Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН) Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН (ИФ СО РАН)

На правах рукописи

Аксенов Сергей Владимирович

КИНЕТИЧЕСКИЕ И ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ СТРУКТУР С СИЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ЗАРЯДОВЫХ И СПИНОВЫХ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ

Специальности: 01.04.11 – физика магнитных явлений, 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

> Научные консультанты: д.ф.-м.н., проф. В. В. Вальков, д.ф.-м.н., член-корр. РАН М. Ю. Каган

Красноярск 2021

Оглавление

Введение

1	Спиновый эффект Фано			14
	1.1	Интерференция Фано как проявление связанных состояний в континуу-		
		мев м	иезоскопических системах	14
	1.2 Теория неупругого рассеяния спин-поляризованного электр			
		новой структуре		
		1.2.1	Гамильтониан в приближении сильной связи	23
		1.2.2	Стационарные состояния и коэффициент прохождения	26
		1.2.3	Общие свойства коэффициента прохождения через спиновый димер	32
		1.2.4	Вольт-амперная характеристика и ее особенности	35
	1.3	ект Фано при транспорте электрона через одиночную магнитную		
		приме	есь	38
		1.3.1	Рассеяние на одиночной анизотропной магнитной примеси	38
		1.3.2	Эффективный гамильтониан устройства с анизотропной магнит-	
			ной примесью	41
	1.4	Эффе	ект Фано при транспорте электрона через спиновый димер	46
		1.4.1	Геометрия сканирующей микроскопии	46
		1.4.2	Геометрия разломного контакта	55
	1.5	Магни	итосопротивление устройства со спиновым димером в качестве ак-	
		тивно	го элемента	68
	1.6	Резюм	1e	72

 $\mathbf{7}$

2	Роль процессов многократного рассеяния			74
	2.1	2.1 Особенности транспортных свойств спиновых структур атомного масштаб		
	2.2	2.2 Подход Келдыша для описания неравновесных систем, содержащих спи-		
		новые	структуры атомного масштаба	77
		2.2.1	Гамильтониан системы	77
		2.2.2	Связь стационарных кинетических процессов и неравновесных	
			средних	80
		2.2.3	Атомное представление для операторов устройства	83
		2.2.4	Неравновесные функции Грина, спектральные функции устрой-	
			ства, спектральные функции туннельной связи	85
		2.2.5	Туннельный ток и кинетические уравнения для чисел заполнения	92
	2.3	Проявление эффектов неравновесности в транспортных характеристи-		
		ках ан	изотропной магнитной примеси	94
		2.3.1	Гильбертово пространство состояний устройства, включающего	
			одиночный спин	94
		2.3.2	Неравновесные числа заполнения и вольт-амперные характери-	
			стики устройства с анизотропным спином	97
		2.3.3	Связь между подходами Ландауэра-Бюттикера и Келдыша	104
	2.4	Эффекты неравновесного транспорта через спиновый димер 10		107
		2.4.1	Атомное представление для устройства со спиновым димером	107
		2.4.2	Транспортные свойства устройства с димерной молекулой	109
	2.5	Стационарный джозефсоновский ток через димерную молекулу1		115
		2.5.1	Особенности эффекта Джозефсона в контакте с наноструктурой .	115
		2.5.2	Теория стационарного эффекта Джозефсона в атомном представ-	
			лении	117
		2.5.3	Подавление критического тока за счет неупругого рассеяния на	
			спиновых моментах молекулы	122
	2.6	Резюм	Ie	125
3	Вли	ияние в	кулоновских взаимодействий	L 27

	3.1	3.1 Особенности транспортных свойств систем квантовых точек			
	3.2	Теория квантового транспорта в четырехточечной структуре с учетом			
		кулоновских корреляций			
		3.2.1	Гамильтониан четырехточечной структуры, связанной с контак-		
			тами		
		3.2.2	Неравновесные функции Грина и ток в приближении сильной связи133		
	3.3	Особе	енности транспортных свойств четырехточечной структуры в ре-		
		жиме линейного отклика			
		3.3.1	Изотропная четырехточечная структура в отсутствии кулонов-		
			ских корреляций		
		3.3.2	Анизотропная четырехточечная структура в отсутствии кулонов-		
			ских корреляций		
		3.3.3	Роль температурного фактора		
		3.3.4	Изотропная четырехточечная структура с учетом кулоновских		
			корреляций		
		3.3.5	Анизотропная четырехточечная структура с учетом кулоновских		
			корреляций		
		3.3.6	Спиновый фильтр на основе четырехточечной структуры 148		
	3.4	Неран	зновесный транспорт в четырехточечной структуре в присутствии		
		многс	частичных эффектов		
	3.5	3.5 Резюме			
4	Occ	бенно	сти транспорта через майорановские связанные состояния158		
	4.1	Пробл	пема детектирования майорановского состояния в сверхпроводя-		
		щих проволоках с сильной спин-орбитальной связью			
	4.2	Трано	спортные свойства интерференционного устройства, содержащего		
		одномерный топологический сверхпроводник			
		4.2.1	Обнаружение майорановских состояний в интерференционных струк-		
			турах		

		4.2.2	Описание модели кольца и теория транспорта в интерференцион-	
			ном устройстве	171
		4.2.3	Резонансы Брейта-Вигнера и Фано	176
		4.2.4	Зависимость свойств резонансов Фано от типа низкоэнергетиче-	
			ского возбуждения мостика	181
		4.2.5	Влияние кулоновских взаимодействий и беспорядка	183
		4.2.6	Асимметричное кольцо и топологический эффект Дикке	185
		4.2.7	Т-образная геометрия	188
	4.3	Контр	ооль направления спин-поляризованного тока через сверхпроводя-	
		щую і	проволоку в скошенном магнитном поле	193
		4.3.1	Исследования спиновой поляризации майорановского состояния .	193
		4.3.2	Спиновая поляризация майорановского состояния в скошенном	
			магнитном поле	194
		4.3.3	Переключение спин-поляризованного тока при транспорте через	
			проволоку в фазе топологической сверхпроводимости	196
	4.4	Резюм	ме	204
5	Про	Іроблема зарядовых корреляций 200		
	5.1	Майој	рановские связанные состояния и электрон-электронные взаимо-	
		дейст	ВИЯ	206
	5.2	Основы метода ренормализационной группы для матрицы плотности 2		210
	5.3	5.3 Влияние зарядовых корреляций на топологическую сверхпровод		
		в про	волоке класса BDI в модели Шубина-Вонсовского	215
		5.3.1	Гамильтониан системы и диаграмма топологических фаз в отсут-	
			ствие кулоновских взаимодействий	215
		5.3.2	Особенности майорановских возбуждений в проволоке с учетом	
			хаббардовского отталкивания	222
	5.4	Фазы	топологической сверхпроводимости в эффективной модели прово-	
		ЛОКИ І	класса BDI	228

Оглавление

	5.4.1	Эффективный гамильтониан сверхпроводящей проволоки класса	
		BDI	228
	5.4.2	Сравнение результатов tUV - и tJV -DMRG процедур	231
	5.4.3	Диаграмма топологических фаз сверхпроводящей проволоки в	
		режиме сильных электронных корреляций	233
5.5	5.5 Магнитокалорический эффект в сверхпроводящей проволоке класса		
	с учет	ом кулоновского отталкивания	239
5.6	Резюм	1e	243
Заключение			245
Благодарности			248
Литература			249

Появившиеся в последние десятиления технологии создания различных низкоразмерных структур, вплоть до размеров порядка межатомных расстояний, приводят к необходимости развития современной теории отклика таких систем, в частности, описания особенностей квантового транспорта. Рассмотрение явлений переноса на столь малых масштабах имеет ряд важных особенностей. Поскольку на сегодняшний день экспериментальные возможности позволяют изучать высокочистые образцы вплоть до сверхнизких температур, контролируя при этом интенсивность их взаимодействия с контактами, то становится доступным режим когерентного транспорта. В этом случае на проводящие свойства может существенно влиять квантовомеханическая интерференция, связанная с фактической неодномерностью (в реальном и/или обратном пространствах) распространения электронных волн. Другая особенность рассмотрения транспортных явлений на атомных масштабах связана со способностью носителей возбуждать структуру за счет неупругого взаимодействия с ее собственными, спиновыми и зарядовыми, степенями свободы.

Таким образом, электронный ток в таких системах несет информацию об особенностях спектра возбуждений низкоразмерной системы, который, в свою очередь, определяется имеющимся набором внутренних взаимодействий. Кроме того, анализ кинетических процессов в таких структурах открывает возможности их использования в качестве электронных устройств, которые демонстрируют известные эффекты (отрицательная дифференциальная проводимость, спиновая фильтрация и др.), обладая при этом значительно меньшими размерами. Стоит отдельно отметить, что квантовый транспорт играет значительную роль в детектировании и понимании свойств топологически нетривиальных фаз и связанных с ними краевых состояний. Стремительное

развитие этого направления физики конденсированных сред во-многом связано с перспективами реализации квантовых вычислений с использованием майорановских состояний, устойчивых по отношению к процессам декогеренции вследствие локальных возмущений. Сказанное выше определяет **актуальность темы исследования**.

Цель работы. Развить теорию кинетических и топологических свойств квантовых структур при учете сильных зарядовых и спиновых взаимодействий.

Научная новизна и практическая значимость. Обнаружен механизм реализации эффекта Фано за счет спин-спиновых взаимодействий, который, с свою очередь, способен индуцировать аномально высокое магнитосопротивление. В диссертации впервые проведено обобщение метода неравновесных функций Грина и диаграммной техники Келдыша на случай атомной статистики. Это позволяет рассчитать электронный ток через наноразмерную структуру с произвольным числом уровней и, в частности, предсказывать эффекты, вызванные сильной неравновесностью и определяемые процессами многократного рассеяния. Продемонстрировано, что интерференция с учетом кулоновских взаимодействий приводит к эффектам спиновой фильтрации и отрицательной дифференциальной проводимости (кондактанса) в системе из четырех квантовых точек. Впервые изучены транспортные свойства интерференционного устройства, в котором рукава связаны сверхпроводящей проволокой со спинорбитальным взаимодействием. Проведенный анализ позволил установить ряд таких особенностей поведения кондактанса, как одновременная реализация и симметричных, и асимметричных резонансов; зависимость ширины пиков Фано от величины гибридизации майорановских волновых функций; топологический эффект Дикке. Эти эффекты могут быть использованы на практике для детектирования майорановских состояний и топологического фазового перехода. Предложен механизм переключения спин-поляризованного тока, основанный на зависимости спиновой поляризации майорановского состояния от направления внешнего магнитного поля. Впервые изучена проблема влияния сильных зарядовых корреляций на реализацию фаз топологической сверхпроводимости в модели Шубина-Вонсовского, описывающей проволоку со спин-орбитальной связью и аномальным спариванием расширенного s-типа. При этом проведенное обобщение метода ренорм-группы для матрицы плотности на случай опе-

раторов Хаббарда позволило построить топологические фазовые диаграммы.

На защиту выносятся следующие положения:

- 1. Реализация эффекта Фано при неупругом одноэлектронном транспорте через спиновые структуры атомного масштаба.
- Механизм индуцирования аномально высокого магнитосопротивления за счет эффекта Фано.
- Развитие метода неравновесных функций Грина и диаграммной техники Келдыша в атомном представлении.
- 4. Построение теории квантового транспорта через многоуровневые наноструктуры при учете процессов многократного рассеяния.
- 5. Эффект отрицательной дифференциальной проводимости за счет процессов многократного рассеяния в режиме сильной неравновесности.
- Способ спиновой фильтрации в системе из четырех квантовых точек, основанный на особенностях интерференции в присутствии электрон-электронных взаимодействий.
- Метод детектирования топологически нетривиальной фазы в сверхпроводящей проволоке со спин-орбитальным взаимодействием, являющейся частью кольца Ааронова-Бома.
- Эффект Дикке и формирование связанных состояний в континууме в интерференционном устройстве со сверхпроводящей проволокой в топологически нетривиальной фазе.
- Механизм переключения спин-поляризованного тока в системе полуметалл / сверхпроводящая проволока / полуметалл за счет зависимости спиновой поляризации майорановского связанного состояния от направления внешнего магнитного поля.

 Диаграмма топологических фаз проволоки со спин-орбитальным взаимодействием и сверхпроводящим спариванием расширенного *s*-типа в режиме сильных зарядовых корреляций.

Структура, объем и содержание работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы, изложена на 286 страницах, включает 83 рисунка. Список цитируемой литературы содержит 417 наименований. Каждая глава диссертации включает вводный раздел, в котором представлен обзор экспериментальных и теоретических результатов, связанных с рассматриваемыми в главе задачами. Формулы и рисунки в диссертации нумеруются по главам, ссылки на литературные источники нумеруются единым образом по всему тексту.

Во введении обосновывается актуальность темы диссертационных исследований, формулируется цель работы, перечисляются основные положения, выносимые на защиту, отмечается новизна и практическая ценность полученных результатов. Введение также содержит информацию о содержании диссертации по главам, об апробации материалов диссертации и публикациях результатов диссертационных исследований.

В первой главе рассмотривается спиновый эффект Фано при одноэлектронном транспорте через структуры атомного масштаба. В разделе 1.1 излагается суть интерференционного явления Фано, приводится краткий обзор твердотельных систем, в транспортных характеристиках которых наблюдаются соответствующие резонансы, а также разбирается связь между эффектом Фано и наличием связанных состояний в континууме. В разделе 1.2 излагается общая теория неупругого рассеяния электрона на примере прохождения через потенциальный профиль спинового димера. В разделе 1.3 анализируется поведение коэффициента прохождения через одиночную анизотропную магнитную примесь. При этом в пункте 1.3.2 вводится эффективный гамильтониан и демонстрируется связь между его собственными значениями и свойствами резонансов Фано. В разделе 1.4 аналогичное рассмотрение проводится для случая спинового димера в геометрии сканирующего микроскопа и разломного контакта для различных типов обменных гамильтонианов. В разделе 1.5 в рамках подхода Ландауэра-Бюттикера показана реализация аномально высокого магнитосопротивления у устройства, содержащего спиновый димер в качестве активного элемента. Вторая глава посвящена развитию теории квантового транспорта через многоуровневые структуры атомного масштаба и изучению роли процессов многократного рассеяния в условиях сильной неравновесности. Обобщение подхода Келдыша для описания неравновесных систем, включающих структуры с атомной статистикой состояний, проводится в разделе 2.2. В разделах 2.3 и 2.4 развитая теория применяется для анализа транспортных свойств одиночной анизотропной магнитной примеси и димерной молекулы, соответственно. Демонстрируется, как вовлечение в процессы переноса заряда все новых возбужденных состояний этих устройств приводят к ряду важных для электронных приложений явлений. В разделе 2.5 метод неравновесных функций Грина в атомном представлении используется для описания теории стационарного эффекта Джозефсона, когда между сверхпроводящими контактами находится многоуровневая структура атомного масштаба.

В третьей главе исследуется влияние кулоновских взаимодействий на транспортные свойства системы квантовых точек. Раздел 3.1 посвящен обзору некоторых основных эффектов, которые имеют место при рассмотрении транспорта через отдельные точки и их наборы, а также аналогии, которую можно проследить между последними и хаббардовскими системами. В разделе 3.2 излагается общая теория транспорта в структуре из четырех точек на основе метода неравновесных функций Грина и уравнений движения. В свою очередь, в разделах 3.3 и 3.4 внимание уделено непосредственному анализу особенностей поведения плотности состояний, чисел заполнения и тока в режимах линейного и нелинейного отклика, соответственно.

Четвертая глава диссертации посвящена изучению транспортных свойств систем, содержащих топологические сверхпроводники. В ее вводной части (см. раздел 4.1) приводится обзор экспериментальных и теоретических работ, ставящих своей целью обнаружение майорановского связанного состояния в сверхпроводящих проволоках со сильным спин-орбитальным взаимодействием во внешнем магнитном поле. В частности, обсуждаются возможности и проблемы измерения квантованного пика кондактанса при нулевом напряжении, нелокальности майорановского состояния и его спиновой поляризации. В разделе 4.2 изучаются особенности транспортных свойств интерферометра (кольца), в котором рукава соединены упомянутой сверхпроводящей

проволокой (мостиком). Необходимая теория, основанная на неравновесных функциях Грина, приближении сильной связи и представлении Горькова-Намбу, излагается в пункте 4.2.2. При анализе дифференциальной проводимости кольца особое внимание уделяется выработке критериев, позволяющих отделить друг от друга случаи транспорта через краевое майорановское и объемное андреевское состояния (см. пункты 4.2.4, 4.2.6, 4.2.7). В разделе 4.3 изучается возможность детектирования фазы топологической сверхпроводисти в проволоке со спин-орбитальной связью Рашбы средствами спин-поляризованной спектроскопии. Для этого предлагается использовать зависимость спиновой поляризации майорановского возбуждения от направления магнитного поля.

В пятой главе методом ренорм-группы для матрицы плотности (DMRG) исследуется проблема влияния сильных зарядовых корреляций на реализацию фаз топологической сверхпроводимости. В разделе 5.1 дается обзор работ, посвященных классификации топологических фаз и определению структуры майорановских операторов в системах с межчастичными взаимодействиями. Основы подхода DMRG изложены в разделе 5.2. Результаты его применения к случаю сверхпроводящей проволоки со спинорбитальным взаимодействием Рашбы, зарядовые корреляции в которой описываются моделью Шубина-Вонсовского, представлены в разделе 5.3. В частности, анализируются различные сценарии трансформации топологических фаз на основе поведения энергий возбуждения и гибридизации волновых функций майорановских мод. С целью построения топологических фазовых диаграмм (карт) процедура DMRG обобщается на случай эффективного сильно коррелированного гамильтониана, записанного с помощью операторов Хаббарда и обсуждающегося в пункте 5.4.1. Сами карты и особенности их построения, в частности, критерии определения фазовых границ, анализируются в пункте 5.4.3. Раздел 5.5 посвящен особенностям магнитокалорического эффекта, позволяющим детектировать майорановские состояния в сверхпроводящей проволоке с учетом кулоновского отталкивания.

В заключении обобщаются основные результаты диссертационной работы.

Достоверность результатов и апробация работы. Достоверность полученных в диссертации результатов определяется корректностью использования матема-

тического аппарата, контролируемостью применяемых приближений, их согласием с результатами исследований других авторов, а также правильностью предельных переходов к известным результатам.

Результаты диссертационных исследований докладывались на 32-ой и 33-ой Международных зимних школах физиков-теоретиков «Коуровка-2008» и «Коуровка-2010» (Новоуральск, 2008, 2010), Euro-Asian Symposiums «Trends in Magnetism», EASTMAG-2010, EASTMAG-2016 (Екатеринбург, 2010; Красноярск, 2016), 36-ом и 37-ом совещаниях по физике низких температур «НТ-36» и «НТ-37» (Санкт-Петербург, 2012; Казань, 2015), научной сессии НИЯУ МИФИ-2011 (Mocквa, 2011), Advanced research workshop "Meso-12" (Черноголовка, 2012), Всероссийских конференциях по физике полупроводников (Санкт-Петербург, 2013; Екатеринбург, 2017; Новосибирск, 2019), международном симпозиуме «Нанофизика и наноэлектроника – 2013» (Нижний Новгород, 2013), XX-й Конференции «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» (Троицк, 2013), The European Conference «Physics on Magnetism 2014» PM'14 (Познань, Польша, 2014), Workshop on Quantum Transport (Дрезден, Германия, 2015), International Workshops on Localization, Interactions and Superconductivity (Черноголовка, 2016, 2017, 2018), International Conference on Nanoscience and Quantum Transport (Киев, Украина, 2016), Workshop on Fundamentals on Quantum Transport (Триест, Италия, 2017), Modern Trends in Condensed Matter Physics (Черноголовка, 2019), Conference on Signatures of Topology in Condensed Matter (Триест, Италия, 2019), XIX-ой Всероссийской конференции «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» (Сочи, 2020). Представленные результаты докладывались на Заседании секции «Магнетизм» Научного совета РАН по физике конденсированных сред в Институте физических проблем им. П. Л. Капицы РАН (Москва, 2009), Сибирском семинаре по высокотемпературной сверхпроводимости ОКНО (Омск, 2014), конференциях молодых ученых КНЦ СО РАН (Красноярск, 2008, 2009, 2012), а также научных семинарах и ученых советах Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН и т.д.

Публикации. Основные результаты диссертационных исследований опубликованы в 23 научных статьях [1–23].

Глава 1

СПИНОВЫЙ ЭФФЕКТ ФАНО ПРИ НЕУПРУГОМ ТРАНСПОРТЕ ЧЕРЕЗ СТРУКТУРЫ АТОМНОГО МАСШТАБА

1.1 Интерференция Фано как проявление связанных состояний в континууме в мезоскопических системах

Последние десятилетия связаны со стремительным развитием мезоскопической физики. Системы, относящиеся к классу мезоскопических, принято считать промежуточным звеном между микроскопическими объектами, такими как атомы и ядра, и макроскопическими, объемными веществами [24–26]. Характерной особенностью мезоскопических систем является то, что длина фазовой когерентности электронов, l_{ϕ} , т.е. расстояние, проходимое электронами без потери информации о фазе волновой функции, больше, чем размеры системы, *L*. Во многих случаях фазовая когерентность теряется при неупругом рассеянии на других электронах, магнитных примесях или фононах. Напротив, акты упругого рассеяния электронов на примесях, расстояние между которыми называется упругой длинной свободного пробега, l_0 , обычно не нарушают фазовую когерентность. Значение l_{ϕ} быстро увеличивается с уменьшением температуры, и при $L \sim 1$ мкм открытая система становится мезоскопической ниже 100 мК [27].

При таких низких температурах между характерными длинами в мезоскопических системах выполняется следующее соотношение [28]

$$a_0 \ll \lambda_F \le l_0 < L < l_\phi \le l_{in},\tag{1.1}$$

где a_0 - первый боровский радиус ($a_0 \approx 0.5 Å$); λ_F - фермиевская длина волны электрона; l_{in} - длина релаксации энергии. Обсудим физический смысл неравенства (1.1). Первое неравенство слева свидетельствует о том, что в подобных системах пренебрегается взаимодействием транспортируемого электрона с кулоновскими полями ионных остовов кристаллической решетки. Однако в процессе прохождения через мезоскопический образец электрон может претерпевать упругое рассеяние, что следует из второго и третьего неравенств. Когерентный характер электронного транспорта, обсуждавшийся выше, постулируется предпоследним неравенством в (1.1). Кроме того, в мезоскопических системах выпадает из рассмотрения рассеяние, приводящее к диссипации энергии. Данное правило определяется последним неравенством.

Заметим, что неравенство $l_0 < L$ не обязательно для установления мезоскопического режима. Если оно выполняется, то говорят о диффузионном (или прыжковом) электронном транспорте, который часто рассматривался на заре мезоскопической физики. В этом случае сохранение фазовой когерентности приводит к таким особенностям диффузии электронов в средах со случайным потенциалом, как слабая локализация [29–31], антилокализация [32, 33] и универсальные флуктуации кондактанса (G = dI/dV, где I - ток в образце, V - разность потенциалов в контактах) [34]. Вконце 1980х годов стало возможным создание полупроводниковых микроструктур с $высокой подвижностью, для которых выполнялось условие <math>l_0 > L$. Такие системы назвали баллистическими. Транспорт в них определяется электронным рассеянием не на примесях, а границах этой структуры [27].

Одним из эффектов, наблюдаемых в условиях мезоскопического транспорта в низкоразмерных системах, является возникновение асимметричных резонансных пиков Фано [35] в кондактансе. Их появление обусловлено интерференционными процессами между электронными волнами, относящимися к разным каналам. В свою очередь, часть из этих каналов соответствует состояниям, сильно связанным с электродами (состояния континуума), а часть - состояниям, слабо связанным с электродами (локализованные состояния). Природа каналов может быть различной: от явления размерного квантования (квантовые проволоки, точки), до присутствия примесей (молекулы, адатомы).

В 1961 году в работе [35] было приведено теоретическое обоснование асимметричных резонансных пиков в спектре поглощения гелия. Для этого была рассмотрена система, в которой состояние с волновой функцией $|\phi\rangle$ имеет дискретное значение энергии E_{ϕ} , а остальные состояния $|\psi_E\rangle$ относятся к непрерывному спектру энергий E (континууму). Важно, что эти два типа состояний взаимодействуют друг с другом так, что $\langle \psi_E | H | \phi \rangle = V_E$, где H - гамильтониан системы. В результате решения задачи на собственные вектора для такой системы Фано была выведена формула для сечения рассеяния σ , которая описывает процессы перехода системы (атома) из некоторого начального состояния $|i\rangle$ в конечное возбужденное состояние $|\Psi_E\rangle$. Это состояние в силу квантовомеханического принципа суперпозиции записывается как $|\Psi_E\rangle = a |\phi\rangle + \int dE' b_{E'} |\psi_{E'}\rangle$. Таким образом, формула Фано записывается в виде

$$\sigma = \frac{|\langle \Psi_E | T | i \rangle|^2}{|\langle \psi_E | T | i \rangle|^2} = \frac{(q+\varepsilon)^2}{1+\varepsilon^2},$$
(1.2)

где T - оператор перехода из начального состояния $|i\rangle$ в состояние $|\Psi_E\rangle$ $(|\psi_E\rangle)$; $\varepsilon = 2[E - E_{\phi} - F(E)]/\Gamma$ - ренормированная энергия; $F(E) = P.v. \int dE' |V_{E'}|^2/(E - E')$ - сдвижка резонансной энергии от дискретного значения E_{ϕ} ; $\Gamma = 2\pi |V_E|^2$ - спектральная ширина состояния $|\phi\rangle$; $q = \frac{1}{\pi V_E^*} \langle \Phi |T|i\rangle/\langle \psi_E |T|i\rangle$ - параметр асимметрии; $|\Phi\rangle = |\phi\rangle + P.v. \int dE' V_{E'} |\psi_{E'}\rangle/(E - E')$ - волновая функция $|\phi\rangle$, модифицированная из-за примешивания состояний континуума. Из формулы (1.2) следует, что для $q \neq 0$ сечение рассеяния σ характеризуется резонансом $\sigma_{max} = 1 + q^2$ при $\varepsilon = 1/q$ (т.е. $E_{max} = E_{\phi} + \Gamma/(2q)$) и минимумом $\sigma_{min} = 0$ при $\varepsilon = -q$ (т.е. $E_{min} = E_{\phi} - \Gamma/(2q)$), который иногда называют антирезонансом.

Зависимость сечения рассеяния σ , нормированного на $1+q^2$, от приведенной энергии ε , отсчитываемой от резонансного значения $E_{res} = E_{\phi} + F$, представлена на рисунке 1.1. Из приведенной зависимости видно, что при $|q| \to \infty$, когда переходы в состояния континуума слабые, кривая σ имеет лоренцеву форму, характерную для



Рис. 1.1: Сечение рассеяние σ , нормированное на $1 + q^2$, при различных значениях q. По оси абсцисс энергия откладывается от резонансного значения $E_{res} = E_{\phi} + F$ [36].

резонанса Брейта-Вигнера [37], т.к. определяется рассеянием только через дискретное состояние. Такая же форма пика возникает при рассмотрении взаимодействия двух или более континуумов с дискретным уровнем. В случае q = 0 имеется только антирезонанс. Эта особенность является отличительной для эффекта Фано, она указывает на деструктивную интерференцию между волнами, соответствующими рассеянию двумя разными путями - через дискретное (локализованное) состояние и напрямую в состояние непрерывного спектра. Термин «деструктивная интерференция» указывает на то, что в результате такого сложения волн происходит подавление рассеяния ($\sigma = 0$).

В наноструктурах, где возможно реализовать мезоскопический режим квантового транспорта при низких температурах, резонансные эффекты Фано весьма распространены. В частности, как уже обсуждалось для систем в характерными размерами $L \sim 1$ мкм, например квантовых точек или проволок, транспорт можно считать мезоскопическим при температурах ниже 100 мК [27]. Кроме того, вероятность рассеяния с нарушением фазы можно уменьшить посредством усиления связи структуры с электродами, между которыми она располагается. Это приводит к уменьшению времени нахождения электронов внутри квантовой точки и, тем самым, ослабляет некогерентное рассеяние. Тогда, если имеется несколько каналов, по которым частицы могут распространяться через структуру, фазовая когерентность делает возможными интерференционные процессы, приводящие к Фано резонансам.

Чтобы понять, откуда возникают эти каналы, рассмотрим прямоугольную квантовую точку со сторонами L_x и L_y . Тогда квантовое состояние внутри этой точки описывается волновым вектором $\mathbf{k}_{ln} = (2\pi l/L_x, 2\pi n/L_y)$, где l, n - положительные целые числа. Пусть точка располагается между двумя электродами и отделена от них туннельными барьерами вдоль оси x. Для заданного l состояние (l, 1) среди остальных (l, n) наиболее сильно связано с электродами, потому что кинетическая энергия движения электрона вдоль оси x является наибольшей, а эффективная высота потенциального барьера, в свою очередь, наименьшая. Следовательно, состояния квантовой точки разделяются на небольшое число сильно связанных состояний, соответствуюцих состояниям непрерывного спектра, и большое число слабо связанных состояний (локализованных) [38,41].

Возникновение эффекта Фано в твердотельных системах сначало было предсказано теоретически. В наиболее простом случае, если имеется только два канала и два контакта [39–41], задача о когерентном транспорте может быть решена аналитически на основе обобщения подхода Фешбаха, в котором рассматривается рассеяние во взаимодействующих открытом и закрытом каналах [42,43]. В более общем случае многозонного мезоскопического образца, связанного с большим числом контактов, выражение для коэффициента прохождения в форме аналогичной формуле (1.2) может быть получено на основе *S*-матрицы рассеяния [41].

С развитием экспериментальных методов стало возможным наблюдение эффекта Фано на практике [38, 44]. В частности, появившаяся технологическая возможность создавать нетривиальную архитектуру электродов затвора позволила контролировать силу взаимодействия контактов истока и стока с квантовой точкой. Как следствие, удалось наблюдать переход из некогерентного в когерентный режим транспорта.

На рисунке 1.2 приведены зависимости проводимости от напряжения затвора для различных режимов, переход между которыми осуществлялся с помощью изменения связи между контактами и квантовой точкой [44]. В случае слабой связи фоновая



Рис. 1.2: Зависимость проводимости квантовой точки G от напряжения затвора V_g . а). Режим Фано; b). Промежуточный режим; c). Режим кулоновской блокады. Связь между контактами и точкой уменьшается от графика а) к графику c). Пунктирные кривые вычислены по формуле, анлогичной формуле (1.2), с параметрами асимметрии q = -0.03 и -0.99 для центрального и правого резонансов соответственно [44].

проводимость близка к нулю вследствие отсутствия состояний континуума (см. график 1.2с). Мы имеем дело с режимом кулоновской блокады, а пики G соответствуют энергиям электрического поля затвора, при которых состояния точки с N и N + 1 электронами вырождены. С увеличением связи резкие пики начинают размываться, что объясняется авторами работы влиянием эффекта Кондо (см. график 1.2b). Наконец, в случае наиболее сильной связи, когда фоновая проводимость достаточно велика, транспорт становится когерентным и наблюдаются резонансы Фано (см. график 1.2а). Применение формулы, аналогичной формуле Фано (1.2), с параметрами асимметрии q = -0.03 и -0.99 позволило довольно точно описать центральный и правый резонансы.

В ряде работ кроме транспортного пути, включающего саму точку, добавлялась возможность либо прямого туннелирования между контактами [45], либо транспорта через рукав (reference arm) [46–48]. Дополнительный путь для прохождения электронов в подобных структурах соответствует состоянию континуума. В результате, даже в режиме кулоновской блокады удается наблюдать интерфернцию по сценарию Фано. При этом в геометрии кольца Ааронова-Бома параметр асимметрии *q* можно контролировать за счет магнитного потока сквозь плоскость устройства [46, 47].

Другим распространенным случаем является взаимодействие эффектов Кондо и Фано. Напомним, что первый заключается в возникновении многочастичного синглетного состояния, образованного локализованным спином (например, спина электрона на уровне точки или магнитного примесного центра) и электронами контакта, находящимися вблизи уровня Ферми [49,50]. Если рассматривать структуру из двух точек в Т-образной схеме подключения к контактам (когда вторая точка взаимодействует с резервуарами только через первую), то реализация пика Кондо указывает на наличие состояния континуума. Это, в свою очередь, создает условия для реализации эффекта Фано. В результате соответствующий характерный антирезонанс подавляет пик Кондо (другими словами, возникает антирезонанс Кондо) [51].

В некотором смысле схожий эффект наблюдается в системах, где на поверхность благородного металла адсорбирован атом переходного металла (Co, Ti, Cr) с локализованным спиновым моментом (за счет d-электронов), а в роли второго контакта выступает игла сканирующего туннельного микроскопа [52]. В этом случае два канала для прохождения электронов в реальном пространстве определяется процессами прямого туннелирования электронов из иглы в зону проводимости подложки, а также транспортом через d-орбиталь. Если доминирует последний, то в кондактансе наблюдается резонанс при нулевом напряжении (пик Кондо). Если же главный вклад дают процессы прямого туннелирования (т.е. появляется состояние континуума), то имеет место антирезонанс Кондо [53, 54].

В квазиодномерных проволоках наличие спин-орбитальной связи Рашбы с одной стороны способно индуцировать связанные состояния, а с другой - приводит к их вза-

имодействию с состояниями континуума, генерируя резонансы Фано [55]. Резонансы Фано наблюдаются в транспортных характеристиках полевых транзисторов, где интерферируют электроны, прошедшие через разные атомы легирующей примеси [56,57]. Конфигурационное взаимодействие состояний непрерывного и дискретного спектра способно существенно влиять не только на транспортные характеристики низкоразмерных систем. Например, в магнитных полупроводниковых гетероструктурах, где локализованные состояния ионов Mn взаимодействуют с континуумом состояний в квантовой яме, эффект Фано приводит к значительной модификации спектра фотолюминисценции [58].

Из формулы (1.2) вытекает, что ширина асимметричного пика Фано пропорциональна интенсивности взаимодействия состояний континуума и дискретного спектра, т.е. $|E_{max} - E_{min}| \sim |V_E|^2$. Следовательно, при малых V_E резонанс и антирезонанс будут располагаться близко друг к другу. Другими словами, возникает долго живущее состояние. Если далее $V_E \rightarrow 0$, то особенность Фано коллапсирует [59,60], и реализуется связанное состояние в континууме (ССК) [61,62]. Появление ССК может быть обусловлено как фундаментальными причинами, связанными определенной симметрией структуры [63], так и случайным обращением в нуль отмеченного взаимодействия V_E при непрерывном изменении параметров [64,65]. Системы с ССК в идеале обладают бесконечной добротностью, что делает их привлекательными для оптических приложений: лазеров, фильтров и детекторов [66].

Низкоразмерные системы являются популярными объектами, где распространены ССК. Это видно уже в структуре, состоящей всего из двух квантовых точек [67,68]. Ее гамильтониан в простейшем случае без учета спиновых степеней свободы имеет вид:

$$H_D = \hat{a}^+ \hat{h}_D \hat{a}, \ \hat{h}_D = \begin{pmatrix} \varepsilon & -t \\ -t & \varepsilon \end{pmatrix}, \ \hat{a} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \end{pmatrix}^T,$$
(1.3)

где $a_{1,2}$ - операторы уничтожения электронов на уровне 1-ой и 2-ой точке, соответственно; ε - энергия электрона в каждой из точек; t - параметр перескока электрона между точками. Проводя унитарное преобразование, гамильтониан (1.3) можно переписать в представлении молекулярных орбиталей, антисвязанного и связанного состояний, т.е.

$$H_{D} = \hat{f}^{+} \hat{U} \hat{h}_{D} \hat{U}^{+} \hat{f} = \hat{f}^{+} \begin{pmatrix} \varepsilon + t & 0 \\ 0 & \varepsilon - t \end{pmatrix} \hat{f}, \ \hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \ \hat{f} = (f_{+} \ f_{-})^{T}.$$
(1.4)

При параллельном подключении левого и правого контактов к двойной точке их влияние описывается следующим туннельным гамильтонианом:

$$H_{T} = \sum_{k} \hat{c}_{k}^{+} \begin{pmatrix} t_{L1} & t_{L2} \\ t_{R1} & t_{R2} \end{pmatrix} \hat{a} + h.c. =$$

$$= \sum_{k} \hat{c}_{k}^{+} \begin{pmatrix} t_{L1} - t_{L2} & t_{L1} + t_{L2} \\ t_{R1} - t_{R2} & t_{R1} + t_{R2} \end{pmatrix} \hat{f} + h.c., \ \hat{c}_{k} = (c_{Lk} \quad c_{Rk})^{T},$$

$$(1.5)$$

где $c_{L,Rk}$ - оператор уничтожения электрона с волновым вектором k в левом и правом контакте, соответственно; $t_{L1,2}$ ($t_{R1,2}$) - параметры туннельной связи левого (правого) контакта с 1-ой и 2-ой точками, соответственно.

Из второго равенства в формуле (1.5) следует, что нарушая симметрию открытой системы непрерывным изменением параметров туннельного взаимодействия двойной точки с контактами, можно проследить переход от ситуации, когда антисвязанное состояние есть ССК при симметричном параллельном подключении ($t_{L1} = t_{L2}, t_{R1} = t_{R2}$), к ситуации, когда оба состояния имеют одинаковое конечное время жизни при последовательном подключении ($t_{R1} = t_{L2} = 0, t_{L1} = t_{R2}$).

В промежуточном случае асимметричного параллельного соединения $(t_{L1} \neq t_{L2}, t_{R1} \neq t_{R2})$ резонанс кондактанса, относящийся к антисвязанному состоянию, имеет вид особенности Фано. Похожая картина наблюдается и при учете фазы Ааронова-Бома [68, 69]. В результате, в сильно асимметричной транспортной геометрии кондактанс характеризуется наличием широкого резонанса Брейта-Вигнера и узкого резонанса Фано, подобно эффекту Дикке в оптике [70–72]. Увеличение числа квантовых точек в структуре приводит к росту числа ССК [73]. Учет многочастичных эффектов также приводит к реализации дополнительных ССК и резонансов Фано [13, 74]. Таким образом, возникновение ССК и эффекта Фано в обсуждаемых системах является естественным следствием их неодномерности в реальном или энергетическом пространстве [75, 76]. В данной главе мы покажем, что эффект Фано и ССК - это распространные явления, имеющие место и при изучении когерентного неупругого транспорта через спиновые структуры [1–6].

1.2 Теория неупругого рассеяния спин-поляризованного электрона на спиновой структуре

1.2.1 Гамильтониан в приближении сильной связи

Рассмотрим особенности эффекта Фано и ССК в системе, состоящей из металлических контактов, между которыми находится устройство. В качестве последнего в настоящей главе будут анализироваться две спиновые структуры. Первая - это спиновый димер, т.е. пара спиновых моментов S_1 и S_2 , связанных обменным антиферромагнитным взаимодействием [1,3,5]. Вторая - одиночный атом со спином S, характеризующийся анизотропией типа легкая ось [4–6].

В случая, когда в роли устройства выступает спиновый димер, одномерная система схематически изображена на рисунке 1.3. Будем предполагать, что устройство находится между металлическими электродами, которые, в свою очередь, соединены с электронными резервуарами в виде макроскопических металлических контактов. Т.к. резервуары являются макроскопическими проводниками много большими, чем электроды, то электроны, входящие в резервуар, термализованы и обладают температурой и химическим потенциалом контакта перед их возвращением в устройство. Таким образом, контакты должны быть безотражательными. Это означает, что электрон, падающий на контакт, будет полностью поглощен и термализован перед его повторным излучением в устройство.

Дальнейшее описание будет осуществляться в приближении сильной связи. На протяжении всей цепочки расстояние между узлами подразумевается одинаковым и равным а. Гамильтониан системы, представленной на рис. 1.3, имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_T + \hat{H}_{De} + \hat{H}_{sf} + \hat{H}_D + U(n).$$
(1.6)

Здесь первые два слагаемых - это электронные гамильтонианы левого L и правого R контактов, которые в представлении вторичного квантования в приближении сильной связи можно записать как

$$\hat{H}_L = \sum_{\sigma,n=-\infty}^{0} \bigg[\varepsilon_{L\sigma} c_{n\sigma}^+ c_{n\sigma} + t_L \left(c_{n\sigma}^+ c_{n-1,\sigma} + c_{n-1,\sigma}^+ c_{n\sigma} \right) \bigg], \qquad (1.7)$$

$$\hat{H}_R = \sum_{\sigma,n=3}^{+\infty} \bigg[\varepsilon_{R\sigma} c_{n\sigma}^+ c_{n\sigma} + t_R \left(c_{n+1,\sigma}^+ c_{n\sigma} + c_{n\sigma}^+ c_{n+1,\sigma} \right) \bigg], \qquad (1.8)$$

где $c_{n\sigma}^+$ ($c_{n\sigma}$) - оператор рождения (уничтожения) электрона проводимости со спином σ на узле n контакта α ($\alpha = L, R$); $\varepsilon_{\alpha\sigma} = \varepsilon_{\alpha} - g_e \mu_B H \sigma$, t_{α} - одноэлектронная спин-зависящая энергия на узле во внешнем магнитном поле **H** ($g_e = 2$ - g-фактор электрона, μ_B - магнетон Бора) и интеграл перескока в контакте α , соответственно. Ось Oz ориентирована вдоль направления магнитного поля. Третий член описывает перескоки электронов проводимости между устройством и контактами,

$$\hat{H}_{T} = \sum_{\sigma} \left[t_{Ld} \left(c_{1\sigma}^{+} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{+} c_{1\sigma} \right) + t_{dR} \left(c_{3\sigma}^{+} c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^{+} c_{3\sigma} \right) \right],$$
(1.9)

где t_{Ld} , t_{dR} - параметры туннельной связи левого и правого электродов с устройством, соответственно. Четвертое слагаемое в (1.6) описывает подсистему носителей в устройстве,

$$\hat{H}_{De} = \sum_{\sigma,n=1}^{2} \bigg[\varepsilon_{d\sigma} c_{n\sigma}^{+} c_{n\sigma} + t_d \left(c_{2\sigma}^{+} c_{1\sigma} + c_{1\sigma}^{+} c_{2\sigma} \right) \bigg], \qquad (1.10)$$

где $\varepsilon_{d\sigma} = \varepsilon_d - 2\mu_B H \sigma$ - одноэлектронная спин-зависящая энергия на узле устройства во внешнем магнитном поле **H**; t_d - параметр перескока между узлами устройства.

Неупругий характер транспорта электронов связан с наличием слагаемого \hat{H}_{sf} в общем гамильтониане (1.6), которое отвечает за обменное взаимодействие s - f-типа между спиновыми моментами электронов проводимости и спинами димера,

$$\hat{H}_{sf} = \frac{A}{2} \sum_{n=1}^{2} \left[\left(c_{n\uparrow}^{+} c_{n\downarrow} S_{n}^{-} + c_{n\downarrow}^{+} c_{n\uparrow} S_{n}^{+} \right) + \left(c_{n\uparrow}^{+} c_{n\uparrow} - c_{n\downarrow}^{+} c_{n\downarrow} \right) S_{n}^{z} \right],$$
(1.11)



Рис. 1.3: Схема наноустройства, связанного с металлическими контактами посредством электродов.

где A - интенсивность s - f-обменного взаимодействия; S_n^+ , S_n^- , S_n^z - спиновые операторы димера на узле n.

Оператор H_D в гамильтониане (1.6) описывает обменное взаимодействие между спиновыми моментами димера, находящихся в устройстве, а также их зеемановскую энергию в магнитном поле H. В изотропном случае этот оператор записывается в виде

$$\hat{H}_D = I\left(\mathbf{S_1S_2}\right) - g\mu_B H\left(S_1^z + S_2^z\right), \tag{1.12}$$

где I - параметр обменного взаимодействия спинов димера; g - g-фактор димера. В настоящей главе будем предполагать, что g-фактор спиновой атомной структуры, димера или одиночной магнитной примеси, равен 1, g = 1. Кроме того, в дальнейшем предполагается, что I > 0. Это означает, что между спиновыми моментами реализуется обменная связь антиферромагнитного типа. Следовательно, при относительно слабых магнитных полях ($g\mu_B H < I$) основным состоянием димера является синглет.

Последний член в гамильтониане характеризует потенциальную энергию электронов во внешнем электрическом поле, обусловленном разностью потенциалов на контактах V. Как известно, вид вольт-амперной характеристики существенно зависит от конкретного профиля потенциала в области между электродами [77]. Далее, для простоты, мы ограничимся рассмотрением транспортных характеристик в предположении, что потенциал изменяется линейно вдоль центральной области.

1.2.2 Стационарные состояния и коэффициент прохождения

Найдем решение задачи о рассеянии спин-поляризованного электрона на спиновом димере. При записи решений уравнения Шредингера с гамильтонианом (1.6) следует учитывать изменение состояния спинового димера, индуцируемое воздействием пролетающего электрона. Анализ s-f-оператора показывает, что слагаемое $\sim \sigma^z S^z$ индуцируют перевод димера из синглетного состояния D_{00} в триплетное D_{10} без изменения проекции спина у транспортируемого электрона, а слагаемое $\sim \sigma^- S^+$ приводит к переводу димера из синглетного состояния D_{00} в триплетное D_{11} с одновременным изменением проекции спина у транспортируемого электрона. Поэтому полное гильбертово пространство представляет собой произведение подпространства для транспортируемого электрона и подпространства спинового димера. В качестве базиса гильбертова пространства выберем базис состояний, каждое из которых характеризует спиновое состояние транспортируемого электрона на узле n, а также одно из четырех состояний спинового димера. С учетом сказанного этот базис будем обозначать посредством $D_{JJ_z}c_{n\sigma}^+|0\rangle$, где D_{JJ_z} соответствует состоянию спинового димера с суммарным спиновым моментом J и проекцией этого момента J_z на ось квантования $Oz, |0\rangle$ - вакуумное состояние, когда в системе не содержится электрона. В выбранных обозначениях четыре состояния димера описываются выражениями

$$D_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right), \qquad (1.13)$$
$$D_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \right), \quad D_{11} = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad D_{1,-1} = |\downarrow\downarrow\rangle,$$

где использованы дираковские кет-вектора $|S_1 \ S_2\rangle$. Каждый из этих четырех кетвекторов описывает состояние, в котором первый спин димера имеет проекцию S_1 , а второй - S_2 .

В соответствии с принятой системой обозначений решение уравнения Шредингера для случая, когда транспортируемый из левого контакта электрон обладал проекцией спинового момента $\sigma = +1/2$, а спиновый димер находился в синглетном состоянии записывается в виде

$$|\Psi_{L\uparrow}\rangle = \sum_{n} \left[w_{n\uparrow} c_{n\uparrow}^{+} D_{00} + u_{n\uparrow} c_{n\uparrow}^{+} D_{10} + v_{n\downarrow} c_{n\downarrow}^{+} D_{11} \right] |0\rangle.$$
(1.14)

Примешивание триплетных состояний димера описывается двумя последними слагаемыми и связано с разобранными выше процессами, индуцируемыми *s* – *f*-обменным взаимодействием электрона с локализованными моментами спинового димера.

Будем считать, что инжектируемый левым контактом электрон обладает волновым вектором k_L . Тогда выражения для парциальных амплитуд в левом ($n \leq 0$) и правом ($n \geq 3$) контактах можно представить в виде

$$n \leq 0: \ w_{n\uparrow} = e^{ik_L n} + r_{00}e^{-ik_L n}, \qquad n \geq 3: \ w_{n\uparrow} = t_{00}e^{ik_R n};$$
$$u_{n\uparrow} = r_{10}e^{-iq_L n}, \qquad u_{n\uparrow} = t_{10}e^{iq_R n}; \qquad (1.15)$$
$$v_{n\downarrow} = r_{11}e^{-ip_L n}, \qquad v_{n\downarrow} = t_{11}e^{ip_R n},$$

где r_{00} , r_{10} , r_{11} - амплитуды, возникновение которых связано с процессами отражения от потенциальной структуры димера, когда последний находится в синглетном и триплетном состояниях, соответственно; t_{00} , t_{10} , t_{11} - амплитуды, описывающие процессы прохождения электрона, при которых димер остается в синглетном и триплетных состояниях, соответственно; $k_L \equiv k_L a$, $k_R \equiv k_R a$, $q_L \equiv q_L a$, $q_R \equiv q_R a$, $p_L \equiv p_L a$, $p_R \equiv p_R a$ - волновые вектора. Содержание индексов у амплитуд r, t аналогично ранее обсуждавшимся индексам для спиновых волновых функций димера. Введенные волновые вектора связаны с энергией электрона в левом контакте посредством дисперсионных соотношений

$$E = \varepsilon_L + U(1) + 2t_L \cos k_L - 2t_{L(R)};$$

$$E = \varepsilon_L + U(1) + I + 2t_L \cos q_L - 2t_{L(R)};$$

$$E = \varepsilon_L + U(1) + I + h + 2t_L \cos p_L - 2t_{L(R)},$$

(1.16)

где $h = (2 - g) \mu_B H$. Аналогично для правого контакта выполняются соотношения

$$E = \varepsilon_R + U(2) + 2t_R \cos k_R - 2t_{L(R)};$$

$$E = \varepsilon_R + U(2) + I + 2t_R \cos q_R - 2t_{L(R)};$$

$$E = \varepsilon_R + U(2) + I + h + 2t_R \cos p_R - 2t_{L(R)}.$$

(1.17)

Из записанных соотношений следует, что кинетическая энергия электрона, налетающего на димер из левого (правого) электрода, изменяется в пределах ширины первой зоны Бриллюэна $W = 4|t_{L(R)}|$.

Из уравнения Шредингера, после приравнивания парциальных амплитуд при ортогональных базисных элементах для n = 0, 1, 2, 3, получаем недостающие двенадцать уравнений (с учетом трех различных спиновых конфигураций системы) на амплитуды отражения и прохождения, которые приведены ниже,

$$\begin{split} t_{L} \left(e^{-ik_{L}} + r_{00}e^{ik_{L}} \right) + \left(\varepsilon_{L} + U(1) - E \right) (1 + r_{00}) + t_{Ld}w_{1\uparrow} = 0; \\ t_{Ld} \left(1 + r_{00} \right) + \left(\varepsilon_{d} + U(1) - E \right) w_{1\uparrow} + \frac{Au_{1\uparrow}}{4} - \frac{Av_{1\downarrow}}{2\sqrt{2}} + t_{d}w_{2\uparrow} = 0; \\ t_{d}w_{1\uparrow} + \left(\varepsilon_{d} + U(2) - E \right) w_{2\uparrow} - \frac{Au_{2\uparrow}}{4} + \frac{Av_{2\downarrow}}{2\sqrt{2}} + t_{dR}t_{00}e^{3ik_{R}} = 0; \\ t_{dR}w_{2\uparrow} + \left(\varepsilon_{R} + U(2) - E \right) t_{00}e^{3ik_{R}} + t_{R}t_{00}e^{4ik_{R}} = 0; \\ t_{L}r_{10}e^{iq_{L}} + \left(\varepsilon_{L} + U(1) + I - E \right) r_{10} + t_{Ld}u_{1\uparrow} = 0; \\ t_{Ld}r_{10} + \left(\varepsilon_{d} + U(1) + I - E \right) u_{1\uparrow} + \frac{Aw_{1\uparrow}}{4} + \frac{Av_{2\downarrow}}{2\sqrt{2}} + t_{d}u_{2\uparrow} = 0; \\ t_{d}u_{1\uparrow} + \left(\varepsilon_{d} + U(2) + I - E \right) u_{2\uparrow} - \frac{Aw_{2\uparrow}}{4} + \frac{Av_{2\downarrow}}{2\sqrt{2}} + t_{dR}t_{10}e^{3iq_{R}} = 0; \\ t_{dR}u_{2\uparrow} + \left(\varepsilon_{R} + U(2) + I - E \right) t_{10}e^{3iq_{R}} + t_{R}t_{10}e^{4iq_{R}} = 0; \\ t_{Lr_{11}}e^{ik_{11_{L}}} + \left(\varepsilon_{L} + U(1) + h + I - E \right) r_{11} + t_{Ld}v_{1\downarrow} = 0; \\ t_{Ld}r_{11} + \left(\varepsilon_{d} + U(1) + h + I - \frac{A}{4} - E \right) v_{1\downarrow} + \\ + \frac{A}{2\sqrt{2}} \left(u_{1\uparrow} - w_{1\uparrow} \right) + t_{d}v_{2\downarrow} = 0; \\ t_{dV_{1\downarrow}} + \left(\varepsilon_{d} + U(2) + h + I - \frac{A}{4} - E \right) v_{2\downarrow} + \\ + \frac{A}{2\sqrt{2}} \left(u_{2\uparrow} + w_{2\uparrow} \right) + t_{dR}t_{11}e^{3ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v_{2\downarrow} + \left(\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E \right) t_{11}e^{3ip_{R}} + t_{R}t_{11}e^{4ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v_{2\downarrow} + \left(\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E \right) t_{11}e^{3ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v_{2\downarrow} + \left(\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E \right) t_{11}e^{3ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v_{2\downarrow} + \left(\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E \right) t_{11}e^{3ip_{R}} + t_{R}t_{11}e^{4ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v_{2\downarrow} + \left(\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E \right) t_{11}e^{3ip_{R}} + t_{R}t_{11}e^{4ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v_{2\downarrow} + \left(\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E \right) t_{11}e^{3ip_{R}} + t_{R}t_{11}e^{4ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v_{2\downarrow} + \left(\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E \right) t_{11}e^{3ip_{R}} + t_{R}t_{11}e^{4ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v_{2\downarrow} + \left(\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E \right) t_{11}e^{3ip_{R}} + t_{R}t_{11}e^{4ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v_{2\downarrow} + \left(\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E \right) t_{11}e^{3ip_{R}} + t_{R}t_{11}e^{4ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v_{2\downarrow} + \left(\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E \right) t_{11}e^{3ip_{R}} + t_$$

Для расчета вольт-амперной характеристики необходимо знать решения и в том случае, когда электрон с проекцией спинового момента $\sigma = +1/2$ инжектируется правым контактом. В этом случае соотношения (1.16), (1.17) остаются в силе, а волновая

функция системы записывается в виде

$$|\Psi_{R\uparrow}\rangle = \sum_{n} \left[w'_{n\uparrow} c^{+}_{n\uparrow} D_{00} + u'_{n\uparrow} c^{+}_{n\uparrow} D_{10} + v'_{n\downarrow} c^{+}_{n\downarrow} D_{11} \right] |0\rangle, \qquad (1.19)$$

где

$$n \leq 0: \quad w'_{n\uparrow} = t'_{00}e^{-ik_L n}; \qquad n \geq 3: \quad w'_{n\uparrow} = e^{-ik_R n} + r'_{00}e^{ik_R n}; u'_{n\uparrow} = t'_{10}e^{-iq_L n}; \qquad u'_{n\uparrow} = r'_{10}e^{iq_R n}; \qquad (1.20) v'_{n\downarrow} = t'_{11}e^{-ip_L n}; \qquad v'_{n\downarrow} = r'_{11}e^{ip_R n}.$$

Дополнительная система из двенадцати уравнений на коэффициенты $r'_{00}, r'_{10}, r'_{11}$ и $t'_{00}, t'_{10}, t'_{11}$ имеет вид

$$\begin{split} t_{L}t'_{00}e^{ik_{L}} + (\varepsilon_{L} + U(1) - E) t'_{00} + t_{Ld}w'_{1\uparrow} = 0; \\ t_{Ld}t'_{00} + (\varepsilon_{d} + U(1) - E) w'_{1\uparrow} + \frac{Au'_{1\uparrow}}{4} - \frac{Av'_{1\downarrow}}{2\sqrt{2}} + t_{d}w'_{2\uparrow} = 0; \\ t_{d}w'_{1\uparrow} + (\varepsilon_{d} + U(2) - E) w'_{2\uparrow} - \frac{Au'_{2\uparrow}}{4} + \frac{Av'_{2\downarrow}}{2\sqrt{2}} + \\ + t_{dR} \left(e^{-3ik_{R}} + r'_{00}e^{3ik_{R}}\right) = 0; \\ t_{dR}w'_{2\uparrow} + (\varepsilon_{R} + U(2) - E) \left(e^{-3ik_{R}} + r'_{00}e^{3ik_{R}}\right) + t_{R} \left(e^{-4ik_{R}} + r'_{00}e^{4ik_{R}}\right) = 0; \\ t_{L}t'_{10}e^{ia_{L}} + (\varepsilon_{L} + U(1) + I - E) t'_{10} + t_{Ld}u'_{1\uparrow} = 0; \\ t_{Ld}t'_{10} + (\varepsilon_{d} + U(1) + I - E) u'_{1\uparrow} + \frac{Aw'_{1\uparrow}}{4} + \frac{Av'_{2\downarrow}}{2\sqrt{2}} + t_{dR}r'_{10}e^{3iq_{R}} = 0; \\ t_{du}'_{1\uparrow} + (\varepsilon_{d} + U(2) + I - E) u'_{2\uparrow} - \frac{Aw'_{2\uparrow}}{4} + \frac{Av'_{2\downarrow}}{2\sqrt{2}} + t_{dR}r'_{10}e^{3iq_{R}} = 0; \\ t_{du}u'_{1\uparrow} + (\varepsilon_{R} + U(2) + I - E) r'_{10}e^{3iq_{R}} + t_{R}r'_{10}e^{4iq_{R}} = 0; \\ t_{du}u'_{1\uparrow} + (\varepsilon_{L} + U(1) + h + I - E) t'_{11} + t_{Ld}v'_{1\downarrow} = 0; \\ t_{Ld}t'_{11} + \left(\varepsilon_{d} + U(1) + h + I - \frac{A}{4} - E\right) v'_{1\downarrow} + \\ + \frac{A}{2\sqrt{2}} \left(u'_{1\uparrow} - u'_{1\uparrow}\right) + t_{d}v'_{2\downarrow} = 0; \\ t_{dv}'_{1\downarrow} + \left(\varepsilon_{d} + U(2) + h + I - \frac{A}{4} - E\right) v'_{2\downarrow} + \\ + \frac{A}{2\sqrt{2}} \left(u'_{2\uparrow} + w'_{2\uparrow}\right) + t_{dR}r'_{11}e^{3ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v'_{2\downarrow} + (\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E) r'_{11}e^{3ip_{R}} + t_{R}r'_{11}e^{4ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v'_{2\downarrow} + (\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E) r'_{11}e^{3ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v'_{2\downarrow} + (\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E) r'_{11}e^{3ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v'_{2\downarrow} + (\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E) r'_{11}e^{3ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v'_{2\downarrow} + (\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E) r'_{11}e^{3ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v'_{2\downarrow} + (\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E) r'_{11}e^{3ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v'_{2\downarrow} + (\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E) r'_{11}e^{3ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v'_{2\downarrow} + (\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E) r'_{11}e^{3ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v'_{2\downarrow} + (\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E) r'_{11}e^{3ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v'_{2\downarrow} + (\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E) r'_{11}e^{3ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v'_{2\downarrow} + (\varepsilon_{R} + U(2) + h + I - E) r'_{11}e^{3ip_{R}} + t_{R}r'_{11}e^{4ip_{R}} = 0; \\ t_{dR}v'_{2\downarrow} + \varepsilon_{R} + U'_{2} + t_{dR}v'_{2} +$$

В выражениях (1.16), (1.17), (1.18), (1.21) проведена ренормировка энергии $E \to E - 2t_{L(R)} + 3I/4 + \mu_B H.$

Следует подчеркнуть, что дальнейшее рассмотрение будет ограничено изучением одномодового режима. Под этим понимается ситуация, когда в левом (правом) электроде налетающий на устройство электрон для заданного значения энергии описывается состоянием только с одним фиксированным значением волнового вектора k_L (k_R). Вместе с тем для отраженных от устройства волн, а также для прошедших через устройство волн примешиваются состояния с другими значениями волновых векторов. Это связано с наличием внутренних степеней свободы у димерного устройства. Из-за s - f-обменной связи внутренние степени свободы участвуют в процессе рассеяния и индуцируют дополнительные состояния всей системы в целом. Таким образом, присутствие нескольких подзон в энергетическом спектре электронов для всей системы, отличающихся значениями квантовых чисел полного спинового момента димера \hat{J}_D и его проекции \hat{J}_{Dz} , вызвано отмеченным s - f-взаимодействием. В этом состоит одно из отличий от распространенных мезоскопических систем, в которых многомодовый режим квантовых проволок, образующих электроды, связан с учетом пространственного квантования [28].

Решение полученных систем уравнений позволяет найти амплитуды отражения и прохождения. Для определения коэффициентов отражения R и прохождения T воспользуемся квазиклассическими выражениями для плотностей падающего j_{inc} , отраженного j_{ref} и прошедшего j_{tr} потоков

$$j_{inc} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_L},$$

$$j_{tr} = \frac{1}{\hbar} \Big[\frac{\partial E}{\partial k_R} |t_{00}|^2 + \frac{\partial E}{\partial q_R} |t_{10}|^2 + \frac{\partial E}{\partial p_R} |t_{11}|^2 \Big],$$

$$j_{ref} = \frac{1}{\hbar} \Big[\frac{\partial E}{\partial k_L} |r_{00}|^2 + \frac{\partial E}{\partial q_L} |r_{10}|^2 + \frac{\partial E}{\partial p_L} |r_{11}|^2 \Big].$$
(1.22)

Как известно коэффициент прохождения T определяется через отношение плотности прошедшего потока вероятности к плотности падающего потока вероятности T = $|j_{tr}|/|j_{inc}|$ [78]. Соответственно этому, получаем

$$T = \begin{cases} T_{00} + T_{10} + T_{11}, & 0 < k_R, q_R, p_R < \pi; \\ T_{00} + T_{10}, & 0 < k_R, q_R < \pi; \\ T_{00}, & 0 < k_R < \pi, \end{cases}$$
(1.23)

где

$$T_{00} = \frac{|t_R|}{|t_L|} \frac{\sin k_R}{\sin k_L} |t_{00}|^2, \quad T_{10} = \frac{|t_R|}{|t_L|} \frac{\sin q_R}{\sin k_L} |t_{10}|^2, \quad T_{11} = \frac{|t_R|}{|t_L|} \frac{\sin p_R}{\sin k_L} |t_{11}|^2 - (1.24)$$

парциальные вклады в общих коэффициент прохождения T от состояний, в которых димер имеет синглетную или триплетные спиновые конфигурации, соответственно. Коэффициент отражения $R = |j_{ref}|/|j_{inc}|$ определяется выражением



Рис. 1.4: Зависимость общего коэффициента прохождения T и его парциальных компонент T_{00}, T_{10} и T_{11} от энергии налетающего электрона для параметров $\varepsilon_L = \varepsilon_d = \varepsilon_R = 0, t_L = t_R = -0.05, t_{Ld} = t_{dR} = -0.125, t_d = -0.1875, h = 0, I = 0.25, A = 0.75, V = 0.$

$$R = \begin{cases} R_{00} + R_{10} + R_{11}, & 0 < k_L, q_L, p_L < \pi; \\ R_{00} + R_{10}, & 0 < k_L, q_L < \pi; \\ R_{00}, & 0 < k_L < \pi, \end{cases}$$
(1.25)

где

$$R_{00} = |r_{00}|^2, \quad R_{10} = \frac{\sin q_L}{\sin k_L} |r_{10}|^2, \quad R_{11} = \frac{\sin p_L}{\sin k_L} |r_{11}|^2.$$
(1.26)

Число неравных нулю парциальных вкладов соответствует числу решений дисперсионных уравнений для волновых векторов, лежащих в пределах первой зоны Бриллюэна. Величины *R* и *T* удовлетворяют закону сохранения полной вероятности, т.е. *R*+*T* = 1.

1.2.3 Общие свойства коэффициента прохождения через спиновый димер

Характерное поведение коэффициента прохождения T(E) и его парциальных составляющих $T_{00} = T_{00}(E)$, $T_{10} = T_{10}(E)$, $T_{11} = T_{11}(E)$ при изменении энергии входящих электронов из левого электрода представлено на рисунке 1.4. Здесь и далее в текущей главе все энергетические величины измеряются в единицах ширины зоны W.

На графике выделяются две области, где зависимости от энергии этих величин существенно отличаются. В области E < 0.25 полный коэффициент прохождения определяется только теми процессами, при которых не происходят переходы димера в триплетные состояния. При E > 0.25 происходит включение процессов, приводящих к возбуждению димера в триплетные состояния. Поэтому полный коэффициент T формируется с учетом вкладов от возбужденных состояний всей системы (штриховая и штрих-пунктирная кривые на рис.1.4).

В области низких энергий, когда электроны рассеиваются на потенциальном профиле димера, находящимся в основном синглетном состоянии, включение магнитного поля может привести к возникновению дополнительных резонансных пиков, как это показано на вкладке к рис. 1.5. В представленном случае продемонстрировано появление такого резонанса в магнитном поле, когда одноэлектронная энергия на узлах устройства ε_d отлична от аналогичного параметра электродов ε_L и ε_R . Качественно схожая ситуация имеет место и при других значениях параметров системы. Пик при $E \simeq 0.375$ соответствует правому пику на рисунке 1.4 ($E \simeq 0.875$), который смещается влево при увеличении модуля ε_d .



Рис. 1.5: Зависимость общего коэффициента прохождения T и его парциальных компонент T_{00}, T_{10} и T_{11} от энергии налетающего электрона для параметров $t_L = t_R = -0.05$ эВ, $t_{Ld} = t_{dR} = -0.125, t_d = -0.1875, h = 1.25 \times 10^{-3}, I = 0.25, A = 0.75, \varepsilon_L = \varepsilon_R = 0, \varepsilon_d = -0.45, g = 1, V = 0$. На вкладке: индуцирование магнитным полем пика резонансного прохождения.

Включение электрического поля смещения, как видно из рисунка 1.6, вызывает заметные изменения величины этих пиков. При построении рисунка 1.6 считалось, что к правому контакту приложено электрическое напряжение так, что -eV = U(2) - U(1). Поэтому $\mu_R = \mu_L - eV$, где μ_R и μ_L - электрохимические потенциалы левого и правого контактов, соответственно. Отмеченное предположение будет использоваться в дальнейшем при расчете вольт-амперных характеристик.

Изменяя параметры системы, можно добиться возникновения запрещенной зоны по энергии (энергетический диапазон 0.45 < E < 0.65 на рисунке 1.7а) для электронов в правом контакте. Соответственно, электроны, падающие на димер из левого контакта и имеющие энергии из данного диапазона, испытывают полное отражение (см. рис. 1.7b).



Рис. 1.6: Зависимость величины пика, наведенного магнитным полем, T_{ind} от энергии электрического поля смещения для параметров $t_L = t_R = -0.05$ эВ, $t_{Ld} = t_{dR} = -0.125$, $t_d = -0.1875$, $h = 1.25 \times 10^{-3}$, I = 0.5, A = 0.75, $\varepsilon_L = \varepsilon_R = 0.25$, $\varepsilon_d = 3$.



Рис. 1.7: Зонная структура (a) и зависимость общего коэффициента прохождения T и его парциальных компонент T_{00} , T_{10} и T_{11} от энергии налетающего электрона (b) для параметров $t_L = -0.05$ эВ, $t_R = -0.125$, $t_{Ld} = t_d = t_{dR} = -0.0625$, h = 0.025, I = 0.75, A = 0.75, $\varepsilon_L = 0.125$, $\varepsilon_d = -0.1875$, $\varepsilon_R = -0.25$, V = 0.

1.2.4 Вольт-амперная характеристика и ее особенности

Учитывая, что электронная плотность, связанная с одним k-состоянием в проводнике длинной L равна 1/L, получим, что в квазиклассическом приближении ток I_{LR} , переносимый состоянием рассеяния (1.14), определяется выражением

$$I_{LR} = \frac{e}{L} \sum_{m} \sum_{k} \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E}{\partial k} \right)_{k=k_m} T_m(E) f_L(E), \qquad (1.27)$$

где $f_L(E) \equiv f(E - \mu_L)$ - фермиевская функция распределения электронов; $m = 00, 10, 11; k_{00} \equiv k_R, k_{10} \equiv q_R, k_{11} \equiv p_R$. Переходя от суммирования по квазиимпульсу к интегрированию по энергии, получаем

$$I_{LR} = \frac{e}{h} \sum_{m} \int dE \ T_m(E) f_L(E).$$
(1.28)

Ток, переносимый состояниями (1.19) можно записать аналогично I_{LR} , а именно

$$I_{RL} = \frac{e}{h} \sum_{m} \int dE \ T'_m(E) f_R(E), \qquad (1.29)$$

где $f_R(E) \equiv f(E - \mu_R), T'_m$ - парциальные коэффициенты прохождения для электрона, падающего на устройство из правого электрода, которые определяются следующими выражениями

$$T'_{00} = \frac{|t_L|}{|t_R|} \frac{\sin k_L}{\sin k_R} |t'_{00}|^2, \quad T'_{10} = \frac{|t_L|}{|t_R|} \frac{\sin q_L}{\sin k_R} |t'_{10}|^2, \quad T'_{11} = \frac{|t_L|}{|t_R|} \frac{\sin p_L}{\sin k_R} |t'_{11}|^2. \tag{1.30}$$

Результирующий ток определяется выражением

$$I = I_{LR} - I_{RL} = \frac{e}{h} \sum_{m} \int dE \left[T_m(E) f_L(E) - T'_m(E) f_R(E) \right],$$
(1.31)

которое эквивалентно формуле, получаемой в рамках формализма Ландауэра-Бюттикера [79–81]. Этот подход к описанию квантового транспорта в мезоскопических системах основан на нахождении унитарной S-матрицы [82], имеющей следующий блочный вид

$$S = \begin{pmatrix} \rho & \tau' \\ \tau & \rho' \end{pmatrix}$$
(1.32)

Матричный элемент $\rho_{n,m}$ ($\rho'_{n,m}$) блока ρ (ρ') представляет собой амплитуду рассеяния электрона из канала m в канал n левого (правого) электрода. В свою очередь матричный элемент $\tau_{n,m}$ ($\tau'_{n,m}$) блока τ (τ') представляет собой амплитуду рассеяния электрона из канала m левого (правого) электрода в канал n правого (левого) электрода. Для устройства, соединенного с контактами посредством двух трехмодовых квантовых проволок, формула тока, переносимого тремя состояниями рассеяния, имеет вид

$$I = \frac{e}{h} \sum_{m=1}^{3} \int dE \left[\left(|\tau_{1m}|^2 + |\tau_{2m}|^2 + |\tau_{3m}|^2 \right) f_L(E) - \left(|\tau'_{1m}|^2 + |\tau'_{2m}|^2 + |\tau'_{3m}|^2 \right) f_R(E) \right] =$$

$$= \frac{e}{h} \sum_{m=1}^{3} \int dE \left(|\tau_{1m}|^2 + |\tau_{2m}|^2 + |\tau_{3m}|^2 \right) \left[f_L(E) - f_R(E) \right].$$
(1.33)

В формуле (1.33) предполагается, что электронные волны входят в центральную мезоскопическую область независимо по трем каналам, и $Tr[\tau^{\dagger}\tau] = Tr[\tau'^{\dagger}\tau']$ [28]. Следовательно, в наиболее простом случае, когда левая и правая квантовые проволоки имеют по одной моде, имеем $|\tau_{1,1}|^2 = |\tau'_{1,1}|^2$. Такая ситуация реализуется в низкоэнергетической области в задаче о транспорте через спиновый димер.

Рассмотрим случай малых напряжений. В этом случае, раскладывая функции распределения в ряд Тейлора в окрестности химического потенциала μ с точностью до линейных членов, получим

$$I(V_L, V_R) = \frac{e^2}{h} \int dETr\left[\tau^{\dagger}(E)\tau(E)\right] \left(-\frac{\partial n_F(E-\mu)}{\partial E}\right) \left(V_L - V_R\right), \qquad (1.34)$$

где учитывалось, что $U(1) = eV_L$, $U(2) = eV_R$. Далее, дифференциальная проводимость системы имеет вид

$$G(\mu, T) = \frac{I}{V_L - V_R} = \frac{e^2}{h} \int dETr\left[\tau^{\dagger}(E)\tau(E)\right] \left(-\frac{\partial n_F(E-\mu)}{\partial E}\right), \quad (1.35)$$

При низких температурах приближенно выполняется равенство $-\frac{\partial n_F(E-\mu)}{\partial E} \approx \delta(E-\mu),$ тогда

$$G(E_F, 0) = \frac{e^2}{h} Tr\left[\tau^{\dagger}(\mu) \tau(\mu)\right] = \frac{e^2}{h} \sum_m T_m(\mu).$$
(1.36)

Формула (1.36) была получена Ландауэром [79,80].

Из приведенной терминологии для S-матрицы следует, что в рассматриваемой задаче мы определяем только матричные элементы первых столбцов матриц отражения
r, r' и прохождения t, t' (т.е. значение m = 1 соответствует m = 00 в наших обозначениях). В свою очередь, связь, например, между амплитудами $r_{n,1}, t_{n,1}$ и аналогичными элементами $\rho_{n,1}$ и $\tau_{n,1}$ унитарной S-матрицы задается в виде [82]

$$\rho_{n,1} = \sqrt{\frac{v_{m_L}}{v_{00_L}}} r_{n,1}, \quad \tau_{n,1} = \sqrt{\frac{v_{m_R}}{v_{00_L}}} t_{n,1}, \tag{1.37}$$

где $n = 1, 2, 3; v_{m_L(R)}$ - скорость электрона в левом (правом) электроде, когда спиновый димер находится в состоянии m.



