funkcja zwraca 30 stanów i wektorów własnych o energiach zlokalizowanych wokół wartości  $\sigma = 0.0$ .

- dla wartości  $\mu = t$ , dla której obserwujemy stany o zerowej energii (faza topologiczna) oraz  $\mu = 4t$  odpowiadającej stanowi trywialnemu, oblicz rozkład gęstości prawdopodobieństwa  $|\psi|^2$  w łańcuchu Fermionów. Wykonaj wykres dla stanu o energii najbliższej lub równej zero. Pamiętaj, że na każdym węźle sieci zdefiniowane są dwa orbitale - elektronowy i dziurowy, zaś  $|\psi|^2 = |\psi^e|^2 + |\psi^h|^2$ . Dla stanów Majorany powinniśmy obserwować ich lokalizację na brzegach łańcucha, podczas gdy dla stanu trywialnego rozkład ma kształt odpowiadający najniższemu stanowi nieskończonej studni potencjału.

Choć model Kitaeva poprawnie opisuje nadprzewodnictwo topologiczne oraz stany Majorany w łańcuchu fermionów, model ten jest nierealistyczny, gdyż opiera się na założeniu fermionów bezspinowych z parowaniem typu  $p$ , które nie występuje w przyrodzie (albo występuje bardzo rzadko). Okazuje się jednak, że układ taki (lub jemu podobny) może zostać wytworzony eksperymentalnie poprzez odpowiednie połączenie kilku zjawisk: silnego uwięzienia, które występuje w nanodrutach półprzewodnikowych i sprowadza układ do jednego wymiaru, oddziaływania spin-orbita oraz nadprzewodnictwa, indukowanego w półprzewodniku efektem bliskości.

### 3 Układ eksperymentalny.

Eksperyment, w którym po raz pierwszy zaobserwowano stany Majorany opublikowano w 2012 roku w prestiżowym magazynie Science, 336, 1003. Układ eksperymentalny oparty jest na nanodrucie półprzewodnikowym InSb, charakteryzującym się silnym oddziaływaniem spin-orbita, który pokryty został warstwą nadprzewodnika, by wyindukować w nim nadprzewodnictwo, w skutek efektu bliskości. Ponadto, do układu przyłożono pole magnetyczne wzdłuż osi drutu  $x$ . Pomiary konduktancji, wykazały istnienie pików prądu o zerowej energii (z ang. zero bias peak, ZBP), który był jednoznacznym potwierdzeniem występowania stanów o zerowej energii (stanów Majorany). Co więcej, ZBP zachowywał się tak jak przewidywała teoria, m.in. zanikał przy przyłożeniu pola prostopadłego do nanodrutu.



Rysunek 1: Schemat przedstawiający rozpatrywany nanodrut z InSb pokryty warstwą nadprzewodnika wraz z wynikami pomiarów konduktancji z charakterystycznym ZBP. Źródło: Science, 336, 1003 (2012)

Hamiltonian rozpatrywanego układu w 2D przyjmuje postać

$$\hat{H} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{2D}^2 - \mu \right) \tau_z \otimes \sigma_0 + \frac{1}{2} g \mu_B \tau_z \otimes (B_x \sigma_x + B_y \sigma_y + B_z \sigma_z) + \alpha (k_y \tau_o \otimes \sigma_x - k_x \tau_z \otimes \sigma_y) - \Delta \tau_y \otimes \sigma_y, \quad (2)$$

gdzie  $m^*$  to masa efektywna,  $\mathbf{k} = (k_x, k_y) = -i\hbar\partial/\partial x(y)$ ,  $\mu$  to potencjał chemiczny,  $\Delta$  to przerwa nadprzewodząca,  $\alpha$  to stała oddziaływania spin-orbita, zaś  $\sigma_i(\tau_i)$  to macierze Pauliego, odpowiednio w przestrzeni spinowej i przestrzeni elektron-dziura.

Dla rozpatrywanego układu 2D:

- dokonaj dyskretyzacji Hamiltonianu (2) na siatce prostokątnej  $dx = dy$  i zaimplementuj go w pakiecie KWANT zakładając, że układ jest układem zamkniętym (nie podłączamy kontaktów),
- korzystając z funkcji `sparse_eigs_vec(...)` oblicz wartości własne energii w funkcji pola magnetycznego skierowanego wzdłuż osi nanodrutu,  $B_x$ ,

3. dla wartości pola magnetycznego, dla którego pojawiają się stany o zerowej energii (np.  $B_x = 0.4$  T) wyznacz gęstość rozkładu prawdopodobieństwa  $|\psi|^2$  w nanourządzeniu. Czy widać na niej lokalizacje stanów Majorany na końcach nanodrutu ?
4. dla wartości pola magnetycznego, dla którego pojawiają się stany o zerowej energii (np.  $B_x = 0.4$  T) wyznacz wartości własne energii w funkcji kierunku pola magnetycznego, zakładając, że obracamy je w płaszczyźnie  $x - y$ ,
5. dla wartości pola magnetycznego, dla którego pojawiają się stany o zerowej energii (np.  $B_x = 0.4$  T) wyznacz wartości własne energii w funkcji kierunku pola magnetycznego, zakładając, że obracamy je w płaszczyźnie  $x - z$ .

Obliczenia wykonaj dla szerokość nanodrutu od  $-W/2$  do  $W/2+1$  gdzie  $W = 9$  to liczba punktów siatki wzdłuż osi  $y$ , długości nanodrutu  $L = 250$  oczek siatki, stałej siatki  $dx = dy = 8$  nm,  $m^* = 0.014$ ,  $\mu = 4$  meV,  $g = -50$ ,  $\alpha = 50$  meVnm oraz  $\Delta = 0.2$  meV.

Uwagi dotyczące implementacji układu w pakiecie KWANT:

1. proszę zauważyć, że w rozpatrywanym przypadku na każdym węźle zdefiniowane są 4 orbitale  $\Psi_i = (\psi_i^{e\uparrow}, \psi_i^{e\downarrow}, \psi_i^{h\uparrow}, \psi_i^{h\downarrow})$  odpowiadające kolejno elektronowi o spinie up i down oraz dziurze o spinie up i down, a zatem parametr  $n_{orbs} = 4$ ,
2. mnożenie tensorowe w pythonie realizowane jest poprzez funkcje  $np.kron(A, B)$ .

## 4 Zero Bias Peak (dodatkowo dla chętnych).

Korzystając z układu z zadania 2 proszę założyć, że obszar nadprzewodnika znajduje się jedynie w połowie urządzenia po prawej stronie (ale nadal ma wymiar ok  $2 \mu\text{m}$  - trzeba rozciągnąć układ). Ponadto założyć, że przed obszarem nadprzewodzącym znajduje się bariera potencjału o wysokości  $V$  i szerokości jednego węzła. Dołączyć do układu kontakty: po lewej, kontakt zwykły, po prawej, nadprzewodzący i policzyć konduktancję w funkcji energii padającego elektronu wiedząc, że

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

gdzie  $R_{ee}$  to prawdopodobieństwo normalnego odbicia, a  $R_{he}$  to prawdopodobieństwo odbicia Andreeeva. Obliczenia wykonać dla  $B_x = 0.4$  T, dla którego obserwujemy stany Majorany, dobierając potencjał  $V$  tak, aby na wykresie zaobserwować ZBP, tak jak ma to miejsce w eksperymencie.