Рис. 1.8: (а) Вольт-амперная характеристика и (b) дифференциальная проводимость спинового димера, вычисленная для параметров $\varepsilon_L = \varepsilon_d = \varepsilon_R = 0, t_L = t_R = -0.05$ эВ, $t_{Ld} = t_{dR} = -0.125, t_d = -0.25, h = 0.025, I = 0.375, A = 0.625, T \simeq 30$ К при двух значениях энергии Ферми контактов.

Таким образом, электронный транспорт в рассматриваемой нами одномерной цепочке можно интерпретировать как транспорт по трем эффективным каналам, возникающим благодаря наличию возбужденных состояний спинового димера. В каждом канале электроны проводимости имеют свою проекцию спиновых моментов: в двух из них спины поляризованы по магнитному полю, а в третьем противоположно. При этом контактами инжектируются только спин-поляризованные электроны со спином 1/2, когда димер находится в синглетном состоянии.

Типичная вольт-амперная характеристика (ВАХ) и дифференциальная проводимость G(V) = dI/dV устройства (в единицах кванта проводимости $G_0 = e^2/h$), использующего спиновый димер в качестве активного элемента, расположенного между металлическими электродами, изображены на рисунках 1.8а и 1.8b, соответственно. Из вида представленных зависимостей следует, что увеличение энергии Ферми в левом контакте приводит к качественному изменению ВАХ. При малом значении E_F , когда в транспорте принимают участие только низкоэнергетические электроны, ВАХ содержит участки с отрицательной дифференциальной проводимостью. Это происходит в режиме, когда триплетные состояния димера не возбуждаются и неупругие процессы не включены. В случае больших значений энергии Ферми, когда энергия электронов достаточна для перевода димеров в возбужденные состояния и транспорт становится неупругим, области с отрицательной дифференциальной проводимостью в ВАХ исчезают. При этом с хорошей степенью точности получающаяся ВАХ соответствует закону Ома.

Эффект Фано при транспорте электрона через одиночную магнитную примесь

1.3.1 Рассеяние на одиночной анизотропной магнитной примеси

Чтобы детально исселовать особенности эффекта Фано, для начала обратимся к наиболее простой ситуации, когда между электродами располагается всего один спиновый момент **S** (примесь), обладающий анизотропией типа легкая ось [4–6]. Тогда гамильтониан системы записывается схожим с (1.6) образом с той лишь разницей, что область устройства включает только один узел, а гамильтониан спиновой структуры, \hat{H}_D , имеет вид

$$\hat{H}_D = D\left(S^z\right)^2 - g\mu_B H S^z,\tag{1.38}$$

где D > 0 - параметр анизотропии; g - g-фактор Ланде примеси. Таким образом, как следует из (1.38), магнитная примесь имеет набор энергетических уровней, классифицируемых по проекции ее спина, S^z . При $D > g\mu_B H$ синглетное состояние ($S^z = 0$), χ_0 , является основным состоянием примеси. Тогда, аналогично (1.14) можно представить решение уравнения Шредингера в виде

$$|\Psi_{L\uparrow}\rangle = \sum_{n} \left[w_n c_{n\uparrow}^+ \chi_0 + u_n c_{n\downarrow}^+ \chi_1 \right] |0\rangle.$$
(1.39)

При записи (1.39) предполагается, что электрон с проекцией спина 1/2 инжектируется левым контактом, когда примесь находится в основном синглетном состоянии. Спинфлип процессы инициируют переход примеси в возбужденное состояние χ_1 с проекцией спинового момента $S^z = 1$; $|0\rangle$ - вакуумное состояние для фермионной подсистемы. Выражения на парциальные амплитуды записываются как

$$n \le 0: \ w_n = e^{ikn} + r_0 e^{-ikn}, \qquad n \ge 2: \ w_n = t_0 e^{ikn};$$
$$u_n = r_1 e^{-iqn}, \qquad u_n = t_1 e^{iqn}, \qquad (1.40)$$

где r_0 (t_0) , r_1 (t_1) - амплитуды отражения (прохождения), когда примесь находится в основном и возбужденном состояниях, соответственно. Волновые вектора k, q удовлетворяют следующим дисперсионным соотношениям

$$E = (1 - \cos k)/2, \quad E = D + h + (1 - \cos q)/2, \tag{1.41}$$

где $h = (2 - g)\mu_B H$. Здесь и в дальнейшем все энергетические величины измеряются в единицах ширины зоны W = 4|t|. При записи соотношений (1.41) проведено изменение отсчета энергии электрона на величину $-1/2 - \mu_B H$. Кроме того, чтобы упростить дальнейшие аналитические выкладки, будем предполагать электроды идентичными, т.е. $t_L = t_R = t$, $t_{Ld} = t_{dR} = t_T$ и $\varepsilon_L = \varepsilon_R = 0$. При этом, поскольку в условиях эксперимента электронные уровни в устройстве могут управляться полем затвора, то $\varepsilon_d \neq 0$.

В результате решения уравнения Шредингера для случая $t \neq t_T$ получим систему уравнений на амплитуды прохождения, $\hat{A}\hat{t} = \hat{b}$, где

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} (E - \varepsilon_k) e^{ik} & -\frac{A}{\sqrt{2}} e^{iq} \\ -\frac{A}{\sqrt{2}} e^{ik} & (E - \varepsilon_q + \frac{A}{2}) e^{iq} \end{pmatrix}, \hat{t} = \begin{pmatrix} t_0, t_1 \end{pmatrix}^T, \hat{b} = \begin{pmatrix} \frac{i\tau^2 \sin k e^{ik}}{2}, 0 \end{pmatrix}^T,$$
$$\varepsilon_k = \varepsilon_{k1} + i\varepsilon_{k2}, \varepsilon_{k1} = \varepsilon_d + \frac{1}{2} \left(1 - \tau^2 \cos k \right), \varepsilon_{k2} = -\frac{1}{2} \tau^2 \sin k, \tau = t_T/t, \qquad (1.42)$$
$$\varepsilon_q = \varepsilon_d + D + h + \frac{1}{2} \left(1 - \tau^2 e^{iq} \right).$$

Тогда, коэффициент туннельного прохождения через магнитную примесь в низкоэнергетическом режиме, E < D + h, записывается как,

$$T = |t_0|^2 = \frac{\varepsilon_{k2}^2 \left(E - \varepsilon_q + \frac{A}{2}\right)^2}{\varepsilon_{k2}^2 \left(E - \varepsilon_q + \frac{A}{2}\right)^2 + \left\{\left(E - \varepsilon_{k1}\right) \left(E - \varepsilon_q + \frac{A}{2}\right) - \frac{A^2}{2}\right\}^2}.$$
 (1.43)

Из (1.43) следует, что при $\tau \neq 1$ или $\varepsilon_d \neq 0$ можно наблюдать как резонансное прохождение (T = 1), так и резонансное отражение (T = 0) (см. рис. 1.9a). Если же $\tau = 1$ и $\varepsilon_d = 0$, то возможно только полное отражение (см. рис. 1.9b).



Рис. 1.9: Зависимость коэффициента прохождения через одиночную магнитную примесь от энергии налетающего электрона при (a) A = D = 0.25, $\varepsilon_d = -0.4$, $\tau = 0.5$; (b) A = 0.5, D = 0.25, $\varepsilon_d = 0$, $\tau = 1$. Точки 'A' и 'B' отвечают решениям уравнения $Re\{z\} - E = 0$ на рис. 1.10а. Другие параметры: t = -1 эВ, g = 1, h = 0.01.

Наличие антирезонанса в обоих случаях указывает на реализацию эффекта Фано. Действительно, в низкоэнергетической области в системе присутствуют два типа состояний. К первому классу относится состояние непрерывного спектра (континуума) описываемое плоской волной e^{ikn} , при этом примесь находится в основном синглетном состоянии. Второй тип - локализованное в пределах устройства состояние, когда примесь имеет проекцию спина $S^z = 1$. Оно определяются волновой функцией с затухающей экспонентой, т.к. Re(q) = 0. В такой ситуации логично предположить, что отмеченные резонансные особенности в системе связаны именно с интерференционными процессами между волнами, соответствующими локализованному состоянию и состоянию континуума. Подобная трактовка была впервые предложена Фано для объяснения асимметричных резонансов в спектре возбуждения гелия. Он показал, что асимметричный резонанс интерференционной природы может возникнуть при конфигурационном взаимодействии между состояниями континуума и состояниями дискретного спектра [35]. При этом основной чертой резонансов Фано является возможность именно полного отражения от дефекта, характеризующегося некоторым дискретным состоянием [36]. В нашем случае выражение на энергию антирезонанса имеет следующий вид,

$$E_{ares} = \frac{1}{2} + D + h + \varepsilon_d - \frac{A}{2} + \tau^2 \frac{\sqrt{(A - 2\varepsilon_d)^2 + 2\tau^2 - 1 + 2\varepsilon_d - A}}{2(1 - 2\tau^2)}.$$
 (1.44)

На практике, когда $\tau \ll 1$, а также $A \ll 1$ (в энергетических единицах $A \sim 1$ мэВ [83]), подкоренное выражение в (1.44) становится отрицательным, если $\varepsilon_d = 0$. Таким образом, электрическое поле затвора позволяет вывести значения резонансных энергий Фано в действительную область в туннельном режиме и может послужить эффективным механизмом для наблюдения эффекта Фано в экспериментальных условиях, поскольку в эксперименте значения $\varepsilon_d \sim 1$ эВ [44].

1.3.2 Эффективный гамильтониан устройства с анизотропной магнитной примесью

Как отмечалось во введении этой главы, явление интерференции Фано тесно связано с присутствием связанных состояний в континууме (ССК) в системе. Фактически, ширина асимметричного пика или антирезонанса (если параметр асимметрии равен нулю, см. рис. 1.1) обратно пропорциональна времени жизни дискретного уровня, которое становится конечным из-за взаимодействия с континуумом. Следовательно, исчезновение (коллапс) резонанса Фано при некотором сочетании параметров сигнализирует о реализации ССК [59, 60]. Для поиска условий, при которых возникают ССК, удобно воспользоваться методологией эффективного гамильтониан, \hat{H}_{eff} , который описывает структуру (устройство), взаимодействующую с окружением. Вследствие этого взаимодействия такой гамильтониан является неэрмитовым.

Чтобы найти \hat{H}_{eff} в рассматриваемом случае, воспользуемся соотношениями $t_0 =$

 $\tau e^{-ik}w_1, t_1 = \tau e^{-iq}u_1$. Тогда, ранее введенную систему $\hat{A}\hat{t} = \hat{b}$ можно переписать следующим образом [77,82]:

$$|\Psi_{dev}\rangle = \tau \hat{G}^r |\phi_L\rangle, \ \hat{G}^r = \left(E \cdot \hat{I} - \hat{H}_{eff}\right)^{-1}, \ \hat{H}_{eff} = \hat{H}_{De} + \hat{H}_D + \hat{\Sigma}^r, \ |\phi_L\rangle = \hat{b}/\tau^2. \ (1.45)$$

Первое равенство в (1.45) является формальной записью решения уравнения Шредингера для открытой системы "устройство (электронный уровень и магнитная примесь) + электроды". Другими словами, волновая функция устройства $|\Psi_{dev}\rangle = (w_1 \ u_1)^T$ определяется действием оператора запаздывающей одночастичной функции Грина, \hat{G}^r , на волновую функцию возмущения $|\phi_L\rangle$, которое представляет собой электрон со спином \uparrow , налетающий из левого электрода. Как видно из определения \hat{G}^r , влияние контактов на устройство описывается матрицей запаздывающей собственно-энергетической функции, $\hat{\Sigma}^r$. Именно это слагаемое приводит к неэрмитовости искомого эффективного гамильтониана,

$$\hat{H}_{eff} = \begin{pmatrix} \varepsilon_k & \frac{A}{\sqrt{2}} \\ \frac{A}{\sqrt{2}} & \varepsilon_q - \frac{A}{2} \end{pmatrix}, \ \hat{\Sigma}^r = \hat{\Sigma}_L^r + \hat{\Sigma}_R^r = -\frac{\tau^2}{2} diag\left(e^{ik}, \ e^{iq}\right).$$
(1.46)

Собственные энергии и собственные вектора \hat{H}_{eff} равны

$$z_{1,2} = \frac{1}{2} \left\{ 1 + D_1 + 2\varepsilon_d - \frac{\tau^2}{2} \left(e^{ik} + e^{iq} \right) \pm \sqrt{\left[D_1 + \frac{\tau^2}{2} \left(e^{ik} - e^{iq} \right) \right]^2 + 2A^2} \right\}, \quad (1.47)$$
$$|1\rangle_R = \frac{1}{Z} \left(\begin{array}{c} A/\sqrt{2} \\ (z_1 - \varepsilon_k) \end{array} \right), \quad |2\rangle_R = \frac{1}{Z} \left(\begin{array}{c} -(z_1 - \varepsilon_k) \\ A/\sqrt{2} \end{array} \right), \quad |1\rangle_L = |1\rangle_R^*, \quad |2\rangle_L = |2\rangle_R^*,$$

где $Z = \sqrt{\left(A/\sqrt{2}\right)^2 - (z_1 - \varepsilon_k)\left(z_2 - \varepsilon_q + \frac{A}{2}\right)}, D_1 = D + h - \frac{A}{2}$. Наличие пары собственных векторов (биортогональный базис) $|i\rangle_{L,R}$ для каждого собственного значения z_i является естественным следствием неэрмитовости эффективного гамильтониана. В результате имеем два неэквивалентных уравнения Шредингера [84,85]: $\hat{H}_{eff} |i\rangle_R = z_i |i\rangle_R$ и $(i|_L \hat{H}_{eff} = (i|_L z_i)$.

На рисунке 1.10 представлено поведение реальных и мнимых частей собственных энергий, $z_{1,2}$, эффективного гамильтониана устройства, содержащего анизотропную магнитную примесь. Известно, что действительные части позволяют найти положения резонансов Фано, исходя из решения уравнения $Re \{z(E_0)\} - E_0 = 0$. Другими



Рис. 1.10: Поведение реальных и мнимых частей собственных энергий, $z_{1,2}$, эффективного гамильтониана устройства, содержащего анизотропную магнитную примесь. (a) $Re\{z\} - E$; (b) $-2Im\{z\}$. Сплошные (штриховые) кривые построены для параметров рис. 1.9a (1.9b).

словами, такая особенность в коэффициенте прохождения возникает, когда энергия транспортируемой частицы совпадает с уровнем энергии устройства. Такие решения для случаев $\tau \neq 1$, $\varepsilon_d \neq 0$ и $\tau = 1$, $\varepsilon_d = 0$ обозначены на рис. 1.10а точками 'A' и 'B', соотвественно. Из сравнения с рис. 1.9 следует, что в первом случает E_0 располагается между минимумом и максимумом, указывая на то, что при прохождении этого значения фаза волновой функции системы меняется на π [35]. При $\tau = 1$, $\varepsilon_d = 0$ точка 'B' совпадает с энергией антирезонанса Фано. Кроме того, исходя из рис. 1.10a, b, в этой ситуации $z_1 = z_2$. Решая уравнение $Re \{z\} - E = 0$, получаем значение E_{Fano} в точке 'B', которое совпадает с E_{ares} ($\tau = 1$, $\varepsilon_d = 0$), определяемой формулой (1.44),

$$E_0^B = \frac{1}{2} + D + h - \frac{1}{2}\sqrt{A^2 + 1} = E_{ares}\left(\tau = 1, \ \varepsilon_d = 0\right).$$
(1.48)

В свою очередь, мнимые части собственных значений \hat{H}_{eff} определяют ширины резонансов, $\gamma_0 = -2Im \{ z (E_0) \}$. В низкоэнергетической области, E < D + h, мнимые части собственных энергий эффективного гамильтониана равны

$$Im\{z_{1,2}\} = -\frac{1}{4} \left[\tau^2 \sin k \mp \sqrt{\tau^4 \sin^2 k - \frac{1}{4} \left(B_1 - B_2\right)^2} \right], \qquad (1.49)$$

где $B_{1,2} = \sqrt{\left(2\sqrt{2}A \pm \tau^2 \sin k\right)^2 + \left(2D_1 + \tau^2 \cos k - \tau^2 e^{iq}\right)^2}$. Из (1.49) вытекает, что ССК возникает только в тривиальных случаях $\tau = 0$ или k = 0. Последняя ситуация хорошо видна на рис. 1.10b. Напомним, что коэффициент прохождения (1.43) может быть

также получен, основываясь на собственных энергиях и собственных векторах \hat{H}_{eff} (1.47) [76,84,85].

Знание одночастичной функции Грина (1.45) также позволяет представить коэффициент прохождения в низкоэнергетической области в виде, аналогичном формуле Фано (1.2). В результате удается получить параметр асимметрии, q, который определяет форму резонансного пика. Чтобы решить эту задачу, запишем $\hat{G}^r(E)$ в окрестности резонансной энергии $Re\{z_i\} = E_0$ следующим образом [86,87]:

$$\hat{G}^{r}(E) = \hat{G}_{0}^{r}(E) + \hat{G}_{1}^{r}(E) \approx \hat{G}_{0}^{r}(E_{0}) + \hat{G}_{1}^{r}(E), \qquad (1.50)$$

где слагаемое $\hat{G}_0^r(E_0) = \hat{G}^r(E_0) - \hat{G}_1^r(E_0) = \left(E_0 \cdot \hat{I} - \hat{H}_{eff}(E_0)\right)^{-1} - \hat{G}_1^r(E_0)$ - медленно меняющаяся в области $E = E_0$ компонента; $\hat{G}_1^r(E)$ - компонента, быстро меняющаяся в окрестности $E = E_0$. При записи (1.50) предполагалось, что резонансы не перекрываются, т.е. $|Re\{z_1\} - Re\{z_2\}| \gg |\gamma_{1,2}|$. Второе слагаемое в выражении (1.50) удобно определить с помощью известных собственных векторов \hat{H}_{eff} и \hat{H}_{eff}^+ [82], а именно:

$$\hat{G}_{1}^{r}(E) \approx \frac{|i)_{0}(i|_{0}}{E - z_{i}},\tag{1.51}$$

где $|i\rangle_0 = |i\rangle_R$, $(i|_L = (i|_0$ при $E = E_0$. Используя формулы (1.47), получаем

$$\left[\hat{G}_{0}^{r} \right]_{1,1} = \frac{ \left[\left(z_{1}^{0} - \varepsilon_{k}^{0} \right) \left(z_{2}^{0} - \varepsilon_{q}^{0} \right) - \frac{A^{2}}{2} \right] i \gamma_{0} + \left[\left(E_{0} - \varepsilon_{k}^{0} \right) \left(E_{0} - \varepsilon_{q}^{0} \right) - \frac{A^{2}}{2} \right] \frac{A^{2}}{2} }{ i \gamma_{0} \left[\left(z_{1}^{0} - \varepsilon_{k}^{0} \right) \left(z_{2}^{0} - \varepsilon_{q}^{0} \right) - \frac{A^{2}}{2} \right] \left[\left(E_{0} - \varepsilon_{k}^{0} \right) \left(E_{0} - \varepsilon_{q}^{0} \right) - \frac{A^{2}}{2} \right] } \right] } \equiv g_{0F}^{r} \cdot i \gamma_{0},$$

$$\left[\hat{G}_{1}^{r} \right]_{1,1} = \frac{A^{2}/2}{A^{2}/2 - \left(z_{1}^{0} - \varepsilon_{k}^{0} \right) \left(z_{2}^{0} - \varepsilon_{q}^{0} \right) \cdot \frac{1}{E - E_{0} + i \gamma_{0}} \equiv g_{1F}^{r} \cdot \frac{i \gamma_{0}}{E - E_{0} + i \gamma_{0}}$$

$$(1.52)$$

где $z_i^0 = z_i (E = E_0), \, \varepsilon_{k,q}^0 = \varepsilon_{k,q} (E = E_0).$

Учитывая, что матрицы уширения уровней устройства за счет связи с левым и правым контактами определяются как $\hat{\Gamma}_{L,R} = -2Im\{\hat{\Sigma}_{L,R}^r\}$, коэффициент прохождения (1.43) на языке функций Грина выражается в известном виде [82]:

$$T(E) = Tr\left[\hat{\Gamma}_{L}(E)\hat{G}^{r}(E)\hat{\Gamma}_{R}(E)\left(\hat{G}^{r}(E)\right)^{+}\right] \approx$$
(1.53)
$$\approx Tr\left[\hat{\Gamma}_{L}\hat{G}_{0}^{r}\hat{\Gamma}_{R}\left(\hat{G}_{0}^{r}\right)^{+}\right] + Tr\left[\hat{\Gamma}_{L}\hat{G}_{0}^{r}\hat{\Gamma}_{R}\left(\hat{G}_{1}^{r}\right)^{+}\right] + + Tr\left[\hat{\Gamma}_{L}\hat{G}_{1}^{r}\hat{\Gamma}_{R}\left(\hat{G}_{0}^{r}\right)^{+}\right] + Tr\left[\hat{\Gamma}_{L}\hat{G}_{1}^{r}\hat{\Gamma}_{R}\left(\hat{G}_{1}^{r}\right)^{+}\right] = T_{00} + T_{01} + T_{10} + T_{11},$$



Рис. 1.11: Сравнение точного (1.43) и приближенного 1.11 решений для коэффициента прохождения в низкоэнергетической области. Параметры: D = 0.25, A = 0.1, $\varepsilon_d = -0.5$, $\tau = 0.5$.

где $\hat{\Gamma}_{L,R} = \hat{\Gamma}_{L,R} (E = E_0)$. Принимая во внимание определения (1.46), имеем $\hat{\Gamma}_{L,R} = \hat{\Gamma}^+_{L,R}$. Как следствие, $T_{10} = T^+_{01}, T_{11} = T^+_{11}$.

Пользуясь найденными матричными элементами (1.52), для дальнейшего вывода удобно представить слагаемые в последнем равенстве формулы (1.53) как

$$T_{00} = \frac{\tau^4}{4} \gamma_0^2 |g_{0F}^r|^2 \sin^2 k_0, \ Im\{T_{00}\} = 0;$$

$$T_{01} = i\gamma_0 \frac{\tau^4}{4} g_{0F}^r g_{1F}^a \sin^2 k_0 \cdot \frac{-i\gamma_0}{E - E_0 - i\gamma_0} \equiv \widetilde{T}_{01} \cdot \frac{-i\gamma_0}{E - E_0 - i\gamma_0};$$

$$T_{11} = \frac{\tau^4}{4} |g_{1F}^r|^2 \sin^2 k_0 \cdot \frac{\gamma_0^2}{(E - E_0)^2 + \gamma_0^2} \equiv \widetilde{T}_{11} \cdot \frac{\gamma_0^2}{(E - E_0)^2 + \gamma_0^2};$$

(1.54)

где $k_0 = k (E = E_0), g_{1F}^a = (g_{1F}^r)^*.$

Таким образом, после ряда преобразований выражение, описывающее коэффициент прохождения в области асимметричного резонанса, принимает искомую форму:

$$T(E) \approx T_F = T_{00} \frac{|\varepsilon + q|^2}{1 + \varepsilon^2}, \ q = \frac{Im\{\widetilde{T}_{01}\}}{T_{00}} + i\sqrt{1 + \frac{2Re\{\widetilde{T}_{01}\} + \widetilde{T}_{11}}{T_{00}} - \left(\frac{Im\{\widetilde{T}_{01}\}}{T_{00}}\right)^2}, \ (1.55)$$

где $\varepsilon = \frac{E-E_0}{\gamma_0}$. На рисунке 1.11 представлено сравнение точного решения (1.43) и приближенной формулы (1.55) в низкоэнергетической области. Видно, что в окрестности особенности Фано имеется приемлемое согласие.

1.4 Эффект Фано при транспорте электрона через спиновый димер

1.4.1 Геометрия сканирующей микроскопии

При обсуждении общих свойств коэффициента прохождения через спиновый димер в пункте 1.2.3 отмечалось, что магнитное поле индуцирует дополнительные резонансные особенности. Причем этот эффект имеет место в области низких энергий транспортируемой частицы, когда вероятность нахождения димера в возбужденных триплетных состояниях стремится к нулю. В данном и следующем параграфах мы покажем, что этот эффект определяется присутствием ССК. Для начала обратимся к более простому с теоретической точки зрения случаю, когда транспортируемый электрон рассеивается только на одном спиновом моменте димера. На практике такая ситуация может иметь место, например, при сканирующей туннельной микроскопии магнитных комплексов атомного масштаба [88,89].

I). Коэффициент прохождения для случая s – f-взаимодействия гейзенберговского вида

При рассмотрении особенностей квантового транспорта через димер будем пользоваться теми же предположениями относительно параметров перескока и одноэлектронных энергий, что и в предыдущем параграфе. Тогда, решая задачу рассеяния с использованием волновой функции (1.14) и приравнивая парциальные амплитуды при ортогональных базисных элементах, получаем систему уравнений на амплитуды прохождения

$$\left(E \cdot \hat{I} - \hat{H}_{eff}\right) \cdot \begin{pmatrix} e^{ik}t_{00} \\ e^{iq}t_{10} \\ e^{ip}t_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{i\tau^2 \sin ke^{ik}}{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad (1.56)$$

В (1.56) матрица эффективного гамильтониана имеет вид

$$\hat{H}_{eff} = \begin{pmatrix} \varepsilon_k & A/4 & -\sqrt{2}A/4 \\ A/4 & \varepsilon_q & \sqrt{2}A/4 \\ -\sqrt{2}A/4 & \sqrt{2}A/4 & \varepsilon_p - A/4 \end{pmatrix}, \qquad (1.57)$$

где $\varepsilon_k = \varepsilon_{k1} + i\varepsilon_{k2}, \varepsilon_{k1} = \varepsilon_d + \frac{1}{2} \left(1 - \tau^2 \cos k \right), \varepsilon_{k2} = -\frac{1}{2} \tau^2 \sin k, \ \varepsilon_q = \varepsilon_d + I + \frac{1}{2} \left(1 - \tau^2 e^{iq} \right),$ $\varepsilon_p = \varepsilon_d + I + h + \frac{1}{2} \left(1 - \tau^2 e^{ip} \right).$ При этом волновые вектора k, q и p удовлетворяют следующим дисперсионным соотношениям:

$$E = (1 - \cos k) / 2;$$

$$E = I + (1 - \cos q) / 2;$$

$$E = I + h + (1 - \cos p) / 2.$$

(1.58)

В низкоэнергетической области вклад в коэффициент прохождения дает только амплитуда t_{00} . Следовательно, при $h \neq 0$ имеем

$$T = |t_{00}|^2 = \frac{X^2}{X^2 + 1}, \quad X = \frac{\left[\left(C_q - \frac{A}{4}\right)\left(C_q + \frac{A}{2}\right) + \Delta_{qp}C_q\right]\varepsilon_{k2}}{\left(C_q - \frac{A}{4}\right)\left[3\left(\frac{A}{4}\right)^2 - C_k\left(C_q + \frac{A}{2}\right)\right] + \Delta_{qp}\left(\left(\frac{A}{4}\right)^2 - C_kC_q\right)}$$
(1.59)

где

$$C_k = E - \varepsilon_{k1}, \ C_{q(p)} = E - \varepsilon_{q(p)}, \ \Delta_{qp} = \varepsilon_q - \varepsilon_p.$$
(1.60)

Из (1.59) и (1.60) следует, что возможно два антирезонанса Фано. В слабых магнитных полях h << I, A их энергии можно приближенно найти, решая уравнения $C_q + A/2 = 0$ и $C_q - A/4 = 0$.

$$E_{ares1} \approx \frac{1}{2} + \varepsilon_d - \frac{A}{2} + I + \frac{\tau^2 \left[2\varepsilon_d - A + \sqrt{(2\varepsilon_d - A)^2 + 2\tau^2 - 1} \right]}{2(1 - 2\tau^2)},$$
 (1.61)

$$E_{ares2} \approx \frac{1}{2} + \varepsilon_d + \frac{A}{4} + I + \frac{\tau^2 \left[2\varepsilon_d + A/2 + \sqrt{\left(2\varepsilon_d + A/2\right)^2 + 2\tau^2 - 1} \right]}{2\left(1 - 2\tau^2\right)}.$$
 (1.62)

Заметим, что второй антирезонанс возникает только при $h \neq 0$. Обе особенности коэффициента прохождения наглядно изображены на рисунках 1.12a и 1.12b. В частности, энергия левого антирезонанса при h = 0 на рис. 1.12a в точности совпадает с E_{ares1} . В свою очередь, энергия в точке 'В' приближенно равна E_{ares2} . Механизм эффекта



Рис. 1.12: Зависимости (a) T = T(E) при $\varepsilon_d = -0.5$ и (b) $T = T(\varepsilon_d)$ при E = 0.2 в низкоэнергетической области, когда s - f-взаимодействие реализуется только на первом узле. На вставке: индуцирование пика Фано магнитным полем. Точки 'A' и 'B' на рисунке (a) отвечают решениям уравнения $Re\{z\} - E = 0$ на рис. 1.13а. Другие параметры: t = -0.2 эВ, $A = I = 0.25, \tau = 0.5, h = 0.01.$

Фано в данном случае аналогичен разобранному в предыдущем параграфе на примере одиночной примеси, поскольку при E < I + h согласно (1.58) имеем $Re(k) \neq 0$, Re(q) = Re(p) = 0. Отличие заключается в наличии двух возбужденных состояний, локализованных в области устройства, а него одного. При включении магнитного поля происходит снятия вырождения по энергии этих состояний. Таким образом, в энергетическом пространстве появляется дополнительный канал для интерференции Фано, что хорошо видно на вставке рис. 1.12а.

Зависимость реальных и мнимых частей собственных значений эффективного гамильтониана (1.57) от энергии падающего электрона представлены на рисунке 1.13. Из сравнения рис. 1.12a и рис. 1.13a видно, что корни уравнения $Re\{z(E^{A,B})\}-E^{A,B}=0$ определяют положения резонансов Фано. При этом мнимая часть z_3 отлична от нуля только при $h \neq 0$, т.е. в нулевом магнитном поле при $E = E^B \approx E_{ares2}$ реализуется



ССК (см. вставку на рис. 1.13b).

Рис. 1.13: Поведение реальных и мнимых частей собственных энергий, $z_{2,3}$, эффективного гамильтониана устройства (1.57). (a) $Re\{z\} - E$; (b) $-2Im\{z\}$. Штриховые (сплошные) кривые построены для случая нулевого (ненулевого) магнитного поля. На вставке: реализация ССК при h = 0. Использованы параметры рис. 1.12.

Рассмотрим предельный случай $\tau = 1$, $\varepsilon_d = 0$. В этом случае $C_k = 0$, и в низкоэнергетической области получаем

$$\widetilde{T} = \frac{\widetilde{X}^2}{\widetilde{X}^2 + 1}, \quad \widetilde{X} = \frac{\widetilde{\varepsilon}_{k2} \left[\widetilde{C}_q (\widetilde{C}_p - A/4) - A^2/8 \right]}{\left(A/4 \right)^2 \left[3A/4 + 2\widetilde{C}_q + \widetilde{C}_p \right]},\tag{1.63}$$

где

$$\widetilde{C}_q = \sqrt{(I-E)(I-E+1)}, \ \widetilde{\varepsilon}_{k2} = \sqrt{E(1-E)},$$

$$\widetilde{C}_p = \sqrt{(I+h-E)(I+h-E+1)}.$$
(1.64)

Из вида (1.63) следует, что в рассматриваемой системе в низкоэнергетической области может возникнуть как резонанс (T = 1), так и антирезонанс (T = 0). Причем, максимум появляется лишь в случае, когда s - f-обменное взаимодействие ферромагнитного типа, т.е. A < 0 (сплошная линия на рис. 1.14), тогда как минимум будет при любом знаке A (штрих-пунктирная и сплошная линии на рис. 1.14). Энергии, при которых имеют место максимум и минимум в низкоэнергетической области, находятся из графического решения уравнений $3A/4 + 2\tilde{C}_q + \tilde{C}_p = 0$ и $\tilde{C}_q(\tilde{C}_p - A/4) - A^2/8 = 0$, соответственно. Решив квадратное уравнение, служащее условием для T = 0, на параметр



Рис. 1.14: Зависимость T = T(E) в низкоэнергетической области при $\tau = 1$, $\varepsilon_d = 0$, когда s - f-взаимодействие реализуется только на первом узле, I = 0.0625, A = 0.25. Остальные параметры совпадают с использованными на рис. 1.12.

А, находим два корня

$$A_1 = \sqrt{\widetilde{C}_q(\widetilde{C}_q + 8\widetilde{C}_p)} - \widetilde{C}_q > 0, \quad A_2 = -(\sqrt{\widetilde{C}_q(\widetilde{C}_q + 8\widetilde{C}_p)} + \widetilde{C}_q) < 0, \tag{1.65}$$

которые имеют противоположные знаки. Если графически решить уравнения (1.65) с параметрами рисунка 1.14 (при этом $A_1 = A_2 = 0.25$), то правые части совпадают с левыми при значениях энергии $E_{min1} \approx 0.05$ и $E_{min2} \approx 0.06$. Эти энергии отвечают антирезонансам коэффициента прохождения при A > 0 и A < 0, соответственно. Таким образом, в ненулевых магнитных полях антирезонанс T присутствует при любом знаке A. Однако, обе особенности не наблюдаются одновременно в отличие от случая $\tau \neq 1$, $\varepsilon_d \neq 0$. Резонанс характерен именно для A < 0.

Если магнитное поле равно нулю, то возможен только минимум, когда A > 0. Резонансное прохождение полностью отсутствует (пунктирная кривая на рис. 1.14). Штриховая кривая, которая практически сливается со сплошной на рисунке 1.14, соответствует случаю A < 0. Для этой зависимости не наблюдается никаких резонансных особенностей. Отсутствие возможности для резонансного прохождения при h = 0 связано с тем, что в \widetilde{X} происходит сокращение на скобку $A/4 + \widetilde{C}_q$, а в знаменателе \widetilde{X} остается постоянная величина.

Чтобы проанализировать влияние спин-флип процессов в системе на реализацию эффекта Фано в спиновых системах атомного масштаба, последовательно рассмотрим несколько частных случаев на примере димера.

II). Транспортные характеристики системы при *s* – *f*-взаимодействии изинговского вида

Упростим рассмотренную в предыдущем пункте систему исключением из гамильтониана *s* – *f*-взаимодействия поперечных компонент, ответственных за спин-флип процессы. Тогда соответствующий оператор примет изинговский вид,

$$\hat{H}_{sfIS} = \frac{A}{2} \left(c_{1\uparrow}^+ c_{1\uparrow} - c_{1\downarrow}^+ c_{1\downarrow} \right) \hat{S}_1^z.$$
(1.66)

Такая форма рассеивающего потенциала приводит к тому, что триплетное состояние $c_{n\downarrow}^+ |0\rangle D_{11}$ не принимает участия в транспорте, если электрон инжектируется электродом с проекцией спина 1/2, а димер изначально находится в синглетном состоянии. С учетом этого система уравнений на амплитуды прохождения t_{00} , t_{10} принимает вид

$$\left(E \cdot \hat{I} - \hat{H}_{eff}\right) \cdot \left(\begin{array}{c} e^{ik}t_{00} \\ e^{iq}t_{10} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} \frac{i\tau^2 \sin ke^{ik}}{2} \\ 0 \end{array}\right), \ \hat{H}_{eff} = \left(\begin{array}{c} \varepsilon_k & A/4 \\ A/4 & \varepsilon_q \end{array}\right).$$
(1.67)

Тогда коэффициент прохождения в низкоэнергетической области записывается как

$$T = |t_{00}|^2 = \frac{\varepsilon_{k2}^2 C_q^2}{\varepsilon_{k2}^2 C_q^2 + \left[C_k C_q - (A/4)^2\right]^2}.$$
(1.68)

Энергии антирезонансов Фано являются корнями уравнения $C_q = 0$ и равны

$$E_{ares1,2} = \frac{1}{2} + \varepsilon_d + I + \frac{\tau^2 \left[2\varepsilon_d \pm \sqrt{4\varepsilon_d^2 + 2\tau^2 - 1} \right]}{2 \left(1 - 2\tau^2 \right)}.$$
 (1.69)

Заметим, что хотя интенсивность s - f-взаимодействия формально не входит в выражения (1.69), при A = 0 множитель C_q становится общим для числителя и знаменателя

T, и эффекта Фано не возникает. Дополнительно, в данном случае эффект Фано не зависит от магнитного поля. В предельном случае $\tau = 1$, $\varepsilon_d = 0$ энергия минимума, $E_{ares1} = I$, совпадает с энергией, при которой становится ненулевой вероятность «заброса» системы в возбужденное состояние $c_{n\uparrow}^+ |0\rangle D_{10}$. Одновременно с этим, резонанс, T = 1, не возникает.

III). Транспортные характеристики изинговского димера с *s*-*f*- взаимодействием гейзенберговского вида

Теперь обратимся к ситуации, когда изинговский вид имеет слагаемое, описывающее обменное внутридимерное взаимодействие,

$$\hat{H}_D = I \left(S_1^z S_2^z \right) - g \mu_B H \left(S_1^z + S_2^z \right), \tag{1.70}$$

а s - f-обменное взаимодействие имеет гейзенберговский вид и выключено на втором узле устройства. При этом основное состояние димера двукратно вырождено, т.к. энергией $E_{00} = -I/4$ обладают два состояния: $|\uparrow\downarrow\rangle$ и $|\downarrow\uparrow\rangle$. Возбужденное состояние $|\uparrow\uparrow\rangle$ в магнитном поле имеет энергию $E_{11} = I/4 - g\mu_B H$.

Рассмотрим транспортные свойства, когда изначально система находится в состоянии $c_{n\uparrow}^+ |0\rangle |\downarrow\uparrow\rangle$ ($n \leq 0$). В этом случае в силу рассеянии электрона только на первом узле состояние $c_{n\uparrow}^+ |0\rangle |\uparrow\downarrow\rangle$ не дает вклад в транспортные свойства. Уравнения же на амплитуды прохождения $t_{\downarrow\uparrow}$ и $t_{\uparrow\uparrow}$ записываются следующим образом

$$\left(E \cdot \hat{I} - \hat{H}_{eff}\right) \cdot \begin{pmatrix} e^{ik} t_{\downarrow\uparrow} \\ e^{is} t_{\uparrow\uparrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{i\tau^2 \sin k e^{ik}}{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \ \hat{H}_{eff} = \begin{pmatrix} \varepsilon_k - A/4 & A/2 \\ A/2 & \varepsilon_s - A/4 \end{pmatrix}, \ (1.71)$$

где $\varepsilon_s = \varepsilon_d + \frac{I}{2} + h + \frac{1}{2} (1 - \tau^2 e^{is})$. В системе (1.71) волновые вектора k и s удовлетворяют дисперсионным соотношениям

$$E = (1 - \cos k) / 2;$$

$$E = I/2 + h + (1 - \cos s) / 2,$$
(1.72)

В результате коэффициент прохождения при малых энергиях налетающего электрона

равен

$$T_{\downarrow\uparrow} = |t_{\downarrow\uparrow}|^2 = \frac{\varepsilon_{k2}^2 \left(C_s + A/4\right)^2}{\varepsilon_{k2}^2 \left(C_s + A/4\right)^2 + \left[\left(C_k + A/4\right) \left(C_s + A/4\right) - \left(A/2\right)^2\right]^2},\tag{1.73}$$

где $C_s = E - \varepsilon_s$. Энергии антирезонансов Фано являются корнями уравнения $C_s + A/4 = 0$ и равны

$$E_{ares1,2} = \frac{1}{2} + \frac{I}{2} + h + \varepsilon_d - \frac{A}{4} + \frac{\tau^2 \left[2\varepsilon_d - \frac{A}{2} \pm \sqrt{\left(2\varepsilon_d - \frac{A}{2}\right)^2 + 2\tau^2 - 1} \right]}{2\left(1 - 2\tau^2\right)}.$$
 (1.74)

Подчеркнем, что из (1.73) следует невозможность деструктивной интерференции при



Рис. 1.15: Общий коэффициент прохождения T в низкоэнергетической области, когда \hat{H}_{sf} имеется только на первом узле, а \hat{H}_D имеет изинговский вид, t = -0.2 эВ, I = 0.0625, A = 0.125, $h \simeq 3 \cdot 10^{-3}$.

A=0 (аналогично (1.68)). Если $\tau=1,\,\varepsilon_{d}=0,$ то

$$\widetilde{T}_{\downarrow\uparrow} = \frac{4\widetilde{\varepsilon}_{k2}^2 \left(\widetilde{C}_s - A/4\right)^2}{4\widetilde{\varepsilon}_{k2}^2 \left(\widetilde{C}_s - A/4\right) + (A/4)^2 \left(3A/4 + \widetilde{C}_s\right)^2},\tag{1.75}$$

где $\tilde{C}_s = \sqrt{(I/2 + h - E)(I/2 + h - E + 1)}$. Из формулы (1.75) видно, что, в отличие от ситуации с изинговским s - f-взаимодействием, рассмотренным выше, в данном случае может наблюдаться как резонанс коэффициента прохождения, так и антирезонанс. Тип особенности определяется знаком A. Если A > 0 (антиферромагнитный характер связи), то при энергии, равной

$$E_{min} = I/2 + h + \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 + \left(\frac{A}{2}\right)^2} \right), \qquad (1.76)$$

наблюдается минимум (штрих-пунктирная кривая на рис. 1.15). Тогда как в случае ферромагнитного характера s - f-связи, A < 0 (сплошная кривая на рис. 1.15), возникает максимум при энергии

$$E_{max} = I/2 + h + \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 + \left(\frac{3A}{2}\right)^2} \right).$$
(1.77)

Выключение магнитного поля качественно не влияет на поведение T, лишь немного изменяя положения особенностей (пунктирная и штриховая кривые на рис. 1.15). Заметим, что ширина резонансного пика на рисунке 1.15 намного больше ширины пика на рисунке 1.14, когда оба обменных спин-спиновых взаимодействия имеют гейзенберговскую форму.

IV). Транспорт через изинговский димер в случае изинговского *s*-*f*-обменного взаимодействия

В заключении обратимся к случаю, когда и \hat{H}_{sf} , и \hat{H}_D имеют изинговский вид. Пусть первоначально система находилась в состоянии $c_{n\uparrow}^+ |0\rangle |\downarrow\uparrow\rangle$ ($n \leq 0$). Тогда по причине отсутствия у рассеивающего потенциала (1.66) слагаемых, отвечающих за спин-флип процессы, рассеяние электрона будет осуществляться только на потенциальном рельефе исходного состояния, а коэффициент прохождения имеет наиболее простой вид

$$T = \frac{\varepsilon_{k2}^2}{\varepsilon_{k2}^2 + (C_k + A/4)^2}.$$
 (1.78)

При этом полное отражение наблюдается только в тривиальных случаях E = 0 и E = 1.

Таким образом, как следует из рассмотренных частных случаев, эффект Фано возникает, если $A \neq 0$ и хотя бы одно из двух обменных взаимодействий содержит спин-флип компоненты. В то же время, индуцирование магнитных полем дополнительных резонансов Фано возможно, только если оба этих гамильтониана имеют гейзенберговскую форму.

1.4.2 Геометрия разломного контакта

Вернемся к задаче о транспорте спин-поляризованного электрона, который рассеивается на обоих узлах спинового димера. Такая геометрия характерна для экспериментов с разломными контактами, внутрь которых осаждается исследуемый молекулярный комплекс [127]. Для начала обратимся к наиболее общей ситуации, когда оба обменных взаимодействия имеют гейзенберговскую форму. Затем, следуя ходу рассуждений, намеченному в предыдущем параграфе, проанализируем изменения, которые возникают в ряде частных случаев, отличающихся видом обменных гамильтонианов.

I). Транспорт электрона, взаимодействующего с обоими спиновыми моментами димера посредством гейзенберговского *s* – *f*- взаимодействия

Перепишем систему уравнений (1.18) в форме, позволяющей вывести эффектив-

ный гамильтониан. В результате, имеем

$$\begin{split} |\Psi_{dev}\rangle &= \tau \hat{G} |\phi_L\rangle, \ \hat{G} = \left(E \cdot \hat{I} - \hat{H}_{eff}\right)^{-1}, |\Psi_{dev}\rangle = \left(w_{1\uparrow} \ u_{1\uparrow} \ v_{1\downarrow} \ w_{2\uparrow} \ u_{2\uparrow} \ v_{2\downarrow}\right)^T, \quad (1.79) \\ \hat{H}_{eff} &= \begin{pmatrix} \varepsilon_k & A_1 & -\sqrt{2}A_1 & -\tau_d/4 & 0 & 0 \\ A_1 & \varepsilon_q & \sqrt{2}A_1 & 0 & -\tau_d/4 & 0 \\ -\sqrt{2}A_1 & \sqrt{2}A_1 & \varepsilon_p - A_1 & 0 & 0 & -\tau_d/4 \\ -\tau_d/4 & 0 & 0 & \varepsilon_k & -A_1 & \sqrt{2}A_1 \\ 0 & -\tau_d/4 & 0 & -A_1 & \varepsilon_q & \sqrt{2}A_1 \\ 0 & 0 & -\tau_d/4 & \sqrt{2}A_1 & \sqrt{2}A_1 \ \varepsilon_p - A_1 \end{pmatrix}, |\phi_L\rangle = \begin{pmatrix} \frac{ie^{ik} \sin k}{2} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \end{split}$$

где $A_1 = A/4$, $\tau_d = t_d/t$, $\varepsilon_k = \varepsilon_d + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tau^2}{2} e^{ik} \right)$, $\varepsilon_q = \varepsilon_d + I + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tau^2}{2} e^{iq} \right)$, $\varepsilon_p = \varepsilon_d + I + h + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tau^2}{2} e^{ip} \right)$.

На рисунке 1.16 показана зависимость коэффициента прохождения от энергии поля затвора при E < I. Из сравнения с рис. 1.12b следует, что с ростом количества центров неупругого рассеяния увеличивается число резонансов Фано, а именно: удваивается число особенностей, реализующихся как при h = 0, так и возникающих при $h \neq 0$.

Положение всех резонансов, симметричных и асимметричных, как и прежде, определяется решениями уравнения $Re\{z\} - E = 0$ (см. рисунок 1.17а), где z - собственные энергии эффективного гамильтониана \hat{H}_{eff} в формуле (1.79). В свою очередь, ширины резонансов на рис. 1.16 хорошо коррелируют со значениями величины $-2Im\{z\}$ в точках 'A - F', поведение которой представлено на рис. 1.17b. В частности, как уже отмечалось в предыдущем параграфе, причиной индуцирования магнитным полем пиков Фано (в данном случае двух) является то, что при $h \neq 0$ взаимодействие ССК с состоянием непрерывного спектра становится отличным от нуля. На вставке рис. 1.17b в нулевом магнитном поле мнимые части двух энергий z равны нулю, $-2Im\{z^{A,D} (h = 0)\} = 0$ (см. штриховые кривые). После включения поля $-2Im\{z^{A,D} (h \neq 0)\} = 0$ (см. сплошные кривые).

Чтобы получить и проанализировать аналитическое решение задачи неупругого рассеяния спин-поляризованного электрона на двух спиновых моментах димера, в качестве упрощения будем полагать, что $\tau = \tau_d = 1$. В то же время, принимая во



Рис. 1.16: Зависимость $T = T(\varepsilon_d)$ при E = 0.2, когда s - f-взаимодействие имеет место на обоих узлах устройства. На вставке: индуцирование одного из двух пиков Фано магнитным полем. Точки 'A - F' отвечают решениям уравнения $Re\{z\} - E = 0$ на рис. 1.17а. Другие параметры: t = -0.2 эВ, A = I = 0.25, $\tau = 0.5$, $\tau_d = 0.75$, h = 0.01.

внимание важность одноэлектронной энергии на узлах устройства ε_d как параметра, изменение которого моделирует действие электрического поля затвора, в дальнейшем будем предполагать $\varepsilon_d \neq 0$. Тогда, с учетом соотношений

$$r_{00} = e^{ik} \left(w_{1\uparrow} - e^{ik} \right), \ t_{00} = e^{-2ik} w_{2\uparrow}, \ r_{10(11)} = e^{iq(p)} u_{1\uparrow} \left(v_{1\downarrow} \right), \ t_{10(11)} = e^{-2iq(p)} u_{2\uparrow} \left(v_{2\downarrow} \right)$$

система уравнений в формуле (1.79) записывается в следующем виде

$$\begin{bmatrix} 1 + 3A^2 - (e^{-ik} + 4\varepsilon_d)^2 \end{bmatrix} e^{2ik} t_{00} + AB_1 e^{2iq} t_{10} - \sqrt{2}AB_2 e^{2ip} t_{11} = e^{2ik} - 1, -AB_1 e^{2ik} t_{00} + \begin{bmatrix} 1 - A^2 - \omega_q^2 \end{bmatrix} e^{2iq} t_{10} - \sqrt{2}AB_3 e^{2ip} t_{11} = 0,$$
(1.80)
$$\sqrt{2}AB_2 e^{2ik} t_{00} - \sqrt{2}AB_3 e^{2iq} t_{10} + \begin{bmatrix} 1 - (\omega_p - A)^2 \end{bmatrix} e^{2ip} t_{11} = 0,$$

где $\omega_q = 4\varepsilon_d + e^{-iq}, \ \omega_p = 4\varepsilon_d + e^{-ip}, \ B_1 = e^{-ik} - e^{-iq} + 2A, \ B_2 = e^{-ik} - e^{-ip} + 2A,$



Рис. 1.17: Поведение реальных и мнимых частей собственных энергий эффективного гамильтониана устройства (1.79). (a) $Re\{z\} - E$; (b) $-2Im\{z\}$. Штриховые (сплошные) кривые построены для случая нулевого (ненулевого) магнитного поля. На вставке: влияние магнитного поля на мнимые части двух энергий z. Использованы параметры рис. 1.16.

 $B_3 = \omega_q + \omega_p$. В результате, при E < I коэффициент прохождения T определяется одной амплитудой t_{00} : $T = |t_{00}|^2$. Поэтому, после решения системы (1.80) находим

$$T = \frac{4\gamma^2 \sin^2 k}{[\gamma b_2 - 2A^2 a_1 b_1]^2 + [\gamma a_2 + A^2 (b_1^2 - a_1^2)]^2},$$
(1.81)

где

$$\gamma = A\delta_{p}(\omega_{q} + \omega_{p})^{2} + A^{2} + \omega_{q}^{2} - 1, \ \delta_{p} = 2A\left(1 - (\omega_{p} - A)^{2}\right)^{-1},$$

$$a_{1} = \delta_{p}(\omega_{q} + \omega_{p})\lambda_{p}(k) - \lambda_{q}(k), \ \lambda_{q}(k) = 2A + \cos k - e^{-iq},$$

$$b_{1} = \left[1 - \delta_{p}(\omega_{q} + \omega_{p})\right]\sin k, \ b_{2} = 2\sin k\left[4\varepsilon_{d} + \cos k - A\delta_{p}\lambda_{p}(k)\right], \qquad (1.82)$$

$$a_{2} = 1 + 3A^{2} - (4\varepsilon_{d} + \cos k)^{2} + (1 - A\delta)\sin^{2}k + A\delta_{p}\lambda_{p}^{2}(k).$$

В нулевом магнитном поле h = 0 коэффициент прохождения записывается в более простом виде

$$T = \frac{4G_q^2 \sin^2 k}{4Z_q^2(k) \sin^2 k + R_q^2(k)}.$$
 (1.83)

Здесь использованы следующие обозначения

$$G_{q} = (\omega_{q} - 2A)^{2} - 3A^{2} - 1, \ Z_{q}(k) = G_{q}[\omega_{q} - 2A + \lambda_{q}(k)] + 3A^{2}\lambda_{q}(k),$$
$$R_{q}(k) = (G_{q} + 3A^{2}) \left[\sin^{2}k - \lambda_{q}^{2}(k)\right] + G_{q}\left[1 + 3A^{2} + \lambda_{q}^{2}(k) - (\omega_{q} - 2A + \lambda_{q}(k))^{2}\right].$$

Зависимость коэффициента прохождения от энергии при h = 0 показана на рисунке 1.18 пунктирной линией. Видно, что монотонное возрастание T при увеличении кинетической энергии электрона от нулевого значения сменяется всплеском T до максимального значения и резким падением до нуля. После этого зависимость T(E) возвращается к монотонно возрастающей. Полное прохождение (T = 1) и отражение (T = 0) соответствует резонансу и антирезонансу Фано, соответственно, и связано, как уже отмечалось, с интерференцией состояний непрерывного и дискретного спектра. Значение энергии, при котором имеет место антирезонанс, находится из условия обращения G_q в нуль, что дает два значения энергии:

$$E_{ares1,2} = I - \frac{(\alpha_{1,2} - 1)^2}{4\alpha_{1,2}}, \quad \alpha_{1,2} = 2A - 4\varepsilon_d \pm \sqrt{3A^2 + 1}, \quad (1.84)$$

Значение E_{ares1} соответствует энергии антирезонанса на рисунке 1.18 при h = 0. Вблизи этого же значения находится и резонанс Фано, когда T = 1. Второе значение E_{ares2}



Рис. 1.18: Модификация энергетической зависимости коэффициента прохождения электрона при включении магнитного поля. На вставке показано структура индуцированного асимметричного пика. t = -0.2 эВ, I = A = 0.125, h = 0.005, $\varepsilon_d = -0.125$, V = 0.

для параметров рисунка 1.18 не попадает в интервал 0 < E < I. Однако, увеличивая

параметр s - f-взаимодействия, можно добиться появления соответствующего антирезонанса коэффициента прохождения в низкоэнергетической области, как это следует из зависимости $E_{ares2}(A)$ (штриховая кривая на рисунках 1.19a,b). Кроме того, $E_{ares2} \in [0; I]$ при $-0.5 < \varepsilon_d < -0.7$ (штриховая кривая на рисунке 1.19c).



Рис. 1.19: Зависимости энергий антирезонансов от параметров A (a, b, d) и ε_d (c). t = -0.2эВ, I = 0.125, h = 0.005, V = 0; a). $\varepsilon_d = 0$; b). $\varepsilon_d = -0.125$; c). A = 0.125; d). $\varepsilon_d = -0.375$.

В магнитном поле происходит расщепление триплетных состояний спинового димера, приводящее к появлению смещенных значений энергий дискретного спектра. Поэтому, кроме смещения отмеченных выше точек резонансов и антирезонансов Фано при $h \neq 0$ открывается возможность возникновения новых (индуцированных магнитным полем) резонансов и антирезонансов Фано. На рис. 1.18 этот эффект проявился в том, что в окрестности $E \simeq 0.1$ возник очень узкий всплеск и провал в зависимости T(E) (сплошная кривая на рис. 1.18). В увеличенном масштабе индуцирование магнитным полем резонанса и антирезонанса Фано продемонстрировано на вставке рис. 1.18.

Приближенные значения резонансных энергий, при которых возникает асимметричный пик Фано в магнитном поле, можно найти, если переписать выражение (1.81) в следующем виде

$$T = \frac{4 \left[G_q \Omega_q + \Delta \cdot \Phi\right]^2 \sin^2 k}{4 \left[\Omega_q Z_q + \Delta \cdot F\right]^2 \sin^2 k + \left[\Omega_q R_q + \Delta \cdot \Psi\right]^2},\tag{1.85}$$

где

$$\Delta = \omega_p - \omega_q, \quad \Omega_q = 1 - (\omega_q + A)^2.$$

Конкретный вид Φ , F и Ψ легко устанавливается из сопоставления выражений (1.81) и (1.85), но в данном рассуждении не является существенным. Важно лишь то, что условие на индуцированный магнитным полем антирезонанс Φ ано принимает вид

$$G_q \Omega_q = -\Delta \Phi. \tag{1.86}$$

Если $\Delta = 0$, то это условие выполняется при $G_q = 0$, либо при $\Omega_q = 0$. Однако, второе уравнение не приводит к антирезонансу, поскольку такие же множители имеются и в знаменателе (1.85).

Если же $\Delta \neq 0$, то из-за различия выражений для Φ, F и Ψ единых сокращающихся множителей нет, и имеется возможность для реализации второго решения. При этом резонансные значения энергии равны

$$E_{ares3,4} = I + \frac{(\alpha_{3,4} + 1)^2}{4\alpha_{3,4}}, \quad \alpha_{3,4} = A + 4\varepsilon_d \mp 1, \tag{1.87}$$

Значение E_{ares3} для параметров рисунка 1.18 приближенно равно 0.099, что меньше фактической энергии антирезонанса на величину порядка *h*. Антирезонанс, отвечающий значению E_{ares4} , для тех же параметров будет наблюдаться или при больших отрицательных величинах *A* (ε_d фиксировано, пунктирная кривая на рисунках 1.19a,b), или при отрицательных ε_d (*A* фиксировано, пунктирная кривая на рисунке 1.19c).

Стоит отметить существенное влияние одноэлектронной энергии на узлах димера ε_d (по сути энергии электрического поля затвора) на положение антирезонансов

Фано. Из зависимостей на рисунке 1.19а следует, что при $\varepsilon_d = 0$ резонансные особенности последовательно появляются в низкоэнергетической области с увеличением A. Но, как видно, одновременное нахождение в этом диапазоне энергий двух антирезонансов возможно только когда $\varepsilon_d \neq 0$ (см. рисунки 1.19b,с). На рисунке 1.19d изображена ситуация, когда при $A = \pm 1$ энергии широкого и узкого (индуцированного магнитным полем) антирезонансов совпадают. Как следствие, зависимость T(E)в окрестности $E \simeq 0.083$ характеризуется резким пиком резонансного прохождения, наведенный магнитным полем, при этом фоновое значение T стремиться к нулю. Данный эффект служит одной из причин для формирования в рассматриваемой системе аномально высоких величин магнитосопротивления (см. параграф 1.5).



Рис. 1.20: Зависимости проводимости G от энергии электрического поля затвора ε_d для параметров рисунка 1.19с, $E_F = 0.06$.

Чтобы проанализировать влияние напряжения затвора на проводящие свойства димера воспользуемся формулой Ландауэра (1.36), применимой для случая малых напряжений смещения V и низких температур. Вычисленная с помощью этой формулы проводимость как функция ε_d продемонстрирована на рисунке 1.20 в единицах кванта проводимости $G_0 = e^2/h$. При построении графика использовались параметры рисунка 1.19с, а энергия Ферми взята равной 0.06. На графике выделяются четыре асимметричных пика Фано, располагающиеся в окрестности энергий антирезонансов $E_{ares1}(E_F)$, $E_{ares2}(E_F)$, $E_{ares3}(E_F)$, $E_{ares4}(E_F)$ (см. рис. 1.19с). Два широких пика с энергиями $\varepsilon_d \simeq -0.45$ и $\varepsilon_d \simeq 0$ остаются в предельном случае A = 0. В этом пределе энергия ε_d правого пика в точности равна нулю, что соответствует свободному движению электрона, и T = 1 при любой энергии входящего электрона. Левый пик возникает при таком значении ε_d , при котором энергия Ферми E_F равна резонансной энергии $E_{res} = \varepsilon_d + 1/2$ (см. пункт 1.4.2.IV и рис. 1.23), что соответствует резонансному прохождению над ямой (барьером) глубиной (высотой) ε_d [90].

II). Транспорт электрона, взаимодействующего с димером посредством изинговского *s* – *f*- взаимодействия

Если в результате s - f-взаимодействия в системе электрон+димер исключены процессы переворота спинов, то, как уже обсуждалось в пункте 1.4.1.II, состояние $c_{n\downarrow}^+ |0\rangle D_{11}$ не дает вклада в транспортные характеристики. С учетом этого система из двух уравнений на амплитуды прохождения t_{00} , t_{10} записывает в виде

$$\begin{pmatrix} (C_1C_2 - 1)e^{2ik} & A(C_3 - C_1)e^{2iq} \\ -A(C_3 - C_1)e^{2ik} & (C_3C_4 - 1)e^{2iq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{00} \\ t_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2i\sin ke^{ik} \\ 0 \end{pmatrix}$$
(1.88)

где $C_1 = 4\varepsilon_d + e^{-ik} + A$, $C_2 = 4\varepsilon_d + e^{-ik} - A$, $C_3 = \omega_q + A$, $C_4 = \omega_q - A$. Отсюда следует, что амплитуда t_{00} и коэффициент прохождения T в низкоэнергетической области представляются следующим образом

$$t_{00} = \frac{-2ie^{-ik} \left(C_3 C_4 - 1\right) \sin k}{\left(C_1 C_2 - 1\right) \left(C_3 C_4 - 1\right) + \left[A \left(C_3 - C_1\right)\right]^2},\tag{1.89}$$

$$T = \frac{4\sin^2 k \left[C_3 C_4 - 1\right]^2}{\left[D^2 - e^{-2iq} + 2D_1 \cos k + C_5 \cos 2k\right]^2 + 4 \left[D_1 + C_5 \cos k\right]^2 \sin^2 k},$$
(1.90)



Рис. 1.21: Зависимости общего коэффициента прохождения T(E) и его парциальных составляющих $T_{00}(E)$, $T_{10}(E)$, когда \hat{H}_{sf} действует обоих узлах и имеет изинговский вид для параметров рисунка 1.14. На вкладке: антирезонанс Фано.

где $C_5 = C_3C_4 + A^2 - 1, D = 4\varepsilon_d\omega_q - A^2 - 1, D_1 = D\omega_q + e^{-iq}$. Из (1.90) следует, что учет s - f-взаимодействия на обоих узлах димера вместо одного (см. пункт 1.4.1) приводит к появлению двух антирезонансов Фано. Их энергии равны

$$E_{ares1,2} = I - \frac{(\alpha_{1,2} - 1)^2}{4\alpha_{1,2}}, \quad \alpha_{1,2} = \pm \sqrt{A^2 + 1} - 4\varepsilon_d.$$
(1.91)

Также можно получить точное выражение для резонансной энергии, при которой наблюдается полное прохождение (T = 1), в случае $\varepsilon_d = 0$,

$$E_{res} = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left(1 + \frac{1}{A^2 + 1} \right) \left(2I - \sqrt{A^2 + 4I^2 + 1} \right).$$
(1.92)

На рисунке 1.21 представлены зависимости общего коэффициента прохождения T(E)и его парциальных составляющих $T_{00}(E)$, $T_{10}(E)$, когда \hat{H}_{sf} действует обоих узлах и имеет изинговский вид. В низкоэнергетической области возникает асимметричный пик Фано, причем резонанс намного шире антирезонанса, показанного в большем разрешении по энергии на вкладке.

III). Транспорт электрона, взаимодействующего с изинговским димером посредством гейзенберговского *s* – *f*-взаимодействия

В отличие от ситуации, рассмотренной в пункте 1.4.1.III, учет s - f- взаимодействия в гейзенберговской форме с двумя спинами димера приводит к тому, что амплитуда прохождения $t_{\uparrow\downarrow}$ становится отличной от нуля. Таким образом, система уравнений на амплитуды прохождения $t_{\downarrow\uparrow}$, $t_{\uparrow\downarrow}$, $t_{\uparrow\uparrow}$ имеет вид

$$\begin{pmatrix} (C_1C_2 - 1) e^{2ik} & 4A^2 e^{2ik} & 2AC_6 e^{2ip} \\ 0 & (C_1C_2 - 1) e^{2ik} & 2AC_1 e^{2ip} \\ 2AC_1 e^{2ik} & 2AC_6 e^{2ik} & (C_6^2 - 1) e^{2ip} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{\downarrow\uparrow} \\ t_{\uparrow\downarrow} \\ t_{\uparrow\uparrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2i \sin k e^{ik} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
(1.93)

где $C_6 = 4\varepsilon_d - A + e^{-ip}$, а волновые вектора k, p удовлетворяют дисперсионным соотношениям (1.72). В низкоэнергетической области амплитуды прохождения $t_{\downarrow\uparrow}$, $t_{\uparrow\downarrow}$, определяющие T, записываются следующим образом

$$t_{\downarrow\uparrow} = \frac{-2ie^{-ik}L_1 \sin k}{\left(C_1 C_2 - 1\right) \left(4A^2 C_1 C_6 + L_1\right) - \left(4A^2 C_1\right)^2},\tag{1.94}$$

$$t_{\uparrow\downarrow} = \frac{8A^2 C_1^2 i e^{-ik} \sin k}{\left(C_1 C_2 - 1\right) \left(4A^2 C_1 C_6 + L_1\right) - \left(4A^2 C_1\right)^2},\tag{1.95}$$

где $L_1 = 4A^2C_1C_6 - (C_6^2 - 1) (C_1C_2 - 1)$. Выражения на общий коэффициент прохождения T и его парциальные составляющие $T_{\downarrow\uparrow}$, $T_{\uparrow\downarrow}$ при 0 < E < I/2+h имеют громоздкий вид, что не позволяет провести их точный анализ на присутствие резонансных особенностей. Однако, в очередной раз обращаясь к работе [35], можно на качественном уровне объяснить невозможность реализации антирезонансов Фано в рассматриваемом случае. Принципиальное отсутствие энергий, при которых электрон испытывает полное отражение от потенциальной структуры димера (T = 0), связано с тем, что локализованное состояние, которому отвечает волновой вектор p, взаимодействует сразу с двумя состояниями континуума, относящимися к разным спиновым конфигурациям димера, $|\downarrow\uparrow\rangle$ и $|\uparrow\downarrow\rangle$. Следовательно, коэффициент прохождения в низкоэнергетической области может достигать максимума, неравного единице, при этом последующий спад T никогда не будет достигать нуля. Такое поведение коэффициента $T_{\uparrow\downarrow}$ (пунктирная



Рис. 1.22: Зависимости общего коэффициента прохождения T(E) и его парциальных составляющих $T_{\downarrow\uparrow}(E)$, $T_{\uparrow\downarrow}(E)$ в низкоэнергетической области, когда \hat{H}_{sf} действует обоих узлах, а \hat{H}_D имеет изинговский вид. t = -0.2 эВ, h = 0.005, I = A = 0.25, $\varepsilon_d = -0.65$.

кривая) имеет асимметричную форму резонансной кривой, свойственную пику Фано, однако, полного отражения и прохождения не возникает. В свою очередь, составляющая $T_{\downarrow\uparrow}$ и результирующий коэффициент T (пунктирная и сплошная кривые) имеют пики лоренцевой формы, характерные для резонансов Брейта-Вигнера.

IV). Транспорт электрона, взаимодействующего с изинговским димером посредством изинговского *s* – *f*-взаимодействия

Наконец, в ситуации, когда слагаемые, описывающие спин-флип процессы, отсутствуют в обоих обменных гамильтонианах, состояние, соответствующее падающей электронной волне, остается единственным возможным. Как следствие, коэффициент прохождения T для всей зоны W определяется лишь одной амплитудой прохождения



Рис. 1.23: Зависимость $T(A, \varepsilon_d)$, когда \hat{H}_{sf} и \hat{H}_D имеют изинговский вид. t = -0.2 эВ, E = 0.06.

и имеем наиболее простой вид по сравнению с тремя последними задачами,

$$T = \frac{4\sin^2 k}{\left[8\varepsilon_d + \alpha\cos k\right]^2 + \left[\alpha - 2\right]^2\sin^2 k},\tag{1.96}$$

где $\alpha = 16\varepsilon_d^2 - A^2$. Из формулы (1.96) следует, что полного отражения не возникает. С физической точки зрения это вытекает из отсутствия локализованных состояний в рассматриваемом случае. Энергии, при которых возможное полное прохождение, равны $E_{1,2} = \varepsilon_d + 1/2 \pm A \sqrt{1/4 - 1/\alpha}/2$. Рассмотрим два предельных случая: 1). A = 0: $E_{res} = \varepsilon_d + 1/2$; 2). $\varepsilon_d = 0$: $E_{res1,2} = 1/2 \pm \sqrt{A^2 + 4}/4$ - корни не попадают в интервал [0, 1].

При $A, \ \varepsilon_d \neq 0$ максимумов не наблюдается, как это видно на рисунке 1.23. Пик в точке $A = \varepsilon_d = 0$ соответствует свободному движению, а в точке $A = 0, \ \varepsilon_d = -0.44$ резонансное прохождение возникает, т.к. энергия падающей волны равна E_{res} , что ранее было отмечено в пункте 1.4.2.I.

1.5 Магнитосопротивление устройства со спиновым димером в качестве активного элемента



Рис. 1.24: Дифференциальная проводимость спин-димерной структуры. Параметры системы такие же, что и для рисунка 1.18, $E_F \simeq 0.045, T \simeq 0.3$ К.

Влияние магнитного поля на положение резонансных асимметричных пиков Фано, которое отражено на рисунках 1.16 и 1.18, позволяет сделать вывод о наличии значительного магнитосопротивления у рассмотренной системы. Магнитосопротивлением наноразмерной структуры, в частности, в спинтронике [91,92], называется следующая величина

$$MR = \left(\frac{G(h)}{G(0)} - 1\right) \times 100\%,$$
(1.97)

где G(h), G(0) - значения дифференциальной проводимости при $h \neq 0$ и h = 0, соответственно. Для нахождения G воспользуемся методом Ландауэра-Бюттикера, который уже применялся к рассматриваемой системе в пункте 1.2.4.

На рисунке 1.24 продемонстрировано изменение зависимости дифференциальной проводимости $G = \partial I(V)/\partial V$, измеренной в единицах кванта проводимости e^2/h , от напряжения смещения V при включении магнитного поля. Параметры системы тако-

вы, что при h = 0 энергии электронов, определяющих главный вклад в проводимость, находятся вблизи и справа от антирезонанса. Возрастание V приводит к тому, что антирезонанс проявляется сильнее, и проводимость падает. При дальнейшем повышении V начинает давать вклад резонанс Фано. Соответственно этому формируется немонотонное поведение дифференциальной проводимости (пунктирная линия). Включе-



Рис. 1.25: Магнитосопротивление MR(V) при тех же параметрах, что и на рис. 1.24.

ние магнитного поля приводит к смещению резонанса и антирезонанса Фано вправо (см.рис. 1.18). При этом магнитное поле может оказаться таким, что коэффициент прохождения при V = 0 будет иметь минимальное значение (антирезонанс Фано). В результате возникает такая модификация зависимости дифференциальной проводимости от напряжения смещения, что при включении магнитного поля, в окрестности малых V максимум G сменяется на минимум (сплошная кривая рисунка 1.24). Отмеченные эффекты лежат в основе того, что при включении магнитного поля возникает большое магнитосопротивление. Зависимость этой величины от напряжения смещения показана на рисунке 1.25. Этот результат в наглядной форме демонстрирует возможность реализации больших значений магнитосопротивления за счет сдвига в магнитном поле резонанса и антирезонанса Фано. При этом магнитосопротивление может приобретать отрицательные значения.



Рис. 1.26: Магнитосопротивление MR(h) для параметров рис. 1.24.

На рисунке 1.26 приведена зависимость магнитосопротивления от магнитного поля. Несимметричность зависимостей для V = 0 и $V \neq 0$ связана со сдвигом асимметричного пика в разные стороны при изменении направления **H**. В частности, отрицательный участок MR(h > 0) при V = 0 вызван сдвигом асимметричного пика Фано вправо, а это приводит к тому, что $T(E_F, h = 0) > T(E_F, h > 0)$ (см. рис. 1.18). Когда $V \neq 0$ пик Фано, смещается влево и при h = 0 в область энергий $E \in [E_F, E_F - eV]$ попадает только антирезонанс. В свою очередь, включение поля приводит к сдвигу пика вправо для h > 0, как уже было замечено выше, и к сдвигу влево для h < 0. В результате в интервал $[E_F, E_F - eV]$, соответствующий токонесущим состояниям, с возрастанием величины магнитного поля начинает попадать и резонанс, и антирезонанс. Как следствие, возникает пик магнитосопротивления (сплошная кривая при h > 0). Тогда как, при смене знака h и дальнейшем уменьшении значений поля в диапазон $E \in [E_F, E_F - eV]$ попадает область до антирезонанса с монотонным поведением, и T(E, h < 0) > T(E, h = 0).



Рис. 1.27: Влияние магнитного поля на вольт-амперную характеристику. Параметры системы: $t_L = t_R = -0.1$ эВ, $t_T = -0.125$, $t_d \simeq -0.186$, $h = 6.25 \times 10^{-3}$, I = 0.187, A = 0.75, $\varepsilon_d = -0.525$, $E_F \simeq 0.13$, $T \simeq 3$ мК.

Как отмечалось в пункте 1.4.2.І еще одним случаем, когда возникают значительные величины магнитосопротивления, является совпадение энергий антирезонансов, индуцируемого магнитным полем и существующего при h = 0 (см. рис. 1.19d). При этом в силу узкости асимметричного пика Фано, наведенного магнитным полем, возникнет максимум резонансного прохождения, в окрестности которого $T \rightarrow 0$. Тогда следует ожидать сильного увеличения проводимости. На рисунках 1.27 и 1.28 представлены вольт-амперная характеристика и магнитосопротивление для такого случая. Скачок тока, имеющий место при $|V| \simeq 0.1$ мВ (сплошная кривая на рисунке 1.27), связан с тем, что вклад в токонесущие состояния начинает давать состояние с резонансной энергией. Видно, что изменение сопротивления в магнитном поле может достигать аномально высоких значений порядка $10^5\%$ (см. рис. 1.28).



Рис. 1.28: Магнитосопротивление при тех же параметрах системы, что и на рис. 1.27.

1.6 Резюме

- 1. На основе точного решения задачи о транспорте спин-поляризованного электрона через область, содержащую спиновую систему с синглетным, либо с квадрупольным основным состоянием, изучена роль процессов неупругого рассеяния, индуцирующих переходы в возбужденные магнитные состояния системы. Показано, что интерференционное взаимодействие между состояниями континуума и состояниями, локализованными в области устройства (спиновая структура + электронные уровни), приводит к спиновому эффекту Фано.
- 2. Показано, что положение резонансов Фано и их ширина определяются действительными и мнимыми частями собственных энергий эффективных гамильтонианов рассмотренных спиновых структур. Установлено, что индуцирование магнитным полем резонансов Фано, наблюдаемое для спин-димерной системы, вызвано существованием связанных состояний в континууме. Показано, что при снятии вырождения спинового триплета в магнитном поле время жизни таких состояний становится конечным.
- Установлена важная роль спин-флип процессов при формировании спинового эффекта Фано. Показано, что индуцирование пиков Фано магнитным полем имеет
место только тогда, когда спины димера связаны между собой и с транспортируемым электроном гейзенберговским взаимодействием. В свою очередь, резонансы Фано, устойчивые к действию поля, могут возникать и в ситуациях, когда одна из двух связей описывается гамильтонианом изинговского типа.

4. Методом Ландауэра-Бюттикера рассчитано магнитосопротивление устройства, содержащего спиновый димер в качестве активного элемента. Показано, что спиновый эффект Фано индуцирует как положительное, так и отрицательное магнитосопротивление, величина которого может достигать аномально больших значений.

Глава 2

РОЛЬ ПРОЦЕССОВ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ПРИ КВАНТОВОМ ТРАНСПОРТЕ ЧЕРЕЗ СПИНОВЫЕ СТРУКТУРЫ АТОМНОГО МАСШТАБА

2.1 Особенности транспортных свойств спиновых структур атомного масштаба

Приближение к технологическому пределу применения полупроводниковых полевых транзисторов привело к необходимости поиска альтернативных материалов, способных стать базовыми в электронных приборах и устройствах нового поколения. В качестве таких перспективных систем предлагаются наногетероструктуры, содержащие слои ферромагнитного металла [93] или магнитного полупроводника [94], а также системы джозефсоновского типа [95–97]. В сфере записи и хранения информации решение отмеченной проблемы видится, в частности, в создании новых устройств памяти, которые по основным характеристикам, таким как размеры, энергопотребление, время считывания, число циклов перезаписи будут превосходить сегодняшние полупроводниковые образцы (например, флэш-память).

Значительные достижения в технологии и существенное расширение экспериментальных возможностей привело к тому, что в последние десятилетия объектами пристального внимания исследователей стали магнитные атомные и молекулярные комплексы, а также отдельные частицы. Такие структуры адсорбируются либо в область разломного контакта [98], либо располагаются на поверхности и зондируются сканирующим туннельным микроскопом (СТМ) [99]. Иногда магнитный ион помещают внутрь квантовой точки [100, 101]. В качестве такого центра может выступать атом переходного или редкоземельного металла (например, Co, Mn, Fe, Ce), а также молекула, у которой магнитное ядро окружено лигандами (например, фталоцианины Co, Fe; Mn₁₂).

Экспериментальные исследования магнитных систем атомного масштаба с применением СТМ выявили ряд резонансных эффектов в транспортных характеристиках этих структур. Природа подобных особенностей связана неупругим рассеянием электронов, которое обусловлено взаимодействием их спинов со спиновыми моментами атомной структуры [88]. Было показано, что спин-флип рассеяние транспортируемых электронов на потенциальном профиле структуры позволяет управлять ее магнитным состоянием [102]. Проведенные эксперименты показали принципиальную выполнимость контроля спинового состояния систем вплоть до отдельного атома. В частности, в работе [103] была продемонстрирована возможность записи и считывания информации на антиферромагнитной цепочке из восьми атомов за счет пропускания спин-поляризованного тока от иглы СТМ, подведенной к отдельному атому такой цепочки. Таким образом, реализован магнитный бит атомного масштаба, не требующий приложения внешнего магнитного поля для записи информации, как это происходит с магнитными доменами в современных жестких дисках.

Как следует из экспериментальных данных, при теоретическом рассмотрении транспортных свойств систем атомного масштаба существенным является учет процессов перехода этих систем в возбужденные состояния. Такие переходы индуцируются за счет взаимодействия транспортируемых электронов с зарядовыми и спиновыми степенями свободы устройства. В результате возникает ситуация, когда протекание туннельного тока приводит к распределению заселенностей энергетических состояний устройства, существенно отличающемуся от равновесного. В частности, учет зарядовых и спиновых корреляций в условиях неравновесности приводит к таким эффектам, как кулоновская блокада и резонанс Кондо [49,104,105]. Ранее было показано, что наличие колебательных степеней свободы у молекулы проявляется в модификации ее вольтамперных характеристик (ВАХ) вследствие возбуждения молекулы при протекании через нее туннельного тока [106,107].

Поскольку в реальных условиях структуры атомного масштаба находятся в туннельном контакте с металлическими электродами, то необходимо принимать во внимание статистические свойства электронных ансамблей в таких электродах. Это означает, что рассеяние электрона на магнитной структуре должно рассчитываться с учетом того обстоятельства, что взаимодействие предшествующих электронов со структурой, вообще говоря, могло изменить ее потенциальный профиль. В результате многократного повторения процессов рассеяния электронов на ренормированном потенциальном профиле структуры устанавливается неравновесное распределение занятости состояний магнитного устройства, существенно отличающееся от исходного равновесного. Соответственно этому появляются ренормировки ВАХ, которые становятся зависящими от свойств индуцированного туннельным током неравновесного состояния магнитного устройства и свидетельствуют о наличии переходов между возбужденными состояниями [102]. Дополнительным фактором, который требуется учитывать при описании транспортных свойств магнитных атомных структур, является влияние кристаллического окружения на магнитные свойства адсорбата. В частности, в зависимости от величины и характера связи адатома с подложкой может меняться тип анизотропии [108] или происходить экранировка магнитного момента вследствие Кондо-корреляций [109].

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

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

2.2 Подход Келдыша для описания неравновесных систем, содержащих спиновые структуры атомного масштаба

2.2.1 Гамильтониан системы

Исследуем эффекты неравновесности при туннельном транспорте электронов через устройство во внешнем магнитном поле **H**. В данной главе, как и в предыдущей, в качестве исследуемой структуры будут рассмотриваться две: 1) одиночный спиновый момент S = 1, характеризующийся легкоосной анизотропией с параметром D за счет влияния кристаллического окружения [7–9]; 2) пара спиновых моментов, $S_1 = S_2 = 1/2$, связанных обменным антиферромагнитным взаимодействием с интенсивностью I [15,18]. Общая форма гамильтониана системы записывается как

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{T} + \hat{V}, \qquad \hat{H}_0 = \hat{H}_L + \hat{H}_D + \hat{H}_R.$$
 (2.1)

Входящие в \hat{H}_0 операторы \hat{H}_L и \hat{H}_R описывают электроны проводимости в левом и правом парамагнитных однозонных металлических контактах, соответственно,

$$\hat{H}_L = \sum_{k\sigma} \xi_{Lk\sigma} c^+_{k\sigma} c_{k\sigma}, \quad \hat{H}_R = \sum_{p\sigma} \xi_{Rp\sigma} d^+_{p\sigma} d_{p\sigma}, \qquad (2.2)$$

где $c_{k\sigma}(d_{p\sigma})$ - оператор уничтожения электрона в левом (правом) контакте с волновым вектором k(p) и проекцией спина σ ; $\xi_{Lk\sigma} = \varepsilon_{Lk} - \sigma g_e \mu_B H - \mu$, $\xi_{Rp\sigma} = \varepsilon_{Rp} - \sigma g_e \mu_B H - \mu$ - одноэлектронные энергии в левом и правом контакте соответственно, отсчитанные от уровня химпотенциала μ и учитывающие расщепление энергии по проекции спина электрона $\sigma = \pm 1/2$ в магнитном поле; g_e - электронный g-фактор в контактах, μ_B - магнетон Бора. В дальнейшем предполагается, что контакты представляют собой однозонные парамагнитные металлы с шириной зоны $W = 4 | t | \sim 1$ эВ (t - интеграл перекрытия электронных волновых функций на соседних узлах в контактах), значительно превышающей характерные энергетические параметры в системе.

Второе слагаемое в \hat{H}_0 является гамильтонианом устройства

1).
$$\hat{H}_D = \sum_{\sigma} \xi_{d\sigma} n_{\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} + D (S^z)^2 - g \mu_B H S^z + A (\sigma \mathbf{S}),$$
 (2.3)
2). $\hat{H}_D = \sum_{j=1}^2 \left\{ \sum_{\sigma} \xi_{d\sigma} a^+_{j\sigma} a_{j\sigma} + U n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \right\} + t_d \sum_{\sigma} \left(a^+_{1\sigma} a_{2\sigma} + a^+_{2\sigma} a_{1\sigma} \right) + U_{12} n_1 n_2 + H (\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2) + \sum_{j=1}^2 \left\{ -g \mu_B H S^z_j + A (\sigma_j \mathbf{S}_j) \right\},$ (2.4)

где $\xi_{d\sigma} = \varepsilon_d - \sigma g_e \mu_B H - \mu$ - отсчитанная от химпотенциала спин-зависящая энергия электрона, находящегося на примеси, во внешнем магнитном поле H; ε_d - затравочная одноэлектронная энергия примесного атома; $n_{\sigma} = a_{\sigma}^+ a_{\sigma}$ - оператор числа электронов на примесном центре с проекцией спина σ ; a_{σ}^+ - оператор рождения электрона на примесном атоме с проекцией спина σ . В случае димера электронные операторы на узле, n_j и $a_{j\sigma}^+$, имеют аналогичный смысл. Параметр U характеризует хаббардовское отталкивание двух электронов с противоположными проекциями спинов на одном узле; U_{12} - интенсивность межузельного кулоновского отталкивания; t_d - параметр перескока между узлами устройства, содержащего димер. Действие магнитного поля на энергетическую структуру спиновой атомной структуры с эффективным g-фактором описывается посредством предпоследнего слагаемого в (2.3) и (2.4). Взаимосвязь между спиновыми степенями свободы транспортируемого электрона и спиновой структуры осуществляется через механизм s - d(f)- обменной связи и описывается последним слагаемым (2.3) и (2.4), где **S** (\mathbf{S}_i) - является векторным оператором спинового момента примеси (j-го спинового момента димера), а σ - векторным оператором спина транспортируемого электрона. Интенсивность s - d(f)- обменной связи определяется параметром A. Как известно, скалярное произведение σS содержит операторные слагаемые, соответствующие учету спин-флип процессов, когда происходит одновременное изменение проекций спинов у структуры и у электрона при сохранении суммарного значения zпроекции спина для всей системы. Важность таких процессов связана, в частности, с тем, что благодаря им происходит изменение потенциального профиля рассеивающего центра. Это проявляется, например, в индуцировании магнитным полем эффекта Фано (см. главу 1). Как будет показано ниже, отмеченные процессы существенно влияют на ВАХ системы и при учете процессов многократного рассеяния.

Связь устройства с металлическими контактами описывается вторым слагаемым гамильтониана системы (2.1) посредством учета процессов туннелирования электронов между этими подсистемами,

1).
$$\hat{T} = \sum_{k\sigma} t_{Lk} c^+_{k\sigma} a_{\sigma} + \sum_{p\sigma} t_{Rp} d^+_{p\sigma} a_{\sigma} + \text{h.c.} = \hat{T}_L + \hat{T}_R + \text{h.c.},$$
 (2.5)

2).
$$\hat{T} = \sum_{k\sigma} t_{Lk} c^+_{k\sigma} a_{1\sigma} + \sum_{p\sigma} t_{Rp} d^+_{p\sigma} a_{2\sigma} + \text{h.c.} = \hat{T}_L + \hat{T}_R + \text{h.c.}$$
 (2.6)

Здесь t_{Lk} , t_{Rp} - параметры связи левого и правого контактов с центральной областью, соответственно.

Последнее слагаемое \hat{V} полного гамильтониана системы, обусловленное приложением к металлическим контактам напряжения смещения V, индуцирующим прохождение электрического тока, определяется выражением:

1).
$$\hat{V} = \frac{eV}{2} \sum_{\sigma} a^+_{\sigma} a_{\sigma} + eV \sum_{p\sigma} d^+_{p\sigma} d_{p\sigma},$$
 (2.7)

2).
$$\hat{V} = \frac{eV}{2} \sum_{j\sigma} a_{j\sigma}^{+} a_{j\sigma} + eV \sum_{p\sigma} d_{p\sigma}^{+} d_{p\sigma}.$$
 (2.8)

2.2.2 Связь стационарных кинетических процессов и неравновесных средних

Поскольку случай с димером является более сложным, последующий вывод общего выражения, описывающего туннельный ток через устройство, и кинетических уравнений будет осуществляться именно для этой спиновой структуры [15]. После чего будут обсуждены упрощения, связанные с наличием только одного узла в центральной части системы вместо двух.

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

$$I = -\frac{ie}{\hbar} \left\langle \left[\hat{N}_L, \hat{T}_L \right] \right\rangle, \qquad (2.9)$$

где в правой стороне выражения под знаком среднего стоит коммутатор оператора числа электронов в левом контакте с оператором туннелирования между левым контактом и устройством. Принято, что e обозначает абсолютную величину заряда электрона. Усреднение проводится с матрицей плотности $\rho(t)$ [110,111], удовлетворяющей уравнению

$$i\hbar\partial\rho(t)/\partial t = \left[\hat{H},\rho(t)\right].$$
 (2.10)

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

$$I = -\frac{ie}{\hbar} \sum_{k\sigma} \left[t_{Lk} \left\langle c_{k\sigma}^{+} a_{1\sigma} \right\rangle - t_{Lk}^{*} \left\langle a_{1\sigma}^{+} c_{k\sigma} \right\rangle \right].$$
(2.11)

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

Для построения теории возмущений, в которой в качестве возмущения формально будет выступать только туннельная связь между контактами и устройством, а в качестве нулевого гамильтониана оператор \hat{H}_0 , проведем два преобразования. Первое преобразование связано с переходом к матрице плотности $\rho_v(t)$ [112], такой что

$$\rho(t) = \hat{U}_v^+ \rho_v(t) \hat{U}_v, \quad \hat{U}_v = \exp\left(it\hat{V}/\hbar\right).$$
(2.12)

В уравнение движения для $\rho_v(t)$,

$$i\hbar\partial\rho_v(t)/\partial t = \left[\hat{H}_v(t), \rho_v(t)\right],$$
(2.13)

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

$$\hat{T}_{v}(t) = \sum_{k\sigma} t_{Lk}(t) c_{k\sigma}^{+} a_{1\sigma} + \sum_{p\sigma} t_{Rp}(t) d_{p\sigma}^{+} a_{2\sigma} + \text{h.c.}$$
(2.14)

имеет явную временную зависимость, определяемую функциями

$$t_{Lk}(t) = t_{Lk} \exp(-iteV/2\hbar), \qquad t_{Rp}(t) = t_{Rp} \exp(iteV/2\hbar)$$

С этим обстоятельством связана необходимость использования неравновесных функций Грина.

Второе преобразование осуществляет переход к представлению взаимодействия:

$$\rho_v(t) = \hat{U}_0^+ \rho_I(t) \hat{U}_0, \quad \hat{U}_0 = \exp\left(it\hat{H}_0/\hbar\right).$$
(2.15)

В этом представлении выражение для тока принимает следующий вид:

$$I = -\frac{ie}{\hbar} \sum_{k\sigma} \left[t_{Lk}(t) \left\langle c_{k\sigma}^{+}(t)a_{1\sigma}(t) \right\rangle_{I} - t_{Lk}^{*}(t) \left\langle a_{1\sigma}^{+}(t)c_{k\sigma}(t) \right\rangle_{I} \right], \qquad (2.16)$$

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

$$i\hbar\partial\rho_I(t)/\partial t = \left[\hat{T}_I(t), \rho_I(t)\right],$$
(2.17)

в котором оператор туннелирования записан в представлении взаимодействия,

$$\hat{T}_{I}(t) = \sum_{k\sigma} t_{Lk}(t) c^{+}_{k\sigma}(t) a_{1\sigma}(t) + \sum_{p\sigma} t_{Rp}(t) d^{+}_{p\sigma}(t) a_{2\sigma}(t) + h.c.$$
(2.18)

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

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

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

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

$$\rho_I(t) = S(t, -\infty)\rho_0 S^+(t, -\infty), \qquad \rho_0 = \rho_I(-\infty).$$
(2.19)

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

$$i\hbar\partial S(t, -\infty)/\partial t = \hat{T}_I(t)S(t, -\infty),$$
 (2.20)

то его можно представить через Т-упорядоченную экспоненту

$$S(t, -\infty) = T_t \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \hat{T}_I(t) dt\right).$$
(2.21)

Оператор $S(t, -\infty)$ решает поставленную задачу, поскольку

$$\left\langle c_{k\sigma}^{+}(t)a_{1\sigma}(t)\right\rangle_{I} = \left\langle S^{+}(t,-\infty)c_{k\sigma}^{+}(t)a_{1\sigma}(t)S(t,-\infty)\right\rangle_{0}.$$
(2.22)

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

$$\left\langle c_{k\sigma}^{+}(t)a_{1\sigma}(t)\right\rangle_{I} = \left\langle S^{-1}(\infty, -\infty)S(\infty, t)c_{k\sigma}^{+}(t)a_{1\sigma}(t)S(t, -\infty)\right\rangle_{0}.$$
(2.23)



Рис. 2.1: Временной контур Келдыша С.

Введение контура Келдыша *С* [111, 113–115], изображенного на рисунке 2.1, позволяет записать рассматриваемые средние в удобном для вычисления виде

$$\left\langle c_{k\sigma}^{+}(t)a_{1\sigma}(t)\right\rangle_{I} = \left\langle T_{C}c_{k\sigma}^{+}(t)a_{1\sigma}(t)S_{C}\right\rangle_{0}, \qquad (2.24)$$

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

$$S_C = T_C \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_C \hat{T}_I(t) dt\right), \qquad (2.25)$$

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

2.2.3 Атомное представление для операторов устройства

Существенная особенность рассматриваемой задачи связана со структурой устройства, описываемой гамильтонианом \hat{H}_D . Из его определения видно, что электрон, попадая в устройство, будет взаимодействовать как с зарядовыми, так и со спиновыми степенями свободы. Присутствие большого числа различных затравочных амплитуд рассеяния приводит не только к значительному усложнению ряда теории возмущений, но и к проблеме вычисления явного вида фермиевских и спиновых операторов в представлении взаимодействия. Это связано с неэквидистантной структурой спектра фермиевских (или спиновых) возбуждений оператора \hat{H}_D . Поэтому непосредственное применение диаграммной техники в терминах операторов вторичного квантования становится невозможным из-за отсутствия теоремы Вика для средних от произведения таких операторов. Выход из этого затруднения связан с построением атомного представления и записи в нем гамильтониана устройства, а также оператора туннелирования. С этой целью введем функции $|\Psi_n\rangle$, являющиеся решением уравнения Шредингера для устройства,

$$\hat{H}_D |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle, \quad n = 1, 2, ..., N_D.$$
 (2.26)

Набор функций $|\Psi_1\rangle$, $|\Psi_2\rangle$, ..., $|\Psi_{N_D}\rangle$, можно рассматривать как базис гильбертова пространства, в котором действуют операторы, относящиеся к устройству. Введем операторы Хаббарда [116–118]

$$X^{nm} = |\Psi_n\rangle \langle \Psi_m|, \quad n, m = 1, 2, ..., N_D,$$
(2.27)

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

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

$$H_D = \sum_{n=1}^{N_D} E_n X^{nn}.$$
 (2.28)

Вторая важная особенность атомного представления связана с тем, что явный вид операторов Хаббарда в представлении взаимодействия $X^{nm}(t) = U_0(t)X^{nm}U_0^+(t)$ легко вычисляется. При этом возникает обычная временная зависимость по экспоненциальному закону [117,118]:

$$X^{nm}(t) = \exp\left(i\left(E_n - E_m\right)t\right)X^{nm} \equiv \exp\left(iE_{\alpha}t\right)X^{nm}.$$

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

Простота временной зависимости операторов Хаббарда в представлении взаимодействия открывает очевидный путь построения теории возмущений с применением диаграммной техники для операторов Хаббарда, поскольку для них существует теорема Вика [125]. Введение матричных элементов операторов уничтожения электрона с проекцией спина σ на первом и на втором узлах устройства,

$$\gamma_{1\sigma}(nm) = \langle \Psi_n | a_{1\sigma} | \Psi_m \rangle, \qquad \gamma_{2\sigma}(nm) = \langle \Psi_n | a_{2\sigma} | \Psi_m \rangle, \qquad (2.29)$$

позволяет в компактном виде выразить фермиевские операторы через операторы Хаббарда,

$$a_{1\sigma} = \sum_{\alpha} \gamma_{1\sigma}(\alpha) X^{\alpha}, \quad a_{2\sigma} = \sum_{\alpha} \gamma_{2\sigma}(\alpha) X^{\alpha}, \quad \alpha \equiv \alpha(n,m).$$
 (2.30)

Здесь, для краткости, использована запись суммирования по индексу α , подразумевающая в действительности суммирование по паре индексов n и m атомных состояний устройства. Явный вид собственных функций и энергий гамильтониана (2.28), $|\Psi_n\rangle$ и E_n , а также матричных элементов (2.29) для двух различных спиновых структур будет дан ниже при непосредственном рассмотрении ВАХ этих систем.

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

$$\hat{T}_{I}(t) = \sum_{k\sigma,\alpha} t_{Lk}(t)\gamma_{1\sigma}(\alpha)c^{+}_{k\sigma}(t)X^{\alpha}(t) + \sum_{p\sigma,\alpha} t_{Rp}(t)\gamma_{2\sigma}(\alpha)d^{+}_{p\sigma}(t)X^{\alpha}(t) + h.c.$$
(2.31)

2.2.4 Неравновесные функции Грина, спектральные функции устройства, спектральные функции туннельной связи

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

$$I = -\frac{ie}{\hbar} \sum_{k\sigma,\alpha} \gamma_{1\sigma}(\alpha) \left[t_{Lk}(t) \left\langle c_{1\sigma}^{+}(t) X^{\alpha}(t) \right\rangle_{I} - t_{Lk}^{*}(t) \left\langle X^{-\alpha}(t) c_{1\sigma}(t) \right\rangle_{I} \right], \qquad (2.32)$$

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

$$G_{Lk\sigma}^{ab}(\tau, \tau') = -i \left\langle T_C c_{k\sigma}(\tau_a) c_{k\sigma}^+(\tau_b') \right\rangle_0,$$

$$D_{\alpha,\beta}^{ab}(\tau, \tau') = -i \left\langle T_C X^\alpha(\tau_a) X^{-\beta}(\tau_b') S_C \right\rangle_0,$$

$$R_{k\sigma,\alpha}^{ab}(\tau, \tau') = -i \left\langle T_C c_{k\sigma}(\tau_a) X^{-\alpha}(\tau_b') S_C \right\rangle_0,$$

$$R_{\alpha,k\sigma}^{ab}(\tau, \tau') = -i \left\langle T_C X^\alpha(\tau_a) c_{k\sigma}^+(\tau_b') S_C \right\rangle_0,$$
(2.33)

для которых каждый из верхних индексов *a* и *b* может принимать два значения: + или –. Первому индексу *a* соответствует время τ_a у первого оператора, стоящего в упорядоченном по Келдышу среднем. Это означает, что при a = + (-) оператор $c_{k\sigma}(\tau_a)$ или $X^{\alpha}(\tau_a)$ в представлении взаимодействия берется в момент времени τ , на нижней (верхней) ветви контура Келдыша (см. рис. 2.1). Аналогично сказанному при b = + (-)оператор $X^{-\alpha}(\tau'_b)$ или $c^+_{k\sigma}(\tau'_b)$ берется в момент времени τ' на нижней (верхней) ветви контура Келдыша.

Введенные функции Грина (2.33) позволяют представить выражение для тока в удобной для применения теории возмущений форме:

$$I = \frac{e}{\hbar} \sum_{k\sigma,\alpha} t_{Lk} \gamma_{1\sigma}(\alpha) \left\{ e^{ieVt/2} R^{++}_{Lk\sigma,\alpha}(t,t+\delta) - - e^{-ieVt/2} R^{++}_{\alpha,Lk\sigma}(t,t+\delta) \right\}, \delta \to +0.$$

$$(2.34)$$

Анализ диаграммного ряда, возникающего при разложении матрицы рассеяния S_C в (2.33), показывает, что функции Грина $R^{++}_{Lk\sigma,\alpha}(t, t')$ и $R^{++}_{\alpha,Lk\sigma}(t, t')$ могут быть представлены в виде интегральных сверток неравновесных функций Грина для левого контакта с неравновесными функциями Грина для устройства, записанными в

атомном представлении,

$$R_{Lk\sigma,\alpha}^{++}(t, t') = \sum_{\beta} t_{Lk}\gamma_{1\sigma}(\beta) \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left\{ G_{Lk\sigma}^{++}(t-\tau) D_{\alpha\beta}^{++}(\tau-t') - G_{Lk\sigma}^{+-}(t-\tau) D_{\alpha\beta}^{-+}(\tau-t') \right\} \exp[-ieV\tau/(2\hbar)],$$

$$R_{\alpha,Lk\sigma}^{++}(t, t') = \sum_{\beta} t_{Lk}\gamma_{1\sigma}(\beta) \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left\{ D_{\alpha\beta}^{++}(t-\tau) G_{Lk\sigma}^{++}(\tau-t') - D_{\alpha\beta}^{+-}(t-\tau) G_{Lk\sigma}^{-+}(\tau-t') \right\} \exp[+ieV\tau/(2\hbar)].$$
(2.35)

Проводя фурье-преобразование для неравновесных функций,

$$G^{ab}_{Lk\sigma}(\tau - \tau') = \int \frac{d\omega}{2\pi} \exp[-i\omega(\tau - \tau')] G^{ab}_{Lk\sigma}(\omega),$$

$$D^{ab}_{\alpha\beta}(\tau - \tau') = \int \frac{d\omega}{2\pi} \exp[-i\omega(\tau - \tau')] D^{ab}_{\alpha\beta}(\omega),$$
 (2.36)

получим, что ток выражается через спектральные функции системы,

$$I = \frac{e}{h} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left[M_{1\sigma}^{-+}(\omega) W_{1\sigma}^{+-}(\omega) - M_{1\sigma}^{+-}(\omega) W_{1\sigma}^{-+}(\omega) \right].$$
(2.37)

В (2.37) левосторонние спектральные функции устройства, $W^{ab}_{1\sigma}(\omega)$, выражаются через атомные функции Грина посредством соотношения

$$W_{1\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_{\alpha\beta} \gamma_{1\sigma}(\alpha) \gamma_{1\sigma}(\beta) D_{\alpha\beta}^{ab}(\omega).$$
(2.38)

Правосторонние спектральные функции, $W_{2\sigma}^{ab}(\omega)$, которые также будут использоваться в дальнейшем, определяются аналогично. Название введенных функций связано с параметрами представления для оператора уничтожения электрона на узле, участвующем в туннельной связи с левым или правым контактом, соответственно. Кроме того, введены левосторонние спектральные функции туннельной связи контакта с устройством,

$$M_{1\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_{k} t_{Lk}^2 G_{Lk\sigma}^{ab}(\omega + eV/(2\hbar)), \qquad (2.39)$$

где
$$G^{ab}_{Lk\sigma}$$
 - неравновесные затравочные функции Грина левого контакта,

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

где

$$n_{Lk\sigma} = \left\{ 1 + \exp\left[\frac{\varepsilon_{Lk\sigma} - \mu}{T}\right] \right\}^{-1}.$$

Затравочные функции $G^{ab}_{Rp\sigma}$, которые имеются в определении правосторонних спектральных функций туннельной связи,

$$M_{2\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_{p} t_{Rp}^2 G_{Rp\sigma}^{ab}(\omega - eV/(2\hbar)), \qquad (2.40)$$

определяются аналогично.

Формула (2.37) сводит проблему вычисления туннельного тока к задаче о нахождении спектральных функций устройства $W_{1\sigma}^{+-}(\omega)$ и $W_{1\sigma}^{-+}(\omega)$. Заметим, что входящие в них суммы по α и β соответствуют учету вкладов в ток от процессов, связанных с переходами между состояниями $|\Psi_1\rangle$, $|\Psi_2\rangle$, ..., $|\Psi_{N_D}\rangle$ устройства.

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

$$D^{ab}_{\alpha\beta}(\tau - \tau') = -i \left\langle T_C X^{\alpha}(\tau_a) X^{-\beta}(\tau_b') \tilde{S}_C \right\rangle_0.$$
(2.41)

Здесь ренормированная матрица рассеяния,

$$\tilde{S}_C = T_C \exp\left\{-i \int\limits_C d\tau_1 \int\limits_C d\tau_2 \sum_{\alpha\beta} \tilde{V}_{\alpha\beta}(\tau_1 - \tau_2) X^{-\alpha}(\tau_1) X^{\beta}(\tau_2)\right\},\tag{2.42}$$

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

$$\tilde{V}_{\alpha\beta}(\tau_1 - \tau_2) = \sum_{k\sigma} \gamma_{1\sigma}(\alpha) \gamma_{1\sigma}(\beta) t_{Lk}^2 e^{i\frac{eV}{2}(\tau_1 - \tau_2)} G_{Lk\sigma}(\tau_1 - \tau_2) + \sum_{p\sigma} \gamma_{2\sigma}(\alpha) \gamma_{2\sigma}(\beta) t_{Rp}^2 e^{-i\frac{eV}{2}(\tau_1 - \tau_2)} G_{Rp\sigma}(\tau_1 - \tau_2)$$
(2.43)

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

$$\frac{}{\alpha } = \frac{}{\alpha} + \frac{}{\alpha} + \frac{}{\alpha} + \frac{}{\gamma} + \frac{}{\beta}$$

Рис. 2.2: Система уравнений для неравновесных функций $D_{\alpha\beta}$.

Для дальнейшего существенно, что при квантовом транспорте электронов реализуются процессы рассеяния, сопровождающиеся изменением состояния устройства. В результате электрон, пришедший в устройство из левого контакта, может перейти в правый контакт или вернуться обратно в левый, а затем снова туннелировать в область устройства. Такие процессы могут инициировать переход устройства в возбужденные состояния. Эффекты многократного отражения будут учтены, если в ряду теории возмущений для $D^{ab}_{\alpha\beta}$ сохранить слагаемые всех порядков по параметрам туннельной связи устройства с левым и правым контактами. На диаграммном языке в беспетлевом приближении это означает, что функции $D^{ab}_{\alpha\beta}$ должны удовлетворять системе уравнений, графическая форма которых хорошо известна для хаббардовских систем [117, 118] и представлена на рисунке 2.2. Заметим, что эффект от учета петлевых диаграмм при нахождении неравновесных функций Грина устройства был ранее рассмотрен на примере траснпорта через простейшую двухуровневую структуру - одиночную квантовую точку [119, 121, 122].

Воспользовавшись определением контура Келдыша C (см. рис. 2.1) и действуя дифференциальным оператором $\hat{D}_{0\alpha}^{-1} = i\frac{\partial}{\partial t} + E_{\alpha}$ на исходные уравнения в частотном представлении [113], запишем первую систему уравнений для неравновесных функций Грина в атомном представлении $D^{+-}_{\alpha\beta}(\omega)$ и $D^{--}_{\alpha\beta}(\omega)$:

$$D_{\alpha\beta}^{+-}(\omega) = \sum_{\nu} D_{\alpha}(\omega) \left[\widetilde{V}_{\alpha\nu}^{++}(\omega) D_{\nu\beta}^{+-}(\omega) - \widetilde{V}_{\alpha\nu}^{+-}(\omega) D_{\nu\beta}^{--}(\omega) \right], \qquad (2.44)$$
$$D_{\alpha\beta}^{--}(\omega) = -\delta_{\alpha\beta} D_{\alpha}(\omega) - \sum_{\nu} D_{\alpha}(\omega) \left[\widetilde{V}_{\alpha\nu}^{--}(\omega) D_{\nu\beta}^{--}(\omega) - \widetilde{V}_{\alpha\nu}^{-+}(\omega) D_{\nu\beta}^{+-}(\omega) \right].$$

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

$$D_{\alpha\beta}^{-+}(\omega) = \sum_{\nu} D_{\alpha}(\omega) \left[\widetilde{V}_{\alpha\nu}^{-+}(\omega) D_{\nu\beta}^{++}(\omega) - \widetilde{V}_{\alpha\nu}^{--}(\omega) D_{\nu\beta}^{-+}(\omega) \right], \qquad (2.45)$$
$$D_{\alpha\beta}^{++}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} D_{\alpha}(\omega) + \sum_{\nu} D_{\alpha}(\omega) \left[\widetilde{V}_{\alpha\nu}^{++}(\omega) D_{\nu\beta}^{++}(\omega) - \widetilde{V}_{\alpha\nu}^{+-}(\omega) D_{\nu\beta}^{-+}(\omega) \right].$$

При получении этих уравнений использовались затравочные неравновесные функции устройства

$$D_{0\alpha}^{++}(\omega) = \frac{N_n}{\omega + E_\alpha + i\delta} + \frac{N_m}{\omega + E_\alpha - i\delta}, \qquad D_{0\alpha}^{+-}(\omega) = 2\pi i N_m \delta(\omega + E_\alpha), \qquad (2.46)$$
$$D_{0\alpha}^{--}(\omega) = -\frac{N_n}{\omega + E_\alpha - i\delta} - \frac{N_m}{\omega + E_\alpha + i\delta}, \qquad D_{0\alpha}^{-+}(\omega) = -2\pi i N_n \delta(\omega + E_\alpha).$$

Кроме того, был введен пропагатор $D_{\alpha}(\omega) = b_{\alpha}/(\omega + E_{\alpha})$, в котором концевой множитель $b_{\alpha} = N_n + N_m$, если $\alpha = \alpha(n, m)$. Этот множитель определяется суммой чисел заполнения $N_n = \langle X^{nn} \rangle$ и $N_m = \langle X^{mm} \rangle$ состояний устройства $|\Psi_n\rangle$ и $|\Psi_m\rangle$, между которыми инициируется переход.

Решение систем уравнений (2.44) и (2.45) существенно упрощается, если учесть, что матричные элементы взаимодействия $\tilde{V}^{ab}_{\alpha\beta}(\omega)$ можно записать в виде суммы четырех слагаемых, каждое их которых по индексам α и β имеет расщепленный характер,

$$\tilde{V}^{ab}_{\alpha\beta}(\omega) = \sum_{j=1}^{2} \sum_{\sigma} \gamma_{j\sigma}(\alpha) \gamma_{j\sigma}(\beta) M^{ab}_{j\sigma}(\omega).$$
(2.47)

При этом видно, что интенсивность взаимодействия для каждого слагаемого определяется как значениями параметров представления, так и значениями левосторонних и правосторонних спектральных характеристик туннельных связей устройства с контактами.

Фактор расщепленности позволяет ввести линейные комбинации

$$\Phi^{ab}_{j\sigma\beta}(\omega) = \sum_{\nu} \gamma_{j\sigma}(\nu) D^{ab}_{\nu\beta}(\omega)$$
(2.48)

и для них получить замкнутые системы уравнений [126]. Тогда, из (2.44) для четырех введенных выше комбинаций $\Phi_{1\sigma\beta}^{+-}(\omega)$, $\Phi_{1\sigma\beta}^{--}(\omega)$, $\Phi_{2\sigma\beta}^{+-}(\omega)$, $\Phi_{2\sigma\beta}^{--}(\omega)$ легко получить систему четырех уравнений, которую для краткости запишем в матричном виде:

$$\hat{\Lambda}_{\sigma}(\omega) \cdot \Pi^{(1)}_{\sigma\beta}(\omega) = -\Upsilon^{(1)}_{\sigma\beta}(\omega), \qquad (2.49)$$

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

$$\tilde{\Pi}^{(1)}_{\sigma\beta}(\omega) = \begin{bmatrix} \Phi^{--}_{1\sigma\beta}(\omega) & \Phi^{--}_{2\sigma\beta}(\omega) & \Phi^{+-}_{1\sigma\beta}(\omega) & \Phi^{+-}_{2\sigma\beta}(\omega) \end{bmatrix}^T,$$
(2.50)

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

$$\begin{array}{cccc} 1 + L_{11\sigma}(\omega)M_{1\sigma}^{--}(\omega) & L_{12\sigma}(\omega)M_{2\sigma}^{--}(\omega) & -L_{11\sigma}(\omega)M_{1\sigma}^{-+}(\omega) & -L_{12\sigma}(\omega)M_{2\sigma}^{-+}(\omega) \\ \\ L_{12\sigma}(\omega)M_{1\sigma}^{--}(\omega) & 1 + L_{11\sigma}(\omega)M_{2\sigma}^{--}(\omega) & -L_{12\sigma}(\omega)M_{1\sigma}^{-+}(\omega) & -L_{11\sigma}(\omega)M_{2\sigma}^{-+}(\omega) \\ \\ L_{11\sigma}(\omega)M_{1\sigma}^{+-}(\omega) & L_{12\sigma}(\omega)M_{2\sigma}^{+-}(\omega) & 1 - L_{11\sigma}(\omega)M_{1\sigma}^{++}(\omega) & -L_{12\sigma}(\omega)M_{2\sigma}^{++}(\omega) \\ \\ \\ L_{12\sigma}(\omega)M_{1\sigma}^{+-}(\omega) & L_{11\sigma}(\omega)M_{2\sigma}^{+-}(\omega) & -L_{12\sigma}(\omega)M_{1\sigma}^{++}(\omega) & 1 - L_{11\sigma}(\omega)M_{2\sigma}^{++}(\omega) \end{array} \right]$$

В правой стороне матричного уравнения стоит вектор $\Upsilon^{(1)}_{\sigma\beta}(\omega),$ такой что

$$\tilde{\Upsilon}^{(1)}_{\sigma\beta}(\omega) = \begin{bmatrix} \gamma_{1\sigma}(\beta) & \gamma_{2\sigma}(\beta) & 0 & 0 \end{bmatrix}^T \cdot D_{\beta}(\omega).$$
(2.51)

Здесь были введены функции

$$L_{ij\sigma}(\omega) = \sum_{\alpha} \gamma_{i\sigma}(\alpha) \gamma_{j\sigma}(\alpha) D_{\alpha}(\omega).$$
(2.52)

Из приведенных уравнений следует, что

$$\Phi_{1\sigma\beta}^{+-}(\omega) = \frac{\gamma_{2\sigma}(\beta)\Delta_{\sigma}^{23}(\omega) - \gamma_{1\sigma}(\beta)\Delta_{\sigma}^{13}(\omega)}{\Delta_{\sigma}(\omega)}D_{\beta}(\omega), \qquad (2.53)$$

где $\Delta_{\sigma}(\omega) = \det(\Lambda_{\sigma}(\omega))$, а $\Delta_{\sigma}^{nm}(\omega)$ - детерминант третьего порядка, получающийся из $\Delta_{\sigma}(\omega)$ посредством вычеркивания строки с номером n и столбца с номером m. Используя определение левосторонней спектральной функции устройства, находим для нее решение

$$W_{1\sigma\beta}^{+-}(\omega) = \sum_{\beta} \gamma_{1\sigma}(\beta) \Phi_{1\sigma\beta}^{+-}(\omega) = \frac{L_{12\sigma}(\omega) \Delta_{\sigma}^{23}(\omega) - L_{11\sigma}(\omega)(\beta) \Delta_{\sigma}^{13}(\omega)}{\Delta_{\sigma}(\omega)}.$$
 (2.54)

Решение второй системы (2.45) можно провести аналогично. Если ввести векторы

$$\tilde{\Pi}_{\sigma\beta}^{(2)}(\omega) = [\Phi_{1\sigma\beta}^{-+}(\omega) \quad \Phi_{2\sigma\beta}^{-+}(\omega) \quad \Phi_{1\sigma\beta}^{++}(\omega) \quad \Phi_{2\sigma\beta}^{++}(\omega)]^T,$$
(2.55)

$$\tilde{\Upsilon}^{(2)}_{\sigma\beta}(\omega) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \gamma_{1\sigma}(\beta) & \gamma_{2\sigma}(\beta) \end{bmatrix}^T \cdot D_{\beta}(\omega), \qquad (2.56)$$

то получим уравнение

$$\hat{\Lambda}_{\sigma}(\omega) \cdot \Pi^{(2)}_{\sigma\beta}(\omega) = \Upsilon^{(2)}_{\sigma\beta}(\omega).$$
(2.57)

Отсюда следует, что интересующая нас спектральная интенсивность равна

$$W_{1\sigma\beta}^{-+}(\omega) = \frac{L_{11\sigma}(\omega)\Delta_{\sigma}^{31}(\omega) - L_{12\sigma}(\omega)(\beta)\Delta_{\sigma}^{41}(\omega)}{\Delta_{\sigma}(\omega)}.$$
(2.58)

2.2.5 Туннельный ток и кинетические уравнения для чисел заполнения

Используя полученные решения, после несложных вычислений находим выражение для тока

$$I = \frac{4e}{h} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \Gamma_{1\sigma}(\omega) \Gamma_{2\sigma}(\omega) \frac{L_{12\sigma}^2(\omega) \left[n_2(\omega - eV/2) - n_1(\omega + eV/2)\right]}{\Delta_{\sigma}(\omega)}, \qquad (2.59)$$

где

$$\Gamma_{1\sigma}(\omega) = \pi \sum_{k} t_{Lk}^2 \delta(\omega + eV/2 - \xi_{Lk\sigma}), \quad \Gamma_{2\sigma}(\omega) = \pi \sum_{p} t_{Rp}^2 \delta(\omega - eV/2 - \xi_{Rp\sigma}).$$

В дальнейшем ограничимся рассмотрением часто встречающегося на практике случая широкозонных металлических контактов, когда $t_L, t_R \ll W$, W- ширина зоны контактов. В результате можно пренебречь реальными частями $M_{j\sigma}^{ab}(\omega)$, а мнимые части рассматривать постоянными, т.е. $\Gamma_{1,2\sigma} = \pi t_{L,R}^2 g_{L,R\sigma} = const (g_{L,R\sigma} - спин-зависящие$ плотности состояний левого и правого контактов). Тогда для определителя динамиче $ской матрицы <math>\hat{\Lambda}_{\sigma}(\omega)$ получим следующее выражение:

$$\Delta_{\sigma}(\omega) = \left[1 - \Gamma_{1\sigma}\Gamma_{2\sigma}\left(L_{11\sigma}^{2}(\omega) - L_{12\sigma}^{2}(\omega)\right)\right]^{2} + \Gamma_{\sigma}^{2}L_{11\sigma}^{2}(\omega), \Gamma_{\sigma} = \Gamma_{1\sigma} + \Gamma_{2\sigma}.$$
 (2.60)

Отметим, что выражение (2.59) удовлетворяет очевидным требованиям. Прежде всего это связано с обращением тока в нуль, как только $t_R = 0$, либо $t_L = 0$ [107]. Более

тонкий эффект связан с тем, что в рассматриваемом случае ток должен равняться нулю, если между узлами устройства нет связи, т.е. при $t_d = 0$. В явном виде параметр t_d не входит в выражение для тока. Однако зависимость от него проявляется через функции $L_{11\sigma}$ и $L_{12\sigma}$. В предельном случае, когда $t_d = 0$, $L_{11\sigma} \neq 0$, а $L_{12\sigma} = 0$. Следовательно, ток, как и должно быть, в этом пределе обращается в нуль. Кроме того, если перейти к системе с \hat{H}_D , описываемом формулой (2.3), с одним узлом в центре, тогда $L_{11\sigma} = L_{12\sigma}$. Таким образом, окончательные выражения для туннельного тока имеют вид:

1).
$$I = \frac{4e}{h} \sum_{\sigma} \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{L_{11\sigma}^2 (n_2 - n_1)}{1 + \Gamma_{\sigma}^2 L_{11\sigma}^2},$$
 (2.61)

2).
$$I = \frac{4e}{h} \sum_{\sigma} \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{L_{12\sigma}^2 (n_2 - n_1)}{\left[1 - \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} (L_{11\sigma}^2 - L_{12\sigma}^2)\right]^2 + \Gamma_{\sigma}^2 L_{11\sigma}^2}.$$
 (2.62)

Входящие в выражение для тока функции содержат концевые множители, которые определяются через числа заполнения N_n $(n = 1, 2, ..., N_D)$ состояний устройства. Для получения кинетических уравнений, которым должны удовлетворять числа заполнения, воспользуемся неравновесными функциями $D_{\alpha\alpha}^{+-}(t - t')$ с различными α . Из определения (2.33) следует, что

$$D_{\alpha\alpha}^{+-}(t-t') = i \left\langle X^{-\alpha}(t') X^{\alpha}(t) \right\rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} D_{\alpha\alpha}^{+-}(\omega) \,. \tag{2.63}$$

Тогда, для t = t' получаем

$$N_m \equiv \langle X^{mm} \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi i} D_{\alpha\alpha}^{+-}(\omega) \,, \ \alpha = \alpha \left(n, \ m\right).$$
(2.64)

Как видно из (2.44), функция $D_{\alpha\beta}^{+-}(\omega)$ выражается через введенные выше комбинации $\Phi_{j\sigma\beta}^{+-}(\omega)$ и $\Phi_{j\sigma\beta}^{--}(\omega)$. Решение для $\Phi_{1\sigma\beta}^{+-}(\omega)$ определено формулой (2.53). Применяя аналогичную методику, нетрудно получить недостающие функции. После простых, но громоздких вычислений, получим искомую систему кинетических уравнений для чисел заполнения

1).
$$N_m = \sum_{\sigma} \int \frac{d\omega}{\pi} \gamma_{1\sigma}^2(\alpha) D_{\alpha}^2 \frac{\Gamma_{1\sigma} n_1 + \Gamma_{2\sigma} n_2}{1 + \Gamma_{\sigma}^2 L_{11\sigma}^2},$$
(2.65)

2).
$$N_m = \sum_{\sigma} \int \frac{d\omega}{\pi} \gamma_{1\sigma}^2(\alpha) D_{\alpha}^2 \frac{\Gamma_{1\sigma} n_1 + \Gamma_{2\sigma} n_2 + \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} (\Gamma_{1\sigma} n_2 + \Gamma_{2\sigma} n_1) \delta_{\sigma}^2(\alpha)}{\left[1 - \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} (L_{11\sigma}^2 - L_{12\sigma}^2)\right]^2 + \Gamma_{\sigma}^2 L_{11\sigma}^2},$$
 (2.66)

где

$$\delta_{\sigma}(\alpha) = L_{11\sigma} - sign\left[\gamma_{1\sigma}(\alpha)\gamma_{2\sigma}(\alpha)\right] \cdot L_{12\sigma}.$$
(2.67)

Далее обратимся к анализу непосредственных следствий, к которым приводит учет процессов многократного рассеяния за пределами приближения линейного отклика.

2.3 Проявление эффектов неравновесности в транспортных характеристиках анизотропной магнитной примеси

2.3.1 Гильбертово пространство состояний устройства, включающего одиночный спиновый момент

Начнем с более простого случая, когда в области устройства располагается одиночный спиновый момент с анизотропией типа "легкая ось". Чтобы определить энергии переходов E_{α} и параметры представления $\gamma_{1\sigma}(\alpha) \equiv \gamma_{\sigma}(\alpha)$, решим уравнение Шредингера с гамильтонианом (2.3), $\hat{H}_D |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle$.

Поскольку оператор числа электронов, находящихся в устройстве, коммутирует с \hat{H}_D , то базисные вектора гильбертова пространства состояний можно сгруппировать так, что в каждой такой совокупности отдельный базисный вектор описывает состояние с фиксированным числом электронов в устройстве: 0, 1 или 2. Таким образом, гильбертово пространство состояний разбивается на три сектора.

Сектор с нулевым числом электронов определяется как пространство состояний, задаваемых произвольной линейной суперпозицией трех базисных векторов (S = 1):

$$|\Psi_n\rangle \equiv |1\rangle = |0,0\rangle, \ |2,3\rangle = |0,\pm1\rangle.$$
(2.68)

В правой части этих и последующих выражений кет-вектор используется для идентификации состояний с заданным числом электронов и проекции спина примеси. Для данного сектора первый индекс кет-вектора соответствует тому, что электронов в устройстве нет.

Однофермионный сектор гильбертова пространства задается набором из шести собственных функций оператора \hat{H}_D :

$$|4\rangle = \cos \Theta_{+} |\uparrow, 0\rangle - \sin \Theta_{+} |\downarrow, +1\rangle, |5\rangle = \cos \Theta_{-} |\downarrow, 0\rangle - \sin \Theta_{-} |\uparrow, -1\rangle,$$

$$|6\rangle = sign (A) (\sin \Theta_{+} |\uparrow, 0\rangle - \cos \Theta_{+} |\downarrow, +1\rangle), \qquad (2.69)$$

$$|7\rangle = sign (A) (\sin \Theta_{-} |\downarrow, 0\rangle + \cos \Theta_{-} |\uparrow, -1\rangle),$$

$$|8\rangle = |\uparrow, +1\rangle, |9\rangle = |\downarrow, -1\rangle,$$

где первый индекс кет-вектора показывает ориентацию спина электрона, находящегося на примеси. Коэффициенты разложения имеют вид

$$\sin \Theta_{\pm} = sign(A) \sqrt{\frac{1+x_{\pm}}{2}}, \ \cos \Theta_{\pm} = \sqrt{\frac{1-x_{\pm}}{2}}, \ x_{\pm} = \Delta_{\pm}/\nu_{\pm}, \qquad (2.70)$$
$$\nu_{\pm} = \sqrt{\Delta_{\pm}^{2} + A^{2}/2}, \ \Delta_{\pm} = \Delta \pm (g/2 - 1) h, \ \Delta = A/4 - D/2, \ h = \mu_{B}H.$$

Влияние магнитного поля проявляется через зависимость этих выражений от h. Для реальных систем в большинстве случаев выполняются условия, когда энергия зеемановского взаимодействия меньше параметров модели. Тогда в линейном по h приближении нетрудно установить явную зависимость коэффициентов разложения от магнитного поля:

$$\sin\Theta_{\pm} \approx \sin\Theta \pm (g/2 - 1) h \frac{1 - x}{2\nu} \sin\Theta, \ \cos\Theta_{\pm} \approx \cos\Theta \mp (g/2 - 1) h \frac{1 + x}{2\nu} \cos\Theta,$$

$$\sin \Theta = sign(A) \sqrt{\frac{1+x}{2}}, \ \cos \Theta = \sqrt{\frac{1-x}{2}}, \ x = \Delta/\nu, \ \nu = \sqrt{\Delta^2 + A^2/2}.$$
 (2.71)

Базисные вектора двухэлектронного сектора определяются выражениями:

$$|10\rangle = |2,0\rangle, \ |11,12\rangle = |2,\pm1\rangle.$$
 (2.72)

В свою очередь, собственные значения энергии устройства E_i (i = 1, 2, ..., 12) могут

быть записаны следующим образом:

$$E_{1} = 0, \ E_{2(3)} = D \mp gh,$$

$$E_{4(5)} = \xi_{d\uparrow(\downarrow)} - \Delta_{\pm} - \nu_{\pm}, \ E_{6(7)} = \xi_{d\uparrow(\downarrow)} - \Delta_{\pm} + \nu_{\pm},$$

$$E_{8(9)} = \xi_{d\uparrow(\downarrow)} + D + A/2 \mp gh,$$

$$E_{10} = 2\xi_{d} + U, \ E_{11(12)} = 2\xi_{d} + U + D \mp gh.$$
(2.73)

При однофермионных возбуждениях устройства происходят переходы между состояниями $|i\rangle$, для которых число электронов отличается на единицу. Для каждой проекции спина σ имеется десять таких переходов. В данной задаче важную роль играют зависимости энергетических разностей отмеченных переходов от магнитного поля. Это связано с тем, что расщепление энергий однофермионных переходов в магнитном поле для электронов с разной проекцией спина лежит в основе изменения зависимости чисел заполнения от электрического поля смещения (см.ниже) и определяет появление дополнительных ступенек в ВАХ. Имея это в виду, приведем с отмеченной выше точностью явную зависимость энергий переходов от *h*. В случае $\sigma = +1/2$:

$$\begin{split} E_{1,4} &= E_1 - E_4 \approx \Delta + \nu - \xi_d + g_+ h, \ E_{1,6} \approx \Delta - \nu - \xi_d + g_- h, \\ E_{3,5} &\approx \Delta + \nu + D - \xi_d + g_- h, \ E_{3,7} \approx \Delta - \nu + D - \xi_d + g_+ h, \\ E_{2,8} &= -\left(A/2 + \xi_d - h\right), \end{split}$$
(2.74)
$$E_{4,11} &\approx -\left(\Delta + \nu + U + D + \xi_d\right) + g_- h, \ E_{5,10} \approx -\left(\Delta + \nu + U + \xi_d\right) + g_+ h, \\ E_{6,11} &\approx -\left(\Delta - \nu + U + D + \xi_d\right) + g_+ h, \ E_{7,10} \approx -\left(\Delta - \nu + U + \xi_d\right) + g_- h, \\ E_{9,12} &= -\left(U - A/2 + \xi_d - h\right), \end{split}$$

где $g_{\pm} = g/2 \pm \frac{\Delta}{\nu} (g/2 - 1)$. Для $\sigma = -1/2$ имеем

$$\begin{split} E_{1,5} &\approx \Delta + \nu - \xi_d - g_+ h, \ E_{1,7} \approx \Delta - \nu - \xi_d - g_- h, \\ E_{2,4} &\approx \Delta + \nu + D - \xi_d - g_- h, \ E_{2,6} \approx \Delta - \nu + D - \xi_d - g_+ h, \\ E_{3,9} &= - \left(A/2 + \xi_d + h \right), \\ E_{4,10} &\approx - \left(\Delta + \nu + U + \xi_d \right) - g_+ h, \ E_{5,12} \approx - \left(\Delta + \nu + U + D + \xi_d \right) - g_- h, \\ E_{6,10} &\approx - \left(\Delta - \nu + U + \xi_d \right) - g_- h, \ E_{7,12} \approx - \left(\Delta - \nu + U + D + \xi_d \right) - g_+ h, \\ E_{8,11} &= - \left(U - A/2 + \xi_d + h \right). \end{split}$$

$$(2.75)$$

Проводя вычисление матричных элементов $\langle n|a_{\sigma}|m\rangle$, получаем:

$$\begin{aligned} a_{\uparrow} &= \left[sign\left(A\right) X^{1,6} - X^{4,11} \right] \sin \Theta_{+} + \left[X^{1,4} + sign\left(A\right) X^{6,11} \right] \cos \Theta_{+} + X^{2,8} + \\ &+ \left[sign\left(A\right) X^{7,10} - X^{3,5} \right] \sin \Theta_{-} + \left[X^{5,10} + sign\left(A\right) X^{3,7} \right] \cos \Theta_{-} + X^{9,12}; \quad (2.76) \\ a_{\downarrow} &= - \left[X^{2,4} + sign\left(A\right) X^{6,10} \right] \sin \Theta_{+} + \left[sign\left(A\right) X^{2,6} - X^{4,10} \right] \cos \Theta_{+} + X^{3,9} + \\ &+ \left[sign\left(A\right) X^{1,7} + X^{5,12} \right] \sin \Theta_{-} + \left[X^{1,5} - sign\left(A\right) X^{7,12} \right] \cos \Theta_{-} - X^{8,11}. \end{aligned}$$

Таким образом, согласно (2.30) коэффициенты пропорциональности между a_{σ} и X^{α} ($\alpha = \alpha (n, m)$) - отличные от нуля параметры представления $\gamma_{\sigma}(\alpha)$. Из (2.76) видно, что в силу коллинеарной геометрии задачи, когда магнитное поле ориентировано параллельно оси анизотропии, для каждого однофермионного перехода $\alpha = \alpha (n, m)$ из двух параметров представления $\gamma_{\uparrow}(\alpha)$ и $\gamma_{\downarrow}(\alpha)$ только один отличен от нуля.

2.3.2 Неравновесные числа заполнения и вольт-амперные характеристики устройства с анизотропным спином

В дальнейшем обратимся к рассмотрению транспортных свойств магнитного устройства в режима туннельной связи при низких температурах. Этот случай наиболее часто реализуется в экспериментальных исследованиях [127, 128]. На математическом языке отмеченному режиму соответствует выполнение неравенств T, $\Gamma_{\sigma} \ll E_{\alpha}$, что означает малость температуры и уширения уровней энергий по сравнению с расстоянием между этими уровнями. Тогда,

$$N_m \simeq \frac{b_{\alpha}}{\pi} \left[\operatorname{arctg} \left(\frac{W/2 + eV/2 - \omega_{0\alpha}}{\kappa_{\alpha}} \right) + \frac{\Gamma_{L\sigma}}{\Gamma_{\sigma}} \operatorname{arctg} \left(\frac{\omega_{0\alpha} - eV/2}{\kappa_{\alpha}} \right) + \frac{\Gamma_{R\sigma}}{\Gamma_{\sigma}} \operatorname{arctg} \left(\frac{\omega_{0\alpha} + eV/2}{\kappa_{\alpha}} \right) \right],$$

$$(2.77)$$

где введены следующие обозначения

$$\omega_{0\alpha} = E_{\alpha} + \lambda_{\alpha}\kappa_{\alpha}, \ \kappa_{\alpha} = \frac{b_{\alpha}\gamma_{\sigma}^{2}(\alpha)\Gamma_{\sigma}}{1 + \lambda_{\alpha}^{2}}, \ \lambda_{\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{b_{\beta}\gamma_{\sigma}^{2}(\beta)\Gamma_{\sigma}}{E_{\beta} - E_{\alpha}}.$$
 (2.78)

Нетрудно убедиться, что при сделанных предположениях основной вклад в туннель-

ный ток вносят диагональные слагаемые, $I \simeq \sum_{\alpha} I_{\alpha\alpha}$, поэтому

$$I \simeq \frac{4e}{h} \sum_{\alpha} \frac{\Gamma_{L\sigma} \Gamma_{R\sigma}}{\Gamma_{\sigma}} b_{\alpha} \gamma_{\sigma}^{2}(\alpha) \left[arctg\left(\frac{\omega_{0\alpha} + eV/2}{\kappa_{\alpha}}\right) - arctg\left(\frac{\omega_{0\alpha} - eV/2}{\kappa_{\alpha}}\right) \right].$$
(2.79)

При проведении численных расчетов все энергетические параметры измерялись в единицах |t|, t = -1 эВ. Как следует из экспериментальных [44, 129, 130] и теоретических [131, 132] работ, между параметрами модели выполнялись следующее соотношения $|t_L|$, $|t_R| > |A|$, |D|, $|\varepsilon_d|$, |h|. Отмеченная область параметров включает и такие соотношения, когда соблюдается условие туннельной связи устройства с контактами, $\Gamma_{\sigma} \ll E_{\alpha}$. Поскольку $W \gg h$, то будем считать, что $g_{L\sigma} = g_{R\sigma} = 1/W$ [133].



Рис. 2.3: Зависимость неравновесных чисел заполнения от энергии электрического поля смещения для параметров t = -1 эВ, $t_L = t_R = t/100$, $\varepsilon_d = A = 0.005$, D = 0.003, U = 0.01, T = 1 K, g = 2, h = 0. На вставке представлены возможные электронные переходы между уровнями системы.

Для начала остановимся на результатах численного решения системы кинетических уравнений для чисел заполнения, которые находились при услови
и $\sum_{i=1}^{12} N_i = 1.$ На рисунке 2.3 представлены зависимости неравновесных чисел заполнения состояний системы электроны+магнитная примесь, N, от энергии электрического поля смещения, eV, при h = 0. Для определенности предположим, что в равновесном случае $(t_L = t_R = 0)$ основным состоянием рассматриваемой системы при D > 0 являлось состояние без электронов с $S^z=0,\;|1
angle,\;N_1\simeq 1.$ Тогда в неравновесных условиях, когда активизируются процессы многократного неупругого рассеяния, должны заселяться верхние по энергии состояния магнитной примеси, как это продемонстрировано на вставке рис. 2.3. Видно, что N₁ начинает существенно отклоняться от равновесного значения уже при нулевом напряжении. Чтобы понять причину возникающих при $V \neq 0$ особенностей в поведении чисел заполнения и тока обратимся к соответствующим аналитическим выражениям (2.77) и (2.79). Поскольку $W/2 \gg E_{\alpha}, eV/2 \gg$ $\lambda_{\alpha}, \kappa_{\alpha}$, то главные эффекты будут иметь место в области $eV/2 \sim E_{\alpha}$. Действительно, пренебрегая малыми поправками к энергии перехода α , $E_{\alpha} < 0$ (> 0), в туннельном режиме можно видеть, что при $eV/2 < E_{\alpha}$ и $t_L = t_R$, верхний уровень остается незаполненным, $N_m = 0$ ($N_n = 0$), а вклад в ток от этого перехода отсутствует, $I_{\alpha\alpha} = 0$. В свою очередь, когда $eV/2 > E_{\alpha}$, заполнение уровней одинаково, $N_n = N_m$, а вклад в ток от такого канала становится ненулевым, $I_{\alpha\alpha} = 2e\Gamma_{L\sigma}\Gamma_{R\sigma}b_{\alpha}\gamma_{\sigma}^{2}(\alpha)/\Gamma_{\sigma}$. Вернемся к рисунку 2.3. Наименьшей энергией перехода является энергия $E_{3,5} \approx 0.0013$. Однако, с возрастанием V в области $eV/2 \sim E_{3,5}$ никаких существенных изменений в распределении вероятностей заполнения уровней и ВАХ (см. пунктирную кривую на рис. 2.5а) не наблюдается. Это связано с тем, что лежащие ниже состояния $|4,5\rangle$ (см. штриховую кривую на рис. 2.3) практически не заполнены. Заселенность этих состояний становится значительной, только когда энергия электрического поля подходит к удвоенной энергии следующего перехода ($E_{1,4} \approx -0.0017$). В результате одновременно заполняются состояния $|4,5\rangle$ и $|2,3\rangle$ (пунктирная кривая на рис. 2.3). Как видно, соответствующая особенность в форме ступеньки появляется и в ВАХ.

На вставке рисунка 2.3 показано расположение всех уровней энергии системы при выбранных параметрах. Стрелками с цифрами показаны возможные переходы с из-

менением числа электронов на единицу. Причем, номер перехода соответствует номеру ступенчатой особенности на графике. В частности, стрелками с цифрами 1 и 2 обозначены обсуждавшиеся выше переходы между состояниями безэлектронного и одноэлектронного секторов гильбертова пространства. При возрастании напряжения в транспорт включаются все новые каналы, относящиеся к одноэлектронным и двухэлектронным состояниям. И при больших *eV* заполнение всех состояний становится равновероятным. ВАХ имеет характерный для режима слабой связи наноструктуры с контактами ступенчатый вид (аналогично эффекту кулоновской блокады в квантовых точках [123,124]), наблюдаемый в экспериментах с магнитными молекулами [127,128]. Существенно, что пренебрежение процессами неравновесного возбуждения магнитного атома в результате неупругого рассеяния носителей приводит к значительно более простой ВАХ (см. штриховую кривую на рис. 2.5а).



Рис. 2.4: Модификация зависимостей чисел заполнения $N_{8,9}(eV)$ в магнитном поле $h = 5 \cdot 10^{-4}$ для параметров рисунка 2.3.

При включении магнитного поля, как видно из (2.73), происходит снятие вырождения по энергии для состояний системы с противоположными проекциями суммарного спина. Следовательно, становятся не равными друг другу и энергии переходов, связанные с этими состояниями. Тогда возбужденное состояние с проекцией суммарного спина, имеющей тот же знак, что и магнитное поле, активируется раньше состояния, обладающего суммарной проекцией спина обратного знака. Данный факт наглядно изображен на рисунке 2.4, где приведены зависимости $N_{8,9} (eV)$ без учета (сплошная кривая) и с учетом (штриховая и пунктирная кривые, соответственно) магнитного поля. Аналогичным образом при включении магнитного поля ведут себя неравновесные числа заполнения и других состояний, вырожденных при h = 0. В результате увеличивается число кулоновских ступенек в ВАХ, что хорошо видно из сравнения сплошной $(h \neq 0)$ и пунктирной (h = 0) кривых на рисунке 2.5а. Такая модификация приводит к тому, что на места плато ВАХ без магнитного поля могут приходиться скачки тока при $h \neq 0$. Таким образом, рассматриваемая система обладает магнитосопротивлением, $MR = (G (h) / G (0) - 1) \cdot 100\%$ (G = dI/dV - дифференциальная проводимость), амплитудой которого достигает величин порядка 10⁵ % (см. вставку рис. 2.5а).



Рис. 2.5: ВАХ магнитного атома для параметров рисунка 2.4: (a) D = 0.003; (b) D = -0.003. На вставках рисунков (a) и (b) - магнитосопротивление структуры и участок ВАХ с ОДП, соответственно.

ВАХ на рисунке 2.5b при h = 0 и $h \neq 0$ (пунктирная и сплошная кривые, соответственно), построенные при обратном знаке параметра анизотропии магнитной примеси (D < 0), имеют участки с отрицательной дифференциальной проводимостью (ОДП). Два таких участка подробно представлены на вставке рисунка 2.5b. Как уже отмечалось выше, при энергиях электрического поля $eV/2 \sim E_{\alpha}$ в ВАХ возникает скачек порядка $I_{\alpha\alpha} = 2e\Gamma_{L\sigma}\Gamma_{R\sigma}b_{\alpha}\gamma_{\sigma}^{2}(\alpha)/\Gamma_{\sigma}$, связанный с заселением нового возбужденного состояния системы. Однако, в силу того, что и в неравновесном режиме должно выполняться условие полноты, $\sum_{n=1}^{N_D} N_n = 1$, начинают уменьшаться числа заполнения, неравные нулю при меньших напряжениях. Поэтому даже при включении дополнительного канала для электронного транспорта полный ток может падать. В результате условие для возникновения ОДП имеет следующий вид

$$\sum_{\beta} I_{\beta\beta} \left(V_1 \right) > \sum_{\beta} I_{\beta\beta} \left(V_2 \right) + I_{\alpha\alpha} \left(V_2 \right), \ V_1 < V_2.$$
(2.80)

Таким образом, изменяя кристаллическое окружение магнитного атома или молекулы, например, помещая их в топологически неэквивалентные места на подложке [109], можно добиться значительной модификации транспортных свойств систем атомного масштаба.



Рис. 2.6: Влияние асимметрии связи магнитного атома с контактами на (a) ВАХ и (b) неравновесные числа заполнения устройства для параметров рисунка 2.3, $t_L = t/50$, $t_R = t_L/10$.

Если взаимное изменение "нового" и "старых" чисел заполнения будет особенно значительным, то это приведет к усилению эффекта ОДП. Подобная картина наблюдается в присутствии асимметрии туннельной связи контактов со структурой, $t_L > t_R$, $\Gamma_{L\sigma} \gg \Gamma_{R\sigma}$. На рисунке 2.6а изображены ВАХ для случая асимметричной связи магнитной структуры с контактами при D > 0 (пунктирная кривая) и D < 0 (сплошная кривая). В области $-eV/2 \sim E_{6,11} \approx 0.01$ относительное изменение тока сильнее, чем в аналогичной ситуации, $eV/2 \sim E_{6,11}$, при $t_L = t_R$ (см. вставку на рис. 2.5b). Для того, чтобы понять причину этого отличия, проанализируем эволюцию заселенностей состояний системы. При V < 0 преобладает поток электронов в область правого контакта. Однако, в рассматриваемых условиях переход электронов с уровня устройства в правый контакт в значительной степени подавлен, и при достаточно больших абсолютных значениях V происходит накопление электронов в устройстве и, как следствие, заполнение преимущественно двухэлектронных состояний, N_{10} , N_{11} и N_{12} , с одновременным резким падением заселенности остальных состояний (см. область eV < -0.02 на рис. 2.6b). Поэтому уменьшение модуля тока происходит на величину большую по сравнению со случаем симметричной туннельной связи, $t_L = t_R$. Существенно, что аналогичный эффект ОДП отсутствует при напряжении обратной полярности, $eV/2 \sim E_{6,11}$. Для V > 0 в силу уже отмеченных причин в основном заполняются только безэлектронные состояния, N_1 , N_2 и N_3 . В результате полный ток практически не меняется при $eV/2 \sim E_{6,11}$ вследствие того, что данный переход между одно- и двухэлектронным состояниями. Таким образом, наблюдаемый при асимметричном подключении диодный эффект способствует более сильному падению абсолютной величины тока с ростом |V|.



Рис. 2.7: Среднее значение z-проекции полного спина системы, $\langle S_{tot}^z \rangle$, как функция энергии электрического поля смещения eV для параметров рисунка 2.6 и $h = 5 \cdot 10^{-4}$.

В заключении данного параграфа отметим, что в рассмотренной системе с высокой вероятностью реализуется переключение между состояниями с различными средними значениями проекции суммарного спина $\langle S_{tot}^z \rangle = \sum_{n=1}^{N_D} S_{tot}^z(n) \cdot N_n$. Зависимости $\langle S_{tot}^z \rangle \left(eV \right)$ при температурах T = 1~K (сплошная кривая) и T = 10~K (штриховая кривая) представлены на рисунке 2.7. Поведение
 $\langle S^z_{tot}\rangle$ при более низких температурах свидетельствует о том, что при энергиях электрического поля $-0.075 \le eV \le -0.05$ система находится в суперпозиции трех двухэлектронных состояний со средней суммарной проекцией спина, равной 0. В интервале -0.01 < eV < -0.005 эта величина равна 1/2; при -0.005 < eV < 0.005 с вероятностью выше 90 % реализуется состояние без электронов с $\langle S^z_{tot} \rangle = 1.$ При eV = 0.05 снова преимущественно заселены три состояния с $\langle S_{tot}^z \rangle = 0$. В свою очередь, усиление тепловых флуктуаций в системе, как и следовало ожидать, приводит к ослаблению эффекта переключения между состояниями с разным средним *z*-проекции полного спина (см. штриховую кривую на рис. 2.7). Подобная возможность управления магнитным состоянием объекта на атомном уровне под действием внешнего электрического поля может оказаться перспективной для приложений записи и хранения информации в наноэлектронике.

2.3.3 Связь между подходами Ландауэра-Бюттикера и Келдыша

Формальную связь подхода Келдыша, основанного на вычислении неравновесных функций Грина, с методом Ландауэра-Бюттикера, который базируется на решении задачи об одноэлектронном рассеянии на потенциальном рельефе анизотропной примеси (см. пункт 1.2.4), можно проследить, если представить (2.61) в виде, аналогичном (1.31) или (1.33), т.е.

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T_{eff}(\omega) \left(n_2(\omega) - n_1(\omega)\right) d\omega, \ T_{eff}(\omega) = 4 \sum_{\sigma} \frac{\Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} L_{11\sigma}^2(\omega)}{1 + \Gamma_{\sigma}^2 L_{11\sigma}^2(\omega)},$$
(2.81)

где $T_{eff}(\omega) = T_{eff\uparrow}(\omega) + T_{eff\downarrow}(\omega)$ - эффективный коэффициент прохождения. На рисунке 2.8 изображена зависимость $T_{eff\uparrow}(\omega)$ при $U \to \infty$. Остальные энергетические



Рис. 2.8: Энергетическая зависимость компоненты эффективного коэффициента прохождения $T_{eff\uparrow}$ при $t_L = t_R = t/50$. Остальные параметры взяты из рис. 2.3.

параметры, соотвествующие устройству, взяты из такими же, как и на рис. 2.3. Таким образом, как следует из (2.74) и (2.76), для проекции спина $\sigma = \uparrow$ в системе возможны пять переходов между одноэлектронным сектором и состояниями без электронов с корневыми векторами 1, 4; 1, 6; 3, 5; 3, 7; 2, 8. Кроме того, как уже отмечалось, в данной ситуации при eV = 0 самосогласованный расчет системы кинетических уравнений (2.65) приводит к следующему соотношению между числами заполнения (см. рис. 2.3):

$$N_1 \gg N_{4,5} \gg N_{6,7} \gg N_{8,9}.$$
 (2.82)

В результате, из состояния $|1\rangle$ возможны переходы в состояния $|4\rangle$ и $|6\rangle$, а $T_{eff\uparrow}$ содержит резонансы при $\omega = E_{1,4}$ и $\omega = E_{1,6}$, соответственно (см. штриховую кривую на рис. 2.8). Важно заметить, что учет процессов многократного рассеяния электронов, поступающих из контактов, приводит к тому, что числа заполнения возбужденных состояний все же отличны от нуля даже при eV = 0. Как следствие, возникают узкие резонансы Фано при $\omega = E_{3,5}$ и $\omega = E_{3,7}$. Причем ширина и симметричных, и асимметричных пиков определяется соотношением (2.82), т.е. прямо пропорционально сум-

ме чисел заполнения атомных орбиталей, участвующих в конкретном возбуждении, $b_{\alpha} = N_n + N_m$. Более того, если пренебрегать процессами многократного рассеяния, то пики Фано коллапсируют, т.к. в этом случае $N_1 = 1$ (см. пунктирную кривую на рис. 2.8). Эти наблюдения подтверждаются приближенным решением для тока (2.79), полученным при T, $\Gamma_{\sigma} \ll E_{\alpha}$, из которого следует, что уширение уровня энергии, связанного с переходом α , определяется выражением $\frac{\Gamma_{L\sigma}\Gamma_{R\sigma}}{\Gamma_{\sigma}}b_{\alpha}\gamma_{\sigma}^2(\alpha)$. При eV = 0.005, когда $N_1 = N_2 = ... = N_5$, резонансы Фано при $\omega = E_{3,5}$ и $\omega = E_{3,7}$ становятся шире (см. сплошную кривую на рис. 2.8). Кроме того, появляется дополнительный асимметричный резонанс при $\omega = E_{2,8}$. Из сравнения результатов при eV = 0 и $eV \neq 0$ следует, что в соответствии с условием полноты появление и уширение новых резонансов сопровождается синхронным сужением пиков, имевшихся изначально.



Рис. 2.9: Индуцирование и подавление магнитным полем резонансов Фано при eV = 0.002 и h = 0.001. Остальные параметры взяты из рис. 2.3.

Учитывая зависимость ширины резонанса Фано от концевого множителя b_{α} , можно реализовать эффект индуцирования резонансов Фано магнитным полем. Как уже отмечалось при анализе данных на рис. 2.4, если $h \neq 0$, то числа заполнения состояний с противоположной проекцией суммарного спина расщепляются. Как следствие, при фиксированном значении напряжения рост поля приводит к увеличению (уменьшению) заселенности состояний с $\sigma + S^z > (<) 0$. Изменение может быть значительным, если $eV/2 < |E_{\alpha} (h = 0)|$ и $eV/2 > |E_{\alpha} (h \neq 0)|$. Этот случай показан на рисунке 2.9. Поскольку в данной ситуации в нулевом поле рассматривается слабое напряжение, т.е. $\forall \alpha : eV/2 < |E_{\alpha} (h = 0)|$, то поведение $T_{eff\uparrow}(\omega)$ похоже на зависимость $T_{eff\uparrow}(\omega; eV = 0)$ на рис. 2.8 (ср. штриховые кривые). Разница состоит в том, что на рис. 2.9 параметры связи с контактами меньше, чем на рис. 2.8. В результате, заселенности возбужденных состояний меньше, и обсуждавшиеся резонансы Фано уже (см., в частности, особенность при $\omega = E_{3,5}$). В ненулевом поле числа заполнения N_2 и N_4 резко возрастают, а N_3 и N_5 становятся меньше. Это приводит к появлению широкого резонанса Фано при $\omega = E_{2,8}$ и, наоборот, к коллапсу узкого пика при $\omega = E_{3,5}$.

2.4 Эффекты неравновесного транспорта через спиновый димер

2.4.1 Атомное представление для устройства со спиновым димером

Обратимся к ситуации, когда в области между контактами находится спиновый димер, а устройство описывается гамильтонианом (2.4) при H = 0 [15, 18]. Диагонализуем его, используя операторы Хаббарда, по аналогии с тем, как это сделано в пункте 2.3.1. Для рассматриваемого нами устройства полное число состояний $|\Psi_n\rangle$, n =1, 2, ..., N_D равно 64. В режиме сильных корреляций параметр хаббардовского отталкивания U и величина межузельного кулоновского взаимодействия U_{12} значительно превосходят значения других энергетических параметров системы. Это позволяет ограничиться только такими состояниями устройства, которые содержат не более одного транспортируемого электрона. Таких состояний 20. Для их описания введем операторы рождения $f_{1\sigma}^+, f_{2\sigma}^+$ и уничтожения $f_{1\sigma}, f_{2\sigma}$ локализованных фермионов с проекцией спина σ на первом и втором узлах устройства. Тогда сектор гильбертова пространства гамильтониана устройства, не содержащий транспортируемых электронов, соответствует состояниям димерной системы. Синглетное состояние устройства записывается в виде

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(f_{1\uparrow}^+ f_{2\downarrow}^+ - f_{1\downarrow}^+ f_{2\uparrow}^+ \right) |0\rangle, \qquad E_1 = -3I/4,$$
(2.83)

где $|0\rangle$ - вакуумное состояние. Три триплетных состояний этого сектора определяются выражениями

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(f_{1\uparrow}^{+} f_{2\downarrow}^{+} + f_{1\downarrow}^{+} f_{2\uparrow}^{+} \right) |0\rangle, \quad |3\rangle = f_{1\uparrow}^{+} f_{2\uparrow}^{+} |0\rangle, \quad |4\rangle = f_{1\downarrow}^{+} f_{2\downarrow}^{+} |0\rangle$$
(2.84)

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

$$|5\rangle = \frac{a_{1\uparrow}^+ + a_{2\uparrow}^+}{\sqrt{2}}|3\rangle, \quad |6\rangle = \frac{\hat{S}_t^-}{\sqrt{3}}|5\rangle, \quad |7\rangle = \frac{\hat{S}_t^+}{\sqrt{3}}|8\rangle, \quad |8\rangle = \frac{a_{1\downarrow}^+ + a_{2\downarrow}^+}{\sqrt{2}}|4\rangle, \quad (2.85)$$

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

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

$$|9\rangle = \frac{a_{1\uparrow}^{+} - a_{2\uparrow}^{+}}{\sqrt{2}}|3\rangle, \quad |10\rangle = \frac{\hat{S}_{t}^{-}}{\sqrt{3}}|9\rangle, \quad |11\rangle = \frac{\hat{S}_{t}^{+}}{\sqrt{3}}|12\rangle, \quad |12\rangle = \frac{a_{1\downarrow}^{+} - a_{2\downarrow}^{+}}{\sqrt{2}}|4\rangle. \quad (2.86)$$

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

$$|1/2, 1/2\rangle_{\pm}^{g} = \sum_{\sigma} C_{g\sigma}^{\pm} \left(f_{1\sigma}^{+} f_{2\bar{\sigma}}^{+} a_{1\uparrow}^{+} + f_{1\bar{\sigma}}^{+} f_{2\sigma}^{+} a_{2\uparrow}^{+} \right) |0\rangle + C_{gg}^{\pm} \left(a_{1\downarrow}^{+} + a_{2\downarrow}^{+} \right) f_{1\uparrow}^{+} f_{2\uparrow}^{+} |0\rangle,$$

$$|1/2, 1/2\rangle_{\pm}^{u} = \sum_{\sigma} C_{u\sigma}^{\pm} \left(f_{1\sigma}^{+} f_{2\bar{\sigma}}^{+} a_{1\uparrow}^{+} - f_{1\bar{\sigma}}^{+} f_{2\sigma}^{+} a_{2\uparrow}^{+} \right) |0\rangle + C_{uu}^{\pm} \left(a_{1\downarrow}^{+} - a_{2\downarrow}^{+} \right) f_{1\uparrow}^{+} f_{2\uparrow}^{+} |0\rangle.$$
(2.87)

В результате, оставшиеся восемь состояний нумеруются следующим образом:

$$|13\rangle = |1/2, 1/2\rangle_{+}^{g}, |14\rangle = \hat{S}_{t}^{-}|13\rangle, |15\rangle = |1/2, 1/2\rangle_{-}^{g}, |16\rangle = \hat{S}_{t}^{-}|15\rangle,$$
(2.88)

$$|17\rangle = |1/2, 1/2\rangle_{+}^{u}, |18\rangle = \hat{S}_{t}^{-}|17\rangle, |19\rangle = |1/2, 1/2\rangle_{-}^{u}, |20\rangle = \hat{S}_{t}^{-}|19\rangle.$$
(2.89)
При записи выражений (2.87) использовались обозначения:

$$C_{g\uparrow}^{\pm} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{b_g^{\pm}}{Z_g^{\pm}}, \quad C_{g\downarrow}^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{a_g^{\pm}}{Z_g^{\pm}}, \quad C_{gg}^{\pm} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{c_g^{\pm}}{Z_g^{\pm}}, \quad Z_g^{\pm} = \sqrt{\left(a_g^{\pm}\right)^2 + \left(b_g^{\pm}\right)^2 + \left(c_g^{\pm}\right)^2},$$
$$C_{u\uparrow}^{\pm} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{b_u^{\pm}}{Z_u^{\pm}}, \quad C_{u\downarrow}^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{a_u^{\pm}}{Z_u^{\pm}}, \quad C_{uu}^{\pm} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{c_u^{\pm}}{Z_u^{\pm}}, \quad Z_u^{\pm} = \sqrt{\left(a_u^{\pm}\right)^2 + \left(b_u^{\pm}\right)^2 + \left(c_u^{\pm}\right)^2} (2.90)$$

где

$$a_{g}^{\pm} = (\nu_{g} \mp A) (\nu_{g} \mp I \mp 2t_{d}), \quad b_{g}^{\pm} = (I + 2t_{d}) (\nu_{g} \mp I \mp 2t_{d}), \quad c_{g}^{\pm} = A (\nu_{g} \mp A),$$

$$a_{u}^{\pm} = (\nu_{u} \mp A) (\nu_{u} \mp I \pm 2t_{d}), \quad b_{u}^{\pm} = (I - 2t_{d}) (\nu_{u} \mp I \pm 2t_{d}), \quad c_{u}^{\pm} = A (\nu_{u} \mp A),$$

$$\nu_{g} = \sqrt{(A - I - 2t_{d})^{2} + A (I + 2t_{d})}, \quad \nu_{u} = \sqrt{(A - I + 2t_{d})^{2} + A (I - 2t_{d})}.$$
(2.91)

Тогда, в рамках принятой нумерации одноэлектронных состояний их энергии записываются как

$$E_{5(9)} = \xi_d + \frac{A+I}{4} \pm t_d, \ E_{13(15)} = \xi_d - \frac{A+I}{4} \pm \frac{\nu_g}{2}, \ E_{17(19)} = \xi_d - \frac{A+I}{4} \pm \frac{\nu_u}{2}.$$
(2.92)

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

$$\gamma_{1\uparrow}(3,5) = \gamma_{1\uparrow}(3,9) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \ \gamma_{1\uparrow}(2,6) = \gamma_{1\uparrow}(2,10) = \frac{1}{\sqrt{3}}, \ \gamma_{1\uparrow}(4,7) = \gamma_{1\uparrow}(4,11) = \frac{1}{\sqrt{6}},$$

$$\gamma_{1\uparrow}(1,13(15)) = \frac{C_{g\uparrow}^{+(-)} - C_{g\downarrow}^{+(-)}}{\sqrt{2}}, \ \gamma_{1\uparrow}(1,17(19)) = \frac{C_{u\uparrow}^{+(-)} - C_{u\downarrow}^{+(-)}}{\sqrt{2}},$$

$$\gamma_{1\uparrow}(2,13(15)) = -\frac{C_{gg}^{+(-)}}{\sqrt{2}}, \ \gamma_{1\uparrow}(2,17(19)) = -\frac{C_{uu}^{+(-)}}{\sqrt{2}},$$

$$\gamma_{1\uparrow}(4,14(16)) = \sqrt{2}\gamma_{1\uparrow}(2,13(15)), \ \gamma_{1\uparrow}(4,18(20)) = \sqrt{2}\gamma_{1\uparrow}(2,17(19)).$$

(2.93)

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

2.4.2 Транспортные свойства устройства с димерной молекулой

В предыдущем параграфе было приведено кинетическое уравнение (2.66), которое в общем виде выражает зависимость чисел заполнения состояний системы спиновый димер+электрон от интенсивностей переходов между этими состояниями, температуры, характеристик контактов и напряжения смещения. Для упрощения процедуры вычисления интеграла, стоящего в правой части уравнения (2.66), сделаем ряд замечаний [18]. Из вида параметров представления (2.93) следует, что $\gamma_{1\sigma}(\alpha)$ и $\gamma_{2\sigma}(\alpha)$ могут отличаться только знаком. Далее, пусть имеется p переходов из N, для которых $\Theta_{12}^{\sigma}(\alpha) \equiv sign\left[\gamma_{1\sigma}(\alpha)\gamma_{2\sigma}(\alpha)\right] = +1$. Тогда, избавляясь от затравочных полюсов в исходном кинетическом уравнении (2.66), получим два варианта записи последнего в зависимости от типа перехода α :

1).
$$\gamma_{1\sigma}(\alpha) = \gamma_{2\sigma}(\alpha), \ N_m = \sum_{\sigma} \int d\omega \frac{b_{\alpha}^2 \gamma_{1\sigma}^2(\alpha)}{\pi} \frac{\Pi_{\alpha 1}^2(\omega) K_{2\sigma}(\omega)}{\Delta_{\sigma 0}(\omega)},$$
 (2.94)
2). $\gamma_{1\sigma}(\alpha) = -\gamma_{2\sigma}(\alpha), \ N_m = \sum_{\sigma} \int d\omega \frac{b_{\alpha}^2 \gamma_{1\sigma}^2(\alpha)}{\pi} \frac{\Pi_{\alpha 2}^2(\omega) K_{1\sigma}(\omega)}{\Delta_{\sigma 0}(\omega)},$

где

$$\Delta_{\sigma 0} = \left[\Pi - 4\Gamma_{1\sigma}\Gamma_{2\sigma} \sum_{\alpha=1}^{N-p} b_{\alpha}\gamma_{1\sigma}^{2}(\alpha) \Pi_{\alpha 1} \cdot \sum_{\beta=N-p+1}^{N} b_{\beta}\gamma_{1\sigma}^{2}(\beta) \Pi_{\beta 2} \right]^{2} \qquad (2.95)$$

$$+ \Gamma_{\sigma}^{2} \left[\sum_{\alpha=1}^{N} b_{\alpha}\gamma_{1\sigma}^{2}(\alpha) \Pi_{\alpha} \right]^{2},$$

$$\Pi = \prod_{\nu=1}^{N-p} \omega_{\nu} \cdot \prod_{\nu=N-p+1}^{N} \omega_{\nu} \equiv \Pi_{1} \cdot \Pi_{2}, \ \Pi_{\alpha} = \Pi/\omega_{\alpha}, \ \Pi_{\alpha 1(2)} = \Pi_{1(2)}/\omega_{\alpha},$$

$$K_{1(2)\sigma} = (\Gamma_{1\sigma}n_{1} + \Gamma_{2\sigma}n_{2}) \Pi_{1(2)}^{2} + 2\Gamma_{1\sigma}\Gamma_{2\sigma} (\Gamma_{1\sigma}n_{2} + \Gamma_{2\sigma}n_{1}) \left[\sum_{\alpha=1(N-p+1)}^{N-p} b_{\alpha}\gamma_{1\sigma}^{2}(\alpha) \Pi_{\alpha 1(2)} \right]^{2}$$

Из вида уравнений (2.94) и определений (2.95) следует, что в случае туннельной связи молекулы с контактами и низких температур, $\Gamma_{1,2\sigma}$, $T \ll E_{\alpha}$, основной вклад в интегралы в правых частях уравнений находится в окрестности энергии перехода α , $\omega=-E_{\alpha}.$ Принимая во внимание этот факт, перепишем линейные пропагаторы $L_{11,12\sigma}$ в следующем виде:

$$L_{11(12)\sigma} \approx B_{11(12)\sigma}(\alpha) / \omega_{\alpha} + \sum_{\nu: E_{\nu} \neq E_{\alpha}} \frac{b_{\nu} \gamma_{1\sigma}(\nu) \gamma_{1(2)\sigma}(\nu)}{E_{\nu} - E_{\alpha}}, \qquad (2.96)$$

где $B_{11(12)\sigma}(\alpha) = b_{\alpha}\gamma_{1\sigma}(\alpha)\gamma_{1(2)\sigma}(\alpha) + \sum_{\beta} b_{\beta}\gamma_{1\sigma}(\beta)\gamma_{1(2)\sigma}(\beta)$. Заметим, что при выводе (2.96) было учтено наличие в системе переходов с одинаковой энергией. В результате во множителях $B_{11(12)\sigma}(\alpha)$ суммирование идет по корневым векторам β , отвечающим условию $E_{\beta} = E_{\alpha}$. Подставляя выражения (2.96) в кинетическое уравнение, получим

$$N_m \approx \sum_{\sigma} \int d\omega \frac{b_{\alpha}^2 \gamma_{1\sigma}^2(\alpha)}{\pi} \frac{\Gamma_{1\sigma} n_1 + \Gamma_{2\sigma} n_2}{\omega_{\alpha}^2 + \kappa_{\sigma}^2(\alpha)},$$
(2.97)

где $\kappa_{\sigma}(\alpha) = \sqrt{\left(\Gamma_{1\sigma}^2 + \Gamma_{2\sigma}^2\right) B_{11\sigma}^2(\alpha) + 2\Gamma_{1\sigma}\Gamma_{2\sigma}B_{12\sigma}^2(\alpha)}.$

Решение уравнения (2.97) имеет вид

$$N_m \approx \frac{b_{\alpha}^2 \gamma_{1\sigma}^2(\alpha)}{\kappa_{\sigma}(\alpha)} \left\{ \frac{\Gamma_{\sigma}}{2} + \frac{\Gamma_{1\sigma}}{\pi} \operatorname{arctg}\left(\frac{E_{\alpha} - eV/2}{\kappa_{\sigma}(\alpha)}\right) + \frac{\Gamma_{2\sigma}}{\pi} \operatorname{arctg}\left(\frac{E_{\alpha} + eV/2}{\kappa_{\sigma}(\alpha)}\right) \right\}.$$
 (2.98)

Действуя аналогичным образом, находим уравнение для N_n ,

$$N_n \approx \frac{b_\alpha^2 \gamma_{1\sigma}^2(\alpha)}{\kappa_\sigma(\alpha)} \left\{ \frac{\Gamma_\sigma}{2} - \frac{\Gamma_{1\sigma}}{\pi} \operatorname{arctg}\left(\frac{E_\alpha - eV/2}{\kappa_\sigma(\alpha)}\right) - \frac{\Gamma_{2\sigma}}{\pi} \operatorname{arctg}\left(\frac{E_\alpha + eV/2}{\kappa_\sigma(\alpha)}\right) \right\}.$$
 (2.99)

При этом решения системы кинетических уравнений должны удовлетворять условию полноты, т.е. $\sum_{i=1}^{20} N_i = 1.$

Суммарный электронный ток формируется вкладами от различных переходов, $I = \sum_{\alpha,\beta} I_{\alpha\beta}$. В режиме туннельной связи и низких температур диагональные компоненты $I_{\alpha\alpha}$, а также недиагональные $I_{\alpha\beta}$, для которых $E_{\alpha} = E_{\beta}$, являются определяющими:

$$I_{\alpha\alpha} \approx \frac{4e}{h} \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} \frac{b_{\alpha}^{2} \gamma_{1\sigma}^{4}(\alpha)}{\kappa_{\sigma}(\alpha)} \left\{ \operatorname{arctg} \left(\frac{E_{\alpha} + eV/2}{\kappa_{\sigma}(\alpha)} \right) - \operatorname{arctg} \left(\frac{E_{\alpha} - eV/2}{\kappa_{\sigma}(\alpha)} \right) \right\}, \quad (2.100)$$

$$I_{\alpha\beta} \approx \frac{4e}{h} \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} \Theta_{12}^{\sigma}(\alpha) \Theta_{12}^{\sigma}(\beta) \frac{b_{\alpha} b_{\beta} \gamma_{1\sigma}^{2}(\alpha) \gamma_{1\sigma}^{2}(\beta)}{\kappa_{\sigma}(\alpha)} \left\{ \operatorname{arctg} \left(\frac{E_{\alpha} + eV/2}{\kappa_{\sigma}(\alpha)} \right) - \operatorname{arctg} \left(\frac{E_{\alpha} - eV/2}{\kappa_{\sigma}(\alpha)} \right) \right\}.$$

Соответствующие вклады в дифференциальную проводимость, $\partial I/\partial V$, имеют вид

$$\begin{split} G_{\alpha\alpha} &\approx 2G_0\Gamma_1\Gamma_2 b_{\alpha}^2 \gamma_{1\sigma}^4\left(\alpha\right) \left\{ \frac{1}{\left(E_{\alpha} + eV/2\right)^2 + \kappa_{\sigma}^2\left(\alpha\right)} + \frac{1}{\left(E_{\alpha} - eV/2\right)^2 + \kappa_{\sigma}^2\left(\alpha\right)} \right\}, \ (2.101) \\ G_{\alpha\beta} &\approx 2G_0\Gamma_1\Gamma_2\Theta_{12}^{\sigma}\left(\alpha\right)\Theta_{12}^{\sigma}\left(\beta\right) b_{\alpha}b_{\beta}\gamma_{1\sigma}^2\left(\alpha\right)\gamma_{1\sigma}^2\left(\beta\right) \left\{ \frac{1}{\left(E_{\alpha} + eV/2\right)^2 + \kappa_{\sigma}^2\left(\alpha\right)} + \frac{1}{\left(E_{\alpha} - eV/2\right)^2 + \kappa_{\sigma}^2\left(\alpha\right)} \right\}, \end{split}$$

где $G_0 = e^2/h$ - квант проводимости. Из формулы (2.101) видно, что максимальные значения этих вкладов реализуются при $eV = \pm 2E_{\alpha}$. В случае симметричного транспортного режима ($\Gamma_{1\sigma} = \Gamma_{2\sigma} = \Gamma_{\sigma}/2$) они равны

$$G_{\alpha\alpha}^{max} \approx G_0 \frac{b_{\alpha}^2 \gamma_{1\sigma}^4 \left(\alpha\right)}{B_{11\sigma}^2 \left(\alpha\right) + B_{12\sigma}^2 \left(\alpha\right)} \left[1 + \frac{\Gamma_{\sigma}^2 \left(B_{11\sigma}^2 \left(\alpha\right) + B_{12\sigma}^2 \left(\alpha\right)\right)}{4E_{\alpha}^2} \right], \qquad (2.102)$$

$$G_{\alpha\beta}^{max} \approx G_0 \frac{\Theta_{12}^{\sigma} \left(\alpha\right) \Theta_{12}^{\sigma} \left(\beta\right) b_{\alpha} b_{\beta} \gamma_{1\sigma}^2 \left(\alpha\right) \gamma_{1\sigma}^2 \left(\beta\right)}{B_{11\sigma}^2 \left(\alpha\right) + B_{12\sigma}^2 \left(\alpha\right)} \left[1 + \frac{\Gamma_{\sigma}^2 \left(B_{11\sigma}^2 \left(\alpha\right) + B_{12\sigma}^2 \left(\alpha\right)\right)}{4E_{\alpha}^2} \right].$$

Остановимся на примере, когда в системе реализуется лишь небольшое число переходов. При этом будем придерживаться следующего соотношения между энергетическими параметрами: $t, t_d \gg A \gg I$. Таким образом, меняя поле на затворе, можно контролировать вид основного состояния устройства - с электроном или без электрона. При расчетах все энергетические величины измеряются в единицах t. В частности, $\mu =$ 0. Дополнительно, будем рассматривать симметричное соединение устройства с контактами. Следовательно имеет место равенство $\kappa_{\sigma}(\alpha) = \Gamma_{\sigma} \sqrt{B_{11\sigma}^2(\alpha) + B_{12\sigma}^2(\alpha)}/\sqrt{2}$.

Предположим, что к устройству приложено такое поле затвора, что в нем отсутствует электрон при V = 0. Тогда синглетное состояние $|1\rangle$ является основным. Выше по энергии располагаются вырожденные одноэлектронные уровни, которым отвечают волновые функции $|19, 20\rangle$. Далее следуют триплетные состояния димера, $|2, 3, 4\rangle$, когда электрон в устройстве снова отсутствует. В результате возможны по три перехода для $\sigma = \uparrow$ и $\sigma = \downarrow$ между следующими парами состояний устройства (1,19), (2, 19), (4, 20) и (1, 20), (2, 20), (3, 19), соответственно. Поскольку в отсутствии магнитного поля переходы для электронов с противоположной проекцией спина эквивалентны, то в дальнейшем мы будет анализировать кинетические уравнения для переходов с $\sigma = \uparrow$. Кроме того, поскольку интенсивности переходов пропорциональны $\gamma_{i\sigma}^2(\alpha)$ $(i=1,\ 2)$ и, исходя из (2.93), $\gamma^2_{i\uparrow}(1,19)=\gamma^2_{i\uparrow}(1,20),\ \gamma^2_{i\uparrow}(4,20)=\gamma^2_{i\uparrow}(3,19),$ то будем предполагать, что $N_3 = N_4$ и $N_{19} = N_{20}$. Для последующего обсуждения важно, что энергии переходов в триплетные состояния димера одинаковы, $E_{2,19} = E_{4,20}$. Одновременно с этим $\gamma_{i\uparrow}^2(4,20) = 2\gamma_{i\uparrow}^2(2,19)$. Тогда получаем $B_{11\uparrow}(1,19) = B_{12\uparrow}(1,19) =$ $b_{(1,19)}\gamma_{1\uparrow}^2(1,19), \text{ a также } B_{11\uparrow}(2,19) = B_{11\uparrow}(4,20) = -B_{12\uparrow}(2,19) = -B_{12\uparrow}(4,20) = -B_{12\uparrow}(4,20)$ $(b_{(2,19)} + 2b_{(4,20)}) \gamma_{1\uparrow}^2(2,19)$. В результате кинетические уравнения (2.98) и (2.99) в случае парамагнитных контактов ($\Gamma_{i\sigma} = \Gamma_{i\overline{\sigma}} = \Gamma_i$) приобретают следующий вид:

$$N_m \approx \frac{b_{\alpha}^2 \gamma_{1\uparrow}^2(\alpha)}{2B_{11\uparrow}(\alpha)} \left\{ 1 + \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg}\left(\frac{E_{\alpha} - eV/2}{\Gamma B_{11\uparrow}(\alpha)}\right) + \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg}\left(\frac{E_{\alpha} + eV/2}{\Gamma B_{11\uparrow}(\alpha)}\right) \right\}, (2.103)$$
$$N_n \approx \frac{b_{\alpha}^2 \gamma_{1\uparrow}^2(\alpha)}{2B_{11\uparrow}(\alpha)} \left\{ 1 - \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg}\left(\frac{E_{\alpha} - eV/2}{\Gamma B_{11\uparrow}(\alpha)}\right) - \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg}\left(\frac{E_{\alpha} + eV/2}{\Gamma B_{11\uparrow}(\alpha)}\right) \right\}. (2.104)$$

Поскольку $\Gamma B_{11\uparrow}(\alpha) \ll 1$, то из уравнений (2.103) и (2.104) следует, что $\frac{1}{\pi} arctg\left(\frac{E_{\alpha} \pm eV/2}{\Gamma B_{11\uparrow}(\alpha)}\right) \rightarrow \frac{1}{2} sign\left(E_{\alpha} \pm eV/2\right)$. Кроме того, условие полноты приводит к дополнительной связи $N_1 + N_2 + 2N_4 + 2N_{19} = 1$.

Рассмотрим решение системы кинетических уравнений для трех случаев: I) $eV/2 < |E_{1,19}|, E_{2,19}$ (слабое напряжение); II) $|E_{1,19}| < eV/2 < E_{2,19}$ (промежуточное напряжение); III) $eV/2 > |E_{1,19}|, E_{2,19}$ (сильное напряжение). При слабом напряжении решение уравнений (2.103) и (2.104) дает $N_2 = N_4 = N_{19} = 0$, т.е. из условия полноты следует, что заселено только синглетное состояние димера, $N_1 = 1$. В режиме промежуточного напряжения уравнение (2.103), записанное для $\alpha = (1, 19)$, приводит к соотношению $N_1 = N_{19}$. В свою очередь, уравнение (2.104) в случаях $\alpha = (2, 19)$ и $\alpha = (4, 20)$ имеет следствием $N_2 = 0$ и $N_4 = 0$, соответственно. В результате получаем $N_1 = N_{19} = N_{20} = 1/3$. В режиме сильных напряжений также получаем равенство $N_1 = N_{19}$. Следовательно, $b_{(2,19)} + 2b_{(4,20)} = 1$. Это позволяет записать два уравнения $(N_2 + N_{19})^2 - 2N_2 = 0$ и $(N_4 + N_{19})^2 - N_4 = 0$. Решение этих уравнений с учетом условия полноты дает

$$N_2 = \frac{7}{2} - 2\sqrt{3}, \ N_1 = N_{19} = \sqrt{2N_2} - N_2, \ N_3 = N_4 = \frac{1}{2} - N_{19} - \frac{1}{2}\sqrt{1 - 4N_{19}}.$$
 (2.105)

На рисунке 2.10а приведена зависимость чисел заполнения состояний системы от энергии электрического поля исток-сток. Величины N_i существенно отличаются в трех различных областях eV: I), II) и III). В частности, в области III), согласно (2.105), наблюдается неодинаковая заселенность триплетных уровней димера (сравните пунктирную и штрих-пунктирную кривые). На рисунке 2.10b представлена ВАХ для того же набора параметров. Кривая тока имеет два скачка: между областями I), II) и II), III), соответственно. Каждая из этих ступенек сигнализирует о включении в транспорт новых, ранее не заселенных состояний. Это видно из сопоставления



Рис. 2.10: Зависимость чисел заполнения состояний системы димер+электрон (a) и тока (b) от энергии электрического поля смещения. Вкладка: скачок тока, вызванный активацией переходов в одноэлектронные состояния системы. Параметры: $t_d = 1$, $\xi_d = 1.145$, A = 0.3, I = 0.02.

рисунков 2.10а и 2.10b. Из формул (2.100) следует, что высота ступенек существенно зависит от $\gamma_{1\sigma}^2(\alpha)$. В частности, значительная разница высот скачков на рисунке 2.10b объясняется тем, что $\gamma_{1\uparrow}^2(2,19)$, $\gamma_{1\uparrow}^2(4,20) \gg \gamma_{1\uparrow}^2(1,19)$. Подчеркнем, что переходы между различными возбужденными состояниями системы проявляются в транспортных характеристиках лишь в том случае, если при самосогласованном решении системы кинетических уравнений учитывается неравновесная заселенность уровней. В противоположной ситуации в ВАХ наблюдается только ступеньки, соответствующие переходам из основного состояния (см. пунктирную кривую на рис.2.10b).

Если условно предположить, что $\gamma_{i\uparrow}^2(4,20) = \gamma_{i\uparrow}^2(2,19)$, тогда из (2.104) вытекает равенство $\sqrt{2N_2} - N_2 = \sqrt{2N_4} - N_4$. Пользуясь условием полноты, можно показать, что единственно возможным решением системы кинетических уравнений в таком случае является $N_2 = N_3 = N_4 = 1/18$ и $N_1 = N_{19} = N_{20} = 5/18$. Таким образом, если напряжение исток-сток достаточно сильное для активации переходов в триплетные состояния димера, то заселенность состояний с проекцией спина $S^z = 0$ и $S^z = \pm 1$ неодинакова вследствие отличия интенсивностей переходов, что можно интерпретировать как своего рода неравновесный эффект Зеемана.

Следует заметить, что в случае, если переход α невырожден по энергии, то при $eV > 2 \mid E_{\alpha} \mid$ уравнения (2.103) и (2.104) приводят к равенству $N_n = N_m$, поскольку $B_{11\sigma}(\alpha) = b_{\alpha}\gamma_{1\sigma}^2(\alpha)$. Следовательно, при включении магнитного поля и высоких напряжениях, когда все возможные переходы будут активированы, расщепление заселенностей триплетных состояний димера, подобное эффекту от создания легкоосной магнитной анизотропии, должно исчезнуть. При этом величина магнитного поля не может быть сколь угодно малой, т.к. приближенная запись линейных пропагаторов в виде $L_{11(12)\sigma} \approx b_{\alpha}\gamma_{1\sigma}(\alpha)\gamma_{1(2)\sigma}(\alpha)/\omega_{\alpha} + \sum_{\nu:E_{\nu}\neq E_{\alpha}} \frac{b_{\nu}\gamma_{1\sigma}(\nu)\gamma_{1(2)\sigma}(\nu)}{E_{\nu}-E_{\alpha}}$ возможна, только если $\mid E_{\nu} - E_{\alpha} \mid \gg \Gamma, T.$

Таким образом, из представленных результатов следует, что в неравновесном режиме имеется возможность управлять спиновыми состояниями димерной молекулы без приложения внешнего магнитного поля.

2.5 Стационарный джозефсоновский ток через димерную молекулу

2.5.1 Особенности эффекта Джозефсона в контакте с наноструктурой

Джозефсоновские структуры привлекают внимание исследователей благодаря возможности использовать их в качестве битов информации в будущих квантовых компьютерах и в традиционных электронных устройствах [95,134]. Когерентный характер транспорта куперовских пар через мезоскопический образец, расположенный между сверхпроводниками, позволяет исследовать основные характеристики такого нанообъекта [135]. Кроме того, свойства самих сверхпроводящих контактов могут быть исследованы в структурах подобного рода [136, 137]. Большое количество исследований в этой области было посвящено взаимосвязи механизма андреевского отражения [138] с кулоновской блокадой и Кондо-корреляциями [49, 135]. В частности, показано, что в

системе сверхпроводник/квантовая точка/сверхпроводник при сильном кулоновском отталкивании в области устройства, когда уровень квантовой точки находится ниже уровня Ферми, основной вклад в сверхток при $T_K < \Delta$ (где T_K и Δ - температура Кондо и величина сверхпроводящей щели, соответственно) обеспечивается туннельными процессами, приводящими к появлению фазового множителя $e^{i\pi}$ у спиновой части волновой функции куперовской пары. В результате критический ток становится отрицательным, $I_J = I_c \sin(\Theta + \pi) = -I_c \sin\Theta$ (где $\Theta = \Theta_L - \Theta_R$ - разность фаз параметров порядка в левом и правом сверхпроводниках), и реализуется π -контакт (или переход) [139–141]. С другой стороны, эффект Кондо подавляет куперовское спаривание при низких температурах, $T < T_K$ и $\Delta < T_K$, и 0-контакт восстанавливается за счет экранировки спинового момента на уровне точки [139,142]. Если в области устройства имеют место процессы рассеяния с переворотом спина, причем полный спин не сохраняется (например, если магнитное поле перпендикулярно оси квантования), то также возможна реализация *π*-контакта [143, 144]. Отмечалось также, что совместное влияние спин-орбитальной связи и зеемановского расщепления способно индуцировать данный эффект [145].

Современная технологическая база позволяет экспериментально исследовать джозефсоновский ток не только через нанопроволоки (в том числе режиме квантовой точки), углеродные нанотрубки, но и через структуры атомного масштаба. Так, в работе [146] анализировались особенности процессов андреевского отражения, когда между сверхпроводящими контактами находились молекулы металлофуллерена. Причем их количество удавалось контролировать, помещая в область устройства вплоть до отдельной молекулы металлофуллеренового димера (пара фуллеренов Gd). В случае отдельной молекулы вследствие эффекта близости наблюдался переход из высокорезистивного состояния перехода в низкорезистивное при уменьшении величины магнитного поля и температуры. Заметим, однако, что режима нулевого сопротивления достичь не удалось даже при очень низких температурах (T = 60 мK). Этот результат может быть связан с неполным подавлением магнитных флуктуаций или переходом из немагнитного основного состояния в магнитное, что приводит к рассеянию куперовской пары со сбоем фазы [147]. Ниже, на основе подхода, развитого в предыдущих параграфах этой главы, мы продемонстрируем аналогичные особенности транспортных свойств контакта, содержащего димерную молекулу, в полностью когерентном режиме. А именно, будет показано, что при стационарном эффекте Джозефсона критический ток существенно подавляется, если заселяется преимущественно магнитное состояние [10].

2.5.2 Теория стационарного эффекта Джозефсона в атомном представлении

Рассматриваемая система представляет собой джозефсоновский переход, где между *s*-волновыми сверхпроводниками находится молекула, состоящая из магнитного "ядра" в виде спинового димера ($S_1 = S_2 = 1/2$) и внешней орбитали, куда садится до двух электронов проводимости (см. рис. 2.11). Такая структура атомного масштаба, например, может приближенно описывать металлофуллереновый димер в эксперименте [146]. Гамильтониан системы в общем виде состоит из нескольких слагаемых



Рис. 2.11: Джозефсоновский переход с димерной молекулой.

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_D + \hat{H}_T.$$
(2.106)

Первые члены \hat{H}_L и \hat{H}_R описывают сверхпроводящие контакты в среднеполевом приближении теории Бардина-Купера-Шриффера [148],

$$\hat{H}_{L(R)} = \sum_{k(p)\sigma} \xi_{k(p)\sigma} c_{k(p)\sigma} c_{k(p)\sigma} + \sum_{k(p)} \left(\Delta e^{i\Theta_L} c_{k(p)\uparrow}^+ c_{-k(p)\downarrow}^+ + h.c. \right), \qquad (2.107)$$

где $c_{k(p)\sigma}$ - оператор уничтожения электрона с волновым вектором k(p) и проекцией спина σ в левом (правом) контакте; $\xi_{k(p)}$ - энергия электрона в левом (правом) контакте, отсчитываемая от уровня Ферми μ ($\mu = 0$). Гамильтониан димерной молекулы есть частный случай оператора (2.4) при j = 1 и $t_d, U, U_{12}, H = 0$, т.е.

$$\hat{H}_D = \sum_{\sigma} \xi_d a^+_{\sigma} a_{\sigma} + I\left(\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2\right) + A\left[\left(\sigma \mathbf{S}_1\right) + \left(\sigma \mathbf{S}_2\right)\right].$$
(2.108)

В результате, если спиновые моменты димера связаны посредством антиферромагнитного обмена с интенсивностью I > 0 в рамках выбранной модели, то при отсутствии электронов на уровне или при его двукратном заполнении синглетное состояние является основным, а триплетные находятся выше на величину I. Если на внешней орбитали находится один электрон, то вследствие обменного взаимодействия sf-типа, определяемого параметром A, возможны восемь состояний. Как и при рассмотрении контактов в нормальной фазе, далее введем операторы Хаббарда, действующие в пространстве собственных состояний гамильтониана устройства (2.108), X^{nm} (где n, m номера этих собственных состояний).

Последний член в (2.106) представляет собой туннельный гамильтониан,

$$\hat{H}_T = t_L \sum_{k\sigma} c^+_{k\sigma} a_\sigma + t_R \sum_{p\sigma} c^+_{p\sigma} a_\sigma + h.c.$$
(2.109)

Здесь $t_{L,R}$ - параметры связи левого и правого контактов с молекулой, соответственно.

Присутствие недиагональных членов в БКШ гамильтонианах (2.107) приводит к необходимости учета соответствующих аномальных средних при построении диаграммных рядов. Для этих целей удобным оказывается представление Горькова-Намбу, оперирующее четырехкомпонентными операторами [149–151],

$$\hat{\Psi}_{k(p)} = \begin{bmatrix} c_{k(p)\uparrow} & c^+_{-k(p)\downarrow} & c_{-k(p)\downarrow} & c^+_{k(p)\uparrow} \end{bmatrix}^T, \\ \hat{\Psi}_{\alpha} = \begin{bmatrix} X^{\alpha} & X^{-\alpha} & X^{\alpha} & X^{-\alpha} \end{bmatrix}^T.$$
(2.110)

Тогда, используя связь между операторами вторичного квантования и операторами Хаббарда через параметры представления, $a_{\sigma} = \sum_{\alpha} \gamma_{\sigma}(\alpha) X^{\alpha}$, туннельный гамильтониан (2.109) записывается в терминах введенных спиноров в следующем виде:

$$\hat{\mathscr{H}}_T = \sum_{k\alpha} \hat{\Psi}_k^+ \hat{t}_{L\alpha} \hat{\Psi}_\alpha + \sum_{p\sigma} \hat{\Psi}_p^+ \hat{t}_{R\alpha} \hat{\Psi}_\alpha + h.c., \qquad (2.111)$$

где
$$\hat{t}_{L(R)\alpha} = \hat{\sigma}\hat{t}_{L(R)}\hat{\gamma}_{\alpha}, \, \hat{\sigma} = diag \, (1, -1, 1, -1),$$

 $\hat{t}_{L(R)} = t_{L(R)} diag \left(e^{i\Theta_{L(R)}/2}, e^{-i\Theta_{L(R)}/2}, e^{i\Theta_{L(R)}/2}, e^{-i\Theta_{L(R)}/2}\right);$
 $\hat{\gamma}_{\alpha} = diag \left(\gamma_{\uparrow}(\alpha), \gamma_{\downarrow}(\alpha), \gamma_{\downarrow}(\alpha), \gamma_{\uparrow}(\alpha)\right).$
(2.112)

При выводе выражения (2.111), чтобы упростить последующие вычисления тока, мы провели унитарное преобразование, $\hat{U} = e^{\sum\limits_{k\sigma} \frac{i\Theta_L}{2} c^+_{k\sigma} c_{k\sigma} + \sum\limits_{p\sigma} \frac{i\Theta_R}{2} c^+_{p\sigma} c_{p\sigma}}$, которое переносит зависимость от фаз $\Theta_{L,R}$ в туннельный гамильтониан.

Стационарный джозефсоновский ток, $\langle I_L(t,t) \rangle = -e \langle \frac{dN_L(t,t)}{dt} \rangle \equiv I_J$, на языке операторов поля (2.110) имеет форму:

$$I_J = e \sum_{k\alpha} Re \Big\{ Tr \left[i\hat{\sigma} \langle \hat{\Psi}_k^+(t) \, \hat{t}_{L\alpha} \hat{\Psi}_\alpha(t) \rangle \right] \Big\} = e \sum_{k\alpha} Re \Big\{ Tr \left[\hat{\sigma} \hat{t}_{L\alpha} \hat{G}_{\alpha k}^{+-}(t,t) \right] \Big\}, \qquad (2.113)$$

Последнее равенство в (2.113) получено путем введения матричных неравновесных функций Грина, $\hat{G}_{ij}^{ab}(\tau - \tau') = -iT_C \langle \hat{\Psi}_i(\tau) \otimes \hat{\Psi}_j^+(\tau') \rangle$. Индексы *a*, *b*, как и прежде, принимают значения + или – в зависимости от того, на нижней или верхней ветви контура Келдыша находятся времена τ , τ' (см. рис. 2.1). Таким образом, ток Джозефсона по аналогии с (2.34) выражается через смешанную функцию Грина, включающую спинор контакта и молекулы. Рассматривая в качестве возмущения оператор (2.111) и расписывая диаграммный ряд для $\hat{G}_{\alpha k}^{+-}(t,t)$, ток выражается как,

$$I_J = e \int_C d\tau Re \Big\{ Tr \left[\hat{\sigma} \hat{G}^{+a} \left(t - \tau \right) \hat{\Sigma}_L^{a-} \left(\tau - t \right) \right] \Big\},$$
(2.114)

где

$$\hat{G}^{ab}(\tau - \tau') = \sum_{\alpha\beta} \hat{\gamma}_{\alpha} \hat{G}^{ab}_{\alpha\beta}(\tau - \tau') \hat{\gamma}^{+}_{\beta}, \quad \hat{\Sigma}^{ab}_{L}(\tau - \tau') = \sum_{k} \hat{t}^{+}_{L} \hat{G}^{ab}_{0k}(\tau - \tau') \hat{t}_{L}. \quad (2.115)$$

Проводя преобразование Фурье, а также используя связь неравновесных функций Грина с опережающими и запаздывающими (в частности, $\hat{G}^{++} = \hat{G}^r + \hat{G}^{+-}$ и $\hat{\Sigma}^{--} = \hat{\Sigma}^{+-} + \hat{\Sigma}^a$), получим

$$I_J = e \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} Re \Big\{ Tr \left[\hat{\sigma} \left(\hat{G}^r \left(\omega \right) \hat{\Sigma}_L^{+-} \left(\omega \right) + \hat{G}^{+-} \left(\omega \right) \hat{\Sigma}_L^a \left(\omega \right) \right) \right] \Big\}.$$
(2.116)

В равновесном случае, когда eV = 0, также имеют место соотношения $\hat{G}^{+-} = n \left(\hat{G}^a - \hat{G}^r \right)$, $\hat{\Sigma}^{+-} = n \left(\hat{\Sigma}^a - \hat{\Sigma}^r \right)$, где n - функция Ферми-Дирака. В результате, стационарный ток Джозефсона принимает вид:

$$I_{J} = e \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n(\omega) \operatorname{Re}\left\{ Tr\left[\hat{\sigma}\left(\hat{G}^{a}(\omega) \,\hat{\Sigma}_{L}^{a}(\omega) - \hat{G}^{r}(\omega) \,\hat{\Sigma}_{L}^{r}(\omega)\right)\right] \right\}.$$
(2.117)

В выражении (2.117) матричные функции Грина определяются из уравнений Дайсона,

$$\hat{G}^{r,a}(\omega) = \hat{L}^{r,a}(\omega) + \hat{L}^{r,a}(\omega)\hat{\Sigma}^{r,a}(\omega)\hat{G}^{r,a}(\omega).$$
(2.118)

Здесь матрицы линейных пропагаторов, $L^{r,a}(\omega) = \sum_{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha} \hat{G}^{r,a}_{0\alpha}(\omega) \hat{\gamma}^{+}_{\alpha}$, в общем случае $(H \neq 0)$ имеют вид:

$$\hat{L}^{r}(\omega) = \sum_{\alpha} \hat{L}^{r}_{\alpha}(\omega) = \sum_{\alpha} b_{\alpha} \begin{pmatrix} \frac{\gamma^{2}_{\uparrow\alpha}}{\omega + E_{\alpha} + i\delta} & 0 & \frac{\gamma_{\uparrow\alpha}\gamma_{\downarrow\alpha}}{\omega + E_{\alpha} + i\delta} & 0\\ 0 & \frac{\gamma^{2}_{\downarrow\alpha}}{\omega - E_{\alpha} + i\delta} & 0 & \frac{\gamma_{\uparrow\alpha}\gamma_{\downarrow\alpha}}{\omega - E_{\alpha} + i\delta} \\ \frac{\gamma_{\uparrow\alpha}\gamma_{\downarrow\alpha}}{\omega + E_{\alpha} + i\delta} & 0 & \frac{\gamma^{2}_{\downarrow\alpha}}{\omega - E_{\alpha} + i\delta} & 0\\ 0 & \frac{\gamma_{\uparrow\alpha}\gamma_{\downarrow\alpha}}{\omega - E_{\alpha} + i\delta} & 0 & \frac{\gamma^{2}_{\uparrow\alpha}}{\omega - E_{\alpha} + i\delta} \end{pmatrix}, \ \hat{L}^{a} = \left(\hat{L}^{r}\right)^{+}$$

$$(2.119)$$

где $b_{\alpha} = N_n + N_m$ - концевой множитель, $E_{\alpha} = E_n - E_m$ - энергия возбуждения с корневым вектором $\alpha(n,m)$. Важно заметить, что матричные элементы на побочных диагоналях \hat{L}^r равны нулю в нулевом или коллинеарном магнитном поле (см., например, выражения (2.76)). В свою очередь, в этом случае на главной диагонали матрицы каждого отдельного слагаемого \hat{L}^r ненулевыми являются элементы $\left[\hat{L}_{\alpha}^r\right]_{11,44}$ или $\left[\hat{L}_{\alpha}^r\right]_{22,33}$. Следовательно, в магнитном поле, ориентированном параллельно оси квантовая спиновых моментов системы, имеем $\hat{L}^r = diag(L_{e\uparrow}, L_{h\downarrow}, L_{e\downarrow}, L_{h\uparrow})$. Матрицы собственно-энергетической функции в уравениях Дайсона (2.118), учитывающие все возможные процессы нормального и андреевского отражения электронов в беспетлевом приближении, равны

$$\hat{\Sigma}^{r}(\omega) = \hat{t}_{L}^{+} \sum_{k} \hat{G}_{0k}^{r,a}(\omega) \,\hat{t}_{L} + \hat{t}_{R}^{+} \sum_{p} \hat{G}_{0p}^{r,a}(\omega) \,\hat{t}_{R}, \ \hat{\Sigma}^{a} = \left(\hat{\Sigma}^{r}\right)^{+}.$$
(2.120)

Для последующих преобразований удобно разбить интеграл в (2.117) на две области $|\omega| > \Delta$ и $|\omega| < \Delta$, поскольку затравочные матричные функции Грина БКШ-

контактов в них отличаются,

$$\sum_{k} \hat{G}_{0k}^{r}(\omega) = -\pi\nu_{0} \begin{pmatrix} \beta & \beta_{0} & 0 & 0\\ \beta_{0} & \beta & 0 & 0\\ 0 & 0 & \beta & \beta_{0}\\ 0 & 0 & \beta_{0} & \beta \end{pmatrix}, \ \beta_{0} = \beta \frac{\Delta}{\omega}, \ \beta = \begin{cases} \frac{\omega}{\sqrt{\Delta^{2} - \omega^{2}}}, \ |\omega| < \Delta;\\ \frac{i|\omega|}{\sqrt{\omega^{2} - \Delta^{2}}}, \ |\omega| > \Delta, \end{cases}$$
(2.121)

где ν_0 - плотность состояний контактов в нормальной фазе. При выводе (2.121), как в предыдущих параграфах данной главы, предполагалось, что контакты являются широкозонными металлами.

Решая уравнения Дайсона (2.118), получим следующую окончательную формулу, характеризующую стационарный джозефсоновский ток через структуру атомного масштаба в случае коллинеарного магнитного поля:

$$I_J = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n(\omega) j(\omega) \sin \Theta = I_{Jc} + I_{Jd}, \qquad (2.122)$$

$$j_{c} = 4e\Gamma\Gamma_{L}\Gamma_{R}i\beta\beta_{0}^{2}\left[\frac{L_{e\uparrow}L_{h\downarrow}\left(L_{e\uparrow}+L_{h\downarrow}\right)}{|Z_{e\uparrow,h\downarrow}|^{2}} + \frac{L_{e\downarrow}L_{h\uparrow}\left(L_{e\downarrow}+L_{h\uparrow}\right)}{|Z_{e\downarrow,h\uparrow}|^{2}}\right], \ |\omega| > \Delta; \quad (2.123)$$

$$j_d = 4e\Gamma_L \Gamma_R \beta_0^2 Im \left\{ \frac{L_{e\uparrow} L_{h\downarrow}}{Z_{e\uparrow,h\downarrow}} + \frac{L_{e\downarrow} L_{h\uparrow}}{Z_{e\downarrow,h\uparrow}} \right\}, \ |\omega| < \Delta,$$
(2.124)

где $Z_{e\uparrow,h\downarrow(e\downarrow,h\uparrow)} = (1 + L_{e\uparrow(\downarrow)}\Gamma\beta) (1 + L_{h\downarrow(\uparrow)}\Gamma\beta) - |B|^2\beta_0^2 L_{e\uparrow(\downarrow)}L_{h\downarrow(\uparrow)}, B = \Gamma_L e^{i\Theta_L} + \Gamma_R e^{i\Theta_R},$ $\Gamma_{L,R} = \pi \nu_0 t_{L,R}^2, \Gamma = \Gamma_L + \Gamma_R.$ Таким образом, ток Джозефсона имеет две составляющие: I_{Jc} - вклад от квазичастичных возбуждений непрерывного спектра $|\omega| > \Delta$ и I_{Jd} - ток, переносимый андреевскими связанными состояниями (ACC), когда $|\omega| < \Delta$. Энергии ACC являются корнями уравнения $Z_{e\uparrow,h\downarrow(e\downarrow,h\uparrow)} = 0$. Отметим, что в предельном случае одноуровневой квантовой точки (A = 0) такое уравнение аналогично соответствующим формулам в работах [152,153]. При этом очевидно, что выражения (2.123) и (2.124) не могут быть сведены к получаемым в случае прямого туннелирования между сверхпроводниками [154].

В нулевом магнитном поле $L_{e\uparrow} = L_{e\downarrow} \equiv L_e$ и $L_{h\uparrow} = L_{h\downarrow} \equiv L_h$ (т.е. можно ограничиться рассмотрением двухкомпонентных операторов Намбу [10]), как следствие получаем

$$j_{0c} = \frac{8e\Gamma\Gamma_{L}\Gamma_{R}\Delta^{2}|\omega|\sqrt{\omega^{2} - \Delta^{2}L_{e}L_{h}(L_{e} + L_{h})}}{\left[\left(\omega^{2} - \Delta^{2}\right)\left(1 - \Gamma^{2}L_{e}L_{h}\right) - \Gamma^{2}\Delta^{2}L_{e}L_{h}\sin^{2}\frac{\Theta}{2}\right]^{2} + \Gamma^{2}\omega^{2}\left(\omega^{2} - \Delta^{2}\right)\left(L_{e} + L_{h}\right)^{2}}, \quad (2.125)$$

$$j_{0d} = Im \left\{ \frac{8e\Gamma_L\Gamma_R\Delta^2 L_e L_h}{\left(\Delta^2 - \omega^2\right)\left(1 - \Gamma^2 L_e L_h\right) + \Gamma^2 \Delta^2 L_e L_h \sin^2 \frac{\Theta}{2} + \Gamma \omega \sqrt{\Delta^2 - \omega^2} \left(L_e + L_h\right)} \right\}.$$
 (2.126)

В свою очередь, числа заполнения, входящие в линейные пропагаторы $L_{e,h}$ в выражениях (2.125) и (2.126), определяются в результате самосогласованного решения следующей системы кинетических уравнений:

$$N_{m} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left[\hat{G}_{\alpha\alpha}^{+-}(\omega) \right]_{11} = b_{\alpha}n \left(-E_{\alpha} \right) +$$

$$+ \frac{\Gamma}{\pi} \left(\int_{-\infty}^{-\Delta} + \int_{\Delta}^{\infty} \right) \frac{n \left(\omega \right) |\omega| \sqrt{\omega^{2} - \Delta^{2}} \left[\left(\omega^{2} - \Delta^{2} \right) \left(1 + \Gamma^{2}L_{h}^{2} \right) + \Delta^{2}\Gamma^{2}L_{h}^{2}\sin^{2}\frac{\Theta}{2} \right] L_{e\alpha}^{2}d\omega}{\left[\left(\omega^{2} - \Delta^{2} \right) \left(1 - \Gamma^{2}L_{e}L_{h} \right) - \Delta^{2}\Gamma^{2}L_{e}L_{h}\sin^{2}\frac{\Theta}{2} \right]^{2} + \Gamma^{2}\omega^{2} \left(\omega^{2} - \Delta^{2} \right) \left(L_{e} + L_{h} \right)^{2}} + \frac{\Gamma}{\pi} \int_{-\Delta}^{\Delta} Im \left\{ \frac{n \left(\omega \right) \left[\sqrt{\Delta^{2} - \omega^{2}} \left(\omega - \Gamma L_{h} \sqrt{\Delta^{2} - \omega^{2}} \right) + \Delta^{2}\Gamma L_{h}\sin^{2}\frac{\Theta}{2} \right] L_{e\alpha}^{2}d\omega}{\left(\Delta^{2} - \omega^{2} \right) \left(1 - \Gamma^{2}L_{e}L_{h} \right) + \Delta^{2}\Gamma^{2}L_{e}L_{h}\sin^{2}\frac{\Theta}{2}} + \Gamma\omega\sqrt{\Delta^{2} - \omega^{2}} \left(L_{e} + L_{h} \right)^{2}} \right\},$$

$$(2.127)$$

где $L_{e\alpha} = b_{\alpha} \left[\gamma_{\uparrow}(\alpha) + \gamma_{\downarrow}(\alpha) \right] / (\omega + E_{\alpha} + i\delta)$. При нахождении заселенностей атомных состояний $|m\rangle$, как и прежде, должно учитываться условие полноты, $\sum_{m} N_{m} = 1$.

2.5.3 Подавление критического тока за счет неупругого рассеяния на спиновых моментах молекулы

В дальнейшем при расчетах все энергетические величины будут измеряться в единицах ширины сверхпроводящей щели $\Delta = 1$. В настоящей работе мы проанализировали случай симметричного джозефсоновского перехода, когда уширение уровней магнитной системы за счет связи с левым и правым контактами одинаково, $\Gamma_L = \Gamma_R = \Gamma/2$. Все расчеты проводились при нулевых температурах, T = 0. Итоговые ток-фазовые зависимости в общем виде можно представить как $I_J = I_c(\Theta) \sin \Theta$. Зависимостью $I_c(\Theta)$ в режиме туннельной связи, $\Gamma << \Delta$, можно пренебречь. Таким образом, критический ток в этом случае будем определять как $I_c = I_J (\Theta = \pi/2)$.



Рис. 2.12: (a) Зависимость критического тока от напряжения затвора $I_c(\varepsilon_d)$ при различных значениях интенсивности sf-обменной связи. (b) Плотность джозефсоновского тока $j(\omega)$ при $\varepsilon_d = -0.03$. На вставке сверху: плотность тока при $\omega \sim -\Delta$. На вставке снизу: резонансы в плотности тока, возникающие при самосогласованном расчете чисел заполнения. (c) Зависимость энергий ACC от разности фаз $E(\Theta)$ при $\varepsilon_d = 0, A = 0.5$. На вставке: $E(\Theta)$ для двух новых ACC, возникающих при самосогласованном расчете чисел заполнения. (d) Зависимость чисел заполнения состояний димерной молекулы от напряжения затвора $N(\varepsilon_d)$ при A = 1. Параметры: I = 0.15, $\Gamma = 0.1$, $\Delta = 1$.

На рисунке 2.12а представлена зависимость критического тока, I_c , от напряжения затвора, ε_d , при различных интенсивностях sf-взаимодействия, A. В случае A = 0(красная кривая) куперовская пара туннелирует через одноуровневую квантовую точку. Из зависимости плотности тока Джозефсона от энергии электрона $j(\omega)$ следует, что основной вклад в сверхток дает транспорт через АСС (пунктирная кривая на рисунке 2.12b в области $-\Delta < \omega < 0$). Это АСС связано с переходом из основного состояния молекулы с незаполненной орбиталью в возбужденное состояние с одним электроном в устройстве. Несмотря на то, что вклад в сверхток от состояний $\omega < -\Delta$ противоположен по знаку компоненте, определяемой транспортом через АСС, в туннельном режиме имеем $|I_{Jc}| \ll |I_{Jd}|$ (см. формулы (2.125) и (2.126), а также верхнюю вставку на рис. 2.12b). Критический ток максимален в точке электрон-дырочной симметрии, $\varepsilon_d = 0$ [152].

При A > I и $|\varepsilon_d| < A - I$ спин-флип процессы между электроном и димером приводят к тому, что основным состоянием системы становится одноэлектронный дублет, $|1; 1/2, \pm 1/2\rangle_+$, с энергией $E_{1/2,+} = \varepsilon_d + I/4 - A$ (см. рис. 2.12d). Следовательно, в таком случае возможны два варианта возбуждений системы: либо переход в сектор гильбертова пространства без электронов, либо в состояния с двумя электронами. Каждому переходу соответствует АСС. Транспорт через них приводит к модификации плотности тока при $|\omega| < \Delta$ и появлению двух близко расположенных резонансов в окрестности $\omega \sim -0.5$ (см. сплошную кривую на рис. 2.12b). Эти пики дают близкие по абсолютной величине и противоположные по знаку вклады в I_{Jd} , который теперь становится сравним по модулю с I_{Jc} . В результате, критический ток существенно уменьшается по сравнению с ситуацией A = 0 (см. кривые при $A \neq 0$ на рис. 2.12a).

Заметим, что поскольку кинетические уравнения учитывают процессы многократного отражения, то становятся возможны переходы с возбужденных уровней первой очереди (состояния с нулем и двумя электронами) на возбужденные уровни второй очереди (состояния с одним электроном) и так далее. Следствием этого при самосогласованном расчете являются дополнительные АСС и пики в плотности тока, когда $|\omega| < \Delta$ (см. нижнюю вставку на рис. 2.12b). Стоит, однако, подчеркнуть, что малость концевых множителей возбуждений более высокой очереди b_{α} в режиме T = 0и $\Gamma \ll \Delta$ делает соответствующие вклады в I_{Jd} незначительными. Этот фактор также существенно влияет на зависимость энергий АСС от разности фаз Θ , как следует из данных на рис. 2.12c.

В областях $|\varepsilon_d| > A - I$ основным состоянием димера является синглет (см. рис.

2.12d). Следовательно, даже при $A \neq 0$ спиновые степени свободы электронов и димера не взаимодействуют, и проблема транспорта снова сводится к прохождению через одноуровневую квантовую точку. Если sf-обмен имеет ферромагнитный характер (A < 0), то подавление критического тока реализуется при условии A < -2I и $\varepsilon_d < |A/2+I|$, когда основным состоянием системы выступает одноэлектронный квартет, $|1; 3/2, \pm 1/2\rangle$, $|1; 3/2, \pm 3/2\rangle$, с энергией $E_{3/2} = \varepsilon_d + I/4 + A/2$. Таким образом, демонстрируемое существенное влияние неупругого взаимодействия носителей и спиновой структуры на ток Джозефсона и эффект близости на качественном уровне согласуется с результатами экспериментальной работы [146]. С точки зрения приложений важно, что переключение джозефсоновского перехода, включающего магнитную молекулу, из состояния со слабым критическим током в состояние сильным током и наоборот можно осуществлять, меняя напряжение на затворе.

2.6 Резюме

Основные итоги главы 2 сводятся к следующему:

- 1. Для решения задач квантового транспорта электронов через устройства с сильными корреляциями впервые в атомном представлении развита неравновесная техника Келдыша. Это позволило преодолеть трудности теории возмущений, возникающие при традиционном подходе из-за большого числа затравочных амплитуд рассеяния. На основе метода неравновесных функций Грина в атомном представлении найдена спектральная функция, определяющая кинетические характеристики устройства. Выведены кинетические уравнения для чисел заполнения в условиях, когда поток электронов приводит к их существенной ренормировке.
- 2. Показано, что в условиях сильной неравновесности, индуцированной процессами многократного рассеяния электронов на одиночной анизотропной магнитной примеси, вольт-амперная характеристика (ВАХ) такой системы в режиме кулоновской блокады содержит участки с отрицательной дифференциальной проводимостью (ОДП). Природа эффекта объясняется согласованностью поведения

чисел заполнения устройства и разными интенсивностями одноэлектронных переходов. Продемонстрирована возможность усиления ОДП за счет диодного эффекта при асимметричном подключении устройства к контактам, а также посредством изменения анизотропии примесного центра. Включение магнитного поля сопровождается увеличением числа кулоновских ступенек в ВАХ примеси. При этом возникает эффект значительного магнитосопротивления. В режиме асимметричной связи устройства с контактами показана возможность переключения между состояниями с различными значениями проекции полного спина.

- 3. Показано, что в нулевом магнитном поле взаимодействие спинового димера с транспортируемыми через устройство электронами индуцирует неодинаковую заселенность его магнитных уровней. Эффект реализуется при сильном напряжении исток – сток, когда активированы переходы в триплетные состояния. Количественно эффект определяется различием интенсивностей переходов в системе.
- 4. На основе развитой техники Келдыша в атомном представлении построена теория стационарного эффекта Джозефсона в контакте, содержащем многоуровневую структуру атомного масштаба. Для магнитной димерной молекулы продемонстрировано, что обменное взаимодействие между спином электронов куперовской пары и спиновыми моментами димера приводит к значительному снижению критического тока в системе. Эффект объясняется установлением основного состояния димерной молекулы с ненулевым полным спином и появлением нового набора андреевских связанных состояний.

Глава 3

ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА ПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

3.1 Особенности транспортных свойств систем квантовых точек

Низкоразмерные твердотельные системы привлекают значительное внимание исследователей как возможностью изучения фундаментальных квантовых явлений, так и потенциальными приложениями в наноэлектронике. Одним из основных объектов являются квантовые точки (КТ). Первые КТ были синтезированы и исследованы А. Екимовым, А. Онущенко и А. Эфросом, и представляли собой наноразмерные полупроводниковые кристаллы в стеклянной матрице [155, 156]. На сегодняшний день термин КТ используется для обозначения широкого круга систем, размеры которых ограничены во всех трех пространственных измерениях. К ним относятся, например, молекулы, нормальных металлические, сверхпроводящие или ферромагнитные наночастицы, а также объекты на основе полупроводниковых гетероструктур. Последние получили широкое распространение и представляют собой небольшие островки электронной плотности, изолированные от остальной части двумерного электронного газа (2DEG) постредством электродов затвора.

Ограничение во всех трех направлениях приводит к дискретному энергетическому спектру. Таким образом, КТ в некотором отношении можно рассматривать в качестве искусственного атома. Подсоединяя контакты к КТ, можно изучать физические процессы, которые определяют поведение системы на масштабах межатомных расстояний. В системах КТ исследуются различные, часто сосуществующие явления, такие как эффекты Кондо, Фано и Ааронова-Бома, а также физика модели Хаббарда [104,157,158]. В одноэлектронном режиме эти структуры предлагается используется в качестве спиновых кубитов [159,160]. Кроме того, было показано, что они могут выступать в качестве выпрямителей, спиновых фильтров и клапанов [161].

В силу более сложной экспериментальной реализации системы, содержащие три и более КТ, начали активно изучалиться только недавно [162, 163]. Четырехточечные структуры (ЧТС) исследовались в различных геометриях. В частности, для последовательно подключенных КТ был продемонстрирован перенос спинов отдельных электронов на наносекундных масштабах [164]. Такая операция также была осуществлена по замкнутой траектории в геометрии квадрата [165]. В той же системе с тремя электронами наблюдался ферромагнетизм Нагаоки [166, 167], изучались особенности спинового обмена четырех электронов [168, 169] и квантовое охаждение [170]. Важно подчеркнуть, что для всех геометрий кулоновское отталкивание внутри и между точками является ключевым фактором, влияющим на спектр и транспортные свойства [171, 172].

Наиболее общая ситуация для изучения квантого транспорта в ЧТС - когда левый и правый металлические контакты соединены с двумя КТ, 1QD и 4QD, таким образом, что две другие КТ, 2QD и 3QD, распологаются в центральной части, как, например, это показано на рисунке 3.1. Исследование интерференционных эффектов Фано, Ааронова-Бома и Ааронова-Кашера в рамках формализма Ландауэра-Бюттикера для этой геометрии ранее было ограничено предельными случаями сильного кулоновского взаимодействия (режим Кондо) или полного его отсутствия [173, 174]. Между тем,



Рис. 3.1: Четырехточечная структура между металлическими контактами.

в [174] было показано, что устройство из четырех КТ со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы действует как спиновый фильтр. Аналогичное поведение за счет зеемановского расщепления было продемонстрировано для системы с большим числом КТ без спин-орбитального взаимодействия, простейшим случаем которой является ЧТС [175]. В последней работе влияние кулоновского взаимодействия на кондактанс было ограничено рассмотрением отталкивания внутри каждой точки, U, в среднеполевом приближении Хаббард-I. Таким образом, транспортные и спектральные свойства ЧТС в более общем режиме, когда предполагаются конечными взаимодействия электоронов как внутри точек, так и между ними (с интенсивностью V), а также учитываются эффекты анизотропии, представляются мало изученными. В данной главе под анизотропией подразумевается различие параметров перескока внутри ЧТС или ненулевая разность посадочных энергий точек (например, в результате действия полей затвора, Vg1 и Vg2), которые имеют место в экспериментах.

Здесь важно отметить, что введение анизотропии позволяет эффективно рассматривать ЧТС как двухзонную хаббардовскую систему. Напомним, что электронполяронный эффект (ЭПЭ) обычно присутствует в многозонных сильно коррелированных электронных системах, когда ширины подзон существенно отличаются. ЭПЭ наблюдается в тяжелофермионных соединениях на основе урана и других системах в режиме переменной валентности [176–179], которые можно описать, например, с помощью двухзонной модели Хаббарда с одной узкой зоной (в случае достаточно сильного межзонного взаимодействия Хаббарда, V) [180,181] или модели Андерсона [182] с одночастичной гибридизацией (в нашем случае t_0) и хаббардовским взаимодействием между s - p-электронами легкой зоны и (тяжелыми) электронами локализованных f - d-уровней.

В двухзонной модели Хаббарда ЭПЭ обычно связан с дополнительным поляронным сужением зоны тяжелых частиц из-за того, что вокруг последних возникает виртуальное облако электронно-дырочных пар легких частиц. Схожим образом в модели Андерсона ЭПЭ приводит к дополнительному сужению матричного элемента гибридизации t_{12} . Отметим, что в ЧТС на рис. 3.1 величине t_{12} соответствует параметр перескока t_2 между 1QD и 3QD, а также между 3QD на 4QD. Следовательно, в случае сильного ЭПЭ, вызванного большими значениями V или t_0 , во всех расчетах мы должны эффективно заменить t_2 на $t'_2 \ll t_2$. Таким образом, при численном анализе мы будем предполагать, что анизотропия вызвана как специфическим дизайном структуры, так и вышеупомянутыми многочастичными эффектами.

Отметим, что физика ЭПЭ тесно связана с результатами Кондо и Нозиера с соавторами по инфракрасным расходимостям при описании броуновского движения тяжелой частицы в ферми-жидкости легких частиц [49,183] (см. также работы Кагана и Прокофьева [184,185]); с результатами по инфракрасным расходимостям Махана [186] в задаче о рентгеновской фотоэмиссии глубоких электронных уровней [187]; а также с известными результатами Андерсона [188] о катастрофе ортогональности в 1D цепочке *N* электронов с одиночной примесью.

Во всех случаях как в системах с тяжелыми фермионами на основе урана [180,181], так и в других системах со смешанной валентностью, например силицидах марганца [189], ЭПЭ в бесконечной геометрии приводит к аномальному поведению удельного сопротивления в 3D и особенно в 2D (слоистых) системах. Отметим, что проявления ЭПЭ также очень интересны в ограниченной геометрии туннельного контакта [190].

Здесь важно отметить дополнительную аналогию между ЧТС и системами с примесями и дефектами. В реальных ситуациях при рассмотрении электрических токов в диэлектриках и полупроводниках, мы обычно имеем дело с небольшим количеством глубоких двухуровневых ловушек, окруженных большим количеством мелких ловушек с одним уровнем. В частности, подобная система, в которой глубокие двухуровневые ловушки случайным образом распределяются между мелкими одноуровневыми ловушками, описана в известной статье группы Бишопа [191] при исследовании радиационно-индуцированной проводимости (что актуально для космических приложений) и электрон-фононных поляронных эффектов в молекулярно-допированных полимерах. В этих терминах нашу ЧТС можно рассматривать как простейшую модель с одной центральной глубокой двухуровневой ловушкой (2- и 3QD) в окружении двух мелких одноуровневых ловушек (1- и 4QD), где, в силу ограниченности геометрии и для простоты, пренебрегается особенностями прыжковой проводимости на решетке Миллера-Абрахамса.

3.2 Теория квантового транспорта в четырехточечной структуре с учетом кулоновских корреляций

3.2.1 Гамильтониан четырехточечной структуры, связанной с контактами

Перейдем к теоретическому описанию электронного квантового транспорта в ЧТС, изображенной на рис. 3.1 [11, 13, 16]. Система состоит из трех частей: металлических контактов и устройства между ними, - и описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_D + \hat{H}_T.$$
(3.1)

Первые два члена в (3.1) характеризуют металлические однозонные контакты,

$$\hat{H}_{L(R)} = \sum_{k\sigma} \left(\xi_{k\sigma} \mp \frac{eV}{2} \right) c^+_{L(R)k\sigma} c_{L(R)k\sigma}, \qquad (3.2)$$

где $c_{L(R)k\sigma}^+$ - оператор рождения электрона в левом (правом) контакте, который обладает волновым вектором k, проекцией спина σ и спин-зависящей энергией $\xi_{k\sigma} = \epsilon_{k\sigma} - \mu (\mu$ - химический потенциал системы). Предполагается, что к левому (правому) контакту приложено напряжение смещения $\pm V/2$.

Третье слагаемое в (3.1) описывает ЧТС в магнитном поле, которое характеризуется зеемановской энергией h,

$$\hat{H}_{D} = \sum_{\sigma;j=1}^{4} \xi_{j\sigma} a_{j\sigma}^{+} a_{j\sigma} + U \sum_{j=1}^{4} n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} + V \sum_{\sigma\sigma'} n_{2\sigma} n_{3\sigma'} + \sum_{\sigma} \left[t_1 \left(a_{1\sigma}^{+} + a_{4\sigma}^{+} \right) a_{2\sigma} + t_2 \left(a_{1\sigma}^{+} + a_{4\sigma}^{+} \right) a_{3\sigma} + t_0 a_{2\sigma}^{+} a_{3\sigma} + h.c. \right],$$
(3.3)

где оператор $a_{j\sigma}$ уничтожает электрон с проекцией спина σ и энергией $\xi_{j\sigma} = \varepsilon_j - \sigma h - \mu$ в *j*-ой KT; t_i (i = 0, 1, 2) - параметр перескока между KT; U - интенсивность кулоновского взаимодействия внутри каждой точки; V - интенсивность отталкивания электронов, находящихся на соседних KT в центральной части устройства (2- и 3QD). Заметим, что такой специфический тип ЧТС, когда корреляции между точками имеют место только внутри одной пары, может быть реализован экспериментально с помощью дополнительных электродов затвора, которые необходимо расположить вблизи переферических KT (1- and 4QDs) с целью их экранировки [192].

Последний член в (3.1) характеризует взаимодействие между контактами и ЧТС,

$$\hat{H}_T = t_L \sum_{k\sigma} c^+_{Lk\sigma} a_{1\sigma} + t_R \sum_{k\sigma} c^+_{Rk\sigma} a_{4\sigma} + h.c., \qquad (3.4)$$

где $t_{L(R)}$ - параметр туннелирования электрона между левым (правым) контактом и 1-ой (4-ой) КТ. Как обсуждалось в предыдущей главе (см. пункт 2.2.2), для аналитического описания кинетических процессов удобно провести унитарное преобразование, $\hat{U} = \exp\left\{\frac{ieVt}{2}\sum_{k\sigma} (n_{Rk\sigma} - n_{Lk\sigma})\right\}$, где $N_{L(R)} = \sum_{k\sigma} c^+_{L(R)k\sigma} c_{L(R)k\sigma}$ - оператор числа частиц в левом (правом) контакте [112], чтобы перевести зависимость от напряжения смещения в \hat{H}_T ,

$$\hat{H}_{T}(t) = T_{L}(t) \sum_{k\sigma} c^{+}_{Lk\sigma} a_{1\sigma} + T_{R}(t) \sum_{k\sigma} c^{+}_{Rk\sigma} a_{4\sigma} + h.c., \qquad (3.5)$$

где $T_{L(R)}(t) = t_{L(R)}e^{\mp \frac{ieV}{2}t}.$

3.2.2 Неравновесные функции Грина и ток в приближении сильной связи

Электронный ток в стационарном режиме определяется как $\langle I(t,t)\rangle \equiv I = e \left\langle \dot{N}_L \right\rangle$. Записывая уравнение движения, получим ($\hbar = 1$)

$$I = ie \sum_{k\sigma} \left[T_L^+(t) \, G_{Lk,1\sigma}^{+-}(t,t) - T_L(t) \, G_{1,Lk\sigma}^{+-}(t,t) \right].$$
(3.6)

В выражении (3.6) введены неравновесные функции Грина,

$$G_{Lk,1}^{+-}(t,t) = -i \left\langle T_C c_{Lk}(t_+) a_1^+(t_-) \right\rangle = i \left\langle a_1^+ c_{Lk} \right\rangle, \qquad (3.7)$$
$$G_{1,Lk}^{+-}(t,t) = -i \left\langle T_C a_1(t_+) c_{Lk}^+(t_-) \right\rangle = i \left\langle c_{Lk}^+ a_1 \right\rangle$$

входящие в них операторы $c_{Lk\sigma}$ и $a_{1\sigma}$ упорядочены на контуре Келдыша C действием оператора T_C . При этом индекс +(-) в (3.6) и (3.7) обозначают принадлежность временной переменной нижней (верхней) ветви этого контура (см. рис. 2.1) [113].

Если рассматривать туннельный гамильтониан (3.5) в качестве оператора взаимодействия, то анализ ряда теории возмущений для функций $G_{Lk1\sigma}^{+-}$ и $G_{1Lk\sigma}^{+-}$ приводит к следующему выражению на ток [115, 193, 194]:

$$I = e \sum_{\sigma} \int_{C} d\tau_1 \Big[\Sigma_{L\sigma}^{+a} \left(t - \tau_1 \right) G_{11\sigma}^{a-} \left(\tau_1 - t \right) - G_{11\sigma}^{+a} \left(t - \tau_1 \right) \Sigma_{L\sigma}^{a-} \left(\tau_1 - t \right) \Big], \qquad (3.8)$$

где введены собственно-энергетические функции,

$$\Sigma_{L\sigma}^{ab}(\tau - \tau') = \sum_{k} T_{L}^{+}(\tau) g_{Lk\sigma}^{ab}(\tau - \tau') T_{L}(\tau'), \ a, b = +, -,$$
(3.9)

описывающие влияние левого контакта на ЧТС $(g_{Lk\sigma}^{ab}(\tau - \tau'))$ - неравновесная затравочная функция Грина левого контакта).

Функции Грина $G_{11\sigma}(\tau - \tau')$ является полными, т.е. включают все возможные процессы рассеяния в контакты и многочастичные взаимодействия в самой ЧТС, и удовлетворяют уравнению Дайсона

$$G_{11\sigma}(\tau - \tau') = g_{11\sigma}(\tau - \tau') + \iint_{C} d\tau_{1}\tau_{2} \Big[g_{11\sigma}(\tau - \tau_{1}) \Sigma_{L\sigma}(\tau_{1} - \tau_{2}) G_{11\sigma}(\tau_{2} - \tau') + (3.10) + g_{14\sigma}(\tau - \tau_{1}) \Sigma_{R\sigma}(\tau_{1} - \tau_{2}) G_{41\sigma}(\tau_{2} - \tau') \Big],$$

где $g_{ij\sigma} (\tau - \tau')$ - затравочные функции Грина ЧТС. При выводе (3.8) и (3.10) рассматривался немагнитный случай, в частности, пренебрегалось спин-флип процессами, $\langle a_{i\sigma}a_{j\overline{\sigma}}^+ \rangle = 0$. После перехода к интегрированию по реальному временному контуру и последующего преобразования Фурье при симметричном подключении к контактам, $t_L = t_R = t$, имеем

$$I = i\Gamma \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \Big[f_L \left(G^a_{11\sigma} - G^r_{11\sigma} \right) - G^{+-}_{11\sigma} \Big], \qquad (3.11)$$

где $f_{L(R)} \equiv f\left(\omega \pm \frac{eV}{2}\right)$ - фермиевская функция распределения левого (правого) контакта; $\Gamma/2 = \Gamma_L = \Gamma_R = \pi t^2 g$ - параметр, характеризующий уширение уровней ЧТС за счет связи с контактом. Плотность состояний контакта в общем случае зависит от частоты и проекции спина, $g_{\sigma}(\omega) = \sum_k \delta\left(\omega - \xi_{k\sigma}\right)$. Однако, в настоящей работе мы воспользуемся приближением парамагнитных широкозонных металлических контактов, когда этими зависимостями можно пренебречь и положить g = const. По этой же причине при выводе (3.11) пренебрегается реальными частями затравочных функций Грина контактов. Следовательно, фурье-образы собственно-энергетических функций равны $\Sigma_{\alpha\sigma}^r = -\frac{i}{2}\Gamma$ и $\Sigma_{\alpha\sigma}^{+-} = i\Gamma f_{\alpha}$ ($\alpha = L$, R).

Чтобы получить окончательное выражение, описывающее стационарный ток в системе, найдем функции Грина ЧТС, входящие в (3.11), принимая во внимания кулоновское отталкивание внутри точек и между ними. Для этого воспользуемся методом уравнений движения [199]. В силу определения $G_{i\sigma,j\sigma'}^{r,+-}(t-t')$ общий вид уравнений для $G_{i\sigma j\sigma'}^{r}(\omega) \equiv \langle \langle a_{i\sigma} | a_{j\sigma'}^{+} \rangle \rangle^{r}$ и $G_{i\sigma j\sigma'}^{+-}(\omega) \equiv \langle \langle a_{i\sigma} | a_{j\sigma'}^{+} \rangle \rangle^{+-}$ отличается,

$$z\langle\langle a_{i\sigma}|a^+_{j\sigma'}\rangle\rangle^r = \langle\left\{a_{i\sigma}, a^+_{j\sigma'}\right\}\rangle + \langle\langle\left[a_{i\sigma}, \hat{H}\right]|a^+_{j\sigma'}\rangle\rangle^r, \qquad (3.12)$$

$$z\langle\langle a_{i\sigma}|a^+_{j\sigma'}\rangle\rangle^{+-} = \langle\langle \left[a_{i\sigma}, \hat{H}\right]|a^+_{j\sigma'}\rangle\rangle^{+-}, \qquad (3.13)$$

где $z = \omega + i\delta$. Кроме того, исходя из диаграммного разложения смешанной функции Грина, $G_{L(R)kj\sigma}(t-t') = \int_{C} g_{L(R)kj\sigma}(t-\tau) T_{L(R)}(\tau) G_{1(4)j\sigma}(\tau-t')$, имеем [113,115]

$$z\langle\langle c_{L(R)k\sigma}|a_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle^{r} = g_{L(R)k\sigma}^{r}t_{L(R)}\langle\langle a_{1(4)\sigma}|a_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle^{r},$$
(3.14)

$$z\langle\langle c_{L(R)k\sigma}|a_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle^{+-} = t_{L(R)}\left(g_{L(R)k\sigma}^{r}\langle\langle a_{1(4)\sigma}|a_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle^{+-} + g_{L(R)k\sigma}^{+-}\langle\langle a_{1(4)\sigma}|a_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle^{a}\right), \quad (3.15)$$

где $g_{\alpha k\sigma}^r = (z - \xi_{k\sigma})^{-1}, \ g_{\alpha k\sigma}^{+-} = 2\pi i f_\alpha \delta (\omega - \xi_{k\sigma}).$

Далее для простоты будем предполагать, что 2(1)-ая и 3(4)-ая КТ идентичны. Будем обозначать их индексами α (β) и $\overline{\alpha}$ ($\overline{\beta}$), соотвественно. Как следствие, $t_1 \equiv t$ ($\alpha = 2$), $t_2 \equiv t$ ($\alpha = 3$). Поскольку гамильтониан ЧТС (3.3) не является квадратичной формой, то уравнения движения (3.12) и (3.13) генерируют функции Грина более высокого порядка $\langle \langle n_{\alpha\overline{\sigma}}a_{\alpha\sigma}|a^+_{\alpha\sigma}\rangle\rangle^{r,+-}, \langle \langle n_{\overline{\alpha}\sigma}a_{\alpha\sigma}|a^+_{\alpha\sigma}\rangle\rangle^{r,+-}, \langle \langle n_{\beta\overline{\sigma}}a_{\alpha\sigma}|a^+_{\alpha\sigma}\rangle\rangle^{r,+-},$ $где <math>n_{\alpha(\beta)\sigma} = a^+_{\alpha(\beta)\sigma}a_{\alpha(\beta)\sigma}$. В свою очередь, уравнения для этих функций приводят в возникновению функций Грина третьего порядка и так далее. Чтобы получить замкнутые системы уравнений, воспользуемся методом расцепления для немагнитного случая [195, 196], который применим для описания эффекта кулоновской блокады при температурах выше температуры Кондо [197, 198]. В этом подходе расцепляются уравнения на функции Грина третьего порядка, например, $\langle \langle n_{3\sigma}n_{2\overline{\sigma}}a_{2\sigma}|a^+_{j\sigma}\rangle\rangle^{r,+-}$. Тогда, для запаздывающих функций после ряда преобразований получаем

$$\langle \langle a_{\alpha\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r = (g_{\alpha\sigma} - K_{\alpha\sigma}) \left(1 + t_0 \langle \langle a_{\overline{\alpha}\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r + t(\alpha) \left[\langle \langle a_{\beta\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r + \langle \langle a_{\overline{\beta}\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r \right] \right),$$

$$\langle \langle a_{\beta\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r = \frac{g_{\beta\sigma}^{(0)}}{1 + itg_{\beta\sigma}^{(0)}/2} \left[t(\alpha) \langle \langle a_{\alpha\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r + t(\overline{\alpha}) \langle \langle a_{\overline{\alpha}\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r \right],$$

$$(3.16)$$

где

$$K_{\alpha\sigma} = \frac{UV \langle a_{\alpha\overline{\sigma}}^{+} a_{\overline{\alpha}\overline{\sigma}} \rangle^{2}}{b_{\alpha\sigma1} b_{\alpha\sigma4}} \left(\frac{1}{b_{\alpha\sigma2}} + \frac{1}{b_{\alpha\sigma3}} \right), \ g_{\alpha\sigma} = g_{\alpha\sigma}^{(0)} + \frac{V}{b_{\alpha\sigma1}} \left[g_{\alpha\sigma}^{(1)} + g_{\alpha\sigma}^{(2)} + \frac{U}{b_{\alpha\sigma2}} g_{\alpha\sigma}^{(3)} \right],$$

$$g_{\alpha\sigma}^{(0)} = \frac{1 - \langle n_{\alpha\overline{\sigma}} \rangle}{b_{\alpha\sigma1}} + \frac{\langle n_{\alpha\overline{\sigma}} \rangle}{b_{\alpha\sigma2}}, \ g_{\alpha\sigma}^{(1)} = \frac{(1 - \langle n_{\alpha\overline{\sigma}} \rangle) \langle n_{\overline{\alpha}\sigma} \rangle}{b_{\alpha\overline{\sigma}3}} + \frac{\langle n_{\alpha\overline{\sigma}} \rangle \langle n_{\overline{\alpha}\sigma} \rangle}{b_{\alpha\overline{\sigma}4}}, \tag{3.17}$$

$$g_{\alpha\sigma}^{(2)} = \frac{(1 - \langle n_{\alpha\overline{\sigma}} \rangle) \langle n_{\overline{\alpha}\overline{\sigma}} \rangle}{b_{\alpha\sigma3}} + \frac{\langle n_{\alpha\overline{\sigma}} \rangle \langle n_{\overline{\alpha}\overline{\sigma}} \rangle}{b_{\alpha\sigma4}}, \ g_{\alpha\sigma}^{(3)} = \frac{\langle n_{\alpha\overline{\sigma}} \rangle \langle n_{\overline{\alpha}\sigma} \rangle}{b_{\alpha\overline{\sigma}4}} + \frac{\langle n_{\alpha\overline{\sigma}} \rangle \langle n_{\overline{\alpha}\overline{\sigma}} \rangle}{b_{\alpha\sigma4}}, \ g_{\beta\sigma}^{(0)} = g_{\alpha\rightarrow\beta,\sigma}^{(0)},$$

$$b_{\alpha\sigma1} = z - \xi_{\alpha\sigma}, \ b_{\alpha\sigma2} = b_{\alpha\sigma1} - U, \ b_{\alpha\sigma3} = b_{\alpha1} - V \left(1 + \langle n_{\overline{\alpha}\sigma} \rangle \right), \ b_{\alpha\sigma4} = b_{\alpha\sigma3} - U.$$

Решая (3.16) с учетом $\langle n_{i\sigma} \rangle = \langle n_{i\overline{\sigma}} \rangle$, $\langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle = \langle a_{i\overline{\sigma}}^+ a_{j\overline{\sigma}} \rangle$, находим набор Фурье-образов запаздывающих функции Грина ЧТС,

$$G_{\beta\beta\sigma}^{r} = \frac{C_{\beta\sigma}Z_{\overline{\beta}\sigma}}{Z_{\sigma}}, \ G_{\beta\overline{\beta}\sigma}^{r} = G_{\overline{\beta}\beta\sigma}^{r} = \frac{C_{\beta\sigma}C_{\overline{\beta}\sigma}x_{2\sigma}}{Z_{\sigma}}, \ G_{\alpha\alpha\sigma}^{r} = \frac{C_{\alpha\sigma}\Delta_{\overline{\alpha}\sigma}}{Z_{\sigma}}, \qquad (3.18)$$
$$G_{\alpha\overline{\alpha}\sigma}^{r} = G_{\overline{\alpha}\alpha\sigma}^{r} = \frac{C_{\alpha\sigma}C_{\overline{\alpha}\sigma}\Delta_{1\sigma}}{Z_{\sigma}}, \\ G_{\beta\alpha\sigma}^{r} = \frac{C_{\alpha\sigma}C_{\overline{\alpha}\sigma}\Delta_{1\sigma}}{Z_{\sigma}}, \\ G_{\beta\alpha\sigma}^{r} = \frac{C_{\alpha\sigma}C_{\beta\sigma}T_{\overline{\beta}\sigma}P_{\overline{\alpha}\sigma}}{Z_{\sigma}}, \ \beta(\alpha) = 1, 4(2,3),$$

где использованы следующие обозначения:

$$\Delta_{\alpha\sigma} = D_{\alpha\sigma}T_{\beta\sigma}T_{\overline{\beta}\sigma} - t^{2}(\alpha) C_{\alpha\sigma}S_{\sigma}, \ \Delta_{1\sigma} = t_{0}T_{\beta\sigma}T_{\overline{\beta}\sigma} + t(\alpha) t(\overline{\alpha}) S_{\sigma},$$

$$S_{\sigma} = C_{\beta\sigma}T_{\overline{\beta}\sigma} + C_{\overline{\beta}\sigma}T_{\beta\sigma}, \ P_{\alpha\sigma} = t(\overline{\alpha}) D_{\alpha\sigma} + t_{0}t(\alpha) C_{\alpha\sigma},$$

$$Z_{\sigma} = T_{\beta\sigma}T_{\overline{\beta}\sigma}x_{1\sigma} - S_{\sigma}x_{2\sigma}, \ Z_{\beta\sigma} = T_{\beta\sigma}x_{1\sigma} - C_{\beta\sigma}x_{2\sigma},$$

$$T_{\beta\sigma} = D_{\beta\sigma} + i\Gamma C_{\beta\sigma}/2, \ x_{1\sigma} = \Delta_{\alpha\sigma}\Delta_{\overline{\alpha}\sigma} - t_{0}^{2}C_{\alpha\sigma}C_{\overline{\alpha}\sigma},$$

$$x_{2\sigma} = t(\alpha) C_{\alpha\sigma}P_{\overline{\alpha}\sigma} + t(\overline{\alpha}) C_{\overline{\alpha}\sigma}P_{\alpha\sigma}, \ t(\alpha) = t_{1,2}.$$
(3.19)

Множители $C_{\alpha,\beta\sigma}$ и $D_{\alpha,\beta\sigma}$ содержат зависимость от чисел заполнения, корреляторов и амплитуд кулоновских взаимодействий, а именно:

$$C_{\alpha\sigma} = C_{\alpha\sigma1} + C_{\alpha\sigma2}, \ C_{\alpha\sigma1} = b_{\alpha\sigma4} \left(b_{\alpha\sigma2} b_{\alpha\sigma3} + U b_{\alpha\sigma3} \langle n_{\alpha\sigma} \rangle + 2V b_{\alpha\sigma2} \langle n_{\overline{\alpha}\sigma} \rangle \right),$$

$$C_{\alpha\sigma2} = UV \left(b_{\alpha\sigma2} + b_{\alpha\sigma3} \right) \left(2 \langle n_{\alpha\sigma} \rangle \langle n_{\overline{\alpha}\sigma} \rangle - \langle a^+_{\alpha\sigma} a_{\overline{\alpha}\sigma} \rangle^2 \right), C_{\beta\sigma} = b_{\beta\sigma2} + U \langle n_{\beta\sigma} \rangle,$$

$$D_{\alpha\sigma} = b_{\alpha\sigma1} b_{\alpha\sigma2} b_{\alpha\sigma3} b_{\alpha\sigma4}, D_{\beta\sigma} = b_{\beta\sigma1} b_{\beta\sigma2}.$$
(3.20)

В свою очередь, решение системы уравнений для функций Грина G_{ij}^{+-} дает

$$G_{\beta\beta\sigma}^{+-} = i\Gamma \frac{C_{\beta\sigma} \left(f_{\beta} Z_{\overline{\beta}\sigma} G_{\beta\beta\sigma}^{a} + f_{\overline{\beta}} C_{\overline{\beta}\sigma} x_{2\sigma} G_{\overline{\beta}\beta\sigma}^{a} \right)}{Z_{\sigma}},$$

$$G_{\beta\overline{\beta}\sigma}^{+-} = i\Gamma \frac{C_{\beta\sigma} \left(f_{\beta} Z_{\overline{\beta}\sigma} G_{\beta\overline{\beta}\sigma}^{a} + f_{\overline{\beta}} C_{\overline{\beta}\sigma} x_{2\sigma} G_{\overline{\beta}\overline{\beta}\sigma}^{a} \right)}{Z_{\sigma}},$$

$$G_{\alpha\alpha\sigma}^{+-} = i\Gamma \frac{C_{\alpha\sigma} P_{\overline{\alpha}\sigma} \left(f_{\beta} C_{\beta\sigma} T_{\overline{\beta}\sigma} G_{\beta\alpha\sigma}^{a} + f_{\overline{\beta}} C_{\overline{\beta}\sigma} T_{\beta\sigma} G_{\overline{\beta}\alpha\sigma}^{a} \right)}{Z_{\sigma}},$$

$$G_{\alpha\overline{\alpha}\sigma}^{+-} = i\Gamma \frac{C_{\alpha\sigma} P_{\overline{\alpha}\sigma} \left(f_{\beta} C_{\beta\sigma} T_{\overline{\beta}\sigma} G_{\beta\overline{\alpha}\sigma}^{a} + f_{\overline{\beta}} C_{\overline{\beta}\sigma} T_{\beta\sigma} G_{\overline{\beta}\overline{\alpha}\sigma}^{a} \right)}{Z_{\sigma}},$$

$$G_{\beta\alpha\sigma}^{+-} = i\Gamma \frac{C_{\beta\sigma} \left(f_{\beta} Z_{\overline{\beta}\sigma} G_{\beta\alpha\sigma}^{a} + f_{\overline{\beta}} C_{\overline{\beta}\sigma} x_{2\sigma} G_{\overline{\beta}\overline{\alpha}\sigma}^{a} \right)}{Z_{\sigma}},$$

$$G_{\beta\overline{\alpha}\sigma}^{+-} = i\Gamma \frac{C_{\beta\sigma} \left(f_{\beta} Z_{\overline{\beta}\sigma} G_{\beta\overline{\alpha}\sigma}^{a} + f_{\overline{\beta}} C_{\overline{\beta}\sigma} x_{2\sigma} G_{\overline{\beta}\overline{\alpha}\sigma}^{a} \right)}{Z_{\sigma}},$$

где $f_{\beta} = f_{L,R}, G_{ij}^a = (G_{ij}^r)^*, G_{ij}^{+-} = -(G_{ji}^{+-})^*$. Исходя из определения функций Грина, числа заполнения и корреляторы могут быть получены на основе самосогласованного решения следующих интегральных уравнений (по аналогии с результатами пункта Глава 3. Влияние кулоновских взаимодействий...

2.2.5):

$$\langle n_{i\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G_{ii\sigma}^{+-}, \ \langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G_{ji\sigma}^{+-}, \ i, j = \alpha, \beta$$
(3.22)

В равновесии (eV = 0) имеем $f_L = f_R = f$ и $G_{ij}^{+-}(\omega) = f(\omega) \left[G_{ij}^a(\omega) - G_{ij}^r(\omega)\right]$, тогда

$$\langle n_{i\sigma} \rangle = -\frac{1}{\pi} \int d\omega Im \left[G_{ii\sigma}^r \right] f, \ \langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle = -\frac{1}{\pi} \int d\omega Im \left[G_{ji\sigma}^r \right] f.$$
(3.23)

Дополнительно, последующий анализ численных расчетов ВАХ и кондактанса ЧТС будет основываться на особенностях плотности состояний данного устройства, которая определяется выражением [199]

$$\rho = \frac{i}{2\pi} \sum_{\sigma;j=1}^{4} \left(G_{jj\sigma}^r - G_{jj\sigma}^a \right).$$
(3.24)

Подставляя полученные функции Грина в (3.11), находим окончательное выражение, описывающее ток в ЧТС,

$$I = e\Gamma^2 \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega |G_{14\sigma}^r|^2 \left(f_L - f_R\right) \equiv e \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega T_\sigma \left(f_L - f_R\right), \qquad (3.25)$$

где

$$T_{\sigma} = \Gamma^2 \frac{C_{1\sigma}^2 C_{4\sigma}^2 x_{2\sigma}^2}{|Z_{\sigma}|^2},$$
(3.26)

Раскладывая $f(\omega \pm eV/2)$ в ряд Тейлора при малых напряжениях смещения eV, получим выражение для кондактанса в приближении линейного отклика [28]

$$G = \frac{I}{V} = -G_0 \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega T_{\sigma} \frac{\partial f}{\partial \omega}, \ G_0 = \frac{e^2}{h}$$
(3.27)

Далее, при низких температурах $-df(\omega)/d\omega \approx \delta(\omega)$. В результате, мы приходим к формуле Ландауэра-Бюттикера [79–81]

$$G = G_0 \sum_{\sigma} T_{\sigma} \left(\varepsilon_d, \ \omega = 0 \right).$$
(3.28)

В дальнейшем при расчетах все энергетические величины измеряются в единицах Г. Кроме того, будет анализироваться режим сильной связи с контактами, когда $\Gamma = t_1$. Одноэлектронные энергии боковых точек предполагаются одинаковыми, $\xi_{1\sigma} = \xi_{4\sigma} = \varepsilon_d - \sigma h$, а для двух центральных точек разность посадочных энергий контролируется параметром Δ , $\xi_{2(3)\sigma} = \varepsilon_d - \sigma h \pm \Delta$.

3.3 Особенности транспортных свойств четырехточечной структуры в режиме линейного отклика

3.3.1 Изотропная четырехточечная структура в отсутствии кулоновских корреляций

Начнем анализировать транспортные свойства ЧТС с режима линейного отлика и низких температур ($k_BT = 10^{-6}$). В первую очередь рассмотрим предельный случай отсутствия кулоновских взаимодействий (U, V = 0) и магнитного поля (h = 0). В частности, в данном пункте отбратимся к изотропному устройству, когда $t_1 = t_2 = 1$ [11,200]. Во всех последующих численных расчетах положение электронных уровней в ЧТС отсчитывается от уровня химического потенциала, $\mu = 0$, и контролируется параметром ε_d , моделирующим энергию электрического поля затвора.

В наиболее простой ситуации энергии всех точек одинаковы, $\xi_{1\sigma} = \xi_{2\sigma} = \xi_{3\sigma} = \xi_{4\sigma} = \varepsilon_d$. Тогда, не составляет труда найти собственные энергии гамильтониана устройства (3.3),

$$E_1 = \varepsilon_d, \ E_2 = \varepsilon_d - t_0, \ E_{3,4} = \varepsilon_d + \frac{t_0}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{t_0^2 + 16t_1^2}.$$
 (3.29)

Следовательно, решения уравнений $E_i = 0$ (i = 1, ..., 4) дают значения ε_d , при которых в зависимостях $G(\varepsilon_d)$ и $TDOS(\varepsilon_d)$ возникают резонансные особенности при $\Delta = 0$, что хорошо видно на рисунках 3.2a $(t_0 = 0)$ и 3.2b $(t_0 = 1)$. Видно, что в обоих случаях и в кондактансе, и в плотности состояний имеется резонансная структура, состоящую из трех максимумов (далее, трехпиковый резонанс, TПР). При этом состояние с энергией E_2 является связанным состоянием в континууме (ССК), поскольку ему соответствует бесконечно узкий пик, ширина которого пропорциональна δ^2 ($\delta \rightarrow 0$). Однако, это состояние никак не влияет на поведение кондактанса (ср. верхние и нижние графики на рис. 3.2a,b) [74]. Возникновение ССК в данном случае качественно объясняется тем, что волновая функция электрона в контакте ортогональна собственной функции ЧТС с энергией E_2 в силу определенной симметрии рассматриваемого устройства. Для проверки этого утверждения сделаем верхний (1QD-2QD-4QD) и нижний (1QD-3QD-



Рис. 3.2: Кондактанс и плотность состояний изотропной ЧТС: a) $t_0 = \Delta = 0$; b) $t_0 = 1, \ \Delta = 0$; c) $t_0 = 0, \ \Delta = 1$; d) $t_0 = 1, \ \Delta = 1$.

4QD) рукава неэквивалентными, введя энергетический сдвиг Δ , $\xi_{2(3)\sigma} = \varepsilon_d \pm \Delta$ [200]. В результате ширина пика в плотности состояний становится конечной (см. нижние графики на рис. 3.2c,d). Как следствие, при $\varepsilon_d = 0$ ($t_0 = 0$) и $\varepsilon_d \approx 1$ ($t_0 = 1$) в кондактансе реализуются резонансы Фано [35] (см. верхние графики на рис. 3.2c,d).

3.3.2 Анизотропная четырехточечная структура в отсутствии кулоновских корреляций

Другой способ сделать время жизни ССК конечным - рассмотреть анизотропную ЧТС, когда $t_2 \neq t_1$. Анизотропный режим по естественным причинам в целом лучше соответствует структурам, изучаемым на практике. Далее будем использовать соотношение $t_1 \gg t_0$, t_2 , учитывая, что оно может быть даже усилено при $U, V \neq 0$ за счет ЭПЭ.

Если $t_0 = \Delta = 0$, то имеем

$$E_{1,2} = \varepsilon_d, \ E_{3,4} = \varepsilon_d \pm \sqrt{2(t_1^2 + t_2^2)}.$$
 (3.30)

В этой ситуации кондактанс и плотность состояний ведут себя аналогично изотропному случаю (ср. рис. 3.2a и 3.3a), т.е. реализуется ТПР, а также ССК при $\varepsilon_d = 0$. Такое поведение можно объяснить тем фактом, что параметр t_2 определяет высоты соответствующих туннельных барьеров в нижнем рукаве и не влияет на фазу волнолновой функции электрона, распространяющегося в нем. Таким образом, интерференция волн, проходящих в двум плечам ЧТС, приводит к проводимости, которая отличается от изотропного случая только количественно. Другим аргументом в пользу отсутствия дополнительных резонансных особенностей в кондактансе ЧТС с нарушенной пространственной симметрией является вырождение энергий двух состояний, согласно (3.30), которое имеет место только при $t_0 = \Delta = 0$. Такое вырождение само по себе может приводить к возникновению ССК [201, 202].

При $t_0 \neq 0$ появляется резонанс Фано (см. рис. 3.3b). Простое объяснение этого эффекта и в изотропном, и в анизотропном устройстве основано на интерпретации 2ой и 3-ей КТ как искусственной молекулы, димера [68,203]. Его собственные состояния



Рис. 3.3: Кондактанс и плотность состояний анизотропной ЧТС, $t_2 = 0.1$: a) $t_0 = \Delta = 0$; b) $t_0 = 0.2$, $\Delta = 0$; c) $t_0 = 0$, $\Delta = \pm 1$; d) $t_0 = 0.2$, $\Delta = \pm 1$; e) $t_0 = 0$, $\Delta = \pm 0.2$; f) $t_0 = 0.2$, $\Delta = \pm 0.2$.

(молекулярные орбитали), связанное и антисвязанное, в общем случае взаимодействуют с остальной частью системы с разной интенсивностью. Тогда, в исходной трактовке Фано [35] уровень, уширение которого больше, можно интерпретировать как состояние континуума или нерезонансный канал, тогда как менее уширенный уровень играет роль состояния дискретного спектра или резонансного канала. При этом фаза волно-

вой функции в нерезонансном канале изменяется незначительно в интервале энергий $\sim \gamma$, где γ - уширение уровня, соответствующего резонансному каналу. Однако, в последнем фаза волновой функции испытывает сдвиг $\sim \pi$ в том же энергетическом диапазоне. Таким образом, интерференция волн в этих каналах (или конфигурационное взаимодействие) приводит к появлению асимметричного пика Фано. Интенсивность взаимодействие) приводит к появлению асимметричного пика Фано. Интенсивность взаимодействия состояний димера с окружением при симметричном подключении контактов определяется параметрами t_1, t_2, Δ . В частности, в работах [67,68] было показано, что в двойной КТ (1QD и 4QD отсутствуют) при $\Delta = 0$ связь одной из орбиталей с контактами становится равной нулю в изотропной системе, $t_1 = t_2 = \Gamma$, и резонанс Фано исчезает (аналогично поведению на рис. 3.2b). Если $\Delta \neq 0$, то имеется ненулевое взаимодействие обоих состояний димера в остальной частью системы. При этом знак *Delta* влияет как на положение, так и на ширину (при $t_0 \neq 0$) пика Фано (см. штриховые и сплошные кривые на рис. 3.2с-3.2f).

3.3.3 Роль температурного фактора

Если температура сравнима по величине в расстоянием между уровнями ЧТС, т.е. $k_BT \sim \Delta, t_2, t_0$, то кондактанс должен вычисляться по формуле (3.27). Влияние температуры на поведение функции $G(\varepsilon_d)$ изображено на рисунке 3.4. При $k_BT \ll \Delta, t_2, t_0$ размытие максимумов контактанса, в частности, асимметричного пика Фано незначительно (см. пунктирную кривую при $k_BT = 0.01$). С ростом температуры зависимость постепенно приобретает вид лоренцевского пика.

3.3.4 Изотропная четырехточечная структура с учетом кулоновских корреляций

Влияние кулоновских взаимодействий между электронами внутри каждой КТ, U, и электронов в разных точках, V, на зависимость кондактанса от энергии поля затвора показано на рисунках 3.5a и 3.5b, соответственно. Сильное кулоновское отталкивание



Рис. 3.4: Влияние температуры на кондактанс анизотропной ЧТС при $t_2 = 0.1, t_0 = 0.2, \Delta = -1.$

электронов с различными проекциями спина в каждой КТ приводит к расщеплению ее энергий возбуждения, $\xi_{j\sigma}$ и $\xi_{j\sigma} + U$ (j = 1, ..., 4). Следовательно, в зависимости $G(\varepsilon_d)$ в силу электрон-дырочной симметрии возникает две ТПР, которые разделены явно выраженной диэлектрической зоной при $-4 \lesssim \varepsilon_d \lesssim -1$, где G близко к нулю, и ЧТС заполнена наполовину (см. штрих-пунктирную кривую на рис. 3.5a и кривые на рис. 3.7b, соответственно) [204]. Таким образом, можно провести аналогию между ТПР и возникновением некоторых прообразов верхней и нижней хаббардовских подзон. Хорошо видно, что диэлектрическая зона образуется при $\Delta = 0$, т.е. реализация ТПР не требует привлечения системы электродов затвора и возможна для меньшего количества КТ, чем в предлагается в работах [175, 205].

Учет кулоновского взаимодействия электронов, находящихся во 2-ой и 3-ей КТ, приводит к расщеплению центрального пика в обоих ТПР, как показано на рис. 3.5b на примере левого ТПР. Эта модификация объясняется тем, что в при $V \neq 0$ у двух



Рис. 3.5: Влияние кулоновских взаимодействий между электронами внутри каждой KT (a) и электронов в разных точках (b) на кондактанс при $k_BT = 0.01$.

центральных КТ имеются четыре отличные друг от друга энергии возбуждения, $\xi_{\alpha\sigma}$, $\xi_{\alpha\sigma} + V$, $\xi_{\alpha\sigma} + U$ и $\xi_{\alpha\sigma} + V + U$ ($\alpha = 2, 3$). Стоит отметить, что увеличение V приводит к появлению антирезонанса Фано и реализации достаточно широкой полосы с низкой проводимостью ($G \sim 0.1$ в области $-7 \leq \varepsilon_d \leq -5.5$).

Влияние отталкивания V на левый и правый ТПР не одинаково, как следует из зависимости $G(\varepsilon_d)$ на рисунке 3.6а. А именно, расщепление в правом ТПР приводит к расширению диэлектрической зоны вследствие значительного подавления первого левого пика при $\varepsilon_d \approx -2$. Если $U, V \neq 0$, а также имеется туннельное взаимодействие между центральными точками, $t_0 \neq 0$, то отмеченные зоны малых значений кондактанса становятся еще шире, как показано на рис. 3.6b. Как уже обсуждалось выше, ненулевой сдвиг энергии, Δ , приводит к антирезонансу Фано в центральной части ТПР (см. пунктирную кривую на рис. 3.6c). Число таких особенностей удваивается при $U \neq 0, V = 0$ (см. штрих-пунктирную кривую). Как следствие, области, характеризующиеся малыми значениями кондактанса внутри обоих ТПР, появляются даже в отсутствии кулоновских корреляций между точками (см. $-8 \leq \varepsilon_d \leq -6.5$ и $0.5 \leq \varepsilon_d \leq 1.5$ в левой и правой ТПР, соответственно). Наконец, $V \neq 0$ индуцирует два дополнительных антирезонанса (см. сплошную кривую) по аналогии со случаем $\Delta = 0$. Заметим также, что возможен и обратный эффект, когда учет корреляций


Рис. 3.6: Кондактанс изотропной ЧТС с учетом кулоновских корреляций при $k_BT = 0.01$: a) $t_0 = \Delta = 0$; b) $t_0 = 1$, $\Delta = 0$; c) $t_0 = 0$, $\Delta = 1$; d) $t_0 = 1$, $\Delta = 1$.

приводит к усиленную дифференциальной проводимости в некотором диапазоне ε_d . Например, антирезонанс в правом ТПР при $\varepsilon_d = 0$ и U, V = 0 на рис. 3.6с (см. пунктирную кривую) заменяется резонансом, $G \simeq 1$, при $U, V \neq 0$ (см. сплошную кривую). Если $t_0 = \Delta = 1$, то еще один антирезонанс появляется (исчезает) в области левого (правого) ТПР (см. сплошную кривую на рис. 3.6d).

Описанное поведение кондактанса определяется соответствующими особенностями поведения чисел заполнения, что наиболее наглядно проявляется в простейшем случае, $t_0 = \Delta = 0$. В отсутствии кулоновских взаимодействий зависимости заселенностей боковых, $n_{1,4\sigma}$ и центральных, $n_{2,3\sigma}$, КТ от энергии поля затвора имеют три ступеньки при тех же ε_d , что и резонансы в ТПР (см. штриховые и сплошные кривые на рис. 3.7а, соответственно). Если принять во внимание многочастичные эффекты внутри точек ($U \neq 0$), то возникают три дополнительные ступеньки на расстоянии U



Рис. 3.7: Зависимость чисел заполнения изотропной ЧТС от энергии электрического поля затвора, $t_0 = \Delta = 0$, $k_BT = 0.01$: a) U = V = 0; b) U = 5, V = 0; c) U = 5, V = 1.

от исходных (см. рис. 3.7b). В свою очередь, включение V приводит к расщеплению двух центральных ступенек в $n_{2,3\sigma}(\varepsilon_d)$ при $\varepsilon_d = -5$ и $\varepsilon_d = 0$, соответственно (см. рис. 3.7c). Важно отметить, что обширные области ε_d , где числа заполнения не меняются, соответствуют диэлектрическим зонам кондактанса на рис. 3.5a и 3.6. В частности, G = 0 в области половинного заполнения. Слабое влияние кулоновских корреляций на кондактанс при больших полях затвора, $\varepsilon_d \ge 1$, объясняется низкой заселенностью точек структуры.

В заключении данного раздела кратко обсудим возможность реализации эффекта Кондо в системе. Этот вопрос является важным поскольку нами рассматривается квантовый транспорт в условиях сильной связи ЧТС с контактами. При этом, исходя из полученных зависимостей кондактанса и формул (3.29), (3.30), можно говорить о реализации режима кулоновской блокады, т.к. выполняется соотношение $\Gamma < \delta E < U$, где δE - расстояние между уровнями ЧТС. В этом случае температура Кондо, T_K , способна достигать достаточно высоких значений [206]. Однако, теоретические оценки для одиночных точек и экспериментальные данные, полученные в том числе в последнее время для ЧТС [207, 208], указывают на $T_K \sim 100$ мК – 1 K, что существенно меньше выбранного здесь значения температуры $T \approx 10$ K (если $\Gamma \approx 0.1$ эВ). Необходимо добавить, что для последовательного описания Кондо корреляций в ЧТС необходимо принимать во внимание не только туннельное взаимодействие с контактами, но и антиферромагнитный обмен, $J \sim t_{1,2}^2/U$, между точками в самом устройстве [209]. В частности, для двойной квантовой точки уже было показано, что подобная конкуренция может полностью подавить резонанс Кондо при половинном заполнении [210].

3.3.5 Анизотропная четырехточечная структура с учетом кулоновских корреляций

Перейдем к рассмотрению транспортных свойств ЧТС с анизотропией кинетических процессов. В этой ситуации ширина области в малыми значениями кондактанса в левом ТПР меньше, чем в изотропном режиме при $\Delta = 0$ (ср. рис. 3.5b и 3.8b). Влияние кулоновских корреляций приводит к тем же качественным особенностям. Однако, сочетание многочастичных эффектов со сдвигом энергии Δ может значительно изменить поведение кондактанса. Совместный учет этих факторов приводит к реализации большой диэлектрической зоны с маленьким пиком посередине в результате значительного подавления левого ТПР, как показано на рис. 3.8c, 3.8d (см. сплошные кривые). Это может быть качественно объяснено более высоким заполнением 3-ей КТ ($\Delta > 0$) и более слабыми кинетическими процессами в нижнем плече ЧТС (1QD-3QD-4QD), приводящими к усилению деструктивной интерференции Фано, обусловленной кулоновским взаимодействием между центральными точками. В то же время, модификация правого ТПР меньше вследствие более низкой заселенности ЧТС при боль-



Рис. 3.8: Кондактанс анизотропной ЧТС с учетом кулоновских корреляций, $t_2 = 0.1$, $k_BT = 0.01$: a) $t_0 = \Delta = 0$; b) $t_0 = 0.2$, $\Delta = 0$; c) $t_0 = 0$, $\Delta = 1$; d) $t_0 = 0.2$, $\Delta = 1$.

ших полях затвора. Таким образом, ЭПЭ, который ожидается в системе с тяжелыми и легкими носителями из-за сильного кулоновского взаимодействия между точками, V, и/или гибридизации между ними, t_0 , а также управляющее влияние электродов затвора, могут существенно влиять на кондактанс путем значительного подавления ТПР.

3.3.6 Спиновый фильтр на основе четырехточечной структуры

Генерация управляемого высоко спин-поляризованного тока является крайне важной задачей для приложений спинтроники [211,212]. Для достижения этой цели было предложено множество систем от полупроводниковых гетероструктур до мезоскопических образцов [92, 161]. В первом случае проекция спина носителей контролируется спин-орбитальной взаимодействием (СОВ) Рашбы [213,214]. Его величина, в свою очередь, может регулироваться электрическим полем, направленным перпендикулярно двумерному электронному газу [215]. В случае отдельных КТ возможность спиновой фильтрации демонстрировалась, например, вследствие кинематического взаимодействия в режиме сильного отталкивания U [120] или за счет эффекта Фано [161]. В мезоскопических устройствах наряду с СОВ в режиме когерентного транспорта важную роль играет квантовая интерференция [216]. Так, в некоторых работах было продемонстрировано, что сочетание потока Ааронова–Бома (АБ) [217] и СОВ Рашбы приводит к существенной спиновой поляризации кондактанса [218,219]. Однако, экспериментальная реализация таких низкоразмерных наносистем, в частности, контроль амплитуды СОВ электрическим полем или фазы АБ, представляется довольно сложной задачей.

Другим механизмом, позволяющим добиться высокой степени спиновой поляризации кондактанса, является комбинация эффектов Фано и Зеемана. В этом случае приложение магнитного поля приводит к возникновению так называемых спинполяризованных окон в области асимметричных пиков Фано, когда кондактанс для проекции спина σ близок 1 (в единицах $G_0 = e^2/h$), а для $\overline{\sigma}$ - к нулю [175,205,220,221]. Для систем КТ, ранее предложенных в качестве прототипов спиновых фильтров [175, 205,221], крайне предпочтительным было наличие большого количества точек. При этом в отмеченных работах принималось во внимание только внутриточечное кулоновское взаимодействие, U. Ниже будет показано, что ЧТС при включении магнитного поля ($h \neq 0$) демонстрирует спин-фильтрационные свойства [11]. Такое поведение основано на совместном учете обоих видов отталкивания ($U, V \neq 0$), анизотропии кинетических процессов в ЧТС и действии полей затвора.

Степень спиновой поляризации тока характеризуется соответствующим коэффициентом *P* [92],

$$P = \frac{G_{\uparrow} - G_{\downarrow}}{G_{\uparrow} + G_{\downarrow}}.$$
(3.31)

Следуя порядку изложения, принятому в предыдущих пунктах данного параграфа, начнем с анализа зависимостей спин-зависящих компонент кондактанса, $G_{\uparrow,\downarrow}$, и коэффициента P от энергии поля затвора в случае изотропной ЧТС. Поведение соответ-



Рис. 3.9: Зависимость спин-зависящих компонент кондактанса, $G_{\uparrow,\downarrow}$, и коэффициента спиновой поляризации для изотропной (a-d) и анизотропной (e,f) ЧТС от энергии поля затвора при U = 6, $k_BT = 0.01$, h = 0.5. Другие параметры: (a) $V = t_2 = t_0 = \Delta = 0$; (b) V = 1, $t_2 = t_0 = \Delta = 0$; (c,d) $V = t_2 = t_0 = \Delta = 1$; (e,f) V = 1, $t_2 = 0.1$, $t_0 = 0.2$, $\Delta = 0.5$.

ствующих функций приведено на рисунках 3.9а-с и 3.9d. Как обсуждалось в пункте 3.3.4, в простейшем случае $t_0 = \Delta = 0$ имеются два ТПР, разделенных диэлектриче-

ской зоной. На рис. 3.9а видно, что при $h \neq 0$ происходит разделение $G_{\uparrow}(\varepsilon_d)$ и $G_{\downarrow}(\varepsilon_d)$, и ТПР начинают смещаться друг относительно друга (см. сплошную и штриховую кривые, соответственно). Следовательно, при некоторых ε_d и h достигается идеальная спиновая фильтрация, когда ТПР для одной из проекций спина совмещается с диэлектрической зоной для другой проекции. Другими словами, реализуется спинполяризованное окно, где, согласно формуле (3.31), $P = \pm 1$ (см. область $-5 \leq \varepsilon_d \leq -1$ пунктирной кривой на рис. 3.9d).

Наиболее интересная ситуация возникает при учете кулоновского взаимодействия между электронами 2-ой и 3-ей КТ наряду с корреляциями внутри каждой точки. В этом случае зеемановское расщепление приводит к возникновению нового спинполяризованного окна в области левого ТПР за счет эффекта Фано (см. область $-7 \leq \varepsilon_d \leq -5$ штриховой кривой на рис. 3.9d). В целом, кулоновскими корреляциями в ЧТС генерируются три зоны с высокой спиновой поляризацией для $\sigma =\uparrow (P > 0.5)$ и четыре зоны - для $\sigma =\downarrow (P < -0.5)$. Неодинаковое количество зон для $sgn(P) = \pm 1$ и их различие до и после половинного заполнения ($\varepsilon_d \approx -3$ для $\sigma =\uparrow$) объясняется нарушением электрон-дырочной симметрии при $V \neq 0$ [204]. Кроме того, дополнительные спин-поляризованные окна можно индуцировать при $t_0 \neq 0$ и/или $\Delta \neq 0$. На рис. 3.9с показан общий эффект от рассмотрения обоих факторов. Видно, что новые резонансы Фано приводят к реализации новых окон в магнитном поле. Таким образом, спиновая поляризация последовательно переключается между проводящими каналами с $P \approx \pm 1$ при изменении ε_d (см. сплошную кривую на рис. 3.9d).

Обратимся к анизотропной ЧТС, когда $t_1 \gg t_2, t_0$. В этом режиме происходит общее уменьшение кондактанса в областях ε_d , где заселенность ЧТС отлична от нуля. В частности, подавляются узкие пики, имевшиеся в кондактансе изотропного устройства (ср. рис. 3.9е и 3.9с). Как следствие, за счет эффекта Зеемана формируются шесть явно выраженных спин-поляризованных окон (по три на каждую проекцию спина), а спиновая поляризация на рис. 3.9f имеет набор чередующихся зон с высокими значениями |P|. Таким образом, продемонстрировано, что ЧТС как в изотропной, так и в анизотропной конфигурации может быть использована в качестве спинового фильтра. Данное свойство связано с присутствием кулоновских корреляций в структуре и квантовой интерференцией.

3.4 Неравновесный транспорт в четырехточечной структуре в присутствии многочастичных эффектов

Как уже отмечалось во введении настоящей главы, на сегодняшний день возможна экспериментальная реализация структур из трех и четырех КТ различной топологии, когда точки выстраиваются в ряд или в форме многоугольника [163–165]. При этом геометрия расположения точек сказывается принципиальным образом на свойствах таких систем. Например, в рамках модели Хаббарда при больших значениях кулоновского отталкивания электронов в точке, U, было показано, что наличие замкнутых путей для движения электронов в системе трех KT делает возможным реализацию ферромагнитного порядка по сценарию Нагаоки [167,222]. В ЧТС квадратной формы с заполнением на единицу меньше половинного появление основного состояния со спином S = 3/2 объясняется наличием эффективного калибровочного поля, приводящего к увеличению энергии кирального состояния со спином S = 1/2. При рассмотрении транспортных задач этот эффект является одним из механизмов, инициирующих спиновую блокаду тока [172], поскольку одноэлектронные переходы являются запрещенными, если спин задействованных в них состояний отличается больше, чем на 1/2. Стоит заметить, что явление спиновой блокады также демонстрировалось ранее как для меньшего количества последовательно соединенных точек [223, 224], так и для отдельной многоуровневой точки [225]. Одним из его проявлений в наблюдаемых характеристиках является выпрямление тока и отрицательная дифференциальная проводимость (ОДП). Среди других механизмов подавления тока в системах КТ можно выделить эффект Ааронова-Бома [226], использование темных состояний [227-229] и изоспиновую блокаду [230]. В данном параграфе мы предлагаем альтернативное описание ОДП, наблюдаемой в транспортных характеристиках ЧТС [16]. Этот эффект, возникающий в случае анизотропной ЧТС, интерпретируется в терминах связанных состояний в континууме (ССК) и взаимодействия резонансов Фано, которые вызваны кулоновскими корреляциями между электронами центральных точек, V.



Рис. 3.10: Влияние напряжения смещения на зависимости кондактанса (a) и чисел заполнения (b) от энергии поля затвора для изотропной ЧТС. Параметры: U = 5, V = 1, $t_1 = t_2 = 1$, $t_0 = \Delta = 0$, $k_BT = 0.01$.

Перейдем к описанию транспорта через ЧТС в неравновесном режиме. На рисунке 3.10a и 3.10b представлены зависимости кондактанса и заселенности точек от энергии поля затвора для изотропного случая. Видно, что резонансы $G(\varepsilon_d)$ слева и справа от диэлектрической зоны, отвечающей половинному заполнению, расщепляются по сравнению с равновесным режимом (см. штриховую кривую на рис. 3.10а). Это объясняется тем, что при $eV \neq 0$ прохождение электронов усиливается, если электронный уровень в ЧТС, управляемый параметром ε_d , совпадает с электрохимическим потенциалом левого или правого контакта, $\mu_{L,R} = \mu \mp \frac{eV}{2}$. Одновременно, антирезонансы Фано в проводимости, возникающие за счет кулоновского взаимодействия между центральными точками, становятся отличными от нуля. При eV = 0.5 обе диэлектрические зоны, полученные в режиме линейного отклика (см. пункт 3.3.4), сохраняются. Однако, дальнейший рост напряжения смещения приводит к уменьшению их ширин (см. сплошную кривую на рис. 3.10а). Кроме того, возрастание роли эффектов неравновесности приводит к выходу за пределы применимости формулы Ландауэра-Бюттикера. В результате, для некоторых значений поля затвора $G > 2G_0$ при $\Gamma \sim U, V$. Ступеньки чисел заполнения также расщепляются при $eV \neq 0$, что особенно заметно на примере заселенностей двух внутренних точек, $n_{2,3}$ (см. рис. 3.10b). При этом каждому скачку



соответствует резонанс кондактанса.

Рис. 3.11: Особенности транспортных свойств анизотропной ЧТС. (а) Зависимость кондактанса от энергии поля затвора. На вставке: антирезонанс Фано и его расщепление при $eV \neq 0$. (b) Вольт-амперные характеристики. Параметры: $U = 5, V = 1, t_1 = 1, t_2 = 0.1, t_0 = \Delta = 0, k_BT = 0.01.$

Обратимся к анизотропной ситуации, когда $t_1 \neq t_2$. На рисунке 3.11а представлена модификация зависимости кондактанса от энергии поля затвора в этом режиме при включении напряжения смещения. Видно, что учет анизотропии кинетических процессов в ЧТС приводит к возникновению антирезонансов проводимости с отрицательными значениями. На рис. 3.11b пунктирной кривой показана вольт-амперная характеристика (ВАХ) в поле затвора $\varepsilon_d = -0.82$, соответствующем антирезонансу наибольшей амплитуды на рис. 3.11a. ВАХ имеет четыре участка, где поведение дифференциальной проводимости существенно отличается. При энергиях поля исток-сток $| eV | \lesssim 0.75$ ток практически не растет аналогично эффекту кулоновской блокады. При 0.75 $\lesssim | eV | \lesssim 1$ наблюдается существенный рост, сменяющийся резким спадом при $| eV | \approx 1$ с узкой долиной. При 1 $\lesssim | eV | \lesssim 1.5$, также как и на втором участке, ток нарастает. Отношение пик/долина в данном случае ~ 1.4. Схожий сценарий наблюдается и при заполнении ЧТС, большем половинного (см. штриховую кривую на рис. 3.11b). Отношение пик/долина можно повысить, если дополнительно учесть перескок между центральными точками и сделать разными их посадочные энергии

с помощью системы из нескольких электродов затвора. ВАХ, отвечающая данному случаю ($t_0 \neq 0, \Delta \neq 0$), изображена сплошной кривой на рис. 3.11b. В данном случае долина более широкая, а отношение пик/долина ~ 1.9. При рассмотрении Т-образной геометрии ЧТС ($t_2 = 0$) отношение пик/долина ~ 2.6. В режиме $\Gamma \ll U, V$ и тех же соотношениях между параметрами перескока t_1, t_2, t_0 , что и на рис. 3.11, отношение становится ~ 4 (последние два случая не представлены на рис. 3.11).

Обнаруженный эффект ОДП связан с особенностями поведения плотности состояний ЧТС в анизотропном режиме, $TDOS(\omega) = -\frac{1}{\pi} \sum_{i=1}^{4} Im\{G_{ii}^{r}(\omega)\}$. Для начала обратимся к изотропной ситуации. Соответствующая плотность состояний изображена на рисунке 3.12а. При отсутствии кулоновских взаимодействий положение максимумов $TDOS(\omega)$ определяются энергиями собственных состояний гамильтониана $H_D (U = V = 0)$ (см. пунктирную кривую на рис. 3.12а). Если $t_0 = \Delta = 0$, то согласно формуле (3.29) имеется четыре уровня с энергиями: ε_d , $\varepsilon_d \pm 2t_1$. Как было показано в работах [201, 202], наличие вырождения может приводить к возникновению ССК. В данном случае ССК соответствует узкий пик при $\omega = 0$, ширина которого определяется слагаемым $i\delta$ в $G_{ij}^{r}(\omega)$. В результате включения кулоновских взаимодействий внутри каждой точки появляется три новых максимума за счет расщепления одноэлектронных энергий возбуждения отдельной точки: ε_d , $\varepsilon_d + U$ (см. штриховую кривую на рис. 3.12a). Как следствие, появляется дополнительное ССК [74]. Учет кулоновских взаимодействий между центральными точками вызывает дополнительное расщепление одноэлектронных энергий возбуждения. Таким образом, в плотности состояний появляются два новых максимума и два ССК (см. сплошную кривую на рис. 3.12a). Заметим, что полученные максимумы в плотности состояний являются причиной возникновения резонансов кондактанса в режиме линейного отклика (см. пунктирную кривую на рис. 3.10а). В частности, индуцирование асимметричных пиков Фано при $V \neq 0$ связано с появлением соответствующих максимумов в зависимости $TDOS(\omega)$ (см. пункт 3.3.4). В свою очередь, ССК никак не проявляются в транспортных характеристиках ЧТС.

В анизотропной ситуации время жизни пары ССК, индуцированных кулоновскими корреляциями между точками, становится конечным. В результате в плотности



Рис. 3.12: (a) Влияние кулоновских корреляций на связанные состояния в континууме (CCK) в плотности состояний изотропной ЧТС. (b) Влияние анизотропии кинетических процессов в ЧТС на ССК. На вставке: пик, связанный с одним из ССК. Параметры: $\varepsilon_d = 0$, другие параметры совпадают с использованными для рисунка 3.11.

состояний появляется два узких пика конечной высоты (см. сплошную кривую на рис. 3.12b). При этом в кондактансе реализуются новые антирезонансы Фано. Один из них показан на вставке рисунка 3.11а при $\varepsilon_d \approx -6.5$ (см. пунктирную кривую). Ненулевое значение G объясняется влиянием температуры. Как уже было замечено выше, в неравновесном режиме резонансы кондактанса расщепляются. В этой ситуации рассматриваемый антирезонанс преобразуется в узкие максимум и минимум, где G > 0 и G < 0 соответственно, которые находятся на расстоянии примерно eV (см. на вставке рисунка 3.11а сплошной кривой показаны основание узкого максимума и минимум при $eV \neq 0$). С ростом напряжения смещения минимум смещается вправо. Одновременно, асимметричный пик Фано, возникающий при $V \neq 0$ в изотропном случае, сдвигается влево. Таким образом, усиление ОДП наблюдается, когда отмеченные резонансные особенности Фано находятся вблизи друг друга и взаимодействуют. Описанный сценарий реализуется и при заполнении ЧТС, меньшем половинного.

Заметим, что в работе [231], где по существу рассматривалась система из двух квантовых точек, связанных с контактами параллельно, эффект ОДП возникает за счет кулоновских корреляций именно в асимметричном контакте, когда неодинаковы в том числе и параметры туннельной связи точек с отдельным контактом. В нашем случае ОДП имеет место в режиме симметричной сильной связи ЧТС с контактами. При этом асимметрия кинетических процессов, приводящая к специфическому перераспределению заселенностей уровней ЧТС, является свойством самого устройства.

3.5 Резюме

Основные итоги главы 3 сводятся к следующему:

- Развита теория стационарных кинетических процессов в системе квантовых точек, в которой существенны зарядовые корреляции электронов, находящихся как в одной, так и в разных точках. Для устройства, состоящего из четырех коррелированных квантовых точек, на основе техники неравновесных функций Грина и метода уравнений движения вычислены транспортные характеристики.
- 2. Показано, что в режиме линейного отклика эффект Фано реализуется как за счет особенностей одночастичных процессов, при которых учитываются туннельное взаимодействие между центральными точками и пространственная анизотропия структуры, так и в результате многочастичных взаимодействий. Установлено, что в определенных диапазонах электрических полей затвора этот эффект про-является посредством больших и малых значений кондактанса, т.е. возникновением проводящих и диэлектрических зон. Данное обстоятельство позволяет функционировать структуре из четырех точек в качестве спинового фильтра.
- 3. Показано, что в неравновесном режиме при ненулевом напряжении смещения в анизотропной системе возникает эффект отрицательной дифференциальной проводимости, связанный с расщеплением и взаимодействием резонансов Фано. При этом отношение пик/долина в ВАХ может быть увеличено за счет создания ненулевой разности одноэлектронных энергий двух центральных точек, а также при учете перескока между этими точками.

Глава 4

ОСОБЕННОСТИ ТРАНСПОРТА ЧЕРЕЗ МАЙОРАНОВСКИЕ СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ТОПОЛОГИЧЕСКИХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

4.1 Проблема детектирования майорановского состояния в сверхпроводящих проволоках с сильной спин-орбитальной связью

В работе [232] А. Китаев рассмотрел одномерную модель бесспиновых фермионов с параметрами перескока и *p*-волнового сверхпроводящего спаривания между ближайшими узлами, *t* и Δ, соотвественно. Гамильтониан такой цепочки (проволоки) имеет следующий вид:

$$H_K = -\mu \sum_{j=1}^N a_j^+ a_j - t \sum_{j=1}^{N-1} \left(a_j^+ a_{j+1} + a_{j+1}^+ a_j \right) + \sum_{j=1}^{N-1} \left(\Delta a_j a_{j+1} + \Delta^* a_{j+1}^+ a_j^+ \right).$$
(4.1)

Китаевым было обнаружено, что топологический инвариант проволоки с периодическими граничными условиями, число Майорана, принимает разные значения при $2t < |\mu|$ и $2t > |\mu|$, $\Delta \neq 0$. В последнем случае на концах открытой цепочки возникают

майорановские моды (MM), а их суперпозиция представляет собой нелокальное фермиевское возбуждение - майорановское связанное состояние (MCC). В особых точках модели Китаева, когда $t = \pm \Delta$ и $\mu = 0$, MCC обладает нулевой энергией, а волновые функции MM локализованы строго на 1-ом и N-ом узлах цепочки.

Важно подчеркнуть, что переход из фазы без краевого состояния в фазу, где таковое присутствует, не сопровождается изменением физической симметрии системы. Однако, при таком переходе происходит закрытие щели в спектре возбуждений при k = 0 (где k - волновой вектор), если $2t = \pm \mu$, поскольку

$$E(k) = \pm \sqrt{(2t\cos k + \mu)^2 + (2\Delta\sin k)^2}.$$
 (4.2)

Таким образом, отмеченные фазы в силу принципа адиабатической непрерывности не являются идентичными, и такой квантовый переход между ними называется топологическим.

Начиная с работ [232, 233], МСС в твердотельных системах привлекают большое внимание исследователей. Как известно, основной проблемой на пути к созданию квантового компьютера является чувствительность квантовых состояний, образующих кубит, к возмущениям, приводящим к сбою фазы волновой функции системы [234]. В силу того, что МСС обладают топологической защищенностью по отношению к внешним воздействиям (за счет пространственной нелокальности и щели в спектре возбуждений), кубит, сформированный на основе МСС, устойчив к действию процессов декогеренции. Управление состоянием такого кубита может осуществляться за счет смены мест ММ или обхода одной ММ вокруг другой (так называемые операции брейдинга) [235,236], т.к. майорановские фермионы подчиняются неабелевой статистике [237].

Известно, что нетривиальные краевые состояния возникают на границе раздела двух сред, отличающихся значениями топологического инварианта. Так, МСС были теоретически предсказаны, например, в 2D гетероструктурах топологический изолятор/сверхпроводник [238–240]. Однако, наибольший прогресс в области экспериментального детектирования фазы топологической сверхпроводимости был достигнут для 1D систем. В этом случае одним из сценариев, позволяющих реализовать МСС, является сочетание трех факторов: спин-орбитального взаимодействия, сверхпроводящего спаривания s-типа и магнитного поля. После того, как было показано, что соответствующая модель изоморфна цепочке Китаева [241, 242], были представлены результаты ряда экспериментов по туннельной спектроскопии, в которых приводились аргументы в пользу реализации МСС в полупроводниковых проволоках InAs, InSb [243–245]. В этих работах изучалась дифференциальная проводимость (кондактанс), G = dI/dV, контакта парамагнитный металл/гибридная полупроводниковая проволока с сильным спин-орбитальным взаимодействием (см. рис. 4.1а). При этом под гибридностью подразумевается, что сверхпроводящее спаривание в проволоке наводится за счет эффекта близости с массивным сверхпроводником. Далее будем называть такую наноструктуру сверхпроводящей проволокой (СП).



Рис. 4.1: (a) Изображение InSb проволоки, которая частично находится над сверхпроводником, *S*, в магнитном поле **B**. (b) Возникновение пика кондактанса при нулевом напряжении смещения с ростом величины магнитного поля [243].

Для пояснения особенностей кондактанса, которые были обнаружены в отмеченных экспериментальных работах, остановимся подробнее на контакте металл / сверхпроводник. При малых напряжениях смещения и низких температурах ток определяется только состояниями электронов с энергией ε вблизи уровня Ферми, и $\varepsilon \ll \Delta$ (где Δ - интенсивность сверхпроводящего спаривания). В этом случае, поскольку основное состояние сверхпроводника описывается волновой функцией, которая является суперпозицией состояний с четным или нечетным числом частиц, то для транспортируемого электрона существует ненулевая вероятность оказаться в сверхпроводнике только в виде куперовской пары. Такой процесс называется андреевским отражением [138]. В этом случае электрон отражается от интерфейса в область нормального металла в виде дырки с противоположной проекцией спина. При наличии потенциального барьера в области контакта имеется также ненулевая вероятность обычного рассеяния электрона назад. Вероятность андреевского отражения обратно пропорциональна высоте потенциального барьера между подсистемами [246].

В случае реализации топологически нетривиальной фазы основное состояние сверхпроводника становится двукратно вырожденным, т.е. имеются две многочастичные волновые функции с одинаковой энергией, но с разной четностью. Другими словами, электрон с энергией Ферми все также может оказаться в сверхпроводнике только в результате андреевского отражения. Однако, теперь этот процесс проходит через майорановское возбуждение, обладающее нулевой энергией. В результате андреевское отражение приобретает резонансный характер, т.е. соответствующая вероятность равна единице независимо от величины интеграла перескока между подсистемами. Данный эффект объясняется тем, что в силу самоэрмитовости майорановского оператора величина туннельного взаимодействия MM, локализованной в области интерфейса, с электронным и дырочным резервуарами нормального металла одинакова [247]. Как следствие, кондактанс при нулевом напряжении смещения имеет максимум высотой $2G_0$ ($G_0 = e^2/h$ - квант кондактанса). При этом множитель 2 указывает на величину заряда 2e, переносимую в описанном процессе андреевского отражения [247, 248]. Кроме того, отмеченный пик должен быть устойчив по отношению к флуктуациям химического потенциала и магнитного поля [249–251].

В первых экспериментах по туннельной спектроскопии СП [243–245] также регистрировался пик кондактанса при нулевом напряжении, который возникал с ростом магнитного поля, сохранялся только при одновременном присутствии спин-орбитального взаимодействия и сверхпроводящего *s*-спаривания и объяснялся резонансным андреевским отражением от МСС (см. рис. 4.1b). Однако, полученные данные демонстрировали отсутствие стабильного квантования кондактанса, значения которого часто оказывались существенно меньше $2G_0$ [243–245, 252, 253].

В результате, в литературе возникла широкая дискуссия относительно возможных

причин слабой проводимости и различных альтернативных механизмов, приводящих к резонансной особенности без привлечения топологически нетривиальных состояний. В частности, существенной проблемой для наблюдения устойчивого пика $2G_0$ стало индуцирование недостаточно сильного сверхпроводящего спаривания в полупроводниковой проволоке. Следствием чего является ненулевая проводимость при энергиях электрического поля исток-сток меньших ширины наведенной сверхпроводящей щели. Этот эффект может объясняться рядом факторов: беспорядком в проволоке, тепловыми флуктуациями, неровностями интерфейса электрон-фононным взаимодействием в системе [254, 255]. Дополнительно было показано, что кроме усложнения интерпретации существующих экспериментальных данных квазичастичные внутрищелевые состояния могут пагубно влиять на топологическую защищенность MCC, поскольку способны участвовать в брейдинге ("переплетении" мировых линий квазичастиц) и, тем самым, вносить ошибки в итоговое квантовое состояние [256, 257].

Сразу после появления первых экспериментов по туннельной спектроскопии СП было продемонстрировано, что резонанс кондактанса при нулевом напряжении может быть следствием появления низкоэнергетических состояний в проволоках с несколькими подзонами при наличии и в отсутствии беспорядка, никак не связанных с топологическим фазовым переходом в системе [258–260]. Тогда, такие состояния могут возникать, если зеемановская энергия превышает расщепление между подзонами [261]. Другими сценариями появления резонанса является эффект Кондо, который способен сосуществовать со сверхпроводящим спариванием при ненулевых магнитных полях [262], а также слабая антилокализация [263]. В последнее время в рамках модели случайных матриц было показано, что квантованные пики кондактанса при нулевом напряжении (и плато в параметрической зависимости) являются общим не имеющим топологической природы свойством многозонных проволок, для которых характерна только электрон-дырочная симметрия (гамильтониан D класса симметрии) [264].

Стоит отметить, что последующие технологические достижения в эпитаксиальном росте гибридных СП позволили реализовать более качественное наведенное спаривание, исключить факторы беспорядка и неровности интерфейсов [265–267] и выйти на режим баллистического транспорта [268, 269]. Это, в свою очередь, сделало возможным наблюдение устойчивого 2G₀-квантования кондактанса при нулевом напряжении в топологически нетривиальной области параметров [270, 271].

Однако, даже достигнутый прогресс не избавляет полностью от неоднозначности интерпретации последних полученных результатов [272]. В частности, остаются другие сценарии, при которых локальные измерения проводимости дают $2G_0$ -резонанс при нулевом напряжении. В СП могут образовываться низкоэнергетические андреевские связанные состояния (АСС) за счет гладкого электростатического потенциала на конце проволоки [274]; квазиодномерности [275]; в ситуации, когда волновые функции майорановских возбуждений значительного перекрываются [276]; или в случае сильно неоднородного потециала по всей длине многозонной гибридной структуры [277, 278].

Во многих экспериментах, посвященных детектированию MCC, между металлическим электродом и СП имеется область полупроводника, в которой наведенное сверхпроводящее спаривание либо существенно подавлено, либо отсутствует вовсе, а потенциальный профиль здесь может значительно отличаться от имеющегося в проволоке за счет действия электродов затвора. На рис. 4.1а отмеченный участок находится между *N*- и *S*-областями прямоугольной формы. Таким образом, реализуется квантовая точка (KT).

В ряде исследований было обнаружено, что пара ACC, которые возникают в подобной KT, могут сливаться с ростом химического потенциала или магнитного поля и образовывать нулевую моду. На рисунках 4.2а возникновение таких состояний в магнитных полях ниже критического поля, B_c , показано красными кривыми. Как видно, подобные ACC сохраняются в некотором диапазоне параметров в тривиальной фазе. При последующем топологическом фазовом переходе они переходят в MCC (см. эволюцию плотности вероятности майорановских волновых функций на рис. 4.2b) [273,279,280].

Таким образом, квантованный резонанс кондактанса может возникать как в тривиальной, так и в нетривиальной фазах. При этом в обоих случаях его одинаковые свойства, такие как: пиннинг при нулевом напряжении и осцилляции при изменении магнитного поля, - дополнительно затрудняют детектирование MCC средствами локальной туннельной спектроскопии, поскольку в условиях эксперимента определение



Рис. 4.2: Андреевские и майорановские связанные состояния в системе квантовая точка/сверхпроводящая проволока. (а) Спектры для потенциальных профилей V_1 (сверху) и V_2 (снизу). (b) Пространственное распределение плотности вероятности майорановских волновых функций для возбуждения с наименьшей энергией (красная кривая на рис. (a)) при различных значениях магнитного поля, показанных стрелками на рисунке (a) [273].

точных значений химического потенциала и величины наведенного сверхпроводящего спаривания представляется затруднительным [273, 276, 279–283].

Пик кондактанса при нулевом напряжении является необходимым, но недостаточным условием для однозначного детектирования МСС в СП. Следовательно, насущной задачей является поиск альтернативных путей обнаружения этих возбуждений. В последние годы был выдвинут ряд предположений относительно того, как можно наблюдать нелокальность этих состояний. Среди них корреляции кондактанса на противоположных концах проволоки в двухконтактной схеме [273]. Однако, в недавно поставленном эксперименте не было установлено согласованного поведения этих величин [359]. Кроме того, полезным является анализ квантовой запутанности и диссонанса состояния двух КТ, взаимодействующих с разными MM [285].

Несмотря на отмеченные недостатки локальных транспортных измерений в си-



Рис. 4.3: Изучение нелокальности майорановского связанного состояния средствами локальной туннельной спектроскопии структуры квантовая точка/сверхпроводящая проволока. (a) Схема взаимодействия точки с каждой из майорановских мод, γ_L и γ_R . (b) Зависимость кондактанса от напряжений исток-сток, V_{sd} , и затвора, V_{dot} , (карта кондактанса) в ситуации, когда майорановские фермионы не взаимодействуют ($\delta \approx 0$). Зелеными кривыми изображены результаты модельных расчетов. (c) Карта проводимости в случае ненулевой гибридизации волновых функций майорановских фермионов ($\delta \neq 0$). (d) Численные расчеты, соответствующие случаю (c) [284].

стеме КТ/СП, пространственная нелокальность МСС может изучаться и в таком случае [284,286,287]. Для этого используется тот факт, что КТ взаимодействует с каждой MM в отдельности, как это показано на рисунке 4.3а. В результате, если имеет место истинное МСС с хорошо удаленными друг от друга нулевыми модами, то его уровень энергии не сдвигается при совмещении со спин-зависящими уровнями энергии KT (см. зеленую прямую $V_{sd} = 0$, совпадающую с экспериментальными данными, на рис. 4.3b). Данное свойство является непосредственным проявлением топологической защищенности МСС. Если же существует перекрытие волновых функций майорановских фермионов, то гибридизация состояния электрона или дырки в КТ и МСС приводит к значительным расщеплениям (антикроссингам) энергий последнего в точках пересечения с энергиям КТ (см. антикроссинг при $V_{dot} \approx 1.75 V$ на рис. 4.3c, d). Величина этого расщепления зависит от спиновой поляризации внешней ММ (находящейся дальше от КТ). Кроме того, отмечалось, что уменьшение нелокальности МСС приводит к зависимости пика в плотности состояний КТ на нулевой частоте от спинового индекса [288]. Также нелокальность МСС можно детектировать, если КТ находится в режиме Кондо [289].

В качестве другого инструмента, который может служить дополнительным доказательством возникновения МСС, является анализ флуктуаций тока. Изучение автокорреляций в системе, где две ММ соединены с противоположными контактами, показывает, что отношение дробового шума контакта к току в нем, фактор Фано контакта, в режиме слабой проводимости равно 1 [247, 249, 290, 291]. В этой ситуации основной вклад в ток вносят процессы перекрестного андреевского отражения на МСС или прямого переноса заряда через МСС, что является непосредственным следствием нелокальности этого квазичастичного возбуждения. Кроме того, в режиме слабой проводимости кросс-корреляции токов в противоположных контактах положительны и максимальны при значениях $\xi_0 \gg eV$, где ξ_0 - энергия MCC [290]. В противоположном пределе, $\xi_0 \ll eV$, кросс-корреляции стремятся к нулю, указывая на доминирование процессов резонансного локального андреевского отражения на МСС [291,292]. Аналогичное поведение кросс-корреляций также наблюдается и в тривиальной фазе. Когда только одна из двух ММ связана с контактом (одноконтактная геометрия), его Фано фактор в режиме слабой проводимости равен 2, поскольку в данном случае снова превалируют процессы локального андреевского отражения на МСС [249].

В ряде работ особенности токового шума изучались в системе, где оба контакта связывались с КТ, которая, в свою очередь, взаимодействовала за счет туннелирования с одной из двух ММ [276, 293–297]. В такой ситуации было продемонстрировано универсальное поведение флуктуаций тока в контакте как при малых напряжениях, так и в существенно неравновесном режиме [293, 296, 297]. В противоположность кросс-корреляциям токов в контактах, связанных с разными ММ, в данном случае эта характеристика оказывается отрицательной и стремится к нулю в пределе больших напряжений [276, 294, 295]. Такое поведение таже позволяет отличить MCC от других сценариев возникновения пика кондактанса при нулевом напряжении (Кондо эффект, ACC).

Обсуждавшиеся выше результаты относятся к ситуации, когда СП заземляется напрямую. Однако, ряд эффектов, перспективных с точки зрения детектирования МСС и приложений, имеют место и при учете зарядовой энергии, E_c, в процессах туннелирования между проволокой и контактами или, другими словами, в режиме кулоновской блокады. Такая зависимость может возникать, когда изучаемая гибридная проволока имеет достаточно небольшие размеры. Тогда, если энергия ACC, E_0 , больше Е_c, то пики кондактанса при нулевом напряжении, связанные с вырождением состояний с 2N- и 2N + 2 электронами, отстоят друг от друга на величину поля затвора, пропорциональную 2e, т.е. транспорт осуществляется за счет куперовских пар [298–300]. С ростом магнитного поля квазичастичная энергия опускается за счет эффекта Зеемана, как следствие, при $E_0 < E_c$ состояние с нечетным числом частиц может стать основным при изменении напряжения на затворе, и пики кондактанса расщепляются. Если реализуется МСС ($E_0 = 0$), то расстояние между максимумами кондактанса становится пропорционально 1е. Поскольку в этом случае добавление заряда 2e в проволоку, находящуюся в нетривиальной фазе, становится более энергетически невыгодным, чем добавление заряда е, то процессы локального андреевского отражения на МСС подавляются. В результате основной вклад в ток начинают давать процессы одноэлектронного туннелирования и, как следствие, в режиме сильной кулоновской блокады максимальное значение кондактанса равно G_0 вместо $2G_0$ [301–303]. При этом двукратное уменьшение пика проводимости наблюдается и при ненулевых температурах [304]. Вследствие того, что в данной ситуации когерентный транспорт между противоположными контактами осуществляется через две разнесенные невзаимодействующие MM (эквивалентно прохождению через одиночную KT), то подобные процессы можно интерпретировать как квантовую телепортацию [302]. Если же волновые функции майорановских фермионов перекрываются, то время транспорта между ними становится отличным от нуля и обратно пропорционально величине этой гибридизации [305].

В эксперименте [298] СП в режиме кулоновской блокады была использована для демонстрации топологической защищенности МСС [232, 250]. С этой целью измерялись усредненные значения расстояний между пиками кондактанса, возникающими вследствие вырождения состояний с четным и нечетным числом частиц. Было показано, что эти величины осциллируют при изменении зеемановского поля. Причем колебания испытывают экспоненциальное затухание с ростом длины проволоки. Стоит заметить, что в работе [298] другой эффект возрастания амплитуды колебаний с увеличением магнитного поля, характерный для МСС, обнаружен не был. Это может объясняться комбинированным влиянием температурного фактора, многозонности и присутствия АСС, локализованных в КТ-областях между контактами и гибридной структурой [306].

4.2 Транспортные свойства интерференционного устройства, содержащего одномерный топологический сверхпроводник

4.2.1 Обнаружение майорановских состояний в интерференционных структурах

Начиная с классической работы Ааронова и Бома [217], влияние электромагнитного потенциала на движение квантовой частицы применялось в большом числе исследований для анализа особенностей когерентного транспорта в мезоскопических структурах (см., например, [47, 307, 308] и рис. 4.4). Этот эффект также был рассмотрен в системах с МСС. Можно выделить несколько вариантов интерферометров Ааронова-Бома (АБ), включающих топологический сверхпроводник.

В стандартной геометрии СП находится в одном из рукавов кольца АБ. Тогда, топологический фазовый переход в такой структуре можно определить по удвоению периода осцилляций АБ кондактанса, которое не зависит от степени беспорядка и объясняется возможностью транспорта отдельных фермиевских квазичастиц, а не куперовских пар [309, 310] (по той же причине реализуется 4π -периодический эффект Джозефсона в контакте двух топологических сверхпроводников [232, 311, 312]). При рассмотрении незатухающего тока в таком кольце нетривиальная фаза характеризуется появлением h/e-гармоники, которая остается конечной в нулевом магнитном потоке со знаком, определяемым фермионной четностью СП [313]. При этом фиксация четности осуществляется переводом проволоки в режим кулоновской блокады. Такая же система рассматривалась с целью обнаружения отличий интерференционных картин в случае МСС и АСС для структур с нулевой [314] и ненулевой зарядовой энергией [315, 316].



Рис. 4.4: Осцилляции Ааронова-Бома кондактанса кольца, изготовленного из проволок InSb (показаны оранжевым цветом на вставке слева) [268].

Одной из нестандартных геометрий является схема MM/KT/MM, где топологический сверхпроводник имеет форму кольца, а между двумя MM, локализованными на противоположных концах проволоки, располагается KT. Данная система была предложена в качестве топологического кубита, в котором операция неабелевого поворота в пространстве собственных векторов вырожденного основного состояния может быть осуществлена посредством одноэлектронного туннелирования в KT в режиме кулоновской блокады. Магнитный поток сквозь такое кольцо позволяет перевести его в желаемую точку вырождения энергий [317,318]. Описанная конфигурация MM/KT/MM использовалась для анализа отличий топологической h/e-периодичности кондактанса от нетопологической, наблюдаемой в случае нормального, а не сверхпроводящего кольца [319]. В работе [315] КТ между ММ была заменена на протяженный 1D электрод, соединенным с контактом. Было показано, что в топологически нетривиальной фазе наблюдаются осцилляции проводимости с периодом 4π (если квант потока определен как $\phi_0 = h/2e$) благодаря процессам нелокального туннелирования через МСС, тогда как в тривиальной фазе осцилляции не наблюдаются.

Результатом деструктивной интерференции при когерентном транспорте в кольце АБ является резонанс Фано [35]. Было предложено несколько способов детектирования МСС на основе этого эффекта. В работе [320] изучалась модификация резонанса Фано в проводимости кольца, состоящего из двух КТ, параллельно связанных с контактами. При этом одна из точек взаимодействует с цепочкой Китаева. Шанг и др. рассмотрели такую цепочку между КТ [321]. В работах [322, 323] СП служит одним из контактов. Кроме того, Фано резонанс и его свойства рассматривались в режиме локального транспорта [324]. Дополнительно анализировались вклады процессов локального и перекрестного андреевского отражения в эффект Фано для различных геометрий кольца АБ с МСС [325].

В большинстве случаев при теоретическом изучении транспортных характеристик кольца АБ, включающем два рукава, предполагается, что в одном из рукавов контакты связаны друг с другом напрямую посредством туннельного слагаемого в гамильтониане. Взаимодействие СП, находящейся в другом рукаве, также описывается процессами прямого перескока в левый и правый контакты. Таким образом, подводящие проволоки в нормальной фазе (далее нормальные проволоки или НП), которые связывают СП с контактами или контакты между собой, не учитываются. С другой стороны, в последнее время была продемонстрирована возможность создания квантовых устройств, в том числе и кольца АБ, на основе полупроводниковых проволок, где сами эти объекты как в нормальной, так и сверхпроводящей фазе, выступают в роли рукавов (см. вставку слева на рисунке 4.4) [268].

Принимая во внимания эти обстоятельства, в данном параграфе мы рассмотрим кольцо АБ, изображенное на рисунке 4.5 и состоящее из четырех НП: две из них образуют верхний рукав, две другие - нижний [19, 21]. СП отделяет левые верхнюю и



Рис. 4.5: Кольцо Ааронова-Бома, образованное СП, концы которой параллельно связаны с металлическими контактами при помощи подводящих проволок в нормальной фазе.

нижнюю НП от правых верхней и нижней НП, и, в то же время, связывает верхний и нижний рукава, играя роль мостика. Кольцо находится во внешнем магнитном поле, *B*, приложенном параллельно СП (кроме того имеется магнитный поток сквозь плоскость кольца, индуцирующий фазу АБ при транспорте из контактов в устройство). Магнитное поле индуцирует топологический фазовый переход в мостике и позволяет получить нетопологические низкоэнергетические возбуждения в НП. В результате, интерференционное взаимодействие носителей, распространяющихся в транспортных каналах НП и мостика, приводит к эффекту Фано. Используя метод неравновесных функций Грина, изучено влияние магнитного поля, интенсивности сверхпроводящего спаривания и др. факторов на отмеченные резонансы Фано.

Стоит отметить, что аналогичная геометрия также исследовалась в работе [321]. Однако, авторы не использовали микроскопическое описание СП, а вместо НП рассматривали КТ. В [326] Раинис и др. в рамках метода сильной связи изучали кольцо АБ с мостиком, содержащим дробные фермионы, не анализируя при этом взаимодействие этих состояний с низкоэнергетическими модами НП.

4.2.2 Описание модели кольца и теория транспорта в интерференционном устройстве

Гамильтониан кольца, взаимодействующего с контактами

Особенности квантового транспорта, которые будут обсуждаться ниже, связаны с присутствием СП. Ее гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}_{W} = \sum_{j=1}^{N} \left[\sum_{\sigma} \xi a_{j\sigma}^{+} a_{j\sigma} + \left(\Delta a_{j\uparrow}^{+} a_{j\downarrow}^{+} + iha_{j\uparrow}^{+} a_{j\downarrow} + h.c. \right) \right] +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma;j=1}^{N-1} \left[-ta_{j\sigma}^{+} a_{j+1,\sigma} + i\alpha\sigma a_{j\overline{\sigma}}^{+} a_{j+1,\sigma} + h.c. \right] + \sum_{j} \left(U\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow} + V\hat{n}_{j}\hat{n}_{j\downarrow+1} \right),$$

$$(4.3)$$

где $\xi = \epsilon_d - \mu$ - одноузельная энергия, которая управляется энергией электрического поля затвора, ϵ_d ; μ - химический потенциал; t - параметр перескока между ближайшими узлами; α - интенсивность спин-орбитального взаимодействия Рашбы; Δ параметр сверхпроводящего спаривания s-типа; h - зеемановская энергия, связанная с магнитным полем в плоскости устройства, **B**; U, V - интенсивности одноузельного и межузельного взаимодействия, соответственно. Тогда, при U, V = 0 топологически нетривиальная фаза реализуется, если выполняется неравенство [241, 242]

$$(\xi - t)^{2} + \Delta^{2} < h^{2} < (\xi + t)^{2} + \Delta^{2}.$$
(4.4)

Заметим, что хотя α формально не входит в (4.4), наличие спин-орбитальной связи необходимо для возникновения МСС, как отмечалось во введении. Причем, эффективное поле Рашбы, **B**_{SO}, должно быть ориентировано перпендикулярно направлению зеемановского поля **B**.

Проволоки в нормальной фазе (НП), которые являются рукавами кольца (см. рис. 4.5), предполагаются одинаковыми. Их гамильтонианы, \hat{H}_{1-4} , получаются из (4.3) при $\Delta = \alpha = 0$. Связь между СП и НП описывается туннельным гамильтонианом,

$$\hat{H}_{T} = -t_{0} \sum_{\sigma} \left[\left(b_{Ln\sigma}^{+} + b_{Rn\sigma}^{+} \right) a_{1\sigma} + \left(d_{L1\sigma}^{+} + d_{R1\sigma}^{+} \right) a_{N\sigma} \right] + h.c.,$$
(4.5)

где t_0 - параметр перескока между крайними узлами СП и НП; $b^+_{L(R)n\sigma}$ - оператор рождения электрона со спином σ на последнем узле левой (правой) верхней НП; $d^+_{L(R)1\sigma}$ - оператор рождения электрона со спином σ на первом узле левой (правой) нижней НП. В свою очередь, связь устройства (СП + НП) с контактами также описывается гамильтонианом, который одновременно является оператором взаимодействия при применении диаграммной техники для неравновесных функций Грина,

$$\hat{V} = -\sum_{k\sigma} \left[c_{Lk\sigma}^{+} \left(t_1 e^{-i\frac{\Phi_L}{2}} b_{L1\sigma} + t_2 e^{i\frac{\Phi_L}{2}} d_{Ln\sigma} \right) + c_{Rk\sigma}^{+} \left(t_2 e^{i\frac{\Phi_R}{2}} b_{R1\sigma} + t_1 e^{-i\frac{\Phi_R}{2}} d_{Rn\sigma} \right) \right] + h.c.,$$
(4.6)

где $c_{L(R)k\sigma}^+$ - оператор рождения электрона с волновым вектором k и спином σ в левом (правом) контакте; $t_{1,2}$ - параметры перескока между контактами и устройством; $\Phi_{L(R)} = \frac{\phi_{L(R)}}{\phi_0}$; $\phi_{L(R)}$ - магнитный поток сквозь левое (правое) полукольцо; $\phi_0 = \hbar/e$ - квант потока (далее $\hbar = 1$). Гамильтониан *i*-го контакта (i = L, R) имеет форму, $\hat{H}_i = \sum_k (\epsilon_k - \mu_i) c_{ik\sigma}^+ c_{ik\sigma}$, где $\mu_{L,R} = \mu \pm eV/2$ - электрохимический потенциал контактов, учитывающий приложенное напряжение смещения.

Ток в терминах неравновесных функций Грина в представлении Намбу

Для расчета стационарного тока при U, V = 0 диагонализуем гамильтониан кольца, $\hat{H}_D = \hat{H}_W + \sum_{i=1}^4 \hat{H}_i + \hat{H}_T$, используя операторы Намбу в узельном представлении, $\hat{f}_l = (f_{l\uparrow} f_{l\downarrow}^+ f_{l\downarrow} f_{l\uparrow}^+)^T$, где $f_{l\sigma}$ - оператор уничтожения электрона со спином σ на *l*-ом узле НП или СП [19]. Тогда, матричная неравновесная функция Грина устройства определяется как

$$\hat{G}^{ab}(\tau,\tau') = -i\left\langle T_C\hat{\Psi}(\tau_a)\otimes\hat{\Psi}^+(\tau'_b)\right\rangle,\tag{4.7}$$

где T_C - оператор упорядочения на контуре Келдыша, включающем нижнюю (индекс +) и верхнюю (индекс –) ветви [113] (см. рис. 2.1); $a, b = +, -; \hat{\Psi}$ содержит операторы Намбу СП и всех НП,

$$\hat{\Psi} = \left(\hat{b}_{L1}...\hat{b}_{Ln}\hat{d}_{L1}...\hat{d}_{Ln}\hat{a}_{1}...\hat{a}_{N}\hat{b}_{R1}...\hat{b}_{Rn}\hat{d}_{R1}...\hat{d}_{Rn}\right)^{T}.$$
(4.8)

Электронный ток в левом контакте, $I = e \left\langle \dot{N}_L \right\rangle (N_L = \sum_{k\sigma} c^+_{Lk\sigma} c_{Lk\sigma}$ - оператор числа частиц в левом контакте), в терминах введенных функций Грина представляется следующим образом:

$$I = 2e \sum_{k} Tr \left[\hat{\sigma} Re \left\{ \hat{t}_{L1}^{+}(t) \, \hat{G}_{k,L1}^{+-}(t,t) + \hat{t}_{Ln}^{+}(t) \, \hat{G}_{k,Ln}^{+-}(t,t) \right\} \right], \tag{4.9}$$

где $\hat{\sigma} = diag(1, -1, 1, -1)$. В результате унитарного преобразования [112, 327] зависимость от напряжения исток-сток переносится в оператор \hat{V} , вследствие чего матрицы $\hat{t}_{L1(n)}(t)$ становятся функциями времени,

$$\hat{t}_{L1} = \frac{t_1}{2} \hat{\sigma} \hat{T} \hat{\Phi}_L, \ \hat{t}_{Ln} = \frac{t_2}{2} \hat{\sigma} \hat{T} \hat{\Phi}_L^+,$$

$$\hat{T} = diag \left(e^{-i\frac{eV}{2}t}, e^{i\frac{eV}{2}t}, e^{-i\frac{eV}{2}t}, e^{i\frac{eV}{2}t} \right),$$

$$\hat{\Phi}_L = diag \left(e^{-i\frac{\Phi_L}{2}}, e^{i\frac{\Phi_L}{2}}, e^{-i\frac{\Phi_L}{2}}, e^{i\frac{\Phi_L}{2}} \right).$$
(4.10)

В формуле (4.9) смешанные функции Грина имеют вид $\hat{G}_{k,L1}^{+-} = i \left\langle \hat{b}_{L1}^{+} \otimes \hat{c}_{Lk} \right\rangle$, $\hat{G}_{k,Ln}^{+-} = i \left\langle \hat{d}_{Ln}^{+} \otimes \hat{c}_{Lk} \right\rangle$. Поскольку \hat{H}_D в пространстве операторов Намбу имеет вид гамильтониана свободных частиц, то при раскрытии средних в $\hat{G}_{k,L1}^{+-}$ и $\hat{G}_{k,Ln}^{+-}$ используются те же принципы, что и для средних от T_C -упорядоченного произведения операторов вторичного квантования [115, 151]. В результате выражение (4.9) при $t \to 0$ переходит в

$$I = 2e \int_{C} d\tau_{1} Tr \left[\hat{\sigma} Re \left\{ \hat{\Sigma}_{L1,L1}^{+a} \left(-\tau_{1} \right) \hat{G}_{L1,L1}^{a-} \left(\tau_{1} \right) + \hat{\Sigma}_{Ln,Ln}^{+a} \left(-\tau_{1} \right) \hat{G}_{Ln,Ln}^{a-} \left(\tau_{1} \right) + \left(4.11 \right) \right. \\ \left. + \hat{\Sigma}_{L1,Ln}^{+a} \left(-\tau_{1} \right) \hat{G}_{Ln,L1}^{a-} \left(\tau_{1} \right) + \hat{\Sigma}_{Ln,L1}^{+a} \left(-\tau_{1} \right) \hat{G}_{L1,Ln}^{a-} \left(\tau_{1} \right) \right\} \right],$$

где $\hat{\Sigma}_{Li,Lj}^{+a}(-\tau_1) = \hat{t}_{Li}^+(0) \, \hat{g}_{Lk}^{+a}(-\tau_1) \, \hat{t}_{Lj}(\tau_1)$ - собственно-энергетические функции, описывающие влияние левого контакта $(i, j = 1, n); \, \hat{g}_{Lk}^{+a}(-\tau_1)$ - затравочная функция Грина левого контакта.

Интегрируя по времени τ_1 и применяя преобразование Фурье, находим

$$I = e \sum_{i,j=1,n} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\pi} Tr \left[\hat{\sigma} Re \left\{ \hat{\Sigma}_{Li,Lj}^{r} \left(\omega \right) \hat{G}_{Lj,Li}^{+-} \left(\omega \right) + \hat{\Sigma}_{Li,Lj}^{+-} \left(\omega \right) \hat{G}_{Lj,Li}^{a} \left(\omega \right) \right\} \right].$$
(4.12)

Поскольку в системе отсутствуют многочастичные взаимодействия, то функции Грина в подынтегральном выражении (4.12) определяются с учетом всех процессов туннелирования между устройством и контактами [115]. В частности, $\hat{G}^a_{Lj,Li}$ - блок матрицы опережающей функции Грина устройства, \hat{G}^a , определяется из уравнения Дайсона,

$$\hat{G}^{a} = \left[\left(\omega - \hat{h}_{D} - \hat{\Sigma}^{r} \left(\omega \right) \right)^{-1} \right]^{+}, \qquad (4.13)$$

где $\hat{\Sigma}^r(\omega)$ - матрица запаздывающей собственно-энергетической функции, отражающей влияние обоих контактов на кольцо. В дальнейшем воспользуемся приближением широкозонных контактов, когда можно пренебречь реальными частями собственноэнергетических функций, а мнимые части рассматривать постоянными. Тогда, имеем следующие ненулевые блоки $\hat{\Sigma}^r$:

$$\hat{\Sigma}_{L1,L1}^{r} = \hat{\Sigma}_{Rn,Rn}^{r} = -\frac{i}{2}\hat{\Gamma}_{11}, \\ \hat{\Sigma}_{R1,R1}^{r} = \hat{\Sigma}_{Ln,Ln}^{r} = -\frac{i}{2}\hat{\Gamma}_{22}, \\
\hat{\Sigma}_{L1,Ln}^{r} = -\frac{i}{2}\hat{\Gamma}_{12}\left(\hat{\Phi}_{L}^{2}\right)^{+}, \\
\hat{\Sigma}_{Ln,L1}^{r} = -\frac{i}{2}\hat{\Gamma}_{12}\hat{\Phi}_{L}^{2}, \\
\hat{\Sigma}_{R1,Rn}^{r} = -\frac{i}{2}\hat{\Gamma}_{12}\left(\hat{\Phi}_{R}^{2}\right)^{+}, \\
\hat{\Sigma}_{Rn,R1}^{r} = -\frac{i}{2}\hat{\Gamma}_{12}\hat{\Phi}_{R}^{2},$$
(4.14)

где $\hat{\Gamma}_{ii} = \Gamma_{ii}\hat{I}_4$, $\Gamma_{ii} = 2\pi t_i^2 \rho$ - функции уширения уровней устройства за счет взаимодействия с контактом (i = 1, 2); ρ - плотность состояний контакта; $\Gamma_{12} = \sqrt{\Gamma_{11}\Gamma_{22}}$; \hat{I}_4 - единичная матрица 4 × 4; $\hat{\Phi}_R = diag\left(e^{i\frac{\Phi_R}{2}}, e^{-i\frac{\Phi_R}{2}}, e^{-i\frac{\Phi_R}{2}}\right)$. При непосредственном рассмотрении асимметричного (симметричного) кольца будем предполагать, что $\Gamma_{22} = \Gamma_{11}/2 = 0.01$ ($\Gamma_{22} = \Gamma_{11} = 0.01$). Значения $\Gamma_{11,22}$ приведены в единицах t.

Блоки $\hat{G}^{+-}_{Li,Lj}$ в (4.12) получаются из решения уравнения Келдыша, $\hat{G}^{+-} = \hat{G}^r \hat{\Sigma}^{+-} \hat{G}^a$. При этом ненулевые блоки $\hat{\Sigma}^{+-}$ равны

$$\hat{\Sigma}_{\alpha i,\alpha j}^{+-} = -2\hat{\Sigma}_{\alpha i,\alpha j}^{r}\hat{F}_{\alpha}, \quad \alpha = L, R, \quad i, j = 1, n,$$

$$\hat{F}_{L(R)} = diag \left(n \left(\omega \pm eV/2 \right), \ n \left(\omega \mp eV/2 \right), \ n \left(\omega \pm eV/2 \right), \ n \left(\omega \mp eV/2 \right) \right),$$

$$(4.15)$$

где $n(\omega \pm eV/2)$ - функции Ферми-Дирака.

В дальнейшем предполагается, что СП и НП являются относительно короткими, т.е. N = 30, n = 20, что значительно уменьшает объем вычислений. Однако, это приводит к тому, что для рассмотрения топологически нетривиальной фазы в рамках параметров, соответствующих экспериментам ($\Delta = 250 \ \mu eV$, $\alpha_R = 0.2 \ eV \cdot Å$, $g = 50, B \sim 0.1 - 1 T$) [243], необходимо использовать неестественно большое значение постоянной решетки, a = 50 нм. Учитывая эффективную массу носителей в полупроводниковых проволоках, $m^* = 0.015m_0$ [243], имеем параметр перескока, $t = \frac{\hbar^2}{m^*a^2}$, который рассматривается в дальнейшем в качестве единицы измерения. Тогда, основные параметры СП, использованные при построении большей части графиков ниже, равны $\alpha = 0.195, \Delta = 0.243$. Другие величины имеют следующие значения: $k_B T \approx 0$, $\varepsilon_d = 1, \mu = 0, t_0 = 0.1$.



4.2.3 Резонансы Брейта-Вигнера и Фано

Рис. 4.6: Зависимость энергий одноэлектронных возбуждений нормальной и сверхпроводящей проволок (a) и проводимость кольца (b) от энергии магнитного поля, приложенного в плоскости устройства. Параметры: U = V = 0, $\Phi = 0$.

Как следует из обзора в разделах 4.1 и 4.2, главными чертами МСС, обнаружение которых ставят своей целью современные эксперименты, являются его нулевая энергия и нелокальность. Таким образом, при рассмотрении транспортных свойств интерференционного устройства, изображенного на рис. 4.5, нас будут интересовать только те из них, которые определяются присутствием низкоэнергетических возбуждений и в НП, и в СП; а также характером пространственного распределения возбуждений с нулевой или близкой к нулю энергией в СП. Следовательно, непосредственные численные расчеты осуществляются в режиме линейного отклика, когда $eV \rightarrow 0$.

Начнем со случая, когда межчастичные взаимодействия в СП отсутствуют, U = V = 0 [19]. При этом обратимся к зависимости кондактанса от энергии магнитного поля в плоскости устройства, h. Транспорт в системе определяется одночастичными возбуждениями в окрестности уровня Ферми. Соответствующие энергии отдельной НП, E_{l1} (синяя пунктирная кривая), и СП, E_{W1} и E_{W2} (красная сплошная и зеленая штриховая кривые), как функции h изображены на рисунке 4.6а. Видно, что энергия E_{l1} осциллирует, периодически обращаясь в нуль при $h \leq 2$. В свою очередь, у СП в топологически нетривиальной фазе, определяемой неравенством (4.4), энергия E_{W1} отщепляется от E_{W2} и также периодически принимает нулевые значения. Таким образом, нули энергии МСС E_{W1} сосуществуют с нулями E_{l1} , имеющими топологически тривиальную природу.

Зависимость кондактанса от энергии магнитного поля в случае симметричного кольца представлена на рисунке 4.6b. В слабых полях, $h \leq 0.25$, пики $G(h = E_{l1})$ значительно подавлены, т.к. $E_{W1} \gg 0$ (см. рис.4.6a). Резонансы в этой области, при которых $G(h = E_{l1}) \rightarrow 1$, могут возникать, если, например, $\Phi_i \neq 0$. Далее, мостику в фазе топологической сверхпроводимости соответствует набор резонансов двух типов (область $0.25 \leq h \leq 2$). К первому относятся симметричные резонансы брейтвигнеровского типа (БВР), ко второму - асимметричные резонансы или Фано резонансы (ФР). В сильных магнитных полях, $h \gtrsim 2$, проводимость близка к нулю, т.к. $E_{l1}, E_{W1} \gg 0$.

Чтобы лучше понять причины появления отмеченных резонансных особенностей при $0.25 \leq h \leq 2$, обратимся к наиболее простой ситуации, когда каждая НП имеет всего один узел, а СП - два. В результате имеется структура из шести КТ, верхний и нижний рукава которой параллельно соединены с контактами. Поскольку магнитное поле приближенно приводит к спин-поляризованному транспорту в кольце, в системе КТ будем анализировать бесспиновый случай. Энергетический спектр структуры из шести КТ при $\alpha = \Delta = 0$ имеет вид:

$$E_{1,2} = \xi_{\downarrow} \equiv \varepsilon, \ E_{3,4} = \varepsilon + \frac{1}{4}\sqrt{t^2 + 8t_0^2} \pm \frac{t}{4},$$

$$E_{5,6} = \varepsilon - \frac{1}{4}\sqrt{t^2 + 8t_0^2} \pm \frac{t}{4}.$$
(4.16)

Из затравочного спектра (4.16) следует, что в такой закрытой системе имеется пара вырожденных $(E_{1,2})$, а также две пары связанных и антисвязанных состояний $(E_{3,4}$ и $E_{5,6})$. Присутствие таких решений создает условия для реализации связанных состояний в континууме (ССК) [61], если система является открытой, т.е. $\Gamma \neq 0$ [201, 202].



Рис. 4.7: Зависимости плотности состояний (a) и проводимости (b) структуры из шести квантовых точек от энергии магнитного поля при t = 0.1. Остальные параметры совпадают с использованными для построения рис. 4.6.

Существование ССК в структуре из шести КТ проиллюстрировано на рисунке 4.7а, где показана зависимость плотности состояний,

$$TDOS(\omega = 0; h) = -\frac{1}{\pi} Tr\left[Im\left\{\hat{G}^{r}(\omega = 0; h)\right\}\right],$$
(4.17)

от энергии магнитного поля, h. Ситуация с $\alpha = \Delta = 0$ изображена красной кривой. В случае вырожденных состояний широкий максимум *TDOS* при h = 1, который относится к состоянию с энергией E_1 , совпадает с узким пиком за счет ССК с энергией E_2 (ширина этого пика пропорциональна δ^2 , где δ - инфинитезималь, отвечающая за аналитическое продолжение $\hat{G}^r(\omega)$). Кроме того, у двух пар из связанного и антисвязанного состояний с энергиями $E_{3,4}$ и $E_{5,6}$ широкий максимум и узкий пик ССК разнесены. На рисунке 4.7а, в соответствии с (4.16), они располагаются слева и справа от h = 1. Все три широких максимума в плотности состояний проявляются в виде БВР в проводимости (см. красную сплошную кривую на рис.4.7b). В свою очередь, наличие ССК никак не отражается на транспортных свойствах.

При α , $\Delta \neq 0$ возникает ненулевое уширение уровней ССК, близких к $E_{4,6}$, поскольку спин-орбитальное взаимодействие приводит к нарушению пространственной симметрии собственных состояний кольца (см. синюю штриховую кривую на рис.4.7а) [328]. Как следствие, в проводимости появляются ФР при тех же значениях h, что и уширенные пики в плотности состояний. Далее, время жизни ССК, связанного с парой вырожденных состояний, можно сделать конечным, вводя фазу АБ [68,329]. Тогда все три пика ССК в плотности состояний приобретают ненулевую ширину, а кондактанс имеет три ФР (см. черные пунктирные кривые на рис.4.7a,b). Из (4.16) следует, что расщепление энергий пары связанного и антисвязанного состояний определяется параметром t. В частности, если t = 1, т.е. $t \gg t_0$ и в результате в окрестности h = 1 в плотности состояний будут два широких максимума и два пика ССК. Дополнительно, один широкий максимум (пик ССК) возникнет на удалении слева (справа) от этой точки.



Рис. 4.8: (а) Резонансы Брейта-Вигнера и Фано в проводимости кольца в случае, когда сверхпроводящая проволока находится в топологически нетривиальной фазе. Положение резонанса Брейта-Вигнера/Фано (ось y слева) совпадает с минимумом энергии E_{W1}/E_{l1} (ось y справа). (b) Влияние фазы Ааронова-Бома на кондактанс. Вкладка: индуцирование резонанса Фано при $\Phi_L = \Phi_R = \Phi \neq 0$. Остальные параметры совпадают с использованными для построения рис. 4.6.

При увеличении числа узлов в системе и переходу к изучаемому кольцу АБ количество максимумов и пиков ССК возрастает. При этом существенно, что время жизни ССК становится конечным, только если наименьшая энергия возбуждения СП близка к нулю, что в рассматриваемом случае означает реализацию топологически нетривиальной фазы (см. рис.4.6а). Типичная структура резонансов проводимости в этом режиме продемонстрирована на рисунке 4.8а. Эта зависимость модифицирована по сравнения с описанной выше картиной транспорта через структуру из шести КТ. В частности, один из ФР на рисунке 4.7b трансформируется в набор БВР в случае кольца AБ. В результате, остаются только ФР близи минимумов $E_{l1}(h)$ (один из них показан на рис.4.8а). Одновременно с этим положения БВР определяется нулями $E_{w1}(h)$. При фиксированных h, Δ , α ширины БВР и ФР зависят E_{l1} и E_{W1} , соответственно: чем выше $E_{l1,W1}$, тем уже резонансы. Как было отмечено выше, ненулевая фаза АБ делает соответствующие ССК доступными для наблюдения в транспортных характеристиках. На рисунке 4.8b показан новый очень узкий ФР, возникающий при $\Phi_L = \Phi_R = \Phi \neq 0$, положение которого совпадает с нулем $E_{l1}(h)$.

Таким образом, наличие двух типов резонансов в кондактансе может быть на качественном уровне объяснено присутствием в устройстве нескольких взаимодействующих каналов для транспорта носителей (по аналогии с двойной квантовой точкой [67, 69, 329]). Если основной вклад создается каналом, относящимся к СП ($\mu = E_{W1}$), то реализуется БВР. Если, наоборот, в транспорте главным образом участвует канал $H\Pi (\mu = E_{l1})$, то имеет место интерференция по сценарию Фано. В двойных квантовых точках аналогичное возникновение широкого БВР и узкого ФР трактовалось как своеобразная реализация эффекта Дикке [69, 330, 331]. Это явление известно из оптики и выражается в возникновении широкого и узкого пиков в спектре люминесценции пары атомов [70–72]. При этом первый из них ассоциируется с короткоживущим коллективным возбуждением (superradiant state), а второй - с долгоживущим (subradiant state). Реализация симметричных и асимметричных резонансов при транспорте отмечается и в других низкоразмерных структурах [332]. В нашем случае при определенном выборе параметров схожее поведение кондактанса можно интерпретировать как топологический эффект Дикке (см. подробнее пункт 4.2.6), поскольку резонансы двух типов возникают, когда СП находится именно в нетривиальной фазе.
4.2.4 Зависимость свойств резонансов Фано от типа низкоэнергетического возбуждения мостика



Рис. 4.9: Зависимость резонанса Фано от величины сверхпроводящего спаривания в проволоке для N = 30 (a) и N = 150 (b). Вставки: пространственное распределение плотности вероятности состояния с энергией E_{W1} при различных Δ и h = 0.375. Остальные параметры совпадают с использованными для построения рис. 4.6.

Из результатов, полученных в параграфе 4.2.3, следует, что независимо от длины сверхпроводящего мостика ФР появляются при любых ненулевых α , Δ и μ , если магнитное поле удовлетворяет условию $\mu^2 + \Delta^2 < h^2 < (2t - \mu)^2 + \Delta^2$. Другими словами, данный резонанс присутствует независимо от пространственного распределения плотности вероятности состояния с энергией E_{W1} , изменяющегося с краевого (майорановского) на объемное (андреевское) при уменьшении ширины щели в спектре возбуждений СП [276]. Однако, как будет показано ниже, свойства ФР значительно зависят от типа этого состояния, которым можно управлять с помощью магнитного поля или варьируя потенциал сверхпроводящего спаривания. Последний случай представлен на рисунке 4.9, где красной пунктирной и синей штриховой кривыми изображены зависимости, отвечающие $\Delta = 0.243$ и $\Delta = 0.097$. Видно, что ширина ФР существенно уменьшается, если реализуется АСС при $\Delta = 0.097$ (ср. верхнюю и центральную вкладки на рис.4.9а).

Состояние с энергией E_{W1} при $\Delta = 0.097$ можно снова сделать майорановским,

рассмотрев более длинную проволоку (см. центральную вкладку на рис.4.9b). В результате, ширина ФР восстанавливается и не меняется, пока перекрытие волновых функций двух майорановских фермионов стремится к нулю (см. красную пунктирную и синюю штриховую кривые на рис.4.9b). Если далее $\Delta \rightarrow 0$, то ФР коллапсирует (его ширина становится бесконечно малой), несмотря на $E_{W1} \approx 0$, т.е. возникает ССК [59, 60]. Эта ситуация наглядно изображена черными сплошными кривыми на рис.4.9a и 4.9b.

Как уже обсуждалось, переход от МСС к АСС также наблюдается при увеличении магнитного поля. Эту эволюцию можно проследить, например, используя майорановскую поляризацию [337, 338]. Однако, здесь для наглядности мы определим более простую и интуитивно понятную величину, характеризующую перекрытие волновых функций MM, как сумму плотности вероятности первого боголюбовского возбуждения на двух центральных узлах СП,

$$\Gamma_{MBS} = \sum_{\sigma; l=N/2}^{N/2+1} \left(|u_{1l\sigma}|^2 + |v_{1l\sigma}|^2 \right), \qquad (4.18)$$

где $u_{1l\sigma}$, $v_{1l\sigma}$ - спин-зависящие коэффициенты преобразования Боголюбова для возбуждения с энергией E_{W1} на узле l.

Поведение этой характеристики как функции энергии магнитного поля изображено красной штрих-пунктирной кривой на рисунке 4.10 в логарифмическом масштабе. В тривиальной фазе ($h < \Delta$) Γ_{MBS} практически не изменяется, а кондактанс содержит пики малой амплитуды (см. синюю сплошную кривую на рис. 4.10). При топологическом фазовом переходе Γ_{MBS} испытывает резкий спад в 10¹⁰ раз, вследствие изменения типа возбуждения с объемного на краевое. В нетривиальной фазе ($h > \Delta$) выделяются две области. При $h \approx 0.1 - 0.3$ перекрытие MM возрастает, но все еще является незначительным. В этом диапазоне зеемановских энергий доминирует режим высокого пропускания, G = 1, с периодически возникающими антирезонансами Фано, где G = 0. Наоборот, при h > 0.3 устанавливается режим слабого пропускания, $G \ll 1$, с периодически возникающими БВР, где G = 1. В этой области при больших магнитных полях гибридизация майорановских волновых функций становится существенной.

Из (4.16) следует, что положение максимумов в плотности состояний и соответ-



Рис. 4.10: Зависимость кондактанса (левая шкала) и перекрытия майорановских мод (правая шкала) от зеемановской энергии при $\Delta = 0.097$ и N = 150. Остальные параметры совпадают с использованными для построения рис. 4.6.

ствующих резонансов проводимости напрямую зависят от параметров перескока. Численные расчеты показывают, что после увеличения размеров системы влияние параметра t_0 на ΦP во многом определяется пространственного распределения состояния с энергией E_{W1} . А именно, с ростом t_0 ΦP остается на месте в случае МСС. Если же состояние существенно делокализованно и трансформируется в АСС, то увеличение t_0 сопровождается сдвигом ΦP .

4.2.5 Влияние кулоновских взаимодействий и беспорядка

Для описания влияния кулоновского отталкивания в СП на полученные резонансные особенности кондактанса кольца АБ воспользуемся обобщенным приближением среднего поля, область применения которого характеризуется неравенством $U, V \ll t$.



Рис. 4.11: Влияние кулоновских взаимодействий на резонансы Брейта-Вигнера и Фано. Параметры совпадают с использованными для построения рис. 4.6.

В рамках данного подхода четырехоператорные слагаемые в гамильтониане СП (4.3) записываются как [333, 334]

$$Un_{l\uparrow}n_{l\downarrow} = U\left[\langle n_{l\uparrow}\rangle n_{l\downarrow} + \langle n_{l\downarrow}\rangle n_{l\uparrow} - \langle a_{l\downarrow}^{+}a_{l\uparrow}\rangle a_{l\uparrow}^{+}a_{l\downarrow} - (4.19) - \langle a_{l\uparrow}^{+}a_{l\downarrow}\rangle a_{l\downarrow}^{+}a_{l\downarrow} - \langle a_{l\uparrow}^{+}a_{l\downarrow}\rangle a_{l\uparrow}a_{l\downarrow} - \langle a_{l\uparrow}a_{l\downarrow}\rangle a_{l\uparrow}^{+}a_{l\downarrow} \right],$$

$$V\sum_{\sigma\sigma'} n_{l\sigma}n_{l+1,\sigma'} = V\sum_{\sigma\sigma'} \left[\langle n_{l\sigma}\rangle n_{l+1,\sigma'} + \langle n_{l+1,\sigma}\rangle n_{l\sigma} - \langle a_{l+1,\sigma}^{+}a_{l\sigma'}\rangle a_{l\sigma'}^{+}a_{l+1,\sigma'} - \langle a_{l\sigma}^{+}a_{l+1,\sigma'}\rangle a_{l\sigma}^{+}a_{l+1,\sigma'}\rangle a_{l\sigma}^{+}a_{l+1,\sigma'}\rangle a_{l\sigma}^{+}a_{l+1,\sigma'}\right].$$

Важно заметить, что при включении даже слабого хаббардовского отталкивания из-за возрастания эффективного зеемановского расщепления и уменьшения интенсивности потенциала сверхпроводящего спаривания происходит смещение границ областей существования топологических фаз проволоки со спин-орбитальной связью изменяются [397]. Эти эффекты, пропорциональные $\langle a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma} \rangle$ и $\langle a_{l\sigma} a_{l\bar{\sigma}} \rangle$, соответственно, должны учитываться при рассмотрении транспорта, поскольку имеют тот же самый порядок малости, что и величины h и Δ .

Нормальные и аномальные средние (4.19) могут быть найдены самосогласованно

с помощью спин-зависящих коэффициентов преобразования Боголюбова, $u_{ml\sigma}$, $v_{mj\sigma}$ [335, 336],

$$\langle a_{l\sigma}^{+}a_{j\sigma'}\rangle = \sum_{m=1}^{2N} \left[f_m u_{ml\sigma} u_{mj\sigma'}^* + (1 - f_m) v_{ml\sigma}^* v_{mj\sigma'} \right],$$

$$\langle a_{l\sigma}a_{j\sigma'}\rangle = \sum_{m=1}^{2N} \left[f_m v_{ml\sigma} u_{mj\sigma'}^* + (1 - f_m) u_{ml\sigma}^* v_{mj\sigma'} \right], \qquad (4.20)$$

где f_m - фермиевская функция распределения квазичастичного возбуждения с энергией E_m . Следствием разложения (4.19) является то, что матрица \hat{H}_W содержит как поправки к имеющимся ненулевым элементам, так и новые элементы. В частности, последние описывают одноузельные спин-флип процессы.

Влияние кулоновских взаимодействий на резонансы проводимости представлено на рисунке 4.11. Видно, что одноузельные корреляции немного смещают максимум Φ P, тогда как его минимум сохраняет свое положение (сравните красную пунктирную и синюю штриховую кривые). Одновременно с этим, БВР сдвигается влево, т.к. соответствующий сдвиг приобретает и нулевая энергия МСС при $U \neq 0$. При $V \neq 0$ БВР движется в противоположном направлении (см. черную сплошную кривую). В свою очередь, Φ P остается на том же месте, а его ширина практически не изменяется. Заметим, что аналогичные эффекты наблюдаются и при включении диагонального беспорядка в СП, $\xi_{\sigma} + \delta \xi_l$, l = 1, ..., N (где $\delta \xi_l$ - случайная добавка к одночастичной энергии на узле l, принимающая значения из интервала [-1/2, 1/2]).

4.2.6 Асимметричное кольцо и топологический эффект Дикке

Дополнительные особенности транспорта, связанные с нелокальностью МСС, имеют место при рассмотрении асимметричного кольца [21]. Напомним, что под асимметрией подразумевается отличие параметров уширения по диагонали, $\Gamma_{11} = 2\Gamma_{22}$, при сохранении симметрии туннельных процессов между НП и мостиком. В этом случае возникает дополнительный узкий ФР в области широкого антирезонанса (ср. сплошную и штриховую кривые на рисунке 4.12), который идентичен резонансу, индуцируемому ненулевой фазой АБ на рис. 4.8b. На рисунке 4.12 этот резонанс реализуется при $h \approx 1.2225$. Тогда, в небольшом интервале зеемановских энергий имеются широ-



Рис. 4.12: Коллапс резонанса Фано, индуцированного асимметрией туннельных процессов в кольце, с ростом нелокальности майорановского связанного состояния. Вставка: коллапс в большем разрешении по *h*. Параметры совпадают с использованными для построения рис. 4.6.

кий и узкий ФР, а также широкий БВР. Последние два указывают на возникновение топологического эффекта Дикке, поскольку мостик находится в нетривиальной фазе.

С ростом длины мостика к узком ΦP смещается широкий антирезонанс, расположенный в области $h \approx 1.222$ при N = 30. При этом индуцированный асимметрией ΦP коллапсирует при увеличении N, что хорошо видно на вставке рис. 4.12. Другими словами, можно говорить о своеобразной блокаде отмеченного эффекта Φ ано и появлении топологического ССК [339,340], поскольку ΦP исчезает, только если реализуется истинное МСС с двумя невзаимодействующими майорановскими модами.

Чтобы объяснить механизм, приводящий к коллапсу ФР, важно напомнить, что последний определяется ССК, возникающим за счет вырождения собственных состояний закрытой системы с нулевой энергией. Следовательно, исчезновение ФР может указывать на увеличение кратности вырождения этого состояния, если перекрытие майорановских волновых функций становится пренебрежимо малым. Для проверки этой гипотезы обратимся к бесспиновой модели кольца с n = 1. В данной ситуации в роли мостика, соединяющего четыре КТ с энергиями ξ_j (j = 1, ..., 4), используем цепочку Китаева с четным числом узлов (см. гамильтониан (4.1)) [232]. Диагонализуя гамильтониан устройства в таком случае при $\xi_j = \xi = \varepsilon - \mu = 0$, получим следующее уравнение на спектр:

$$E^{4}\left(E \cdot P_{1} - 2t_{0}^{2}\delta_{1}^{N/2-1}\right)\left(E \cdot P_{2} + 2t_{0}^{2}\delta_{1}^{N/2-1}\right) \cdot \left(E \cdot P_{3} - 2t_{0}^{2}\delta_{2}^{N/2-1}\right)\left(E \cdot P_{4} + 2t_{0}^{2}\delta_{2}^{N/2-1}\right) = 0,$$
(4.21)

где $\delta_{1,2} = t \mp \Delta$; $P_i - i$ -ый полином N/2-ой степени, причем в силу электрон-дырочной симметрии $P_{2,4} = P_{1,3} (E \to -E)$ Из (4.21) вытекает, что в особых точках модели Китаева, $\Delta = \pm t$, когда волновые функции майорановских фермионов не перекрываются, кратность вырождения состояния с нулевой энергией возрастает при N > 2, что и приводит к подавлению узкого Φ P на рис. 4.12.

Для большей наглядности обратимся к рассмотрению данной системы в представлении Майорана, $a_l = (\gamma_{Al} + i\gamma_{Bl})/2$, где $\gamma_{il} = \gamma_{il}^+$ (i = A, B). На рисунках 4.13а и 4.13b изображены устройства в рамках такого описания в особой точке модели Китаева, $\Delta = t$, с N = 2 и N > 2, соответственно (прямыми линиями обозначается взаимодействие между майорановскими фермионами разного сорта). Видно, что в первом случае верхний и нижний рукава остаются связанными. Собственные энергии цепочек, имеющих только две связи в горизонтальном направлении (изображены штриховыми прямыми), равны $E_1 = 0$, $E_{2,3} = \pm t_0/\sqrt{2}$. В свою очередь, энергии цепочки, включающей перескок между рукавами (изображена сплошными прямыми), имеют вид $E_{4,5} = 0$, $E_{6,7} = \left(\sqrt{t^2 + 2t_0^2} \pm t\right)/2$, $E_{8,9} = -\left(\sqrt{t^2 + 2t_0^2} \pm t\right)/2$. В результате состояние с нулевой энергией вырождено четырехкратно.

Во втором случае, N > 2, устройство распадается на верхнюю и нижнюю идентичные подсистемы, которые не связаны между собой, поскольку при $\xi = 0$ майорановские фермионы, принадлежащие одному узлу, не взаимодействуют. Каждая из подсистем включает две цепочки. При этом энергии второй, со взаимодействием в



Рис. 4.13: Кольцо с n = 1 в представлении операторов Майорана для N = 2 (a) и N > 2 (b) при $\Delta = t$.

вертикальном направлении (аналогично модели Фано-Андерсона), равны $E_{1,2} = 0$, $E_{3,4} = \pm \sqrt{t^2 + t_0^2/2}$. Как следствие, имеется уже шестикратное вырождение состояния с нулевой энергией. Таким образом, именно возникновение Т-образных структур майорановских фермионов приводит к подавлению ФР в асимметричном кольце. Подчеркнем, что поскольку этот эффект связан только с нелокальностью МСС, то он имеет универсальный характер, реализуясь и в наиболее общей ситуации, характерной для эксперимента, когда отличаются все параметры туннелирования между различными подсистемам. Кроме того, из рис. 4.13 становится очевидным, что просто при t = 0, т.е. в случае двух несвязанных рукавов, ФР не подавляется.

4.2.7 Т-образная геометрия

Принципиальное отличие квантового транспорта через МСС и АСС можно наглядно продемонстрировать, рассмотрев один из предельных случаев асимметричного кольца, T-образную геометрию, когда связь между нижними НП и контактами отсутствует. На рисунке 4.14a приведены зависимости кондактанса кольца от зеемановской энергии, когда СП находится в нетривиальной фазе, при нескольких значениях N. При этом экспоненциальное уменьшение перекрытия MM с ростом длины проволоки приведено во вставке рисунка 4.14. Видно, что Γ_{MBS} уменьшается на два порядка, если число узлов в проволоке увеличивается с N = 30 до N = 100. При этом состояние с энергией



Рис. 4.14: Зависимость кондактанса от зеемановской энергии для случая Т-образной геометрии. (а) Влияние пространственного распределения состояния с энергией E_{W1} на резонанс Фано. (b) Проводимость в нелокальном ($\beta = 1$) и локальном ($\beta = 0$) режимах транспорта. Вставка рис.4.14а: перекрытие майорановских мод (4.18) как функция длины мостика при h = 0.777. Остальные параметры совпадают с использованными для построения рис. 4.6.

 E_{W1} из андреевского становится майорановским, и антирезонанс в окрестности h = 0.777 поднимается, т.е. $G \neq 0$ (сравните красную пунктирную и синюю штриховую кривые на рис.4.14а). При дальнейшем удлинении проволоки Γ_{MBS} уменьшается еще на несколько порядков. В результате возникает плато проводимости высотой G_0 (см. фиолетовую штрих-пунктирную и черную сплошную кривые).

Такое поведение вызвано тем, что в Т-образной схеме транспорта взаимодействие нижней левой и правой НП с проводящим каналом (или контактами) напрямую зависит от типа низкоэнергетического состояния в СП. В случае МСС ($N \gtrsim 100$) связь данных НП с контактами отсутствует, и ФР исчезает. Если же возникает АСС (N < 100), то отмеченные НП являются боковыми как в случае модели Фано-Андерсона, где ФР является следствием взаимодействия дискретного уровня с континуумом [36,341].

Дополнительные существенные отличия имеют место, если обратится к особенностям локального транспорта через МСС и АСС. В частности, в случае МСС высота плато кондактанса удваивается при переходе от нелокального, $\beta = 1$ (где β - параметр асимметрии, см. гамильтониан (4.22)), к локальному, $\beta = 0$, режиму. Соответствующие зависимости G(h) показаны сплошной кривой и кривой с круглыми маркерами на рисунке 4.14b. В ситуации с ACC кондактанс локальной конфигурации подавляется (см. штриховую кривую на рис.4.14b).

Обнаруженные в рамках численных расчетов особенности кондактанса Т-образной структуры могут быть описаны аналитически. Для этого следует уточнить, что транспорт через МСС, по существу, подразумевает взаимодействие контактов только с одним майорановским фермионом. В свою очередь, туннелирование через АСС, которому соответствует боголюбовский оператор α^+ , фактически означает связь с обоими фермионами Майорана, γ_A и γ_B , поскольку $\alpha^+ = (\gamma_A + i\gamma_B)/2$.

Рассмотрим последовательно транспортные свойства Т-образной структуры, в которой реализуется либо МСС, либо АСС. Для анализа транспорта в случае МСС воспользуемся эффективным низкоэнергетическим гамильтонианом СП, который описывает взаимодействие пары фермионов Майорана с интенсивностью ε_0 , $\hat{H}_W = i\varepsilon_0\gamma_A\gamma_B/2$. Далее в целях упрощения мы заменим НП одноуровневыми КТ с энергиями ξ_j (j = 1, ..., 4) и обратимся к бесспиновому случаю, тогда

$$\hat{H}_{T} = -t_{0} \left[b_{1}^{+} - b_{1} + \beta \left(b_{2}^{+} - b_{2} \right) \right] \gamma_{A} - t_{0} \left[d_{3}^{+} - d_{3} + d_{4}^{+} - d_{4} \right] \gamma_{B},$$

$$\hat{V} = -\sum_{k} \left(t_{1} c_{Lk}^{+} b_{1} + t_{2} c_{Rk}^{+} b_{2} + h.c. \right),$$
(4.22)

Применение формулы (4.12) к симметричной Т-образной системе ($t_1 = t_2$) приводит к следующему выражению для кондактанса левого контакта в режиме линейного отклика:

$$G_L = G_0 \frac{\Gamma^2}{2} \left[2 \left| F_{11e}^r(0) \right|^2 + \left| G_{12e}^r(0) \right|^2 + \left| G_{12h}^r(0) \right|^2 \right].$$
(4.23)

где $F_{11e}^r(\omega), G_{12e}^r(\omega), G_{12h}^r(\omega)$ - фурье-образы аномальной и нормальной гриновских функций,

$$F_{11e}^{r}(t-t') = -i\Theta(t-t')\left\langle \left\{ b_{1}^{+}(t), b_{1}^{+}(t') \right\} \right\rangle,\$$

$$G_{12e}^{r}(t-t') = -i\Theta(t-t')\left\langle \left\{ b_{1}(t), b_{2}^{+}(t') \right\} \right\rangle,\$$

$$G_{12h}^{r}(t-t') = -i\Theta(t-t')\left\langle \left\{ b_{1}^{+}(t), b_{2}(t') \right\} \right\rangle.$$

Отметим, что член в (4.23), пропорциональный F_{11e}^r , описывает вклад от процессов локального андреевского отражения. Два последующих слагаемых отвечают за процессы прямого переноса заряда. При этом вклады от процессов перекрестного андреевского отражения отсутствуют, поскольку $\mu_{L(R)} = \mu \pm eV/2$ [350].

Используя метод уравнений движения [199], получим необходимые функции Грина,

$$F_{11e}^{r} = -\frac{2t_0^2 z Z_B C_2}{z Z_T Z_B - \varepsilon_0^2 C_T C_B}, \ G_{12e(h)}^{r} = \frac{2\beta t_0^2 z Z_B C_{1h(e)} C_{2h(e)}}{z Z_T Z_B - \varepsilon_0^2 C_T C_B},$$
(4.24)

где $z = \omega + i\delta$, $C_{je(h)} = z \mp \xi_j + i\delta_{jj_T}\Gamma/2$ $(j_T = 1, 2)$, $C_j = C_{je}C_{jh}$, $C_{T(B)} = C_{1(3)}C_{2(4)}$, $Z_T = zC_T - 2t_0^2 (C_{1e} + C_{1h}) (\beta^2 C_1 + C_2)$, $Z_B = C_B - 4t_0^2 (C_3 + C_4)$. Тогда, если $\xi_1 = \xi_2 = \xi_3 = \xi_4 = 0$, то

$$G_{12e}^{r} = G_{12h}^{r} = -\beta F_{11e}^{r} = \frac{2\beta t_0^2 \left(z^2 - 8t_1^2\right)}{C_{1e} Z_1},$$
(4.25)

где $Z_1 = (z^2 - 8t_0^2) (zC_{1e} - 4t_0^2 (1 + \beta^2)) - \varepsilon_0^2 zC_{1e}$. Таким образом, при $\beta = 1$ проводимость становится равной $G_0/2$. Полученную величину кондактанса можно качественно объяснить, если рассмотреть всю систему целиком в представлении майорановских операторов. Из вида оператора взаимодействия между точками и МСС (4.22) следует, что левый и правый контакты соединены только цепочкой, которая содержит вертикальную связь и изображена при помощи сплошных прямых на рис. 4.13а. В общем случае, как и для обычных фермионов и электромагнитных полей [342], наличие резонанса или антирезонанса кондактанса при $\omega = 0$ зависит как от количества взаимодействующих операторов Майорана в нижней ветке, так и от того, какой из них непосредственно связан с γ_A . В рассматриваемой ситуации нижняя цепочка включает три оператора, γ_{B3} , γ_B , γ_{B4} . При этом, поскольку ее собственный вектор, описывающий состояние с нулевой энергией, пропорционален sin $\left(\frac{\pi l}{4}\right)$ (где l = 1, 2, 3) и $H_W = i\varepsilon_0\gamma_A\gamma_B/2$, то верхняя и нижняя цепочки эффективно не взаимодействуют. Другими словами, эффект Фано отсутствует, и наблюдается резонансное прохождение.

Заметим, что при рассмотрении Т-образной геометрии ситуация, когда в нижней цепочке есть только один оператор Майорана, также возможна. Она имеет место, если в качестве СП рассмотреть цепочку Китаева в особой точке и $\xi_1 = \xi_2 = 0$. В представлении операторов Майорана такая система представлена на рис. 4.13b. Тогда, аналогично работе [318], полный кондактанс равен сумме вкладов от цепочек с двумя и тремя связями, соотвественно. В первом случае - это $G_0/2$, а во втором - 0 (за счет эффекта Фано).

В режиме локального транспорта, $\beta = 0$, имеем $G_L = G_0$. Такие же результаты могут быть получены для $\xi_1 = \xi_2 = \xi_3 = \xi_4 \neq 0$ и $\varepsilon_0 = 0$ (см. рис.4.14). В общем случае, когда ξ_i , $\varepsilon_0 \neq 0$, кондактанс (4.23) стремится к нулю.

Перейдем к транспорту в Т-образной структуре с АСС. Соответствующий низкоэнергетический гамильтониан СП имеет вид $\hat{H}_W = \xi \alpha^+ \alpha$. Поскольку АСС и исходные операторы вторичного квантования связаны преобразованием Боголюбова, $a_{1(N)} \approx u\alpha \pm v\alpha^+$, то запишем гамильтониан туннелирования между КТ и АСС в следующей форме [314]:

$$\hat{H}_T = -t_{0e} \left(b_1^+ + \beta b_2^+ + d_3^+ + d_4^+ \right) \alpha - t_{0h} \left(b_1 + \beta b_2 + d_3 + d_4 \right) \alpha + h.c., \quad (4.26)$$

где $t_{0e(h)}$ - амплитуда туннелирования электрона (дырки).

Решение уравнений движения для функций Грина пр
и $\xi_1=\xi_2=\xi_3=\xi_4=0$ дает

$$F_{11e}^{r} = -\frac{2t_{0e}t_{0h}z^{3}}{Z_{2}},$$

$$G_{12e(h)}^{r} = \frac{\beta z}{C_{1e}Z_{2}} \left[zC_{1e} \left(t_{0e}^{2}C_{h(e)} + t_{0h}^{2}C_{e(h)} \right) - \left(t_{0e}^{2} - t_{0h}^{2} \right)^{2} \left(z \left(1 + \beta^{2} \right) + 2C_{1e} \right) \right],$$
(4.27)

где $C_{e(h)} = z \mp \xi$,

$$Z_{2} = z^{2}C_{1e}^{2}C_{e}C_{h} + \left(t_{0e}^{2} - t_{0h}^{2}\right)^{2} \left(z\left(1+\beta^{2}\right) + 2C_{1e}\right)^{2} - 2z^{2}C_{1e}\left(t_{0e}^{2} + t_{0h}^{2}\right) \left(z\left(1+\beta^{2}\right) + 2C_{1e}\right).$$

Из (4.27) видно, что проводимость в приближении линейного отклика обращается в нуль и в локальном, и в нелокальном режимах. Как и в случае с МСС, полученный результат можно качественно объяснить, переходя к представлению операторов Майорана. Тогда, при $\xi = 0$ гамильтониан системы, АСС+четыре КТ, записывается как

$$H = i\frac{t_{0e} + t_{0h}}{2} \left(\gamma_{A1} + \beta\gamma_{A2} + \gamma_{A3} + \gamma_{A4}\right) \gamma_B - i\frac{t_{0e} - t_{0h}}{2} \left(\gamma_{B1} + \beta\gamma_{B2} + \gamma_{B3} + \gamma_{B4}\right) \gamma_A$$
(4.28)

Таким образом, имеются две цепочки, в каждой из которых центральный оператор, $\gamma_{A(B)}$, взаимодействует с двумя другими сбоку, $\gamma_{B3(A3)}$ и $\gamma_{B4(A4)}$ (не связанными между собой). Таким образом, при $\omega = 0$ в обоих цепочках G = 0 за счет эффекта Фано.

Выражения для функций Грина в общем случае, $\xi_j \neq 0$, имеют достаточно громоздкий вид и не приводятся здесь. Однако, необходимо подчеркнуть, что в этой ситуации $F_{11e}^r(0) = 0$ при $\beta = 0, 1$, тогда как $G_{12e(h)}^r(0) \neq 0$ при $\beta = 1$. Такое поведение качественно согласуется с численными расчетами на рис.4.14.

Таким образом, рассмотренное кольцо АБ со сверхпроводящим мостиком делает возможным детектирование топологического фазового перехода в системе за счет возникновения ФР. Кроме того, анализ свойств ФР позволяет отличить истинное МСС, имеющее краевой характер, от низкоэнергетического возбуждения объемного типа, т.е. ACC.

4.3 Контроль направления спин-поляризованного тока через сверхпроводящую проволоку в скошенном магнитном поле

4.3.1 Исследования спиновой поляризации майорановского состояния

Еще одной характеристикой МСС является его спиновая поляризация [343–345]. В работе [344] было показано, что если магнитное поле, **B**, направлено вдоль оси z, а вектор эффективного поля Рашбы, **B**_{SO}, коллинеарен оси y, то спиновая поляризация на концах СП изменяется в xz плоскости. Эта характеристика может быть использована в качестве локального (зависящего от координаты) параметра порядка при описании топологического фазового перехода [344, 346, 347]. Величина и направление вектора спиновой поляризации может зависеть как от природы спин-орбитальной связи [344], так и от величины и направления внешнего магнитного поля [12, 14, 286]. При больших магнитных полях и значениях спин-орбитального взаимодействия, соответствующих экспериментально наблюдаемым, z-компонента является доминирующей, в то время как x-компонента имеет порядок малости $O(\Delta/B, \alpha/B)$ и определяет величину скоса спиновой поляризации. Стоит заметить, что эта компонента спиновой поляризации пропорциональна аналогичной составляющей локальной майорановской поляризации [337,338], если **B** $\parallel z$ и **B**_{SO} $\parallel y$ [344,346]. В общем случае, как отмечалось выше, соотношение между этими компонентами можно определять, исходя из величин антикроссинга энергий KT и MCC в условиях резонанса этих подсистем [284,286].

Следствием ненулевой спиновой поляризации МСС в процессах транспорта является андреевское рассеяние без изменения проекции спина [348,349] и неколлинеарное андреевское отражение [350] (напомним, что при классическом андреевском отражении [138] электрон со спином ↑ отражается от поверхности сверхпроводника в область с нормальной фазой как дырка со спином ↓). Таким образом, существование МСС может быть проверено средствами спин-поляризованной спектроскопии/микроскопии. В работе [17] было показано нарушение симметрии спин-поляризованных токов в СП за счет отмеченной спиновой поляризации МСС. На основе этого эффекта возможно реализовать переключатель тока, в котором контроль за направлением последнего осуществляется с помощью магнитного поля затвора.

4.3.2 Спиновая поляризация майорановского состояния в скошенном магнитном поле

Следуя рассуждениям предыдущего пункта, воспользуемся гамильтонианом СП (4.3), считая, что проволока ориентирована вдоль оси x, а эффективное поле Рашбы параллельно оси y. В данном параграфе под МСС мы будем подразумевать отщепленное низкоэнергетическое возбуждение, не учитывая особенности его пространственного распределения. Зависимость электронных компонент спиновой поляризации МСС от координаты определяется как $S^i(x) = \langle \psi(x) | \sigma^i \frac{(\tau_0 + \tau^z)}{2} | \psi(x) \rangle$, где $| \psi(x) \rangle$ - волновая функция майорановского возбуждения; σ^i , τ^i (i = x, y, z) - матрицы Паули в спиновом и электрон-дырочном пространствах; τ_0 - единичная матрица. Учитывая, что волновая функция МСС может быть выражена через коэффициенты преобразования Боголюбова, $u_{l=1,j\sigma}$, $v_{l=1,j\sigma}$, составляющие $S^i(x)$ записываются как

$$S_{j}^{x} = u_{1j\uparrow}^{*} u_{1j\downarrow} + u_{1j\downarrow}^{*} u_{1j\uparrow}, \ S_{j}^{y} = i \left(u_{1j\uparrow}^{*} u_{1j\downarrow} - u_{1j\downarrow}^{*} u_{1j\uparrow} \right),$$

$$S_{j}^{z} = |u_{1j\uparrow}|^{2} - |u_{1j\downarrow}|^{2} \equiv S_{j\uparrow}^{z} - S_{j\downarrow}^{z}.$$
(4.29)

Поскольку гамильтониан проволоки (4.3) является вещественным, то $u_{lj\sigma} = u^*_{lj\sigma}$, $v_{lj\sigma} = v^*_{lj\sigma}$ и, следовательно, $S^y_j = 0$. Другими словами, электронный вклад в спиновую поляризацию МСС изменяется в плоскости xz, что уже отмечалось в предыдущем пункте.



Рис. 4.15: Зависимости x- и z-компонент спиновой поляризации майорановского связанного состояния, $S_i^{x,z}$, от энергии магнитного поля на левом, i = L (a,b), и правом, i = R (e,f), концах сверхпроводящей проволоки. На рисунках (c,d) и (g,h) приведены аналогичные зависимости спин-зависящих составляющих z-компоненты, $S_{i\uparrow,\downarrow}^{z}$, на левом и правом концах, соответственно. Параметры: t = 1, $\mu = 0$, $\Delta = 0.4$, $\alpha = 2$, N = 30.

Изучим влияние величины и направления внешнего магнитного поля на электронную спиновую поляризацию MCC [12, 14]. Для этого, наряду с компонентой h_z , отвечающей за зеемановское расщепление, введем в гамильтониан проволоки слагаемое, которое описывает действие продольного магнитного поля, индуцирующего одноузельные спин-флип процессы, $-h_x \sum_{j=1}^{N} (a_{j\uparrow}^+ a_{j\downarrow} + a_{j\downarrow}^+ a_{j\uparrow})$. Такая добавка оставляет гамильтониан вещественным, т.е. по-прежнему $S_j^y = 0$. Заметим, что на практике управление ориентацией и амплитудой поля может осуществляться при помощи магнитного затвора [351].

На рисунке 4.15 показаны зависимости $S_{j=1}^{x,z}\equiv S_L^{x,z}$ и $S_{j=N}^{x,z}\equiv S_R^{x,z}$ от магнитного

поля. Видно, что эти характеристики отличны от нуля преимущественно в нетривиальной фазе, где параметры системы удовлетворяют неравенству (4.4) для случая $\varepsilon_d = t$. При этом, существуют направления магнитного поля, для которых $S_{L,R}^i \approx 0$ даже в топологически нетривиальной фазе. Для ориентаций, при которых $S_L^x \approx 0$, как и следовало ожидать, S_L^z принимает максимальные абсолютные значения (ср. рис. 4.15а и 4.15b). Одновременно, для этих направлений магнитного поля, S_R^x имеет максимальную амплитуду, а $S_R^z \approx 0$ (ср. рис. 4.15е и 4.15f). С точки зрения последующего анализа спин-поляризованного транспорта существенно, что в случае ориентаций, когда $|S_{L,R}^z|$ максимален, одна из соответствующих спин-зависящих компонент стремится к нулю (см. рис. 4.15с, d и 4.15g, h), что также вытекает из формулы (4.29). Существенно, что при $V_x = 0$, как было ранее показано в работе [344], имеем $S_L^x \approx -S_R^x$ и $S_L^z \approx S_R^z$.

4.3.3 Переключение спин-поляризованного тока при транспорте через проволоку в фазе топологической сверхпроводимости



Рис. 4.16: Сверхпроводящая проволока между ферромагнитными металлическими контактами в скошенном магнитном поле, **B**, которое управляется затвором. Красными кружками схематически показаны майорановские моды.

Далее обратимся к рассмотрению особенностей транспортных свойств системы, где сверхпроводящая проволока последовательно и напрямую соединена с левым и правым ферромагнитными контактами, как это показано на рисунке 4.16 [17, 20]. Запишем гамильтонианы таких резервуаров, $\hat{H}_{L,R}$, в наиболее общей форме, соответствующей однозонному ферромагнетику в модели Стонера,

$$\hat{H}_{i} = \sum_{k\sigma} \left\{ \left[\xi_{k} - \frac{eV_{i}}{2} - \sigma M_{i} \cos \theta_{i} \right] c^{+}_{ik\sigma} c_{ik\sigma} - M_{i} \sin \theta_{i} c^{+}_{ik\sigma} c_{ik\overline{\sigma}} \right\}, \quad i = L, R,$$
(4.30)

где $c_{ik\sigma}^+$ - оператор рождения электрона в *i*-ом контакте с волновым вектором *k*, спином σ и энергией $\xi_k = \epsilon_k - \mu$ (μ - химический потенциал системы); M_i - энергия молекулярного поля *i*-ого контакта; θ_i - угол между намагниченностью *i*-ого контакта и осью z; $\sigma = \pm 1$ или \uparrow , \downarrow . Предполагается, что к левому (правому) контакту приложено напряжение $\pm V/2$. Чтобы упростить вывод общей формулы для электронного тока, диагонализуем гамильтонианы ферромагнитных контактов (4.30) с помощью преобразования Боголюбова, $c_{ik\sigma} = b_{ik\sigma} \cos \frac{\theta_i}{2} - \sigma b_{ik\sigma} \sin \frac{\theta_i}{2}$ [327].

Получение общего выражения, описывающего ток в левый контакт, I_L , в данной ситуации проводится аналогично процедуре, изложенной в пункте 4.2.2 и основанной на применении операторов Намбу. Следуя этим рассуждениям, можно показать, что итоговая форма записи I_L через полные матричные функции Грина остается неизменной и задается формулой (4.12). При этом отличие от ранее рассмотренной ситуации, когда СП связана с парамагнитными контактами, состоит в структуре ненулевых блоков матриц собственно-энергетических функций $\hat{\Sigma}^{r,+-}$. Так, для ферромагнитных контактов имеем

$$\hat{\Sigma}_{L1,L1}^{r(a)} = \mp \frac{i}{2} \hat{\Gamma}_L, \hat{\Sigma}_{RN,RN}^{r(a)} = \mp \frac{i}{2} \hat{\Gamma}_R, \qquad (4.31)$$

где

$$\hat{\Gamma}_{L,R} = \begin{pmatrix} \Gamma_{L,R}^{11} & 0 & \Gamma_{L,R}^{12} & 0 \\ 0 & \Gamma_{L,R}^{22} & 0 & \Gamma_{L,R}^{12} \\ \Gamma_{L,R}^{12} & 0 & \Gamma_{L,R}^{22} & 0 \\ 0 & \Gamma_{L,R}^{12} & 0 & \Gamma_{L,R}^{11} \end{pmatrix}.$$
(4.32)

В формуле (4.32) матричные элементы имеют вид: $\Gamma_i^{11} = \Gamma_i^+ \cos^2 \frac{\theta_i}{2} + \Gamma_i^- \sin^2 \frac{\theta_i}{2}$, $\Gamma_i^{22} = \Gamma_i^+ \sin^2 \frac{\theta_i}{2} + \Gamma_i^- \cos^2 \frac{\theta_i}{2}$, $\Gamma_i^{12} = \frac{1}{2} \left(\Gamma_i^+ - \Gamma_i^- \right) \sin \theta_i$, где $\Gamma_i^{+(-)} = 2\pi t_i^2 \rho_i^{+(-)}$ - функции уширения уровней устройства за счет взаимодействия с *i*-ым контактом; $\rho_i^{+(-)}$ - плотность состояний основных (неосновных) в *i*-ом контакте. Величины $\Gamma_i^{+(-)}$ связаны друг с

другом через коэффициент поляризации, $p_i: \Gamma_i^- = (1 - p_i) \Gamma_i^+ / (1 + p_i)$. В ходе дальнейших численных расчетов, как и прежде, будем предполагать, что контакты являются широкозонными металлами, т.е. $\Gamma_i^{+(-)} = const$. Связь между $\hat{\Sigma}^r$ и $\hat{\Sigma}^{+-}$ определяется формулой (4.15).

Как обсуждалось в параграфе 4.1, дополнительной характеристикой, которая позволяет идентифицировать транспорт через МСС, являются флуктуации тока. В частности, фурье-образ автокорреляций тока в левом контакте определяет спектральную плотность токового шума и имеет вид

$$S_L(\omega) = \int dt' e^{i\omega t'} \langle \delta I_L(t') \, \delta I_L(0) + \delta I_L(0) \, \delta I_L(t') \rangle, \qquad (4.33)$$

где $\delta I_L(t) = I_L(t) - \langle I_L(t) \rangle$. Подставляя выражение для тока (4.12) в (4.33), получим формулу для дробового шума при нулевой частоте в терминах неравновесных функций Грина [249,352],

$$S_{L}(0) = 2e^{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} Tr \left[\hat{\sigma} \hat{\Sigma}_{L}^{+-} \hat{\sigma} \hat{G}_{L1,L1}^{-+} + \hat{G}_{L1,L1}^{+-} \hat{\sigma} \hat{\Sigma}_{L}^{-+} \hat{\sigma} - (4.34) \right. \\ \left. - \hat{\sigma} \left[\hat{\Sigma}_{L} \hat{G}_{L1,L1} \right]^{+-} \hat{\sigma} \left[\hat{\Sigma}_{L} \hat{G}_{L1,L1} \right]^{-+} - \left[\hat{G}_{L1,L1} \hat{\Sigma}_{L} \right]^{+-} \hat{\sigma} \left[\hat{G}_{L1,L1} \hat{\Sigma}_{L} \right]^{-+} \hat{\sigma} + \left. + \hat{\sigma} \left[\hat{\Sigma}_{L} \hat{G}_{L1,L1} \hat{\Sigma}_{L} \right]^{-+} \hat{\sigma} \hat{G}_{L1,L1}^{+-} + \hat{G}_{L1,L1}^{-+} \hat{\sigma} \left[\hat{\Sigma}_{L} \hat{G}_{L1,L1} \hat{\Sigma}_{L} \right]^{+-} \hat{\sigma} \right],$$

где используются следующие соотношения для функций Грина [353]

$$[AB]^{+-/-+} = A^{r}B^{+-/-+} + A^{+-/-+}B^{a}, \qquad (4.35)$$
$$[ABC]^{+-/-+} = A^{r}B^{r}C^{+-/-+} + A^{r}B^{+-/-+}C^{a} + A^{+-/-+}B^{a}C^{a}.$$

В рамках анализа транспорта в системе ферромагнитный контакт/СП/ферромагнитный контакт нас будет интересовать фактор Фано *i*-го контакта, $F_i = S_i/2eI_i$, который чувствителен как к гибридизации волновых функций ММ, так и к интенсивности туннелирования между СП и контактами.

При $V_{L,R} = \pm V$ формулу (4.12) можно формально представить в виде $I_L = I_L^{LAR} + I_L^{ET}$. Другими словами, ток при таком профиле электрического потенциала определяется локальными процессами андрееского отражения (Local Andreev Reflection) и

нелокальными процессами переноса электрона или дырки (Electron Transfer) [350]. Когда $\theta_{L,R} = 0$, выражение, описывающее первый вклад, имеет вид

$$I_{L}^{LAR} = \frac{e}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left[\left(\Gamma_{L}^{+} \right)^{2} \left(\left| f_{14} \right|^{2} + \left| f_{41} \right|^{2} \right) + \left(\Gamma_{L}^{-} \right)^{2} \left(\left| f_{23} \right|^{2} + \left| f_{32} \right|^{2} \right) + \left(4.36 \right) \right. \\ \left. + \Gamma_{L}^{+} \Gamma_{L}^{-} \left(\left| f_{12} \right|^{2} + \left| f_{21} \right|^{2} + \left| f_{34} \right|^{2} + \left| f_{43} \right|^{2} \right) \right] \left(n_{2} - n_{1} \right),$$

где $n_{1,2}=n\left(\omega\pm eV/2\right)$ - функции Ферми-Дирака. В свою очередь, вторая компонента определяется как

$$I_{L}^{ET} = \frac{e}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left[\Gamma_{L}^{+} \Gamma_{R}^{+} \left(|g_{11}|^{2} + |g_{44}|^{2} \right) + \Gamma_{L}^{-} \Gamma_{R}^{-} \left(|g_{22}|^{2} + |g_{33}|^{2} \right) + \left(4.37 \right) \right. \\ \left. + \Gamma_{L}^{+} \Gamma_{R}^{-} \left(|g_{13}|^{2} + |g_{42}|^{2} \right) + \Gamma_{L}^{-} \Gamma_{R}^{+} \left(|g_{31}|^{2} + |g_{24}|^{2} \right) \right] \left(n_{2} - n_{1} \right).$$

Если же $V_{L,R} = V$, то нелокальный ток определяется процессами перекрестного андреевского отражения (Crossed Andreev Reflection), т.е. $I_L = I_L^{LAR} + I_L^{CAR}$, где

$$I_{L}^{CAR} = \frac{e}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left[\Gamma_{L}^{+} \Gamma_{R}^{+} \left(\left| \tilde{f}_{14} \right|^{2} + \left| \tilde{f}_{41} \right|^{2} \right) + \Gamma_{L}^{-} \Gamma_{R}^{-} \left(\left| \tilde{f}_{23} \right|^{2} + \left| \tilde{f}_{32} \right|^{2} \right) + \Gamma_{L}^{+} \Gamma_{R}^{-} \left(\left| \tilde{f}_{12} \right|^{2} + \left| \tilde{f}_{43} \right|^{2} \right) + \Gamma_{L}^{-} \Gamma_{R}^{+} \left(\left| \tilde{f}_{21} \right|^{2} + \left| \tilde{f}_{34} \right|^{2} \right) \right] (n_{2} - n_{1}) .$$

$$(4.38)$$

В формулах (4.36), (4.37) и (4.38) локальные (нелокальные) аномальные, $f_{ij} \equiv \hat{G}^r_{i,j}$ $(\tilde{f}_{ij} \equiv \hat{G}^r_{i,4(N-1)+j})$, и нормальные, $g_{ij} \equiv \hat{G}^r_{i,4(N-1)+j}$, матричные элементы запаздывающей функции Грина СП находятся в результате решения уравнения Дайсона, $\hat{G}^r = \left(\omega - \hat{H}_W - \hat{\Sigma}^r\right)^{-1}$.

При непосредственных численных расчетах будем рассматривать случай полуметаллических контактов (например, NiMnSb или CrO₂ [354]), которые характеризуются наличием носителей только с одной проекцией спина (основные носители), т.е. $\Gamma^+_{L,R} = \Gamma_{L,R}, \ \Gamma^-_{L,R} = 0.$ Тогда выражения (4.36) и (4.37) принимают более простой вид:

$$I_L^{LAR} = \frac{e}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \Gamma_L^2 \left(|f_{14}|^2 + |f_{41}|^2 \right) \left(n_2 - n_1 \right), \tag{4.39}$$

$$I_{L}^{ET} = \frac{e}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \Gamma_{L} \Gamma_{R} \left(|g_{11}|^{2} + |g_{44}|^{2} \right) \left(n_{2} - n_{1} \right).$$
(4.40)

$$I_{L}^{CAR} = \frac{e}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \Gamma_{L} \Gamma_{R} \left(\left| \tilde{f}_{14} \right|^{2} + \left| \tilde{f}_{41} \right|^{2} \right) (n_{2} - n_{1}).$$
(4.41)

Важно заметить, что в ситуации с полуметаллическими контактами составляющие тока, связанные с процессами андреевского отражения, определяются триплетными компонентами запаздывающей функции Грина, $f_{14}(\omega) = \langle \langle a_{1\uparrow} | a_{1\uparrow} \rangle \rangle^r$ и $\tilde{f}_{14}(\omega) = \langle \langle a_{1\uparrow} | a_{N\uparrow} \rangle \rangle^r$. При этом в общем случае андреевские процессы в системе полуметалл/сверхпроводник невозможны. Это вызвано тем, что ферромагнетик такого типа имеет только одну подзону носителей заряда. Однако, например, если при рассеянии на интерфейсе возможны спин-флип процессы, то андреевское отражение без изменения проекции спина носителей имеет место [355, 356].

В случае с рассматриваемой СП ненулевой вклад в спин-поляризованный ток от андреевских каналов возникает вследствие спин-орбитального взаимодействия. Продемонстрируем это аналитически для наиболее простой ситуации, когда СП состоит из двух узлов (N = 2) и $h_x = 0$. Тогда, решая систему уравнений движения [199], находим числители соответствующих функций Грина,

$$\operatorname{num} \left\{ f_{14} \right\} = -16\eta_{\sigma} \Delta \alpha t \xi_{\bar{\sigma}} \left[\omega \left(16\eta_{\sigma} \xi_{0} h_{z} + \Gamma_{R}^{2} \right) + 2i\Gamma_{R} \left(\Delta^{2} + \alpha^{2} + t^{2} - \omega^{2} - \xi_{\bar{\sigma}}^{2} \right) \right],$$

$$\operatorname{num} \left\{ \tilde{f}_{14} \right\} = 32\eta_{\sigma} \Delta \alpha \xi_{\bar{\sigma}} \left[\left(\Delta^{2} + \alpha^{2} + t^{2} \right)^{2} + t^{2} \left(C_{e\bar{\sigma}} C_{h\bar{\sigma}} - \omega \left(4\omega + i\Gamma \right) \right) + \left(4.42 \right) \right.$$

$$\left. + C_{e\sigma L} C_{h\sigma R} \left(t^{2} + C_{e\bar{\sigma}} C_{h\bar{\sigma}} \right) - C_{e\sigma L} \left(\alpha^{2} C_{e\bar{\sigma}} + \Delta^{2} C_{h\bar{\sigma}} \right) - C_{h\sigma R} \left(\alpha^{2} C_{h\bar{\sigma}} + \Delta^{2} C_{e\bar{\sigma}} \right) \right],$$

$$f_{41} = f_{14}, \tilde{f}_{41} = -\tilde{f}_{14} \left(L \longleftrightarrow R \right)$$

где $C_{e\sigma L(h\sigma R)} = \omega \mp \xi_{\sigma} + i\Gamma_{L(R)}/2$, $C_{e(h)\bar{\sigma}} = \omega \mp \xi_{\bar{\sigma}}$, $\xi_0 = t - \mu$, $\Gamma = \Gamma_L + \Gamma_R$. Общий для всех гриновских функций знаменатель здесь не приводится по причине громоздкости. Из (4.42) следует, что локальное и перекрестное андреевское отражение от интерфейса полуметалл/СП имеют место только, если в СП одновременно присутствуют и сверхпроводящее спаривание, и спин-орбитальное взаимодействие. В одноконтактной геометрии ($\Gamma_R = 0$) ток определяется только локальными процессами. Тогда, для дальнейшего рассмотрения важно заметить, что в режиме линейного отклика дифференциальная проводимость $G_L = dI_L/dV$ стремится к нулю. Такое поведение согласуется с описанным для случая, когда сверхпроводник (без спинорбитального взаимодействия) контактирует с полуметаллом, в котором градиент намагниченности перпендикулярен интерфейсу [355,356]. В свою очередь, в нелокальном режиме вклад в ток от обоих каналов является ненулевым при любых ω .



Рис. 4.17: Зависимости полного кондактанса, а также вкладов от процессов локального и нелокального транспорта в левом (a-c) и правом (e-g) контактах от энергии магнитного поля. Цвет рисунков расшифровывается на шкале слева. На рисунках (d) и (h) изображены аналогичные зависимости факторов Фано левого и правого контактов, соответственно. Цвет рисунков расшифровывается на шкале справа. Параметры совпадают с использованными для построения рис. 4.15.

В дальнейшем ограничимся рассмотрением слабо неравновесного режима при $V_{L,R} = \pm V$, определяемого неравенством $0 < eV/2 < \min(\delta \varepsilon_0)$, где под $\delta \varepsilon_0$ подразумеваются величины максимумов характерной осцилляционной зависимости энергии возбуждения MCC от внешнего магнитного поля (см. поведение функции $E_{W1}(h)$ на рис.

4.6а). На рисунке 4.17 представлены зависимости транспортных свойств проволоки от энергии скошенного магнитного поля, полученные при малом напряжении смещения, $eV = 10^{-3} \ll h_{x,z}, \ \alpha, \ \Delta$. В результате, в возникающем энергетическом диапазоне между электрохимическими потенциалами полуметаллических контактов ток может создаваться только за счет прохождения через МСС. Дополнительно, предполагалось, что $\theta_{L,R} = 0$. Таким образом, спин-поляризованный транспорт будет существенно зависеть от $\sigma = \uparrow$ компоненты плотности вероятности MCC на концах проволоки, которая пропорциональна $S^z_{i\uparrow}$ (в МСС $|u_{1j\sigma}|^2 = |v_{1j\sigma}|^2$). Это подтверждается картами кондактанса левого и правого контактов на рис. 4.17а и 4.17е, соответственно. Проводимость приобретает максимальные значения преимущественно в нижней полуплоскости, $h_z < 0$, где также наибольшие значения имеют $S^z_{L,R\uparrow}$ (см. рис. 4.15с и 4.15g). Кроме того, можно заметить, что контуры постоянных значений кондактанса имеют вид концентрических колец. Это связано с осцилляторным поведением энергии майорановского возбуждения в магнитном поле. Одновременно, кольца, которые характеризуются $2G_0$ значениями кондактанса, имеют разрывы, где $G_{L,R} \longrightarrow 0$. Данные разрывы образуются при ориентациях магнитного поля, для которых $S^z_{L,R\uparrow} \longrightarrow 0$.

Из магнитополевых зависимостей вкладов в кондактанс от процессов локального андреевского отражения, $G_{L,R}^{LAR}$, и нелокального электронного туннелирования, $G_{L,R}^{ET}$, следует, что $2G_0$ -резонансы вызваны именно локальным транспортом (см. рис. 4.17b и 4.17f) [247]. Видно, что соответствующие кольца содержат разрывы при тех же направлениях магнитного поля, что и полные кондактансы, $G_{L,R}$. Нелокальный характер вкладов $G_{L,R}^{ET}$ проявляется в том, что кольца проводимости имеют разрывы сразу для двух направлений поля, при которых $S_{L\uparrow}^z \longrightarrow 0$ или $S_{R\uparrow}^z \longrightarrow 0$ (см. рис. 4.17c и 4.17g).

Области магнитных полей, где доминируют локальный или нелокальный механизмы квантового транспорта, также хорошо видны на картах фактора Фано левого и правого контактов, представленных на рисунках 4.17d и 4.17h, соответственно. Видно, что $2G_0$ -резонансам проводимости отвечают нулевые значения $F_{L,R}$ [247, 249]. В свою очередь, при $E_{W1} > eV/2$, Γ_i^+ процессы локального андреевского отражения подавлены, и вклад от электронного туннелирования между противоположными контактами становится ненулевым. Таким образом, $F_{L,R} \longrightarrow 1$, как уже отмечалось в работе [290]. Однако, при ориентации магнитного поля, для которой характерно $S^z_{L(R)\uparrow} \longrightarrow 0$, фактор Фано правого (левого) контакта в режиме малой проводимости стремится к 2 (см. "хвост" красного цвета на рис. 4.17h(d)). Такое поведение связано с отсутствием эффективной связи между левым (правым) контактом и соответствующим концом проволоки и, как следствие, доминированием процессов локального андреевского отражения на противоположном интерфейсе, когда в течение одиночного импульса тока в правый (левый) контакт переносится заряд 2*e*.

Таким образом, из рисунков 4.17а и 4.17е следует, что при низких напряжениях наблюдается нарушение симметрии токов для двух ориентаций магнитного поля, т.е. $I_L \neq I_R$. Подчеркнем, что такой эффект в ситуации, когда число частиц в системе не сохраняется и $\Gamma_L = \Gamma_R$, $\mu_L = \mu_R$, отсутствует, если контакты являются парамагнитными металлами [357]. Как показано выше, в режиме полностью спин-поляризованного транспорта для выделенных направлений магнитного поля транспорт становится сильно асимметричным, что делает возможным нарушение симметрии токов.



Рис. 4.18: Схема переключения спин-поляризованного тока с помощью майорановского связанного состояния в слабо неравновесном режиме при $\theta_{L,R} = 0$. (a) $I_L \to 0$ и $I_0 \approx -I_R$, т.к. $S_L^z = -S_{L\downarrow}^z$ при $h_x > 0$, $h_z \approx h_x$; (b) $I_R \to 0$ и $I_0 \approx -I_L$, т.к. $S_R^z = -S_{R\downarrow}^z$ при $h_x < 0$, $h_z \approx -h_x$; (c) $I_0 \to 0$ и $I_L \approx -I_R$ при $h_x \neq \pm h_z$.

Отмеченный эффект можно использовать следующим образом для реализации переключателя спин-поляризованного тока. Ток в заземленном объемном сверхпроводнике, на котором располагается исследуемая нанопроволока, равен $-I_0 = I_L + I_R$. Тогда, если $h_x \approx h_z$ и $eV/2 > E_1$, то $I_L \approx 0$ и $I_0 \approx |I_R|$ (см. рис. 4.18а). Похожим образом, если $h_x \approx -h_z$ и $eV/2 > E_1$, то $I_R \approx 0$ и $I_0 \approx -|I_L|$ (см. рис. 4.18b). Если же $h_x \neq \pm h_z$, то $I_L \approx -I_R$ и $I_0 \approx 0$ (см. рис. 4.18c). Заметим, что в отличие от результатов работы [358] кондактанс dI_0/dV при формально симметричном подключении контактов ($\Gamma_L = \Gamma_R$) отличен от нуля, если $h_x \approx \pm h_z$, и приближенно равен $2G_0$. Таким образом, эффект переключения спин-поляризованного тока может быть использован как для детектирования МСС, так и для электронных приложений, связанных с то-пологической сверхпроводимостью.

4.4 Резюме

Основные итоги главы 4 сводятся к следующему:

- 1. Изучены транспортные характеристики кольца Ааронова-Бома, которое содержит вставку из сверхпроводящей проволоки со спин-орбитальным взаимодействием, допускающей реализацию майорановских связанных состояний. Показано, что при индуцировании магнитным полем в проволоке топологически нетривиальной фазы магнитополевой кондактанс содержит и симметричные, и асимметричные резонансы. Установлена зависимость свойств резонансов Фано от пространственной структуры низкоэнергетической волновой функции в сверхпроводящей проволоке.
- 2. Показано, что использование специальной геометрии кольца с Т-образной схемой транспорта позволяет отличить майорановский тип возбуждения сверхпроводящего мостика от андреевского. Обнаружено, что в нелокальном режиме с ростом длины мостика, когда тип возбуждения меняется с объемного на краевое, в магнитополевой зависимости кондактанса резонанс Фано трансформируется в плато высотой G₀ (G₀ квант кондактанса). В локальном режиме высота плато удваивается, а в случае андреевского состояния кондактанс полностью подавляется.
- Показано, что для асимметричного кольца при увеличении длины сверхпроводящего мостика, когда перекрытие волновых функций майорановских мод становится пренебрежимо малым, имеет место коллапс резонанса Фано. Анализ эф-

фекта проведен для бесспиновой модели кольца с цепочкой Китаева в качестве мостика. На основе расчета спектра такой системы продемонстрировано увеличение кратности вырождения состояния с нулевой энергией в особых точках модели Китаева, что объясняет реализацию топологического связанного состояния в континууме.

4. Вычислена зависимость характеристик спин-поляризованного квантового транспорта в сверхпроводящей проволоке от ориентации внешнего магнитного поля. Показано, что поведение кондактанса как функции компонент зеемановской энергии существенно зависит от аналогичного поведения спин-зависящих компонент спиновой поляризации майорановского связанного состояния. Это позволяет с помощью магнитного поля управлять транспортными характеристиками в системе посредством переключения между симметричным и сильно асимметричным режимами. В последнем случае наблюдается нарушение симметрии токов, что делает возможным реализацию переключателя слабо неравновесного спин-поляризованного тока, когда проволока находится в фазе топологической сверхпроводимости.

Глава 5

ПРОБЛЕМА ЗАРЯДОВЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В ПРОВОЛОКАХ В ФАЗАХ ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

5.1 Майорановские связанные состояния и электронэлектронные взаимодействия

Как отмечалось во введении предыдущей главы (см. параграф 4.1), современные эксперименты с гибридными сверхпроводящими проволоками (СП), которые характеризуются наличием сильной спин-орбитальной связи и большими значениями g-фактора, не дают однозначного положительного ответа на вопрос о реализации на концах этой структуры майорановских мод (MM) [264,277,359]. В результате возникает потребность в изучении воздействия различных факторов на явление топологической сверхпроводимости.

Одна из важных проблем - вопрос о влиянии кулоновских взаимодействий на майорановские связанные состояния (MCC). В большей части теоретических исследований этих квазичастичных возбуждений рассматриваются квадратичные гамильтонианы, для которых была дана классификация фаз топологической сверхпроводимости [360, 361] и развиты алгоритмы квантовых вычислений [233, 382]. Однако, при непосредственном рассмотрении СП полная экранировка кулоновских взаимодействий в полупроводниковой нанопроволоке массивном сверхпроводником в общем случае не является гарантированной. В результате более качественное описание топологических свойств гибридной наноструктуры должно включать как наведенное за счет эффекта близости куперовское спаривание, так и процессы многочастичного рассеяния.

Стоит отметить, что действие электрических полей электродов затвора, количество которых в современных экспериментах по детектированию МСС может быть весьма значительным (см. например [243]), также способно существенно влиять на интенсивность зарядовых корреляций в полупроводниковой проволоке. В частности, в работе [362] было показано, что зависимость тока через проволоки InAs от напряжения смещения и температуры демонстрирует скейлинговое поведение в соответствии с теорией жидкости Томонаги-Латтинжера (несмотря на перемешивание спиновых и зарядовых степеней свободы за счет сильной спин-орбитальной связи) [363–365]. Полученный при этом параметр электрон-электронного взаимодействия указывает на реализацию режима сильных кулоновских корреляций, когда концентрация носителей в проволоке понижается.

Одним из факторов, препятствующих обнаружению МСС в проволоках, является подавление магнитным полем сверхпроводящей щели подложки или внешней оболочки гибридной наноструктуры. Этой проблемы можно избежать, если предположить, например, что куперовское спаривание в СП индуцировано за счет эффекта близости с нетрадиционным сверхпроводником. Тогда в нулевом магнитном поле, поскольку симметрия относительно обращения времени сохраняется, возникают крамерсовские пары MCC (т.е. пары ММ на обоих концах проволоки) [366–368]. В случае с наведенным *s*волновым спариванием такие возбуждения можно получить, рассмотрев две проволоки со спин-орбитальным взаимодействием, находящихся на противоположных поверхностях традиционного сверхпроводника. В результате топологически нетривиальная фаза имеет место, если главный вклад в создание куперовской неустойчивости дают процессы перекрестного андреевского отражения, а не туннелирования пары электронов как целого в одну из проволок. Это условие выполняется именно в случае сильного хаббардовского отталкивания [369]. Отмечалось также, что в квазиодномерных СП относительно большая величина кулоновского отталкивания способно вызывать смену знака эффективного потенциала куперовского спаривания и также приводить к возникновению крамерсовских пар МСС [370]. Важность режима сильных корреляций подчеркивалась и для реализации парафермионов в системах с СП [371–373].

Существенно, что учет сильных электронных взаимодействий встречает фундаментальные теоретические трудности, связанные со значительной перенормировкой эффективных взаимодействий и изменением топологической классификации [374–376]. Кроме того, должна быть однозначно определена структура одночастичных возбуждений, которые обладают свойствами, аналогичными таковым у ММ в системе невзаимодействующих (или слабо взаимодействующих) фермионов. Модель Китаева с учетом электрон-электронных взаимодействий между ближайшими соседями не имеет точного аналитического решения в общем случае. При этом в ряде исследований было показано, но при специфическом соотношении между параметрами, в частности, в особой точке $(t = \Delta, \mu = 0)$ основное состояние остается двукратно вырожденным и можно построить набор операторов, которые связывают состояния из секторов гильбертова пространства с противоположной четностью [377–379]. Одним из следствий существования "многочастичного" МСС является устойчивость 4*π*-эффекта Джозефсона по отношению в межузельным кулоновским взаимодействиям в случае, если гамильтониан всей системы (две туннельно связанные цепочки Китаева) обладает электрондырочной симметрией [381]. В работе [380] для спиновой ХҮZ-модели, которая эквивалентна цепочке Китаева со взаимодействиями (в силу преобразования Йордана-Вигнера), также был построен оператор возбуждения майорановского типа в точке электрон-дырочной симметрии. Это означает, что спектр такой системы остается двукратно вырожденным.

Значимость проблемы многочастичных взаимодействий также связана с реализацией топологических квантовых вычислений. Несмотря на фундаментальную устойчивость МСС по отношению к локальным возмущениям [237, 256], различные процессы декогеренции (сбоя фазы) все же способны приводить к разрушению состояния топологического кубита (например, из-за гибридизации волновых функций ММ в коротких СП) [383,384]. В качестве одного из таких источников шума могут выступать флуктуаций электростатического потенциала электродов затвора [385–387]. В свою очередь, в ряде работ и в рамках среднеполевого описания, и на основе метода ренорм-группы для матрицы плотности (DMRG) было обнаружено, что как одноузельные [388, 389], так и межузельные [390, 391] зарядовые корреляции при определенной интенсивности приводят к увеличению устойчивости МСС по отношению к различным процессам декогеренции. Однако, в противоположность этому, точная диагонализация гамильтонианов коротких цепочек Китаева (N = 10) показывает, что учет взаимодействий в следующих координационных сферах (по отношению к первой) вызывает уменьшение времени жизни МСС (или, иначе говоря, времени декогеренции топологического кубита) [392]. С точки зрения реализации топологических квантовых вычисления сохранение двукратно вырожденного основного состояния в частных случаях модели Китаева со взаимодействиями [377-379] означает, что заселенность квазичастичной моды с нулевой энергией сохраняется. Другими словами, электрон-электронные корреляции в данном случае не приводят к потере информации (т.н. quasiparticle poisoning [257]), которая переносится таким МСС.

Для учета электрон-электронного взаимодействия в СП часто используется обобщенная 1D модель Хаббарда при наличии спин-орбитальной связи Рашбы и внешнего поля. Численные расчеты топологических фазовых диаграмм и свойств низкоэнергетических возбуждений проводятся в рамках среднеполевого описания, а также на основе ренорм-группового анализа для матрицы плотности (density matrix renormalization group или DMRG). Последний базируется на знании многочастичных волновых функций [393, 394]. Применение этих методов показало, что учет слабого взаимодействия приводит к тому, что топологически нетривиальная фаза и МСС формируются при более низких значениях магнитных полей по сравнению с невзаимодействующим случаем. Эти результаты также подтверждаются при описании на основе бозонных полей и ренорм-групповых уравнений. Рассмотрение противоположного режима сильных взаимодействий в рамках последнего подхода приводит к разрушению сверхпроводящего состояния и возникновению газа свободных фермионов с бесщелевым спектром и отсутствием краевых состояний [391, 395–398].

По понятным причинам влияние зарядовых корреляций на топологические фазы в рамках метода DMRG наиболее частно рассматривается на примере модели Китаева (4.1) [375,391,398] и изоморфной ей в сильных магнитных полях модели СП (4.3) [397]. Гамильтониан последней относится к симметрийному классу D, когда возможны только две фазы: тривиальная с числом Майорана (топологическим инвариантом) $\mathcal{M} = +1$ и нетривиальная с $\mathcal{M} = -1$. В данной главе на основе алгоритма DMRG мы проанализируем влияние электрон-электронных взаимодействий в случае СП, чей гамильтониан относится к симметрийному классу BDI [22,23]. В результате имеется несколько топологически нетривиальных фаз: фаза с одной MM на концах структуры (аналогично СП класса D) и фаза с двумя MM. Проволока с такими свойствами получается, например, при рассмотрении взаимодействия в куперовском канале не только на одном узле, но и между ближайшими соседями. Такой сценарий на практике может иметь место, если в сверхпроводнике, с которым туннельно связана полупроводниковая проволока, реализуется расширенное спаривание *s*-типа [399,400].

5.2 Основы метода ренормализационной группы для матрицы плотности

Метод ренормализационной группы для матрицы плотности (DMRG) изначально был разработан для изучения низкоэнергетических свойств одномерных сильно коррелированных систем: модели Хаббарда и модели Гейзенберга [393, 394, 401].Основное состояние в этих системах не может быть найдено на основе теории возмущений, поэтому применение численных методов, таких как точная диагонализация, Монте Карло и DMRG, представляет существенной интерес.

Основная идея DMRG аналогична используемым в других ренорм-групповых подходах [402] и заключается в последовательном исключении из рассмотрения набора состояний исходного микроскопического гамильтониана системы. В результате анализируется некоторая эффективная модель, которая тем не менее описывает главные физические свойства первоначальной. Алгоритм DMRG в реальном пространстве подразумевает несколько этапов. На первом рассматривается кластер из нескольких узлов, все M_S собственных состояний которого могут быть получены точно. На втором шаге конструируется блок из большего числа узлов, чей гамильтониан после диагонализации проецируется на подпространство из M_S собственных состояний с наименьшей энергией. После чего второй этап повторяется, до тех пор пока не будет достигнута нужная длина цепочки. Однако, при выполнении описанного алгоритма возникают ошибки, связанные с (а) неправильным выбором граничных условий при добавлении новых узлов; (b) процедурой обрезания состояний, когда часть информации теряется на каждом шаге [403].



Рис. 5.1: Схема метода DMRG для бесконечной системы.

Часть отмеченных проблем удается решить в рамках процедуры DMRG для бесконечной системы (infinite-system DMRG - iDMRG), которая включает следующие пункты [393, 404]:

1. Рассмотривается левый кластер L из N_0 узлов, изображенный на рисунке 5.1. Собственные состояния матрицы гамильтониана \hat{H}_L образуют гильбертово пространство, состоящее из M_0 состояний, $\{|M_0\rangle\}$. Аналогичным образом формируется правый кластер R. Размеры обоих блоков предполагаются одинаковыми.

- 2. Добавлением одного узла к исходному кластеру L справа, как это показано на рис. 5.1, образуется кластер S (S - system). Похожим образом присоединением одного узла к кластеру R слева образуется кластер E (E - environment). Размер гильбертова пространства новых блоков равен $M_{S,E} = M_0 m_0$ (где m_0 - количество состояний отдельного узла), а сами базисные состояния образуются произведением состояний исходных кластеров и состояний отдельного узла, т.е. $\{|M_{S,E}\rangle\} = \{|M_0\rangle|m_0\rangle\}$. Важно заметить, что добавление узлов именно в центр снимает ряд проблем, связанных с конечными размерами, поскольку положение узлов всей системы (суперкластер S + E) относительно ближайшей границы остается неизменным.
- Строится суперкластер (S + E) размером 2N₀ + 2 с числом базисных состояний M_SM_E. Путем диагонализации разряженной матрицы суперкластера методом Ланцоша [405] находится его основное состояние, |ψ⟩.
- 4. Формируется редуцированная матрица плотности кластера $S, \hat{\rho}_S = Tr_E |\psi\rangle \langle \psi|,$ в которой взят парциальный след относительно состояний блока окружения (E) [78,406],

$$\langle i|\hat{\rho}_S|i'\rangle = \sum_{j=1}^{M_E} \psi_{ij}\psi^*_{i'j}, \quad i,i'=1,...,M_S.$$
 (5.1)

Собственные состояния данной матрицы плотности, $|w_i\rangle$, упорядочиваются по убыванию ее собственных значений (весов), w_i . Для кластера S составляется новый базис меньшего размера из M_0 состояний $|w_i\rangle$, имеющих наибольшие веса w_i [407]. Соответствующие вектор-столбцы формируют прямоугольную матрицу проекционного оператора \hat{T}_S размерности $M_S \times M_0$. Такие же действия осуществляются и для блока E.

5. Производится операция отсечения (DMRG truncation), итогом которой являются новые матрицы гамильтонианов кластеров L и R, т.е. $\hat{H}_{L,R} = \hat{T}_{S,E}^+ \hat{H}_{S,E} \hat{T}_{S,E}$. Тем же путем модифицируются операторы, действующие в пространстве состояний блоков S и E. В дальнейшем весь алгоритм повторяется, начиная с пункта 2, пока не будет достигнута необходимая длина цепочки. При этом на каждом витке

накапливается ошибка отсечения

$$err = 1 - \sum_{i=1}^{N_0} w_i.$$
 (5.2)

Таким образом, быстрое убывание собственных значений редуцированных матриц плотности $\hat{\rho}_{S,E}$ является крайне важным критерием эффективности метода DMRG.

Существенно, что описанная процедура не в полной мере позволяет учесть граничные эффекты. В частности, корреляционная длина цепочки может превышать ее размер на первых итерациях iDMRG (т.е., например, могут не учитываться примеси и влияние беспорядка, возникающие при наращивании системы). В результате наборы базисных состояний для маленькой системы и для проволоки окончательного размера могут существенно отличаться.



Рис. 5.2: Схема метода DMRG для конечной системы.

Чтобы избежать этих проблем, выполняется алгоритм DMRG для конечной системы (finite-system DMRG - fDMRG), который состоит из последовательности свипов (от англ. to sweep - мести, подметать). Отдельный свип схематически изображен на рисунке 5.2. Его можно разбить на несколько этапов:

- 1. Применение метода iDMRG прекращается при достижении заданной длинны цепочки.
- 2. В дальнейшем происходит наращивание одного из блоков, например, блока R. В свою очередь, блок L постепенно сокращается в размерах, как это показано на рис. 5.2. При этом редуцирование базисных состояний, следуя алгоритму iDMRG, осуществляется только для блока R, а матрицы гамильтониана и операторов блока L на каждом шаге берутся из памяти компьютера, куда они предварительно сохраняются при выполнении процедуры iDMRG.
- 3. Когда блок *L* достигает минимального размера, с которого начиналось выполнение алгоритма iDMRG, направление наращивания меняется на противоположное: блок *L* увеличивается за счет сокращения в размерах блока *R*. Заметим, что на каждом шаге наращивания гамильтониан и операторы соответствующего блока также заносятся в память для последующего использования при выполнении алгоритма в обратном направлении.

При достижении определенной точности процедура fDMRG останавливается. После чего вычисляется энергия и волновая функция основного состояния ($|\psi\rangle$). Аналогичным образом вычисляются и характеристики ряда низкоэнергетических возбуждений. Кроме того, могут быть получены средние значения различных операторов,

$$\langle \hat{A}_i \rangle = Tr_i \left[\hat{\rho}_i \hat{A}_i \right], \ i = S, E$$
(5.3)

где \hat{A}_i - оператор, действующий в пространстве состояний *i*-го блока.

5.3 Влияние зарядовых корреляций на топологическую сверхпроводимость в проволоке класса BDI в модели Шубина-Вонсовского

5.3.1 Гамильтониан системы и диаграмма топологических фаз в отсутствие кулоновских взаимодействий

Рассмотрим модель одномерной квантовой проволоки со спин-орбитальной связью Рашбы во внешнем магнитном поле [22,23]. Предполагается, что в структуре реализуется как одноузельное, так и межузельное спин-синглетное спаривание за счет эффекта близости с объемным сверхпроводником. Основная цель исследований, представленных ниже - проанализировать эффекты электрон-электронных взаимодействий, а именно: локального хаббардовского отталкивания и кулоновского взаимодействия в пределах первой координационной сферы, - на топологическую сверхпроводимость и майорановские связанные состояния (МСС). Гамильтониан описанной системы в приближении сильной связи имеет вид:

$$H = \sum_{f\sigma} \xi_{\sigma} a_{f\sigma}^{\dagger} a_{f\sigma} - \frac{t}{2} \sum_{f\sigma} \left(a_{f\sigma}^{\dagger} a_{f+1\sigma} + a_{f+1\sigma}^{\dagger} a_{f\sigma} \right) - \frac{\alpha}{2} \sum_{f\sigma} \eta_{\sigma} \left(a_{f\sigma}^{\dagger} a_{f+1\bar{\sigma}} + a_{f+1\bar{\sigma}}^{\dagger} a_{f\sigma} \right) + \sum_{f} \left[\Delta a_{f\uparrow} a_{f\downarrow} + \Delta_1 \left(a_{f\uparrow} a_{f+1\downarrow} + a_{f+1\uparrow} a_{f\downarrow} \right) + h.c. \right] + U \sum_{f} n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} + V \sum_{f} n_{f} n_{f+1}, \quad (5.4)$$

где $\xi_{\sigma} = \xi - \eta_{\sigma}h$, $\xi = \varepsilon_0 - \mu$; ε_0 - одноузельная энергия, μ - химический потенциал, h энергия зеемановского расщепления; $\eta_{\uparrow(\downarrow)} = \pm 1$; параметры t и α описывают перескоки и спин-орбитальное взаимодействие Рашбы, соответственно; Δ , Δ_1 - параметры одно- и межузельного сверхпроводящего спаривания, соответственно (которые в дальнейшем предполагаются действительными); U - интенсивность хаббардовского отталкивания; V - параметр, характеризующий межузельное электрон-электронное взаимодействие. Впоследствии будем измерять все энергетические переменные в единицах t, и t = 1. В обшем случае, t - U - V-гамильтониан (5.4) представляет собой разновидность модели Шубина-Вонсовского [408, 409], которая дополнительно включает спин-орбитальную связь Рашбы и расширенную *s*-волновую сверхпроводимость.

Гамильтониан (5.4) при U = V = 0 и $\Delta = 0$ был изучен в работе [366]. В частности, было показано, что в строго одномерной системе наряду с электронно-дырочной симметрией имеет место дополнительная, подобная симметрии инверсии времени. В результате такой гамильтониан относится к классу BDI. Это подразумевает более богатую картину топологических фаз по сравнению с популярной СП, относящейся к симметрийному классу D [241,242]. В частности, в BDI-проволоке помимо возникновения одиночного MCC или, другими словами, реализации на противоположных концах по одной MM (далее OMC - одиночное майорановское состояние), возможно образование двух MCC или двух MM на каждом конце (далее ДМС - двойное майорановское состояние). Подчеркнем, что, поскольку последующие вычисления включают случаи h = 0 и $h \neq 0$, аббревиатура ДМС означает как крамерсовские пары MM [360,361,410], так и невырожденный по энергии мод случай, соответственно.

Отмеченные особенности сохраняются при ненулевой интенсивности одноузельного сверхпроводящего спаривания, $\Delta \neq 0$, и U = V = 0. Чтобы показать это, обобщим некоторые аналитические результаты, полученные в работе [366]. Накладывая периодические граничные условия, гамильтониан (5.4) в k-пространстве в представлении Боголюбова-де-Женна (БдЖ) приобретает следующий вид:

$$\hat{H}(k) = \begin{pmatrix} \hat{A}(k) & \hat{B}(k) \\ \hat{B}^{+}(-k) & -\hat{A}^{T}(-k) \end{pmatrix},$$
(5.5)

где $\hat{A}(k) = \xi_k \hat{\sigma}_0 + h \hat{\sigma}_z + \alpha_k \hat{\sigma}_y$, $\hat{B}(k) = i \Delta_k \hat{\sigma}_y$, $\xi_k = -t \cos k - \mu$, $\alpha_k = \alpha \sin k$, $\Delta_k = \Delta + 2\Delta_1 \cos k$; $\hat{\sigma}_0$ - единичная матрица размерности 2×2 ; $\hat{\sigma}_{x,y,z}$ - матрицы Паули, действующие в спиновом подпространстве. Далее, в результате унитарного преобразования, $\hat{H}(k) \rightarrow \tilde{H}(k) = \hat{U}_S \hat{H}(k) \hat{U}_S^+$, где $\hat{U}_S = (\hat{\sigma}_0 \otimes \hat{\sigma}_x - i \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_x) / \sqrt{2}$, имеем

$$\tilde{\hat{H}}(k) = \begin{pmatrix} 0 & \hat{Q}(k) \\ \hat{Q}^T(-k) & 0 \end{pmatrix}, \ \hat{Q}(k) = \xi_k \hat{\sigma}_0 - h \hat{\sigma}_z - (\alpha_k + i\Delta_k) \hat{\sigma}_y.$$
(5.6)

Определим топологический инвариант (winding number) как

$$N_{BDI} = \frac{-i}{\pi} \int_{k=0}^{k=\pi} \frac{dz(k)}{z(k)}; \quad z(k) = \frac{\det \hat{Q}(k)}{|\det \hat{Q}(k)|}.$$
(5.7)


Рис. 5.3: Диаграмма топологических фаз сверхпроводящей проволоки класса BDI. Топологический инвариант N_{BDI} как функция химического потенциала и зеемановской энергии при $\Delta = -0.5$ (a) и $\Delta = -0.3$ (b). Другие параметры: $\Delta_1 = 0.2$, $\alpha = 1.5$. Числа на диаграмме являются значениями N_{BDI} . Штриховая линия соответствует магнитополевым зависимостям на рис. 5.12.

Топологические фазовые диаграммы (карты топологических фаз), представляющие зависимость инварианта N_{BDI} от химического потенциала μ и зеемановской энергии h, показаны на рисунке 5.3. Каждая область, расположенная между двумя граничными линиями, характеризуется индивидуальным значением топологического индекса, указанного на диаграмме, $N_{BDI} = 0$, ± 1 , ± 2 . Параметрическая область, где $N_{BDI} = 0$ ($N_{BDI} \neq 0$), соответствует топологически тривиальной (нетривиальной) фазе. В случае нетривиальной топологии абсолютное значение N_{BDI} указывает число майорановских связанных состояний в открытой СП. Соотношения между параметрами системы, являющиеся уравнениями граничных линий (см. сплошные линии на рис. 5.3), могут быть получены из условия наличия бесщелевых возбуждений в объемном энергетическом спектре. Уравнения этих кривых при $|\Delta| < 2|\Delta_1|$ (см. рис. 5.3b) имеют вид:

$$h_{1}^{2} = (t + \mu)^{2} + (\Delta + 2\Delta_{1})^{2},$$

$$h_{2}^{2} = (t - \mu)^{2} + (\Delta - 2\Delta_{1})^{2},$$

$$h_{3}^{2} = \operatorname{Re}\left[\left(\mu - \tilde{\Delta}\right)^{2} - \alpha^{2}\sin^{2}\phi\right].$$
(5.8)

где $\tilde{\Delta} = \Delta/2\Delta_1, \phi = \arccos(\tilde{\Delta})$. Тогда, N_{BDI} приобретает ненулевые значения, если

выполняются следующие условия:

$$N_{BDI} = \operatorname{sgn}(\Delta_{1}) \operatorname{при} |h_{2(1)}|, |h_{3}| < |h| < |h_{1(2)}|;$$

$$N_{BDI} = -\operatorname{sgn}(\Delta_{1}) \operatorname{прu} |h_{2(1)}| < |h| < |h_{1(2)}|, |h_{3}|;$$

$$N_{BDI} = 2 \cdot \operatorname{sgn}(\Delta_{1}) \operatorname{пpu} |h_{3}| < |h| < |h_{1}|, |h_{2}|.$$
(5.9)

Таким образом, в силу того, что имеет место универсальное соответствие между свойствами объемной системы (т.е. топологическим инвариантом) и краевыми состояниями в системе с открытими граничными условиями (т.н. bulk-boundary correspondence), то при $|\Delta| < 2|\Delta_1|$ реализуются ДМС (см. рис. 5.3b).

Если $|\Delta| \geq 2|\Delta_1|$, то топологические фазовые переходы определяются только выражениями $h_{1(2)}^2 = (t \pm \mu)^2 + (\Delta \pm 2\Delta_1)^2$. В этом случае топологический инвариант равен $N_{BDI} = -\text{sgn}(\Delta)$ при $|h_1| < |h| < |h_2|$ или $N_{BDI} = \text{sgn}(\Delta)$ при $|h_2| < |h| < |h_1|$. В переменных μ и h возникают две области параболической формы, изображенные на рис. 5.3а. Для простоты будем называть их "левая парабола" и "правая парабола".

Здесь необходимо отметить два аспекта. Во-первых, как следует из анализа [366], BDI класс симметрии реализуется только для строго одномерной системы. Если учитывать несколько электронных подзон, то система попадает в класс D. Во-вторых, условие $|\Delta| < 2|\Delta_1|$ для реализации ДМС эквивалентно наличию нодальных точек сверхпроводящего параметра порядка Δ_k . Это неравенство нарушается во взаимодействующей системе. В следующем пункте мы покажем, что подобные одночастичные возбуждения возникают даже при $|\Delta| > 2|\Delta_1|$, если $U, V \neq 0$.

Основным подходом, используемым далее для исследования топологических фаз в одномерной системе при наличии электронных корреляций, является метод DMRG. Этот инструмент весьма эффективен для исследования свойств низкоэнергетических многочастичных состояний одно- и квазиодномерных систем с учетом взаимодействий [401]. Процедура DMRG будет использоваться для изучения как исходного гамильтониана (5.4), так и эффективной модели в сильно коррелированном режиме. В последнем случае применение атомного представления позволяет увеличить скорость и точность расчетов DMRG.

Как для исходной, так и для эффективной моделей многочастичное гильбертово

пространство было разделено на сектора с четным и нечетным числом фермионов. В каждом секторе были рассчитаны квантовые состояния $|\Psi_{1,2}^{ev(od)}\rangle$ и соответствующие энергии $E_{1,2}^{ev(od)}$. Кроме того, знание многочастичной матрицы плотности позволяет исследовать поведение различных равновесных средних.

Для СП конечного размера индекс N_{BDI} может только приблизительно описать условия существования MCC. Удобный подход для анализа этих квазичастичных возбуждений в структуре конечной длины основан на расчете майорановской поляризации (МП). Эта величина была введена ранее в работах [337,338] как мера майорановского пространственного распределения одночастичной волновой функции. Мы будем рассматривать прямое обобщение МП для многочастичных состояний. Тогда эта характеристика определяется как

$$MP_j = \frac{\sum\limits_{f\sigma}' \left(w_{jf\sigma}^2 - z_{jf\sigma}^2\right)}{\sum\limits_{f\sigma}' \left(w_{jf\sigma}^2 + z_{jf\sigma}^2\right)}, \ j = 1, 2,$$

$$(5.10)$$

$$w_{jf\sigma} = \langle \Psi_j | \left(a_{f\sigma} + a_{f\sigma}^+ \right) | \Psi_0 \rangle, \ z_{jf\sigma} = \langle \Psi_j | \left(a_{f\sigma} - a_{f\sigma}^+ \right) | \Psi_0 \rangle, \tag{5.11}$$

где $|\Psi_0\rangle = |\Psi_1^{ev/od}\rangle$ - кет-вектор основного состояния в четном/нечетном секторе; $|\Psi_j\rangle = |\Psi_j^{od/ev}\rangle$ - кет-вектора первого (j = 1) и второго (j = 2) возбужденных многочастичных состояний из дуального сектора гильбертова пространства. Апостроф указывает на то, что суммирование по f выполняется для половины узлов СП. Видно, что значение MP_j определяет перекрытие пространственных распределений коэффициентов майорановского типа, $w_{if\sigma}$ и $z_{if\sigma}$.

В отсутствие кулоновских взаимодействий (U = V = 0) определение (5.10) совпадает с определением, введенным в работах [337,338]. Как мы упоминали выше, MP_j лишь частично согласуется с N_{BDI} в СП конечной длины. Однако, четкое соответствие получается, когда число узлов $N \to \infty$: $MP_j \to 0$ для объемного возбуждения, и $MP_j \to 1$ в случае МСС. Поэтому предполагается, что если $N \to \infty$, то появляются ОМС с $MP = MP_1 + MP_2 = 1$ в топологических фазах, характеризующихся $N_{BDI} = \pm 1$. ДМС реализуются при $MP = MP_1 + MP_2 = 2$ в фазе с $N_{BDI} = 2$. Наконец, если MP = 0, то имеет место топологически тривиальная фаза, где $N_{BDI} = 0$. В проволоке с конечной величиной N пространственное распределение конкретного возбуждения меняется непрерывно от объемного к краевому, особенно в окрестности границ между разными топологическими фазами. Следовательно, *MP* также плавно изменяется от 0 до 1. Для простоты мы будем предполагать, что MM образуются, если $MP_i > 0.8$.

Для взаимодействующих систем топологическая классификация может быть выполнена путем анализа спектра квантовой запутанности редуцированной матрицы плотности, $\mathcal{H} = -\ln Tr_{N/2}\rho$, где ρ - матрица плотности суперкластера [375, 391, 397]. Для рассматриваемой системы вырождение спектра запутанности, $d = d[\mathcal{H}]$, может быть одно-, двух- и четырехкратным. В пределе $N \to \infty$ соответствие между MP и dвыглядит следующим образом: $MP = 0 \leftrightarrow d = 1$; $MP = 1 \leftrightarrow d = 2$; $MP = 2 \leftrightarrow d = 4$. Эти соотношения актуальны и в сильно коррелированном режиме. Как и прежде, MPне имеет топологического происхождения. Тем не менее, это позволяет идентифицировать MM, а также их гибридизацию, учитывая тем самым краевые эффекты. Границы топологических фаз, полученные с использованием инварианта d и зависимости MPот длины проволоки при наличии кулоновских взаимодействий, будут представлены в разделе 5.4.3.

Второй подход, используемый в настоящей главе - это обобщенное приближение среднего поля. Технически он основан на преобразовании Боголюбова с введением четырехфермионных операторов и последующей перенормировкой uv-коэффициентов [411,412]. При таком подходе уравнения для этих коэффициентов преобразования становятся нелинейными, поскольку эффективная квадратичная форма гамильтониана зависит от параметров преобразования. Этот подход был использован для изучения СП класса D в статьях [333, 334]. Сравнение данного среднеполевого описания с результатами точной диагонализации (DMRG) для коротких (длинных) СП класса BDI показывает качественное согласие при $U \lesssim 1$, $V \lesssim 0.5$ и значительные различия в сильно коррелированном режиме. В обобщенном приближении среднего поля гамиль-

тониан СП (5.4) в представлении БдЖ имеет вид:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \cdot \mathbf{C}^{+} \cdot H \cdot \mathbf{C}, \qquad (5.12)$$
$$H = \begin{pmatrix} A_{\uparrow\uparrow} & A_{\uparrow\downarrow} & B_{\uparrow\uparrow} & B_{\uparrow\downarrow} \\ A_{\uparrow\downarrow}^{+} & A_{\downarrow\downarrow} & -B_{\uparrow\downarrow}^{T} & B_{\downarrow\downarrow} \\ -B_{\uparrow\uparrow}^{*} & -B_{\uparrow\downarrow}^{*} & -A_{\uparrow\uparrow}^{*} & -A_{\uparrow\downarrow}^{*} \\ B_{\uparrow\downarrow}^{+} & -B_{\downarrow\downarrow}^{*} & -A_{\uparrow\downarrow}^{T} & -A_{\downarrow\downarrow}^{*} \end{pmatrix}, \qquad (5.13)$$

где $\mathbf{C}^+ = \left(\mathbf{a}^+_{\uparrow}, \mathbf{a}^+_{\downarrow}, \mathbf{a}^T_{\uparrow}, \mathbf{a}^T_{\downarrow}\right), \, \mathbf{a}_{\sigma} = (a_{1\sigma}, \dots, a_{N\sigma})^T.$ Матрицы $A_{\sigma,\sigma'}, \, B_{\sigma,\sigma'}$ содержат следующие ненулевые элементы $(A_{\sigma\sigma} = A^+_{\sigma\sigma}, \, B_{\sigma\sigma} = -B^T_{\sigma\sigma})$:

$$(A_{\sigma\sigma})_{f,f} = -\mu - \sigma h + U\langle a_{f\bar{\sigma}}^{+} a_{f\bar{\sigma}} \rangle + V\left(\sum_{\sigma'} \langle a_{f-1,\sigma'}^{+} a_{f-1,\sigma'} \rangle + \langle a_{f+1,\sigma'}^{+} a_{f+1,\sigma'} \rangle \right),$$

$$(A_{\sigma\sigma})_{f+1,f} = -\frac{t}{2} - V\langle a_{f\sigma}^{+} a_{f+1,\sigma} \rangle, \quad (A_{\uparrow\downarrow})_{f,f} = -U\langle a_{f\downarrow}^{+} a_{f\uparrow} \rangle,$$

$$(A_{\uparrow\downarrow})_{f,f+1} = -\frac{\alpha}{2} - V\langle a_{f+1\downarrow}^{+} a_{f\uparrow} \rangle, \quad (A_{\uparrow\downarrow})_{f+1,f} = \frac{\alpha}{2} - V\langle a_{f\downarrow}^{+} a_{f+1\uparrow} \rangle, \quad (5.14)$$

$$(B_{\sigma\sigma})_{f+1,f} = -V\langle a_{f+1\sigma} a_{f\sigma} \rangle, \quad (B_{\uparrow\downarrow})_{f,f} = -\Delta^{*} + U\langle a_{f\downarrow} a_{f\uparrow} \rangle,$$

$$(B_{\uparrow\downarrow})_{f,f+1} = -\Delta_{1} + V\langle a_{f+1\downarrow} a_{f\uparrow} \rangle, \quad (B_{\uparrow\downarrow})_{f+1,f} = -\Delta_{1} - V\langle a_{f+1\uparrow} a_{f\downarrow} \rangle.$$

Из выражений (5.14) следует, что кулоновские взаимодействия *U*, *V* приводят как к ренормировкам уже имеющихся элементов, так и к появлению новых.

Собственные вектора $\mathbf{Y}_{j} = \left(\mathbf{u}_{j\uparrow}, \mathbf{u}_{j\downarrow}, \mathbf{v}_{j\uparrow}^{*}, \mathbf{v}_{j\downarrow}^{*}\right)^{T}$ БдЖ гамильтониана (5.13) представляют собой электрон- и дырочноподобные волновые функции состояний с энергиями ε_{j} . Средние в выражениях (5.14) нелинейно связаны с искомыми коэффициентами преобразования Боголюбова,

$$\langle a_{f\sigma}^{+} a_{f'\sigma'} \rangle = \sum_{j=1}^{2N} \left[u_{jf\sigma} u_{jf'\sigma'}^{*} f\left(\frac{\varepsilon_{j}}{T}\right) + v_{jf\sigma} v_{jf'\sigma'}^{*} \left(1 - f\left(\frac{\varepsilon_{j}}{T}\right)\right) \right],$$
(5.15)
$$\langle a_{f\sigma}^{+} a_{f'\sigma'}^{+} \rangle = \sum_{j=1}^{2N} \left[u_{jf\sigma} v_{jf'\sigma'} f\left(\frac{\varepsilon_{j}}{T}\right) + v_{jf\sigma} u_{jf'\sigma'} \left(1 - f\left(\frac{\varepsilon_{j}}{T}\right)\right) \right],$$

где f(x) - функция распределения Ферми-Дирака. Анализ МП в среднеполевом приближении можно выполнить, используя соотношения между операторами боголюбовских возбуждений и самосопряженными операторами Майорана, $\gamma_{Af\sigma} = \frac{1}{2} \left(a_{f\sigma} + a_{f\sigma}^+ \right)$, $\gamma_{Bf\sigma} = \frac{i}{2} \left(a_{f\sigma} - a_{f\sigma}^+ \right),$

$$\alpha_j = \frac{1}{2} \sum_{f=1;\sigma}^{N} \left(w_{jf\sigma} \gamma_{Af\sigma} + z_{jf\sigma} \gamma_{Bf\sigma} \right).$$
(5.16)

Для последующего численного моделирования зафиксируем некоторые параметры BDI-нанопроволоки: N = 100, $\varepsilon_0 = 0$, $\Delta = -0.5$, $\Delta_1 = 0.2$, $\alpha = 1.5$. Для исходной (эффективной) модели число удерживаемых базисных состояний равно 64 (27). В результате ошибка отсечения процедуры DMRG определяется неравенством $err \leq 10^{-5}$.

5.3.2 Особенности майорановских возбуждений в проволоке с учетом хаббардовского отталкивания

Перейдем к численным результатам, полученным методом tUV-DMRG (алгоритм DMRG для t - U - V-модели), для анализа влияния одноузельного кулоновского взаимодействия на топологические фазы в СП класса BDI (5.4). Как отмечалось выше, процедура DMRG уже использовался ранее для изучения этой проблемы в СП класса D [397]. В частности, рассматривая левую параболу, внутри которой реализуются ОМС при малых U, было показано, что с ростом U ее правая граница смещается вправо, а минимум сдвигается вправо и вниз. Левая граница остается примерно на том же месте из-за низкой концентрации электронов при больших отрицательных μ. Другими словами, нетривиальная фаза возникает при более низких магнитных полях и более высоких значениях химического потенциала по сравнению со случаем U = 0. Это поведение может быть качественно объяснено эффективным усилением зеемановского расщепления и подавлением одноузельного сверхпроводящего спаривания. Такие особенности отчетливо проявляются уже в рамках обобщенного приближения среднего поля (см. выражения для $(A_{\sigma\sigma})_{f,f}$ и $(B_{\uparrow\downarrow})_{f,f}$ в (5.14)). Кроме того, между областями с ОМС появляется разрыв, где фаза является топологически тривиальной. Наконец, начиная с режима промежуточных электронных корреляций U > 2, левая и правая параболы располагаются в нижней и верхней хаббардовских подзонах, соответственно.

Аналогичные эффекты возникают в СП класса BDI. Однако, согласно соотношениям (5.8), (5.9), если Δ , $\Delta_1 \neq 0$, то фазовая диаграмма становится асимметричной (при U = 0 в системе класса D основания обеих парабол находятся на уровне $h = \Delta$). Следовательно, когда $\Delta < 0$, $\Delta_1 > 0$ и $|\Delta| < 2|\Delta_1|$, область с ДМС в параметрическом пространстве $\mu - h$ находится вокруг левой параболы. В свою очередь, его ширина определяется величиной α .



Рис. 5.4: Индуцирование двойных майорановских мод сильным хаббардовским отталкиванием. (а) Зависимость первых двух энергий возбуждения от химического потенциала. (b,c) Зависимость среднего значения локального аномального коррелятора и майорановской поляризации от U, соответственно. (d) Два графика в левом (правом) столбце представляют пространственные распределения плотности вероятности первых двух возбуждений, PD_1 и PD_2 , при $\mu = 0.5$, U = 3 (U = 7). Параметры: h = 0.1, V = 0.

Из обсуждавшихся выше результатов видно, что управление соотношением между Δ и Δ_1 приводит к различным диаграммам топологических фаз. В частности, ДМС исчезают при увеличении Δ . Напротив, одноузельное кулоновское взаимодействие должно подавлять этот тип сверхпроводящего спаривания. Следовательно, можно ожидать восстановление фазы с ДМС даже при $|\Delta| > 2|\Delta_1|$. Это предположение подтверждается численными расчетами. На рисунке 5.4а этот эффект проявляется в зависимости двух наименьших энергий возбуждения, $E_{1,2}$, от химического потенциала в слабом магнитном поле, h = 0.1. Когда U = 0 и $\mu \approx -1$, система находится в параметрической области дна левой параболы и близка к топологическому фазовому переходу (см. рис. 5.3а). Это подтверждается данными на рис. 5.4a, где энергии $E_{1,2}$ расщепляются при $\mu \approx -1$, однако E_1 все еще отлична от нуля (см. кривые с синими и красными кружками-маркерами). Когда U увеличивается, топологические фазы с ОМС могут реализовываться при более слабых магнитных полях, как обсуждалось выше. В результате $E_1 \approx 0$ и $E_2 \neq 0$ при $\mu \approx -0.5 - 0.2$ для U = 3 (см. синие и красные кривые с крестиками-маркерами). Корме того, фаза с ДМС появляется слева и справа от этой области, где и E_1 , и E_2 приблизительно равны нулю, несмотря на то, что формально $|\Delta| > 2|\Delta_1|$.

Индуцирование ДМС при сильном U и $|\Delta| > 2|\Delta_1|$ может быть качественно объяснено значительным подавлением эффективного спаривания на узле, что отчетливо видно по поведению соответствующего среднего аномального коррелятора, $\langle a_{\uparrow}^+ a_{\downarrow}^+ \rangle = \sum_f \langle a_{f\uparrow}^+ a_{f\downarrow}^+ \rangle / N$. Его зависимость от U показана на рис. 5.4b, из которой следует двухкратное уменьшение абсолютного значения $\langle a_{\uparrow}^+ a_{\downarrow}^+ \rangle$ уже при U = 2.

Краевой характер обоих возбуждений в левой и правой ДМС-областях на рис. 5.4а подтверждается значениями MP, равными 1 для $\mu = -1$ и $\mu = 0.5$ (см. кривые в точке U = 3 на рис. 5.4с). Важно отметить, что эти состояния локализованы на концах СП ($MP_i \gtrsim 0.9$) только при $U \gtrsim 1$, где среднеполевой подход становится неприменимым [333, 397]. Примечательно, что ДМС в левой области выживают даже при высокой интенсивности хаббардовского отталкивания. Напротив, правые ДМС превращаются в ОМС, когда MP_2 значительно отклоняется от 1 при U > 5 (см. красную сплошную кривую на рис. 5.4с), что можно объяснить продолжающимся движением области с ОМС вправо на фазовой диаграмме. Одновременно с этим между хаббардовскими подзонами увеличивается щель при половинном заполнении, которая постепенно "обрезает" область правых ДМС вблизи $\mu = 1.5$. Отметим, что индуцирование ДМС за счет многочастичных взаимодействий также анализировалось для квазиодномерной СП класса DIII с помощью DMRG и СП класса BDI на основе приближения Хартри-Фока [370].

Чтобы нагляднее показать переход от фазы с ДМС к фазе с ОМС, а также продемонстрировать прямую связь между МП и плотностью вероятности возбуждений, PD_j (j = 1, 2), обратимся к графикам на рис. 5.4d, где представлены зависимости $PD_j(f)$ (где f - номер узла). В общем случае $PD_j(f)$ можно выразить через коэффициенты Боголюбова следующим образом:

$$PD_{j}(f) = \sum_{\sigma} \left(\mid u_{jf\sigma} \mid^{2} + \mid v_{jf\sigma} \mid^{2} \right), \qquad (5.17)$$

где $u_{jf\sigma} = (w_{jf\sigma} + z_{jf\sigma})/2$, $v_{jf\sigma} = (w_{jf\sigma} - z_{jf\sigma})/2$. В свою очередь, майорановские коэффициенты $w_{jf\sigma}$, $z_{jf\sigma}$ определяются формулами (5.11). Левый столбец на рис. 5.4d соответствует случаю $\mu = 0.5$, U = 3. В этом случае имеется два МСС (см. верхнюю синюю и нижнюю красную зависимости). Правый столбец описывает точку $\mu = 0.5$, U = 7, где второе состояние становится объемным (см. нижнее распределение, изображенное красным цветом).

Так как при $h \neq 0$ крамерсовское вырождение отсутствует, то второе состояние в ДМС сильнее подвержено влиянию возрастающего одноузельного отталкивания U, приводящего к уменьшению щели в спектре возбуждений открытой СП. Следовательно, ожидается, что при достаточно высоких магнитных полях ДМС могут быть преобразованы в ОМС. Описанная картина показана на рисунке 5.5. При U = 3 синие и красные кривые с кружками-маркерами отвечают зависимостям $E_1(h)$ и $E_2(h)$, соответственно. При $h \approx 0.6$ возникает топологический фазовый переход. Фаза с двумя (одним) МСС реализуется слева (справа) от этой точки. Если интенсивность отталкивания на узле возрастает до U = 10, то фаза с ОМС при $h \gtrsim 0.6$ полностью подавляется (см. синие и красные кривые с крестиками-маркерами). В то же время, в диапазоне магнитных полей $0.55 \leq h \leq 0.6$ ДМС преобразуется в ОМС, что также подтверждается расчетами величины MP (см. вставку на рис. 5.5).

Определение МП (5.10) характеризует перекрытие волновых функций майорановских одночастичных возбуждений и не дает информации о вкладе таких состояний в



Рис. 5.5: Изменение количества майорановских мод при различных интенсивностях одноузельного кулоновского взаимодействия. Зависимость первых двух энергий возбуждения от магнитного поля при U = 3 (кружки) и U = 10 (крестики). На вставке: $MP_{1,2}$ как функция h при U = 10. Параметры: $\mu = -1.4$, V = 0.

общую структуру переходов между вырожденными многочастичными состояниями из секторов с разной четностью. Последнее можно оценить по норме *j*-го возбуждения, *norm_j*. Если она стремится к 1, то МСС образует четко определенное квазичастичное возбуждение, которое подходит для целей квантовых вычислений. В противном случае, когда *norm_j* < 1, роль квазичастичной диссипации возрастает.

Чтобы глубже понять влияние сильного одноузельного кулоновского взаимодействия на возбуждения майорановского типа, рассмотрим поведение их норм, $norm_j = \sum_{f} PD_j(f)$. Случаи слабых и сильных магнитных полей изображены на рисунках 5.6a и 5.6b, соответственно. Как было упомянуто выше, ДМС реализуются при h = 0.1, $\mu = -1$ и $U \ge 1$. В свою очередь, их нормы резко уменьшаются при увеличении U(см. красные и синие сплошные кривые на рис. 5.6a), что указывает на необходимость



Рис. 5.6: Влияние хаббардовского отталкивания и средних спин-зависящих концентраций на норму майорановских одночастичных возбуждений при слабом (a) и сильном (b) магнитных полях, h = 0.1 и h = 1, соответственно; $\mu = -1$. Остальные параметры такие же, как и на рис. 5.4.

учитывать слагаемые с тремя и более фермиевскими операторами вторичного квантования для правильного описания майорановских возбуждений [397]. Также следует отметить, что небольшое превышение 1 обеими нормами связано с недостаточным количеством используемых базисных состояний M_0 при выполнении процедуры DMRG. Очевидно, что существенным фактором, влияющим на нормы при больших U, являются средние спин-зависимые электронные концентрации, $n_{\sigma} = \sum_{f} \langle a_{f\sigma}^{+} a_{f\sigma} \rangle / N$. Зависимость этих величин от параметра U также показана на рис. 5.6а (см. красную и синюю кривые с кружками-маркерами). Видно, что нормы значительно уменьшаются, поскольку n_{\uparrow} и n_{\downarrow} являются соизмеримыми величинами.

Влияние локальных зарядовых корреляций на майорановские возбуждения становится значительно слабее в сильных магнитных полях. Соответствующий случай изображен на рис. 5.6b. Для выбранных параметров, h = 1 и $\mu = -1$ реализуются ОМС. В этой ситуации СП находится в спин-поляризованном режиме, т.к. разница между n_{\uparrow} и n_{\downarrow} становится значительной (см. красную и синюю кривые с кружкамимаркерами). По мере возрастания U средняя концентрация неосновных носителей, n_{\downarrow} уменьшается быстрее, чем средняя концентрация основных носителей, n_{\uparrow} , что приводит к $n_{\uparrow}/n_{\downarrow} \approx 10$ при U = 9. В результате даже при больших значениях одноузельного отталкивания отклонение нормы составляет около 10% (см. синюю сплошную кривую). Установленное соответствие между *norm_j* и n_{σ} может быть полезно для экспериментального анализа свойств MCC в квантовых проволоках со взаимодействиями.

5.4 Фазы топологической сверхпроводимости в эффективной модели проволоки класса BDI

5.4.1 Эффективный гамильтониан сверхпроводящей проволоки класса BDI

При выполнении DMRG расчетов диагонализация больших разреженных матриц выполняется по алгоритму Ланцоша. Его сходимость значительно ухудшается в сильно коррелированном режиме, U > 3, что становится особенно заметным при $U \sim 10$, $V \sim$ 1. Причина этого - появление большого количества ненулевых матричных элементов. Такой эффект качественно наблюдается уже в среднеполевом приближении (см. новые элементы $(A_{\uparrow\downarrow})_{f,f}$ и $(B_{\sigma\sigma})_{f+1,f}$ в (5.14)) [333,334]. Чтобы преодолеть это препятствие, обратимся к рассмотрению эффективной модели на основе атомного представления.

Вторым преимуществом расширения процедуры DMRG на случай эффективного сильно коррелированного гамильтониана является значительное увеличение скорости вычислений. Это становится возможным, поскольку все состояния с двумя электронами на одном узле оказываются отынтегрированными теоретически с помощью техники проекционных операторов. В результате алгоритм DMRG для получающейся модели работает быстрее по сравнению с алгоритмом для гамильтониана (5.4), поскольку число используемых собственных состояний уменьшается с 4^{N_0} до 3^{N_0} , где N_0 - количество узлов в кластере *L*. Кроме того, самый большой размер матриц при соответствующих вычислениях уменьшается с $4^{2(N_0+1)}$ до $3^{2(N_0+1)}$.

Введем операторы Хаббарда

$$X_f^{pq} = |f, p\rangle \langle f, q|, \tag{5.18}$$

где индексы $p, q = 0; \sigma; 2$ описывают квантовые состояния на узле f [125]. Используя соотношение $a_{f\sigma} = X_f^{0\sigma} + \eta_{\sigma} X_f^{\bar{\sigma}2}$, гамильтониан (5.4) в атомном представлении принимает форму

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + H' + H_V. (5.19)$$

В формуле (5.19) первое слагаемое есть одноузельный гамильтониан,

$$H_0 = \sum_{f\sigma} \xi_{\sigma} X_f^{\sigma\sigma} + \sum_f (2\xi + U) X_f^{22}.$$
 (5.20)

Члены H_1, H_2 описывают процессы в нижней и верхней хаббардовских подзонах, соответственно,

$$H_{1} = -\frac{t}{2} \sum_{f\sigma} \left(X_{f}^{\sigma 0} X_{f+1}^{0\sigma} + X_{f+1}^{\sigma 0} X_{f}^{0\sigma} \right) - \frac{\alpha}{2} \sum_{f\sigma} \eta_{\sigma} \left(X_{f}^{\sigma 0} X_{f+1}^{0\bar{\sigma}} + X_{f+1}^{\bar{\sigma} 0} X_{f}^{0\sigma} \right) + (5.21) + \Delta_{1} \sum_{f} \left(X_{f}^{0\uparrow} X_{f+1}^{0\downarrow} + X_{f+1}^{0\uparrow} X_{f}^{0\downarrow} \right) + h.c.,$$

$$H_{2} = -\frac{t}{2} \sum_{f\sigma} \left(X_{f}^{2\bar{\sigma}} X_{f+1}^{\bar{\sigma}2} + X_{f+1}^{2\bar{\sigma}} X_{f}^{\bar{\sigma}2} \right) - \frac{\alpha}{2} \sum_{f\sigma} \eta_{\bar{\sigma}} \left(X_{f}^{2\bar{\sigma}} X_{f+1}^{\sigma2} + X_{f+1}^{2\sigma} X_{f}^{\bar{\sigma}2} \right) - (5.22)$$
$$-\Delta_{1} \sum_{f} \left(X_{f}^{\downarrow 2} X_{f+1}^{\uparrow 2} + X_{f+1}^{\downarrow 2} X_{f}^{\uparrow 2} \right) + h.c.$$

Взаимодействие между подзонами описывается гамильтонианом Н',

$$H' = -\frac{t}{2} \sum_{f\sigma} \eta_{\sigma} \left(X_{f}^{\sigma 0} X_{f+1}^{\bar{\sigma} 2} + X_{f}^{2\bar{\sigma}} X_{f+1}^{0\sigma} + X_{f+1}^{2\bar{\sigma}} X_{f}^{0\sigma} + X_{f+1}^{\sigma 0} X_{f}^{\bar{\sigma} 2} \right) - \frac{\alpha}{2} \sum_{f\sigma} \left(-X_{f}^{\sigma 0} X_{f+1}^{\sigma 2} + X_{f}^{2\sigma} X_{f+1}^{0\sigma} - X_{f+1}^{2\sigma} X_{f}^{0\sigma} + X_{f+1}^{\sigma 0} X_{f}^{\sigma 2} \right) +$$

$$(5.23)$$

+
$$\left\{ -\Delta \sum_{f} X_{f}^{02} + \Delta_{1} \sum_{f} \left(-X_{f}^{0\uparrow} X_{f+1}^{\uparrow 2} - X_{f+1}^{0\uparrow} X_{f}^{\uparrow 2} + X_{f}^{\downarrow 2} X_{f+1}^{0\downarrow} + X_{f+1}^{\downarrow 2} X_{f}^{0\downarrow} \right) \right\} + \{h.c.\}$$

Последнее слагаемое в (5.19) характеризует межузельное кулоновское взаимодействие,

$$H_V = V \sum_f n_f n_{f+1},$$
 (5.24)

где $n_f = X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow} + 2X_f^{22}.$

Применим операторную форму теории возмущения [413], когда выполняется неравенство $U \gg t$, α , Δ , Δ_1 . Тогда оператор, который проецирует гамильтониан типа Шубина-Вонсовского (t - U - V-модель) (5.19) на подпространство, не содержащее состояний с двумя электронами на узле, имеет вид:

$$P = \prod_{f} \left(X_f^{00} + X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow} \right).$$
(5.25)

Наличие переходов между хаббардовскими подзонами приводит к появлению ряда взаимодействий с параметрами малости t/U, α/U , Δ/U , Δ_1/U . Во втором порядке по этим параметрам эффективный гамильтониан имеет следующий вид [22,23]:

$$H_{t-J_{\alpha}-V} = PH_{0}P + H_{1} - \frac{1}{2} \Big(PH' \cdot (H_{0} - KH_{0}K)^{-1} \cdot H'P + h.c. \Big) + H_{V} \approx \sum_{f\sigma} \xi_{\sigma} X_{f}^{\sigma\sigma} - \frac{\Delta^{2}}{U} \sum_{f} X_{f}^{00} + H_{1} + H_{int} + H_{V},$$
(5.26)

где K - оператор эрмитова сопряжения. Как видно, формула (5.26) не содержит трехцентровых слагаемых, которыми мы будем пренебрегать при численных расчетах.

В итоговом выражении (5.26) слагаемое H_{int} , описывающее двухцентровые взаимодействия в нижней хаббардовской подзоне, записывается как

$$H_{int} = \frac{t^2}{U} \sum_{f\sigma} \left(\mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+1} - \frac{1}{4} n_f n_{f+1} \right) -$$

$$- \frac{\alpha^2}{U} \sum_{f} \left[\frac{1}{2} \left(S_f^+ S_{f+1}^+ + S_f^- S_{f+1}^- \right) + S_f^z S_{f+1}^z + \frac{1}{4} n_f n_{f+1} \right] -$$

$$- \frac{t\alpha}{U} \sum_{f\sigma} \left[\left(S_f^+ + S_f^- \right) S_{f+1}^z - S_f^z \left(S_{f+1}^+ + S_{f+1}^- \right) \right] -$$

$$- \frac{t\Delta}{U} \sum_{f\sigma} \left(X_f^{0\downarrow} X_{f+1}^{0\uparrow} - X_f^{0\uparrow} X_{f+1}^{0\downarrow} + h.c. \right) - \frac{\alpha\Delta}{U} \sum_{f\sigma} \left(X_f^{0\sigma} X_{f+1}^{0\sigma} + h.c. \right).$$
(5.27)

Слагаемые в H_{int} пропорциональные t^2/U характеризуют кинетическое антиферромагнитное обменное взаимодействие [414,415]. Слагаемые с множителем α^2/U определяют взаимодействие между электронами на соседних узлах с одинаковой проекцией спинового момента, в результате которого оба электрона изменяют свои проекции на противоположные. Для взаимодействий с параметром $\sim t\alpha/U$ проекция спинового момента изменяется только у одного электрона из пары на соседних узлах. Слагаемое с параметром $\sim t\Delta/U$ описывает спин-синглетные сверхпроводящие спаривания электронов на ближайших узлах, что соответствует симметрии сверхпроводящего параметра порядка в исходном гамильтониане (5.19). В сильно коррелированном режиме триплетные спаривания с амплитудой ~ $\alpha \Delta/U$ появляются явным образом за счет спин-орбитального взаимодействия.

Естественным образом получается, что слагаемые пропорциональные Δ входят в эффективный гамильтониан (5.26) только с отношением ~ Δ/U и приобретают малые значения. Таким образом, сверхпроводимость определяется синглетными по спину спариваниями между ближайшими узлами, относящимися к расширенному s-типу симметрии, с параметром Δ_1 (см. слагаемое H_1 (5.21)). В пределе $U \to \infty$ гамильтониан (5.26) сводится к *t*-модели,

$$H_t = \sum_{f\sigma} \xi_{\sigma} X_f^{\sigma\sigma} + H_1 + H_V.$$
(5.28)

Очевидно, что в этом пределе одноузельное сверхпроводящее спаривание полностью подавляется.

Таким образом, использование эффективных $t - J_{\alpha} - V$ - и t-моделей позволяет значительно ускорить численные расчеты в рамках tJV- и t-DMRG алгоритмов, соответственно, при больших величинах хаббардовского отталкивания. В этих случаях коэффициенты $\omega_{jf\sigma}$ и $z_{jf\sigma}$, необходимые для вычисления МП, определяются аналогично (5.11) с использованием операторов Хаббарда,

$$w_{jf\sigma} = \langle \Psi_j | \left(X_f^{0\sigma} + X_f^{\sigma 0} \right) | \Psi_0 \rangle, \ z_{jf\sigma} = \langle \Psi_j | \left(X_f^{0\sigma} - X_f^{\sigma 0} \right) | \Psi_0 \rangle, \ j = 1, 2.$$
(5.29)

5.4.2 Сравнение результатов *tUV*- и *tJV*-DMRG процедур

Чтобы показать соответствие между результатами, получаемыми с помощью метода DMRG для исходной t - U - V-модели (tUV-DMRG) и tJV-DMRG, обратимся к зависимостям энергий возбуждения $E_{1,2}$ от химического потенциала, которые показаны на рисунке 5.7. Заметим, что интенсивность одноузельного кулоновского взаимодействия выбрана достаточно высокой, U = 10, чтобы обеспечить достаточность квадратичных членов ряда теории возмущения при построении эффективной модели (5.26).

В отсутствие межузельных кулоновских корреляций поведение энергий возбуждения на рис. 5.7а, полученных на основе алгоритма tUV-DMRG при U = 10 (см. синие



Рис. 5.7: Сравнение результатов DMRG для исходной (t - U - V) и эффективной $(t - J_{\alpha} - V)$ моделей, изображенных сплошными и штриховыми кривыми, соответственно. Зависимости двух первых энергий возбуждения от химического потенциала при U = 10, V = 0 (a) и U = 10, V = 0.5 (b). На вставках: майорановские поляризации MP_1 и MP_2 как функции μ , показанные синими и красными кривыми, соответственно. Параметры: h = 0.1.

и красные сплошные кривые), сохраняют особенности, найденные при U = 3 на рис. 5.4а. В частности, имеются левая и правая области с ДМС (где $E_{1,2} \approx 0$), между ними располагается область с ОМС (где $E_1 \approx 0$, $E_2 \neq 0$). Последняя реализуется при $\mu \approx 0$ — 1.2. Обе энергии резко возрастают при $\mu \approx 1.5$ вследствие возникновения моттхаббардовской щели. Наличие ДМС и ОМС подтверждается зависимостью $MP_{1,2}$ от μ (см. синие и красные сплошные кривые на вставке к рис. 5.7а). Данные tJV-DMRG демонстрируют качественно схожее поведение при низких значениях μ , $\mu < 0$ (см. синие и красные штриховые кривые на рис. 5.7а). Различия усиливаются при более высоких концентрациях. Здесь расщепление E_1 и E_2 уменьшается и сопровождается колебаниями энергий возбуждения. Следовательно, область с ОМС становится короче по сравнению с результатами tUV-DMRG, что подтверждается значениями $MP_1 < 0.8$ при $\mu \approx 0 - 1$ (см. синюю штриховую кривую на вставке рис. 5.7а). Наконец, область с ДМС в окрестности $\mu = 1.5$ также уменьшается в размерах.

Из данных на рисунке 5.7b вытекает, что упомянутое частичное согласие между данными *tUV*- и *tJV*-DMRG сохраняется с учетом межузельных корреляций, *V*. В свою очередь, есть два эффекта, к которым приводят ненулевые значения *V*. Вопервых, потолок нижней хаббардовой подзоны смещается вправо по μ . Другими словами, межузельное отталкивание эффективно увеличивают энергию частицы на узле (см. выражение для $(A_{\sigma\sigma})_{f,f}$ в (5.14)). Следовательно, нужно поднять уровень μ , чтобы достичь той же величины концентрации по сравнению с ситуацией V = 0. Во-вторых, ненулевое взаимодействие V уменьшает щель в спектре возбуждения намного сильнее, чем хаббардовское отталкивание U, хотя $V \ll U$ [392]. В результате, tUV-DMRG расчеты обнаруживают значительные осцилляции $E_{1,2}$ и, как следствие, ОМС исчезает. Это подтверждается поведением MP_1 при $\mu \approx 0.25 - 1.5$ (см. синюю сплошную кривую на вставке рис. 5.7b). Тем не менее, ОМС выживают в диапазоне $\mu \approx 1.5 - 2.25$. Левая и правая области с ДМС приблизительно сохраняют свою ширину.

Расчеты на основе алгоритма tJV-DMRG свидетельствуют об уменьшении размеров области с OMC, а также области с ДМС, находящейся правее. Таким образом, как уже было отмечено выше, различия между tUV- и tJV-DMRG при $V \neq 0$ также усиливаются с ростом концентрации электронов. Наблюдаемые различия результатов двух схем DMRG, как предполагается, связаны с пренебрежением трехцентровыми слагаемыми в эффективном гамильтониане при реализации алгоритма tJV-DMRG, поскольку влияние таких процессов усиливается именно при высоких электронных плотностях.

5.4.3 Диаграмма топологических фаз сверхпроводящей проволоки в режиме сильных электронных корреляций

Поскольку алгоритм tJV-DMRG также дает и ОМС, и ДМС, перейдем к более подробному анализу топологических фаз в $t - J_{\alpha} - V$ -модели. На рисунке 5.8 представлены цветные карты $MP_{1,2}(\mu, h)$. Начиная с диаграммы N_{BDI} , найденной в пределе отсутствия взаимодействия и показанной на рис. 5.8е, можно проследить модификацию топологических фаз в нижней хаббардовской подзоне (левая парабола на рис. 5.8е), которая вызвана сильными электронными корреляциями. Если межузельные взаимодействия не учитываются, то правая граница параболы определяется мотт-хаббардовской



Рис. 5.8: Зависимости $MP_{1,2}$ от химического потенциала и энергии зеемановского расщепления при U = 10, V = 0 (a,b) и U = 10, V = 0.5 (c,d), вычисленные методом DMRG для $t - J_{\alpha} - V$ -модели. Штриховые кривые изображают границы между разными топологическими фазами. Точками 'A' - 'F' отмечены параметры, для которых построены рисунки 5.9a-5.9c. (e,f) Диаграммы для проволоки в отсутствие зарядовых корреляций и в сильно коррелированном режиме, соответственно. Карта (f) получена при U = 10, V = 0 на основе зависимостей майорановских поляризации от длины системы.

щелью при $\mu \approx 1.5$ (см. рис. 5.8а и 5.8b). Внутри параболы ОМС в значительной степени подавлены, сохраняясь только у ее правого края. Норма ОМС внутри этой области, имеющей форму полосы на рис. 5.8а, близка к 1. С учетом вышеописанного сравнения результатов tUV- и tJV-DMRG можно ожидать, что эта область должна быть существенно шире для t - U - V-модели. Ниже параболы реализуется топологическая фаза с ДМС, где $MP_{1,2} \rightarrow 1$. Заметим, что такое поведение аналогично ситуации, показанной на рис. 5.3b, где, напротив, $|\Delta| < 2|\Delta_1|$. Нормы ДМС, индуцированных сильными одноузельными зарядовыми корреляциями, варьируются от 0.5 до 0.8.

Когда межузельные электрон-электронные взаимодействия включены и $V \ll U$, упомянутые эффекты сохраняются (см. рис. 5.8с и 5.8d). При этом парабола дополнительно вытягивается вправо (ее правый край не показан целиком на рис. 5.8с и 5.8d), а ее дно опускается ниже. Полоса с ОМС становится уже, а также уменьшается размер области с ДМС под параболой.

Для нахождения границ между топологическими фазами, которые изображены питриховыми кривыми на рис. 5.8, были проанализированы две характеристики: кратность вырождения спектра запутанности, d, и зависимость МП от длины проволоки, $MP_{1,2}(N)$. Их поведение демонстрирует хорошее согласие друг с другом. Штриховые кривые делят области с разными значениями d (для расчета d мы взяли N = 1400), где $MP_{1,2}(N)$ также ведут себя по-разному. Чтобы показать это, рассмотрим три пары точек в (μ ,h)-пространстве (см. рис. 5.8а). МП как функции длины системы для каждой пары точек показаны на рисунках 5.9а-5.9с, соответственно. Видно, что точки 'A', 'C' и 'E' находятся в тривиальной фазе с d = 1. В свою очередь, точки 'B' и 'D' находятся в топологически нетривиальной фазе с d = 4, где реализуются ДМС. Наконец, точка 'F' находится в другой топологически нетривиальной фазе с d = 2, где возникают ОМС.

Таким образом, зависимости МП от длины структуры могут быть использованы для приближенного получения фазовой диаграммы в случае бесконечно длинной структуры. Как обсуждалось в параграфе 5.3.1, если $N \to \infty$ и U = V = 0, то между топологическим инвариантом N_{BDI} и $MP_1 + MP_2$ существует четкое соответствие, позволяющее непосредственно сравнивать фазовые диаграммы системы без взаимо-



Рис. 5.9: Зависимость майорановских поляризаций двух возбуждений с наименьшей энергией от длины проволоки. (a) $MP_{1,2}(N)$ соответствуют точкам 'A' (кружки) и 'B' (крестики) на рис. 5.8a; (b) $MP_{1,2}(N)$ соответствуют точкам 'C' (кружки) и 'D' (крестики) на рис. 5.8a; (c) $MP_{1,2}(N)$ соответствуют точкам 'E' (кружки) и 'F' (крестики) на рис. 5.8a; (d) $MP_{1,2}(N)$ соответствуют белой точке на рис. 5.10.

действий и в ситуации сильных зарядовых корреляций. Эти случаи приведены на рис. 5.8е и 5.8f, соответственно. Здесь отчетливо видна значительная трансформация левой параболы с ОМС внутри и индуцирование области с ДМС хаббардовским отталкиванием.

Далее полезно рассмотреть предел $U \to \infty$. Карты $MP_{1,2}$ в переменных μ и h, рассчитанные при помощи алгоритма t-DMRG, показаны на рисунках 5.10a и 5.10b, соответственно. Как упоминалось ранее, результаты не зависят от Δ , т.к. $\Delta/U \to 0$. Можно видеть, что ОМС, выживавшие при высоком, но конечном U вблизи правой границы параболы (эта область характеризуется сильной спиновой поляризацией элек-



Рис. 5.10: Карты $MP_1(\mu, h)$ (a) и $MP_2(\mu, h)$ (b), полученные методом DMRG для *t*-модели $(N \to \infty)$ при V = 0. В данном предельном случае границы между фазами отсутствуют, поскольку d = 1 для всех h и μ , и реализуется только топологически тривиальная фаза. Черными и белыми точками отмечены параметры, для которых на рис. 5.11a-5.11d построены пространственные распределения модулей майорановских коэффициентов.

тронов), разрушаются при $U \to \infty$. В свою очередь, ДМС в параметрической области под параболой также подавляются, поскольку MP_2 значительно отклоняется от 1. Тем не менее, одиночные краевые состояния сохраняются в этой области, как показано на рис. 5.10а. Нормы таких состояний превышают значение 0.7 в широком диапазоне параметров.

Обозначим параметры h = 0.4, $\mu = -1.5$, соответствующие высокому значению MP_2 , черной точкой на рис. 5.10. Для этих параметров пространственные распределения модулей майорановских коэффициентов первых двух возбуждений, $|\omega_{jf\sigma}|$ и $|z_{jf\sigma}|$ (j = 1, 2), показаны на рисунках 5.11a и 5.11b. Значения МП и нормы составляют $MP_1 \approx 0.82$, $MP_2 \approx 0.8$ и $norm_1 \approx 0.87$, $norm_2 \approx 0.52$, соответственно. Для сравнения те же пространственные распределения при h = 0.63, $\mu = -1.5$ (см. белую точку на рис. 5.10) представлены на рис. 5.11c и 5.11d. В этой ситуации значения МП и нормы равны $MP_1 \approx 0.94$, $MP_2 \approx 0.54$ и $norm_1 \approx 0.92$, $norm_2 \approx 0.47$, соответственно.

Из рис. 5.11 следует, что второе возбуждение демонстрирует поведение, характерное для объемного состояния (см. рис. 5.11b и 5.11d). Напротив, первое обладает свойствами ОМС даже в пределе $U \to \infty$, т.к. хорошо видна локализация $|\omega_{1f\sigma}|$ и $|z_{1f\sigma}|$ на противоположных краях проволоки (см. рис. 5.11а и 5.11с). Однако, зависимости МП от длины системы показывают нестабильность наблюдаемых краевых состояний при бесконечном хаббардовском отталкивании. Рисунок 5.9d показывает, что как MP_1 , так и MP_2 уменьшаются с ростом N. Эти данные подтверждаются расчетами кратности вырождения спектра запутанности, которые дают d = 1 для всех μ и h.



Рис. 5.11: Пространственные распределения майорановских коэффициентов ($\omega_{jf\sigma}, z_{jf\sigma}$) первого (a,c) и второго (b,d) возбуждений в *t*-модели. Верхние (нижние) графики соответствуют черной (белой) точке на рис. 5.10.

Таким образом, можно наблюдать следующую модификацию фазовой диаграммы для $|\Delta| > 2|\Delta_1|$: 1) в случае отсутствия взаимодействия существуют топологически тривиальная фаза и нетривиальные с ОМС (см. рис. 5.8e); 2) в сильно коррелированном режиме могут реализовываться топологически нетривиальные фазы с ОМС, ДМС, а также тривиальная фаза (см. рис. 5.8f); 3) в пределе бесконечного одноузельного отталкивания проволока находится в топологически тривиальной фазе.

Важно подчеркнуть, что примененный для изучения тологических фаз в BDIпроволоке метод DMRG по определению учитывает влияние различных флуктуационных процессов. Чтобы ярче показать их ключевую роль в полученных выше результатах, в работе [22] была построена фазовая диаграмма при аналитическом рассмотрении *t*-модели в приближении Хаббард-I. Показано, что в этом среднеполевом подходе обе топологически нетривиальные фазы выживают, что полностью противоречит картам $MP_{1,2}(\mu, h)$, представленным на рис. 5.10, и зависимостям $MP_{1,2}(N)$ на рис. 5.9d.

5.5 Магнитокалорический эффект в сверхпроводящей проволоке класса BDI с учетом кулоновского отталкивания

В завершении этой главы обсудим возможность экспериментального обнаружения топологических фаз в сильно коррелированной системе (5.4) на основе анализа магнитокалорической функции. Можно выделить несколько причин использования имено этого инструмента. Во-первых, изучение особенностей поведения калорических функций как способ определения топологических фаз изучен недостаточно по сравнению с популярным методом, базирующимся на исследовании транспортных свойств СП. Во-вторых, последовательность калорических аномалий, указывающих на образование нетривиальной фазы в СП класса D, устойстива по отношению к слабым кулоновским взаимодействиям, когда справедлив подход обобщенного среднего поля [333,334]. Калорические аномалии в этих структурах связаны с квантовыми фазовыми переходами [416,417]. Последние, в свою очередь, обусловлены гибридизацией волновых функций MM, локализованных на противоположных концах СП. Из приведенных выше числовых данных ясно видно, что сильные электронные корреляции в СП класса BDI усиливают этот эффект из-за уменьшения щели в объемном спектре. Таким образом, можно ожидать реализацию подобных особенностей и в нашей системе.

Магнитокалорический эффект определяется изменением температуры системы,

Т, при адиабатическом изменении магнитного поля,

$$MCE = -\frac{1}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial h} \right)_{S,\mu} = \left(\frac{\partial \langle \hat{M} \rangle / \partial T}{C(T)} \right)_{\mu,h}, \quad \hat{M} = \sum_{f=1;\sigma}^{N} \sigma a_{f\sigma}^{+} a_{f\sigma}, \tag{5.30}$$

где S и C(T)- энтропия и удельная теплоемкость системы, соответственно. На основе теории скейлинга было показано, что MCE должен расходиться в квантовых критических точках при низких температурах [416, 417]. В окрестности таких точек эта величина имеет разные знаки. Последнее следует из определения (5.30), поскольку $\partial \langle \hat{M} \rangle / \partial T$ должна иметь противоположные знаки слева и справа от квантовой критической точки. Ниже показано, что описанное поведение в СП класса BDI имеет место, если изменяется либо основное, либо возбужденное состояние.

В случае невзаимодействующих или слабо взаимодействующих фермионов *MCE* может быть выражен через *u*, *v*-коэффициенты Боголюбова [333, 334],

$$\partial \langle M \rangle / \partial T = \frac{1}{2T^2} \sum_{j=1}^{2N} B_j E_j f(E_j) \left(1 - f(E_j) \right);$$

$$C(T) = \frac{1}{T^2} \sum_{j=1}^{2N} E_j^2 f(E_j) \left(1 - f(E_j) \right);$$
 (5.31)

где

$$B_j = \sum_{\sigma;f=1}^N \eta_\sigma \left(|u_{jf\sigma}|^2 - |v_{jf\sigma}|^2 \right).$$
(5.32)

В формулах (5.31) величина $f(E_j)$ - фермиевская функция распределения.

Из (5.30) — (5.32) следует, что для одного краевого состояния с энергией в щели $E_1 \leq T \ll E_{j'}$ (j' > 1) расходимости *MCE* возникают при $E_1 = 0$. Такая ситуация реализуется в СП класса D, когда наблюдаются осцилляции фермионной четности основного состояния. Далее, рассмотрим случай, когда в щели имеется несколько возбуждений краевого типа, т.е. $E_{1,2} \leq T \ll E_{j'}$ (j' > 2). Тогда аномалии *MCE* не наблюдаются, если $E_{1,2} \neq 0$. Другими словами, при изменении некоторого параметра могут изменяться энергии возбужденных многочастичных состояний, но не основного - его четность сохраняется.

Таким образом, имеет место следующая связь между поведением магнитокалорической функции и энергетическим спектром системы: знак *MCE* изменяется при квантовых переходах и эта функция расходится (остается конечной) в точках таких переходов, если изменяется основное (возбужденное) состояние. Оба сценария могут иметь место в СП класса BDI. В параметрической области, где появляются ОМС, наблюдается каскад переходов, сопровождаемый сменой фермионной четности основного состояния. В топологически нетривиальной фазе с ДМС также реализуется множество квантовых переходов. Однако, основное состояние остается тем же, но возникает многократная смена мест многочастичных состояний (по энергии), принадлежащих дуальному сектору гильбертова пространства.



Рис. 5.12: Магнитополевые зависимости $E_{1,2}$ (a) и МСЕ (b) при $\mu = -1.5$. На вставках рис. (a): на левом и правом графиках в большем разрешении представлены $E_{1,2}$ в областях h, где возникают двойная и одиночная майорановские моды, соответственно. Параметры: $\Delta = -0.3$, $\Delta_1 = 0.2$, $\alpha = 1.5$, U = 0, V = 0, $T = 10^{-3}$.

Описанные эффекты показаны на рисунке 5.12. График 5.12а включает в себя магнитополевые зависимости энергий первых двух возбуждений $E_{1,2}$ в отсутствие кулоновских взаимодействий. На рис. 5.12b представлена аналогичная зависимость магнитокалорического эффекта MCE, рассчитанного по формулам (5.30) — (5.32) при U = V = 0. Эта величина меняет знак и периодически расходится в полях, где $E_1 \rightarrow 0$, $E_2 \neq 0$. Напротив, расхождения исчезают в области с ДМС, и MCE колеблется с конечной амплитудой. Таким образом, численные расчеты полностью подтверждают сформулированное выше соответствие между поведением калорической функции и энергетическим спектром.

Строго говоря, в сильно коррелированном режиме выражения (5.30) — (5.32)

неприменимы. Для анализа магнитокалорической функции в такой ситуации необходимо применять метод DMRG для конечных температур, что выходит за рамки настоящего исследования. Однако, качественная оценка калорических эффектов в низкотемпературном пределе (когда *T* много меньше величины щели в объемном спектре) может быть дана на основе следующих термодинамических соотношений:

$$\partial \langle \hat{M} \rangle / \partial T = \langle \hat{M} \cdot H \rangle - \langle \hat{M} \rangle \cdot \langle H \rangle, \quad C(T) = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2. \tag{5.33}$$



Рис. 5.13: Магнитополевые зависимости $E_{1,2}$ при $\Delta = -0.5$, U = 10, $\mu = -0.75$. На вставке: *MCE* как функция *h*. Остальные параметры те же, что и на рис. 5.12.

Поскольку наличие ДМС приводит к четырехкратному вырождению спектра запутанности, *d*, равновесные средние могут быть рассчитаны с использованием первых четырех многочастичных состояний (по два из четного и нечетного секторов),

$$\langle \hat{M} \rangle = Tr\left(\hat{M} \cdot \rho\right), \quad \rho = \left(\frac{1}{\tilde{Z}}\right) \sum_{j=1,2} \sum_{P=ev,od} e^{-E_j^P/T} \cdot |\Psi_j^P\rangle \langle \Psi_j^P|,$$
(5.34)
$$\tilde{Z} = \sum_{j=1,2} \sum_{P=ev,od} e^{-E_j^P/T}.$$

Данное приближенное решение подтверждает соответствие между поведением магнитокалорической функции и спектром элементарных возбуждений, что показано на рисунке 5.13. А именно, наблюдаются колебания *MCE* в топологически нетривиальной фазе с ДМС, h < 0.3, и ряд аномалий в области h > 0.3, где при U = 0 реализовывались ОМС (см. вставку на рис. 5.13).

Как уже отмечалось, возникновение такой тривиальной фазы вызвано уменьшением разности $E_1 - E_2$ с ростом интенсивности электрон-электронных взаимодействий. В результате пространственное распределение состояния с наименьшей энергией становится объемным. При этом E_1 все еще периодически обращается в нуль (как и в случае истинного ОМС). Таким образом, выявленные свойства сохраняются в режиме сильных кулоновских корреляций. Отметим также, что измерения магнитокалорического эффекта могут быть дополнены анализом спиновой поляризации СП, которая предоставляет информацию о норме майорановских возбуждений (см. рис. 5.6).

5.6 Резюме

Основные итоги главы 5 сводятся к следующему:

- 1. Методом ренорм-группы для матрицы плотности (DMRG) изучено влияние зарядовых корреляций на топологические фазы одномерной сверхпроводящей проволоки (СП) с расширенным s-типом спаривания. Проведено обобщение понятия майорановской поляризации, позволившее изучить влияние зарядовых флуктуаций на майорановские связанные состояния (MCC). Показано, что поведение МП в широком диапазоне интенсивностей кулоновских взаимодействий согласуется с вырождением спектра квантовой запутанности, имеющим топологическую природу. Установлена эквивалентность майорановской поляризации и топологического инварианта N_{BDI} для предельного случая невзаимодействующей системы.
- 2. Установлено, что в режиме |∆| > 2|∆₁| (∆ < 0, ∆₁ > 0 параметры одно- и межузельного сверхпроводящего спаривания, соответственно) хаббардовское отталкивание индуцирует на краях проволоки двойные МСС (ДМС). Эффект объясняется подавлением одноузельного спаривания при возрастании одноузельных корреляций. При сильном кулоновском отталкивании происходит превращение ДМС в одиночные МСС (ОМС). В свою очередь, при сильных корреляциях ОМС выживают в ситуации, когда СП является сильно спин-поляризованной.

- 3. Метод DMRG был применен для анализа t J_α V-модели. Это позволило в режиме сильных корреляций ускорить сходимость проводимых вычислений и построить диаграмму топологических фаз, отражающую описанные в п.2 эффекты индуцирования и подавления MCC. Показано, что межузельное кулоновское взаимодействие приводит к дополнительному уменьшению областей, где реализуются фазы с ОМС и ДМС. В пределе бесконечного хаббардовского отталкивания топологические фазы разрушаются полностью.
- 4. На основе обнаруженных особенностей магнитокалорической функции предложен метод детектирования ОМС и ДМС. Идентификация связана с тем, что в фазе с ОМС знак магнитокалорической функции изменяется, что также сопровождается возникновением сингулярности. В свою очередь, для фазы с ДМС характерной является осциллирующее поведение магнитокалорического эффекта с конечной амплитудой. Установлено, что для фазы с ОМС сингулярности имеют место в тех точках, где основное состояние СП меняет четность. Для фазы с ДМС такой эффект отсутствует. Методом DMRG показано, что выявленные особенности магнитокалорического эффекта могут сохраняться в сильно коррелированном режиме.

Заключение

Основные выводы, которые следуют из изложенных в диссертации результатов, могут быть сформулированы следующим образом:

- 1. Предсказан спиновый эффект Фано при одноэлектронном неупругом транспорте через магнитные структуры атомного масштаба. Положение и ширина резонансов Фано определяются действительными и мнимыми частями собственных энергий эффективного гамильтониана, описывающего состояния устройства (спиновая структура + электронные уровни), взаимодействующих с состояниями континуума контактов. В случае димера обнаружены связанные состояния в континууме. Показано, что в магнитном поле, когда время жизни этих состояний становится конечным, возникают новые резонансы Фано. Установлено, что эффект имеет место только в том случае, когда обменное взаимодействие спинов димера между собой и с транспортируемым электроном является гейзенберговским. В рамках подхода Ландауэра-Бюттикера показано, что спиновый эффект Фано может служить механизмом аномально высокого магнитосопротивления устройства со спиновым димером в качестве активного элемента.
- 2. Проведено развитие метода неравновесных функций Грина и диаграммной техники Келдыша в атомном представлении. В беспетлевом приближении для массового оператора построена теория квантового транспорта через многоуровневые структуры атомного масштаба. Введена и вычислена спектральная функция устройства и получены общие выражения, описывающие электронный ток для контактов, находящихся в нормальной фазе. Найдено выражение для стационарного джозефсоновского тока в случае сверхпроводящих контактов. При учете процессов многократного рассеяния получена система квантовых кинети-

ческих уравнений, позволяющих определять неравновесные числа заполнения состояний устройства. Для одиночной анизотропной примеси и димера показано, что высокое напряжение смещения могут индуцировать эффект отрицательной дифференциальной проводимости, переключение между состояниями с разными средними значениями проекции полного спина, диодный эффект, а также приводить к разной заселенности триплетных состояний димера в нулевом магнитном поле.

- 3. Изучено влияние кулоновского отталкивания на транспортные свойства системы из четырех квантовых точек. Зарядовые корреляции как внутри точек, так и между ними учитывались в рамках метода уравнений движения для неравновесных функций Грина. В режиме линейного отклика предсказан эффект Фано, обусловленный как одночастичными, так и многочастичными процессами. Это приводит к тому, что в магнитном поле под действием электрического поля затвора в системе реализуется переключение между транспортными каналами с противоположной спиновой поляризацией, близкой к 100%. Продемонстрировано, что в неравновесном режиме расщепление и взаимодействие резонансов Фано приводит к эффекту отрицательной дифференциальной проводимости.
- 4. Исследованы особенности интерференционных процессов в кольце Ааронова-Бома, рукава которого соединены сверхпроводящей проволокой (мостиком) со спинорбитальной связью Рашбы. Обнаружено, что только в таких магнитных полях, при которых мостик находится в топологически нетривиальной фазе, кондактанс устройства содержит и резонансы Брейта-Вигнера, и Фано. Показано, что характеристики резонансов Фано существенно зависят от того, реализуется в мостике майорановское или андреевское состояние. Отмеченная зависимость продемонстрирована также для Т-образной геометрии транспорта.
- 5. Развита теория спин-поляризованного транспорта в сверхпроводящей проволоке со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы при различных ориентациях внешнего магнитного поля. Выявлена зависимость кондактанса от спиновой поляризации майорановского связанного состояния. Показано, что изменение уг-

ла магнитного поля в плоскости, перпендикулярной вектору Рашбы, управляет транспортным режимом посредством переключения между симметричным и сильно асимметричным. Установлено, что в сильно асимметричном режиме, когда проволока находится в фазе топологической сверхпроводимости, возникающее нарушение симметрии токов позволяет реализовать переключатель слабо неравновесного спин-поляризованного тока.

6. Методом ренорм-группы для матрицы плотности (DMRG) изучено влияние сильных кулоновских взаимодействий на свойства одномерного топологического сверхпроводника симметрийного класса BDI. Для модели Шубина-Вонсовского со спинорбитальным взаимодействием показано, что увеличение интенсивности одноузельных и межузельных кулоновских взаимодействий приводит к различным сценариям трансформации топологически нетривиальных фаз. Обнаружены эффекты индуцирования и подавления одиночных и двойных майорановских связанных состояний. Проведено обобщение метода DMRG для систем с атомной статистикой. Для эффективной (t – J_α – V) модели проволоки построены диаграммы топологических фаз. Показано, что в предельном случае бесконечного хаббардовского отталкивания (t-модель) топологически нетривиальные фазы разрушаются. Продемонстрирована возможность тестирования топологических фаз в сильно коррелированном сверхпроводнике на основе особенностей поведения магнитокалорической функции.

Благодарности

В заключении хочу выразить благодарность людям, без которых эта работа не была бы возможной. Я глубоко признателен своему учителю, Валерию Владимировичу Валькову, за все те силы, терпение и знания, которые он, не жалея, вкладывал в меня. Считаю большим везением то, что 15 лет назад этот замечательный физик встретился мне на жизненном пути. Все эти годы он на собственном примере показывал, что значит любовь к своему делу и самоотверженный труд.

Для меня было большим удовольствием и удачей работать вместе с Максимом Юрьевичем Каганом. Его широкий кругозор и глубокое понимание основ физических процессов позволили получить ряд важных результатов, изложенных в диссертации.

Отдельных слов благодарности, несомненно, заслуживают мои соавторы и коллеги по теоротделу: Максим Шустин, Антон Злотников, Саша Федосеев, Виталий Мицкан, Дмитрий Михайлович Дзебисашвили, Максим Коровушкин, Дима Максимов и Костя Пичугин. Наша совместная работа и отдых всегда были удовольствием, а многочисленные дискуссии позволили основательнее понять полученные результаты.

Выражаю благодарность Н.С. Аверкиеву, А.Л. Рахманову, В.Н. Манцевичу, П.И. Арсееву, А.Ф. Садрееву, А.Р. Коловскому, В.А. Игнатченко, С.Г. Овчинникову и И.С. Сандалову за полезные замечания, критику и важные обсуждения, которые позволили качественно улучшить изложение результатов диссертации. Благодарю А.Н. Втюрина и Н.И. Попову за неоценимую помощь в решении организационных вопросов.

Я благодарю своих родных и друзей за постоянную поддержку в любых жизненных обстоятельствах. И главное, трудно найти слова, чтобы выразить всю мою признательность, любовь и уважение к моей Маме.

Литература

- [1] Вальков В.В., Аксенов С.В. Эффекты неупругого транспорта электрона через потенциальный рельеф спинового димера в магнитном поле.// Изв. РАН. Серия физ. – 2010. – Т.74. – С.6.
- [2] Вальков В. В., Аксенов С. В. Проявление неупругих эффектов в транспортных характеристиках спиновых наноструктур.// Изв. РАН. Серия физ. – 2010. – Т.74. – С.763.
- [3] Вальков В. В., Аксенов С. В. Эффекты неупругого спин-зависящего электронного транспорта через спиновую наноструктуру в магнитном поле.// ЖЭТФ. – 2011.
 – Т.110. – С.305.
- [4] Вальков В.В., Аксенов С.В., Уланов Е.В. Проявление антирезонанса Фано в вольт-амперной характеристике наноструктуры с одиночной магнитной примесью.// Изв. РАН. Серия физ. – 2012. – Т.76. – С.411.
- [5] Вальков В. В., Аксенов С. В., Уланов Е. В. Индуцирование спин-флип процессами резонанса Фано при туннелировании электрона через спиновые структуры атомного масштаба.// ЖЭТФ. – 2013. – Т.143. – С.984.
- [6] Вальков В. В., Аксенов С. В., Уланов Е. В. Эффект Фано при туннелировании спин-поляризованного электрона через одиночную магнитную примесь.// ФНТ. – 2013. – Т.39. – С.48.
- [7] Вальков В. В., Аксенов С. В., Уланов Е. В. Эффекты многократного отражения при неупругом электронном транспорте через анизотропный магнитный атом.// Письма в ЖЭТФ. – 2013. – Т.98. – С.459.

- [8] Вальков В. В., Аксенов С. В., Уланов Е. В. Неупругий туннельный транспорт электронов через анизотропную магнитную структуру во внешнем магнитном поле.// ЖЭТФ. – 2014. – Т.146. – С.144.
- [9] Вальков В. В., Аксенов С. В., Уланов Е. В. Квантовый транспорт через многоуровневую магнитную структуру при учете процессов многократного неупругого рассеяния в магнитном поле.// ФНТ. – 2015. – Т.41. – С.129.
- [10] Val'kov V. V., Aksenov S. V. Electron transport through Josephson junction containing dimeric molecule.// J. Low Temp. Phys. - 2016. - V.185. - P.446.
- [11] Kagan M. Yu., Val'kov V. V., Aksenov S. V. Coulomb interactions-induced perfect spinfiltering effect in a quadruple quantum-dot cell.// J. Magn. Magn. Mat. - 2017. - V.440.
 - P.15.
- [12] Val'kov V. V., Aksenov S. V. Electronic spin polarization in the Majorana bound state in one-dimensional wires.// J. Magn. Magn. Mat. – 2017. – V.440. – P.112.
- [13] Kagan M. Yu., Val'kov V. V., Aksenov S. V. Effects of anisotropy and Coulomb interactions on quantum transport in a quadruple quantum-dot structure.// Phys. Rev. B. - 2017. - V.95. - P.035411.
- [14] Вальков В. В., Аксенов С. В. Влияние ориентации магнитного поля и беспорядка на майорановскую поляризацию в проволоках с топологической сверхпроводимостью.// ФНТ. – 2017. – Т.43. – С.546.
- [15] Вальков В. В., Аксенов С. В. Неравновесные функции Грина в атомном представлении и проблема квантового транспорта электронов через системы с внутренними степенями свободы.// ТМФ. – 2018. – Т.194. – С.277.
- [16] Каган М. Ю., Аксенов С. В. Влияние кулоновских корреляций на неравновесный квантовый транспорт в системе из четырех квантовых точек.// Письма в ЖЭТФ. – 2018. – Т.107. – С.512.
- [17] Val'kov V.V., Aksenov S.V. Spin-polarized-current switching mediated by Majorana bound states.// J. Magn. Magn. Mat. - 2018. - V.465. - P.88.

- [18] Вальков В. В., Аксенов С. В. Ренормировки заселенностей триплетных состояний спинового димера в нулевом магнитном поле при квантовом транспорте.// ФНТ. – 2019. – Т.45. – С.192.
- [19] Val'kov V. V., Kagan M. Yu., Aksenov S. V. Fano effect in Aharonov-Bohm ring with topologically superconducting bridge.// J. Phys.: Cond. Mat. – 2019. – V.31. – P.225301.
- [20] Вальков В. В., Мицкан В. А., Злотников А. О., Шустин М. С., Аксенов С. В. Реализация топологически нетривиальных фаз, каскад квантовых переходов и идентификация майорановских мод в киральных сверхпроводниках и нанопроволоках.// Письма в ЖЭТФ. – 2019. – Т.110. – С.126.
- [21] Аксенов С. В., Каган М. Ю. Коллапс резонанса Фано вследствие нелокальности майорановского состояния.// Письма в ЖЭТФ. – 2020. – Т.111. – С.321.
- [22] Aksenov S. V., Zlotnikov A. O., Shustin M. S. Strong Coulomb interactions in the problem of Majorana modes in a wire of the nontrivial topological class BDI.// Phys. Rev. B. - 2020. - V.101. - P.125431.
- [23] Злотников А. О., Аксенов С. В., Шустин М. С. Эффективные взаимодействия, индуцированные спин-орбитальной связью в сверхпроводящих нанопроволоках в режиме сильных корреляций.// ФТТ. – 2020. – Т.62. – С.1447.
- [24] van Kampen N. G. Stochastic processes in physics and chemistry. Amsterdam: North-Holland. – 1981.
- [25] Akkermans E., Montambaux G., Pichard J.-L., Zinn-Justin J. Mesoscopic quantum physics. – Amsterdam: North-Holland. – 1995.
- [26] Имри Й. Введение в мезоскопическую физику. М.: Физматлит. 2002.
- [27] Alhassid Y. The statistical theory of quantum dots.// Rev. Mod. Phys. 2000. V.72.
 P.895.
- [28] Bruus H., Flensberg K. Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction. – Copenhagen: Oxford University Press. – 2004.

- [29] Горьков Л. П., Ларкин А. И., Хмельницкий Д. Е. Проводимость частицы в двумерном случайном потенциале.// Письма в ЖЭТФ. – 1979. – Т.30. – С.248.
- [30] Altshuler B. L., Khmel'nitzkii D., Larkin A. I., Lee P. A. Magnetoresistance and Hall effect in a disordered two-dimensional electron gas.// Phys. Rev. B. – 1980. – V.22. – P.5142.
- [31] Альтшулер Б. Л., Аронов А. Г., Ларкин А. И., Хмельницкий Д. Э. Об аномальном магнитосопротивлении в полупроводниках.// ЖЭТФ. 1981. Т.81. С.768.
- [32] Hikami S., Larkin A. I., Nagaoka Y. Spin-Orbit Interaction and Magnetoresistance in the Two Dimensional Random System.// – Progr. Theor. Phys. – 1980. – V.63. – P.707.
- [33] Ефетов К.Б., Ларкин А.И., Хмельницкий Д.Е. Interaction of diffusion modes in the theory of localization.// ЖЭТФ. – 1980. – Т.79. – С.1120.
- [34] Haucke H., Washburn S., Benoit A. D. et al Universal scaling of nonlocal and local resistance fluctuations in small wires.// Phys. Rev. B. - 1990. - V.41. - P.12454.
- [35] Fano U., Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts.// Phys. Rev. - 1961. - V.124. - P.1866.
- [36] Miroshnichenko A. E., Flash S., Kivshar Y. S. Fano resonances in nanoscale structures.// Rev. Mod. Phys. - 2010. - V.82. - P.2257.
- [37] Breit G., Wigner E. Capture of slow neutrons.// Phys. Rev. 1936. V.49. P.519.
- [38] Aikawa H., Kobayashi K., Sano A. et al. Interference effect in multilevel transport through a quantum dot.// J. Phys. Soc. Jpn. – 2004. – V.73. – P.3235.
- [39] Gurvitz S. A., Levinson Y. B. Resonant reflection and transmission in a conducting channel with a single impurity.// Phys. Rev. B. - 1993. - V.47. - P.10578.
- [40] Tekman E., Bagwell P. Fano resonances in quasi-one-dimensional electron waveguides.// Phys. Rev. B. - 1993. - V.48. - P.2553.
- [41] Nockel J. U., Stone A. D. Resonance line shapes in quasi-one-dimensional scattering.// Phys. Rev. B. - 1994. - V.50. - P.17 415.
- [42] Feshbach H. Unified theory of nuclear reactions.// Ann. Phys. (N.Y.) 1958. V.5. –
 P.357.
- [43] Feshbach H. A unified theory of nuclear reactions. II.// Ann. Phys. (N.Y.) 1962. V.19. – P.287.
- [44] Gores J., Goldhaber-Gordon D., Heemeyer S. et al. Fano resonances in electronic transport through a single-electron transistor.// Phys. Rev. B. – 2000. – V.62. – P.2188.
- [45] Johnson A. C., Marcus C. M., Hanson M. P., Gossard A. C. Coulomb-modified Fano resonance in a one-lead quantum dot.// Phys. Rev. Lett. - 2004. - V.93. - P.106803.
- [46] Kobayashi K., Aikawa H., Katsumoto S., Iye Y., Tuning of the Fano effect through a quantum dot in an Aharonov-Bohm interferometer.// Phys. Rev. Lett. – 2002. – V.88. – P.256806.
- [47] Kobayashi K., Aikawa H., Katsumoto S., Iye Y. Mesoscopic Fano effect in a quantum dot embedded in an Aharonov-Bohm ring.// Phys. Rev. B. – 2003. – V.68. – P.235304.
- [48] Kobayashi K., Aikawa H., Sano A. et al. Fano resonance in a quantum wire with a side-coupled quantum dot.// Phys. Rev. B. - 2004. - V.70. - P.035319.
- [49] Kondo J. Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys.// Prog. Theor. Phys. 1964.
 V.32. P.37.
- [50] Hewson A.C. The Kondo Problem to Heavy Fermions. Cambridge: Cambridge University Press. – 1993.
- [51] Sasaki S., Tamura H., Akazaki T., Fujisawa T. Fano-Kondo interplay in a side-coupled double quantum dot.// Phys. Rev. Lett. – 2009. – V.103. – P.266806.
- [52] Madhavan V., Chen W., Jamneala T. et al. Tunneling into a single magnetic atom: spectroscopic evidence of the Kondo resonance.// Science. – 1998. – V.280. – P.567.

- [53] Ujsaghy O., Kroha J., Szunyogh L., Zawadowski A. Theory of the Fano Resonance in the STM Tunneling Density of States due to a Single Kondo Impurity.// Phys. Rev. Lett. - 2000. - V.85. - P.2557.
- [54] Morr D. K. Theory of scanning tunneling spectroscopy: from Kondo impurities to heavy fermion materials.// Rep. Prog. Phys. - 2017. - V.80. - P.014502.
- [55] Sanchez D., Serra L. Fano-Rashba effect in a quantum wire.// Phys. Rev. B. 2006. V.74. – P.153313.
- [56] Verduijn J., Tettamanzi G.C., Lansbergen G.P. et al. Coherent transport through a double donor system in silicon.// Appl. Phys. Lett. - 2010. - V.96. - P.072110.
- [57] Calvet L. E., Snyder J. P., Wernsdorfer W. Fano resonance in electron transport through single dopant atoms.// Phys. Rev. B. - 2011. - V.83. - P.205415.
- [58] Rozhansky I.V., Averkiev N.S., Lahderanta E. Tunneling magnetic effect in heterostructures with paramagnetic impurities.// Phys. Rev. B. - 2012. - V.85. -P.075315.
- [59] Ким Ч. С., Сатанин А. М. Туннелирование через дискретные уровни в континууме.// ЖЭТФ. – 1999. – Т.115. – С.211.
- [60] Ким Ч.С., Сатанин А.М., Джое Ю.С., Косби Р.М. Коллапс резонансов в квазиодномерных квантовых каналах.// ЖЭТФ. – 1999. – Т.116. – С.263.
- [61] von Neumann J., Wigner E. Über merkwürdige diskrete Eigenwerte.// Phys. Z. 1929.
 V.30. P.465.
- [62] Hsu C. W., Zhen B., Stone A. D. et al. Bound states in the continuum.// Nat. Rev. Mat. - 2016. - V.1. - P.16048.
- [63] Schult R. L., Ravenhall D. G., Wyld H. W. Quantum bound states in a classically unbound system of crossed wires.// Phys. Rev. B. - 1989. - V.39. - P.5476.
- [64] Friedrich H., Wintgen D. Physical realization of bound states in the continuum.// Phys. Rev. A. - 1985. - V.31. - P.3964.

- [65] Friedrich H., Wintgen D. Interfering resonances and bound states in the continuum.// Phys. Rev. A. – 1985. – V.32. – P.3231.
- [66] Foley J. M., Young S. M., Phillips J. D. Symmetry-protected mode coupling near normal incidence for narrow-band transmission filtering in a dielectric grating.// Phys. Rev. B. - 1989. - V.89. - P.165111.
- [67] Landron de Guevara M. L., Claro F., Orellana P. A. Ghost Fano resonance in a double quantum dot molecule attached to leads.// Phys. Rev. B. – 2003. – V.67. – P.195335.
- [68] Lu H., Lu R., Zhu B.-F. Tunable Fano effect in parallel-coupled double quantum dot system.// Phys. Rev. B. - 2005. - V.71. - P.235320.
- [69] Orellana P. A., Landron de Guevara M. L., Claro F. Controlling Fano and Dicke effects via a magnetic flux in a two-site Anderson model.// Phys. Rev. B. – 2004. – V.70. – P.235315.
- [70] Dicke R. H. The Effect of Collisions upon the Doppler Width of Spectral Lines.// Phys. Rev. - 1953. - V.89. - P.472.
- [71] Dicke R. H. Coherence in Spontaneous Radiation Processes.// Phys. Rev. 1954. V.93. P.99.
- [72] Brandes T. Coherent and collective quantum optical effects in mesoscopic systems.// Phys. Rep. - 2005. - V.408. - P.315.
- [73] Gong W., Han Y., Wei G. Antiresonance and bound states in the continuum in electron transport through parallel-coupled quantum-dot structures.// J. Phys.: Cond. Mat. – 2009.
 – V.21. – P.175801.
- [74] Sadreev A. F., Babushkina T. V. Two-electron bound states in continuum in quantum dots.// Письма в ЖЭТФ. – 2008. – Т.88. – С.360.
- [75] Lee H.-W., Generic Transmission Zeros and In-Phase Resonances in Time-Reversal Symmetric Single Channel Transport.// Phys. Rev. Lett. - 1999. - V.82. - P.2358.

- [76] Sadreev A. F., Rotter I. S-matrix theory for transmission through billiards in tightbinding approach.// J. Phys. A: Math. Gen. - 2003. - V.36 - P.11413.
- [77] Datta S. Quantum transport: Atom to Transistor. New York: Cambridge University Press. – 2005.
- [78] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория).
 М.: Наука. 2001.
- [79] Landauer R. Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction.// IBM J. Res. Dev. – 1957. – V.1. – P.233.
- [80] Landauer R. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices.// Philos. Mag.
 1970. V.21. P.863.
- [81] Buttiker M. Four-Terminal Phase-Coherent Conductance.// Phys. Rev. Lett. 1986.
 V.57. P.1761.
- [82] Datta S. Electronic transport in mesoscopic systems. Cambridge: Cambridge University Press. – 1995.
- [83] Misiorny M., Weymann I., Barnas J. Interplay of the Kondo Effect and Spin-Polarized Transport in Magnetic Molecules, Adatoms, and Quantum Dots.// Phys. Rev. Lett. – 2011. – V.106. – P.126602.
- [84] Rotter I. A continuum shell model for the open quantum mechanical nuclear system.// Rep. Prog. Phys. - 1991. - V.54. - P.635.
- [85] Okolowicz J., Ploszajczak M., Rotter I. Dynamics of quantum systems embedded in a continuum.// Phys. Rep. – 2003. – V.374. – P.271.
- [86] Huang L., Lai Y.-C., Luo H.-G., Grebogi C. Universal formalism of Fano resonance.// AIP Adv. - 2015. - V.5. - P.017137.
- [87] Liu C.-R., Huang L., Luo H., Lai Y.-C. Spin Fano Resonances and Control in Two-Dimensional Mesoscopic Transport.// Phys. Rev. Appl. – 2020. – V.13. – P.034061.

- [88] Hirjibehedin C. F., Lutz C. P., Heinrich A. J. Spin Coupling in Engineered Atomic Structures.// Science. - 2006. - V.312. - P.1021.
- [89] Fernandez-Rossier J. Theory of Single-Spin Inelastic Tunneling Spectroscopy.// Phys. Rev. Lett. - 2009. - V.102. - P.256802.
- [90] Пейсахович Ю. Г., Штыгашев А. А. Одномерная квантовая механика. Новосибирск: НГТУ. – 2007.
- [91] Ведяев А.В., Использованик поляризованного по спину тока в спинтронике.// УФН. – 2002. – Т.172. – С.1458.
- [92] Zutic I., Fabian J., Das Sarma S. Spintronics: Fundamentals and applications.// Rev. Mod. Phys. - 2004. - V.76. - P.323.
- [93] Вдовичев С. Н., Грибков Б. А., Гусев С. А. и др. Магнитосопротивление и неколлинеарные состояния многослойных ферромагнитных наночастиц.// Письма в ЖЭТФ. – 2011. – Т.94. – С.418.
- [94] Rozhansky I.V., Averkiev N.S., Lahderanta E. Tunneling magnetic effect in heterostructures with paramagnetic impurities.// Phys. Rev. B. - 2012. - V.85. -P.075315.
- [95] Makhlin Y., Schon G., Shnirman A. Quantum-state engineering with Josephsonjunction devices.// Rev. Mod. Phys. - 2001. - V.73. - P.357.
- [96] Гантмахер В. Ф., Долгополов В. Т. Квантовый фазовый переход сверхпроводник изолятор.// УФН. – 2010. – Т.180. – С.3.
- [97] Feofanov A. K., Oboznov V. A., Bol'ginov V. V. et al. Implementation of superconductor / ferromagnet / superconductor π-shifters in superconducting digital and quantum circuits.// Nature Physics. - 2010. - V.6. - P.593.
- [98] Park J., Pasupathy A. N., Goldsmith J. I. et al. Coulomb blockade and the Kondo effect in single-atom transistors.// Nature. - 2002. - V.417. - P.722.

- [99] Heinrich A. J., Gupta J. A., Lutz C. P. Single-Atom Spin-Flip Spectroscopy.// Science. - 2004. - V.306. - P.466.
- [100] Besombes L., Leger Y., Maingault L. et al. Probing the Spin State of a Single Magnetic Ion in an Individual Quantum Dot.// Phys. Rev. Lett. - 2004. - V.93. - P.207403.
- [101] Besombes L., Leger Y., Maingault L. et al. Carrier-induced spin splitting of an individual magnetic atom embedded in a quantum dot.// Phys. Rev. B. - 2005. - V.71. -P.161307.
- [102] Loth S., von Bergmann K., Ternes M. et al. Controlling the state of quantum spins with electric currents.// Nature Physics. - 2010. - V.6. - P.340.
- [103] Loth S., Baumann S., Lutz C. P. et al. Bistability in Atomic-Scale Antiferromagnets.// Science. - 2012. - V.335. - P.196.
- [104] Kikoin K., Avishai Y. Kondo Tunneling through Real and Artificial Molecules.// Phys.
 Rev. Lett. 2001. V.86. P.2090.
- [105] Arseyev P. I., Maslova N. S., Mantsevich V. N. Correlation induced switching of local spatial charge distribution in two-level system.// Письма в ЖЭТФ. – 2011. – Т.94. – С.422.
- [106] Ueba H., Mii T., Tikhodeev S. G. Theory of inelastic tunneling spectroscopy of a single molecule – Competition between elastic and inelastic current.// Surf. Science. – 2007. – V.601. – P.5220.
- [107] Арсеев П. И., Маслова Н. С. Взаимодействие электронов с колебательными модами при туннелировании через одиночные молекулы.// УФН. – 2010. – Т.180. – С.1197.
- [108] Tsukahara N., Noto K.-i., Ohara M. et al. Adsorption-Induced Switching of Magnetic Anisotropy in a Single Iron(II) Phthalocyanine Molecule on an Oxidized Cu(110) Surface.// Phys. Rev. Lett. - 2009. - V.102. - P.167203.

- [109] Otte A. F., Ternes M., von Bergmann K. et al. The role of magnetic anisotropy in the Kondo effect.// Nature Physics. - 2008. - V.4. - P.847.
- [110] Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука. 1971.
- [111] Зубарев Д. Н., Морозов В. Г., Репке Г. Статистическая механика неравновесных процессов. – М.: Физматлит. – 2002.
- [112] Rogovin D., Scalapino D.J. Fluctuation Phenomena in Tunnel Junctions.// Ann. Phys. - 1974. - V.86. - P.1.
- [113] Келдыш Л. В. Диаграммная техника для неравновесных процессов.// ЖЭТФ. 1964. – Т.47. – С.1515.
- [114] Зайцев Р. О. Введение в современную кинетическую теорию: Курс лекций. М.: КомКнига. – 2006.
- [115] Арсеев П.И. О диаграммной технике для неравновесных систем: вывод, некоторые особенности и некоторые применения.// УФН. – 2015. – Т.185. – С.1271.
- [116] Hubbard J.C. Electron correlations in narrow energy bands. IV. The atomic representation.// Proc. R. Soc. London A. – 1965. – V.285. – P.542.
- [117] Зайцев Р.О. Обобщенная диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном антиферромагнетике.// ЖЭТФ. – 1975. – Т.68. – С.207.
- [118] Зайцев Р. О. Диаграммная техника и газовое приближение в модели Хаббарда.// ЖЭТФ. – 1976. – Т.70. – С.1100.
- [119] Fransson J., Eriksson O., Sandalov I. Many-Body Approach to Spin-Dependent Transport in Quantum Dot Systems.// Phys. Rev. Lett. - 2002. - V.88. - P.226601.
- [120] Fransson J., Sandalov I., Eriksson O. A perfect spin-filter quantum dot system.//
 J.Phys.: Cond. Mat. 2004. V.16. P.L249.

- [121] Fransson J. Nonequilibrium theory for a quantum dot with arbitrary on-site correlation strength coupled to leads.// Phys. Rev. B. - 2005. - V.72. - P.075314.
- [122] Chen F., Ochoa M.A., Galperin M. Nonequilibrium diagrammatic technique for Hubbard Green functions.// J. Chem. Phys. - 2017. - V.146. - P.092301.
- [123] Sandalov I., Nazmitdinov R. G. Nonlinear transport at the strong intra-dot Coulomb interaction.// J.Phys.: Cond. Mat. - 2006. - V.18. - P.L55.
- [124] Sandalov I., Nazmitdinov R. G. Shell effects in nonlinear magnetotransport through small quantum dots.// Phys. Rev. B. - 2007. - V.75. - P.075315.
- [125] Вальков В.В., Овчинников С.Г. *Квазичастицы в сильно коррелированных си*стемах. – Новосибирск: Изд-во СО РАН. – 2001.
- [126] Вальков В. В., Валькова Т. А. Обобщенная диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном антиферромагнетике.// ФНТ. – 1985. – Т.11. – С.951.
- [127] Heersche H. B., de Groot Z., Folk J. A. et al. Electron Transport through Single Mn₁₂
 Molecular Magnets.// Phys. Rev. Lett. 2006. V.96. P.206801.
- [128] Jo M.-H., Grose J. E., Baheti K. et al. Signatures of Molecular Magnetism in Single-Molecule Transport Spectroscopy.// Nano Lett. - 2006. - V.6. - P.2014.
- [129] Zacharia I. G., Goldhaber-Gordon D., Granger G. et al. Temperature dependence of Fano line shapes in a weakly coupled single-electron transistor.// Phys. Rev. B. – 2001. – V.64. – P.155311.
- [130] Hirjibehedin C. F., Lin C.-Y., Otte A. F. et al. Large Magnetic Anisotropy of a Single Atomic Spin Embedded in a Surface Molecular Network.// Science. – 2007. – V.317. – P.1199.
- [131] Park K., Pederson M. R. Effect of extra electrons on the exchange and magnetic anisotropy in the anionic single-molecule magnet Mn₁₂.// Phys. Rev. B. - 2004. - V.70. - P.054414.

- [132] Qu F., Hawrylak P. Magnetic Exchange Interactions in Quantum Dots Containing Electrons and Magnetic Ions.// Phys. Rev. Lett. - 2005. - V.95. - P.217206.
- [133] Tikhodeev S.G., Ueba H. in: Ivanov A.L., Tikhodeev S.G. (Eds.), Problems of Condensed Matter Physics. – Oxford: Clarendon Press. – 2008.
- [134] Xiang Z.-L., Ashhab S., You J. Q., Nori F. Hybrid quantum circuits: Superconducting circuits interacting with other quantum systems.// Rev. Mod. Phys. - 2013. - V.85. -P.623.
- [135] A. Martin-Rodero, A.L. Yeyati Josephson and Andreev transport through quantum dots.// Adv. Phys. - 2011. - V.60. - P.899.
- [136] Wollman D. A., Van Harlingen D. J., Lee W. C. et al. Experimental Determination of the Superconducting Pairing State in YBCO from the Phase Coherence of YBCO-Ph dc SQUIDs.// Phys. Rev. Lett. - 1993. - V.71. - P.2134.
- [137] Kashiwaya S., Tanaka Y. Tunnelling effects on surface bound states in unconventional superconductors.// Rep. Prog. Phys. – 2000. – V.63. – P.1641.
- [138] Andreev A. F. The Thermal Conductivity of the Intermediate State in Superconductors.// Sov. Phys. JETP. – 1964. – V.19. – P.1228.
- [139] Glazman L. I., Matveev K. A. Resonant Josephson current through Kondo impurities in a tunnel barrier.// JETP Lett. - 1989. - V.49. - P.659.
- [140] Rozhkov A. V., Arovas D. P. Josephson Coupling through a Magnetic Impurity.// Phys. Rev. Lett. - 1999. - V.82. - P.2788.
- [141] van Dam J. V., Nazarov Y. V., Bakkers E. P. A. M. et al. Supercurrent reversal in quantum dots.// Nature. - 2006. - V.442. - P.667.
- [142] Delagrange R., Luitz D. J., Weil R. et al. Manipulating the magnetic state of a carbon nanotube Josephson junction using the superconducting phase.// Phys. Rev. B. – 2015. – V.91. – P.241401(R).

- [143] Pan H., Lin T.-H. Spin-flip effects on the supercurrent through mesoscopic superconducting junctions.// J. Phys.: Cond. Mat. - 2005. - V.17. - P.5207.
- [144] Kawaguchi S. Spin-Flip Effects on Current in a Quantum Dot with a Josephson Junction System.// J. Phys. Soc. Jpn. – 2012. – V.81. – P.034707.
- [145] Bezuglyi E. V., Rozhavsky A. S., Vagner I. D., Wyder P. Combined effect of Zeeman splitting and spin-orbit interaction on the Josephson current in a superconductor-twodimensional electron gas-superconductor structure.// Phys. Rev. B. - 2002. - V.66. -P.052508.
- [146] Kasumov A. Yu., Tsukagoshi K., Kawamura M. et al. Proximity effect in a superconductor-metallofullerene-superconductor molecular junction.// Phys. Rev. B. – 2005. – V.72. – P.033414.
- [147] Zhu Y., Sun Q.-f., Lin T.-h. Probing spin states of coupled quantum dots by a dc Josephson current.// Phys. Rev. B. - 2002. - V.66. - P.085306.
- [148] Bardeen J., Cooper L. N., Schrieffer J. R. Theory of Superconductivity.// Phys. Rev. - 1957. - V.108. - P.1175.
- [149] Gor'kov L. P. On the Energy Spectrum of Superconductors.// ЖЭΤΦ 1958. T.34.
 C.735.
- [150] Nambu Y. Quasi-Particles and Gauge Invariance in the Theory of Superconductivity.// Phys. Rev. - 1960. - V.117. - P.648.
- [151] Вонсовский С. В., Изюмов Ю. А., Курмаев Э. З. Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений. – М.: Наука. – 1977.
- [152] Beenakker C. W. J., van Houten H. in: Koch H., Lubbig H. (Eds.), Single Electron Tunneling and Mesoscopic Devices. – Berlin: Springer. – 1992.
- [153] Девятов И.А., Куприянов М.Ю. Резонансное джозефсоновское туннелирование через SIS переход произвольных размеров.// ЖЭТФ. – 1997. – Т.112. – С.342.

- [154] Ambegaokar V., Baratoff A. Tunneling Between Superconductors.// Phys. Rev. Lett.
 1963. V.10. P.486. Phys. Rev. Lett. 10, 486 (1963)
- [155] Екимов А.И., Онущенко А.А. Квантовый размерный эффект в трёхмерных микрокристаллах полупроводников.// Письма в ЖЭТФ. – 1981. – Т.34. – С.363.
- [156] Ekimov A. I., Efros Al. L. Onushchenko A. A. Quantum size effect in semiconductor microcrystals.// Solid State Commun. – 1985. – V.56. – P.921.
- [157] Oguri A., Hewson A.C. NRG Approach to the Transport through a Finite Hubbard Chain Connected to Reservoirs.// J. Phys. Soc. Jpn. - 2005. - V.74. - P.988.
- [158] Delgado F., Shim Y.-P., Korkusinski M. et al. Spin-Selective Aharonov-Bohm Oscillations in a Lateral Triple Quantum Dot.// Phys. Rev. Lett. - 2008. - V.101. -P.226810.
- [159] Hanson R., Kouwenhoven L. P., Petta J. R. et al. Spins in few-electron quantum dots.// Rev. Mod. Phys. - 2007. - V.79. - P.1217.
- [160] Gimenez I. P., Hsieh C.-Y., Korkusinski M., Hawrylak P. Charged-impurity-induced dephasing of a voltage-controlled coded qubit based on electron spin in a triple quantum dot.// Phys. Rev. B. - 2009. - V.79. - P.205311.
- [161] Torio M. E., Hallberg K., Flach S. et al. Spin filters with Fano dots.// Eur. Phys. J.
 B. 2004. V.37. P.399.
- [162] Haider M. B., Pitters J. L., DiLabio G. A. et al. Controlled Coupling and Occupation of Silicon Atomic Quantum Dots at Room Temperature.// Phys. Rev. Lett. - 2009. -V.102. - P.046805.
- [163] Hsieh C.-Y., Shim Y.-P., Korkusinski M., Hawrylak P. Physics of lateral triple quantum-dot molecules with controlled electron numbers.// Rep. Prog. Phys. – 2007. – V.75. – P.114501.

- [164] Baart T. A., Jovanovic N., Reichl C. et al. Nanosecond-timescale spin transfer using individual electrons in a quadruplequantum- dot device.// Appl. Phys. Lett. - 2016. -V.109. - P.043101.
- [165] Thalineau R., Hermelin S., Wieck A. D. et al. A few-electron quadruple quantum dot in a closed loop.// Appl. Phys. Lett. - 2012. - V.101. - P.103102.
- [166] von Stecher J., Demler E., D. Lukin M., Rey A. M. Probing interaction-induced ferromagnetism in optical superlattices.// New J. Phys. – 2010. – V.12. – P.055009.
- [167] Barthelemy P., Vandersypen L. M. K. Quantum Dot Systems: a versatile platform for quantum simulations.// Ann. Phys. - 2013. - V.525. - P.808.
- [168] Mizel A., Lidar D. A. Exchange interaction between three and four coupled quantum dots: Theory and applications to quantum computing.// Phys. Rev. B. - 2004. - V.70. -P.115310.
- [169] Scarola V. W., Das Sarma S. Exchange gate in solid-state spin-quantum computation: The applicability of the Heisenberg model.// Phys. Rev. A. - 2005. - V.71. - P.032340.
- [170] Venturelli D., Fazio R., Giovannetti V., Minimal Self-Contained Quantum Refrigeration Machine Based on Four Quantum Dots.// Phys. Rev. Lett. - 2013. - V.110.
 - P.256801.
- [171] Nisikawa Y., Oguri A. Numerical renormalization group approach to a quartet quantum-dot array connected to reservoirs: Gate-voltage dependence of the conductance.// Phys. Rev. B. – 2006. – V.73. – P.125108.
- [172] Ozfidan I., Trojnara A. H., Korkusinski M., Hawrylak P. Geometry, chirality, topology and electron-electron interactions in the quadruple quantum dot molecule.// Solid State Commun. – 2013. – V.172. – P.15.
- [173] Jiang Z.-T., Han Q.-Z. Quantum coherent transport through a quadruple quantumdot structure with one continuous channel and two concrete channels.// Phys. Rev. B. – 2008. – V.78. – P.035307.

- [174] Lobos A. M., Aligia A. A. Effects of Interactions in Transport through Aharonov-Bohm-Casher Interferometers.// Phys. Rev. Lett. - 2008. - V.100. - P.016803.
- [175] Fu H.-H., Yao K.-L. Perfect spin-filter and highly spin-polarized current in a quantum network device.// Appl. Phys. Lett. - 2012. - V.100. - P.013502.
- [176] Newns D. M., Read M. Mean-field theory of intermediate valence/heavy fermion systems.// Adv. Phys. - 1987. - V.36. - P.799.
- [177] Fulde P. Electron Correlations in Molecules and Solids. Berlin: Springer. 1983.
- [178] Coleman P. Mixed valence as an almost broken symmetry.// Phys. Rev. B. 1987. V.35. – P.5072.
- [179] Keitler H., Grewe N. in: Falicov L. M., Hanke W., Maple M. B. (Eds.), Valence Fluctuations in Solids. – New York: North-Holland. – 1981.
- [180] Kagan M. Yu., Val'kov V. V. Anomalous resistivity and the origin of heavy mass in the two-band Hubbard model with one narrow band.// ЖЭΤΦ. – 2011. – T.140. – C.179.
- [181] Kagan M. Yu., Val'kov V. V. Anomalous resistivity and superconductivity in the twoband Hubbard model with one narrow band (Review).// Low Temp. Phys. - 2011. - V.37. - P.69.
- [182] Anderson P. W. A poor man's derivation of scaling laws for the Kondo problem.// J. Phys. C. - 1970. - V.3. - P.2436.
- [183] Iche G., Nozieres P. Quantum Brownian motion of a heavy particle: An adiabatic expansion.// Physica A. – 1978. – V.91. – P.485.
- [184] Kagan Yu., Prokof'ev N. V. Electronic polaron effect and the quantum diffusion of heavy particle in a metal.// ЖЭΤΦ. – 1986. – T.90. – C.2176.
- [185] Kagan Yu., Prokof'ev N.V. Quantum tunneling in a metal and the heavy-electron problem.// ЖЭΤΦ. – 1987. – T.93. – C.366.

- [186] Mahan D. A. Excitons in Metals: Infinite Hole Mass.// Phys. Rev. 1967. V.163.
 P.612.
- [187] Nozieres P., de Dominicis L. T. Singularities in the X-Ray Absorption and Emission of Metals. III. One-Body Theory Exact Solution.// Phys. Rev. - 1969. - V.178. - P.1097.
- [188] Anderson P.W. Infrared Catastrophe in Fermi Gases with Local Scattering Potentials.// Phys. Rev. Lett. - 1958. - V.18. - P.1049.
- [189] Demishev S. V., Samarin A. N., Huang J. et al. Magnetization of Mn_{1^{*}x} Fe_xSi in high magnetic fields up to 50 T: Possible evidence of a field-induced Griffiths phase.// JETP Lett. - 2016. - V.104. - P.116.
- [190] Matveev K. A., Larkin A. I. Interaction-induced threshold singularities in tunneling via localized levels.// Phys. Rev. B. - 1992. - V.46. - P.15337.
- [191] Yu Z.G., Smith D.L., Saxena A. et al. Molecular geometry fluctuations and fielddependent mobility in conjugated polymers.// Phys. Rev. B. - 2001. - V.63. - P.085202.
- [192] Friesen M., Rugheimer P., Savage D. E. et al. Practical design and simulation of silicon-based quantum-dot qubits.// Phys. Rev. B. - 2003. - V.67. - P.121301(R).
- [193] Meir Y., Wingreen N.S. Landauer Formula for the Current through an Interacting Electron Region.// Phys. Rev. Lett. - 1992. - V.68. - P.2512.
- [194] Jauho A.-P., Wingreen N.S., Meir Y. Time-Dependent Transport in Interacting and Noninteracting Resonant-Tunneling Systems.// Phys. Rev. B. - 1994. - V.50. - P.5528.
- [195] You J. Q., Zheng H.-Z. Spectral properties of a double-quantum-dot structure: A causal Green's function approach.// Phys. Rev. B. – 1999. – V.60. – P.8727.
- [196] You J. Q., Zheng H.-Z. Electron transport through a double-quantum-dot structure with intradot and interdot Coulomb interactions.// Phys. Rev. B. – 1999. – V.60. – P.13314.
- [197] Lacroix C. Density of states for the Anderson model.// J. Phys. F: Metal Phys. 1981. – V.11. – P.2389.

- [198] Meir Y., Wingreen N. S., Lee P. A. Transport through a Strongly Interacting Electron System: Theory of Periodic Conductance Oscillantions.// Phys. Rev. Lett. - 1991. -V.66. - P.3048.
- [199] Зубарев Д.Н., Двухвременные функции Грина в статистической физике.// УФН. – 1960. – Т.71. – С.71.
- [200] Yan J.-X., Fu H.-H. Bound states in the continuum and Fano antiresonance in electronic transport through a four-quantum-dot system.// Physica B. – 2013. – V.410. – P.197.
- [201] Volya A., Zelevinsky V. Non-Hermitian effective Hamiltonian and continuum shell model.// Phys. Rev. C. - 2003. - V.67. - P.054322.
- [202] Sadreev A. F., Bulgakov E. N., Rotter I. Bound states in the continuum in open quantum billiards with a variable shape.// Phys. Rev. B. - 2006. - V.73. - P.235342.
- [203] Liu Y.-S., Chen H., Yang X.-F. Transport properties of an Aharonov-Bohm ring with strong interdot Coulomb interaction.// J. Phys.: Cond. Mat. - 2007. - V.19. - P.246201.
- [204] Chen G., Klimeck G., Datta S. et al. Resonant tunneling through quantum-dot arrays.// Phys. Rev. B. - 1994. - V.50. - P.8035.
- [205] Gong W., Zheng Y., Liu Y., Lu T. Well-defined insulating band for electronic transport through a laterally coupled double-quantum-dot chain: Nonequilibrium Green's function calculations.// Phys. Rev. B. – 2006. – V.73. – P.245329.
- [206] Aleiner I. L., Brouwer P. W., Glazman L. I. Quantum effects in Coulomb blockade.// Phys. Rep. - 2002. - V.358. - P.309.
- [207] Cronenwett S. M., Oosterkamp T. H., Kouwenhoven L. P. A tunable Kondo effect in quantum dots.// Science. – 1998. – V.281. – P.540.
- [208] Shang R., Li H.-O., Cao G. et al. Observation of the Kondo effect in a quadruple quantum dot.// Phys. Rev. B. - 2015. - V.91. - P.245102.

- [209] Doniach S. The Kondo lattice and weak antiferromagnetism.// Physica B. 1977. V.91. – P.231.
- [210] Ribeiro L. C., Vernek E., Martins G. B., Anda E. V. Kondo temperature and screening extension in a double quantum dot system.// Phys. Rev. B. - 2012. - V.85. - P.165401.
- [211] Prinz G. A. Magnetoelectronics.// Science. 1998. V.282. P.1660.
- [212] Wolf S.A., Awschalom D.D., Buhrman R.A. et al. Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future.// Science. - 2001. - V.294. - P.1488.
- [213] Рашба Э. И. Свойства полупроводников с экстремальной петлей. 1. Циклотрон и комбинационный резонанс в магнитном поле, перпендикулярном плоскости петли.// ФТТ. – 1960. – Т.2. – С.1224.
- [214] Bychkov Y.A., Rashba E.I. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers.// J. Phys. C. – 1984. – V.17. – P.6039.
- [215] Koga T., Nitta J., Akazaki T., Takayanagi H. Rashba Spin-Orbit Coupling Probed by the Weak Antilocalization Analysis in InAlAs/InGaAs/InAlAs Quantum Wells as a Function of Quantum Well Asymmetry.// Phys. Rev. Lett. - 2002. - V.89. - P.046801.
- [216] Bercioux D., Governale M., Cataudella V., Ramaglia V. M. Rashba effect in quantum networks.// Phys. Rev. B. - 2005. - V.72. - P.075305.
- [217] Aharonov Y., Bohm D. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory.// Phys. Rev. - 1959. - V.115. - P.485.
- [218] Sun Q.-F., Wang J., Guo H. Quantum transport theory for nanostructures with Rashba spin-orbital interaction.// Phys. Rev. B. - 2005. - V.71. - P.165310.
- [219] Aharony A., Entin-Wohlman O., Tokura Y., Katsumoto S. Spin filtering by a periodic spintronic device.// Phys. Rev. B. - 2008. - V.78. - P.125328.
- [220] Wu M. W., Zhou J., Shi Q. W. Spin-dependent quantum transport in periodic magnetic modulations: Aharonov-Bohm ring structure as a spin filter.// Appl. Phys. Lett. - 2004.
 - V.85. - P.1012.

- [221] Ojeda J. H., Pacheco M., Orellana P. A. An array of quantum dots as a spin filter device by using Dicke and Fano effects.// Nanotechnology. – 2009. – V.20. – P.434013.
- [222] Oguri A., Nisikawa Y., Tanaka Y., Numata T. Kondo screening of a high-spin Nagaoka state in a triangular quantum dot.// J. Magn. Magn. Mater. - 2007. - V.310. - P.1139.
- [223] Johnson A. C., Petta J. R., Marcus C. M. et al. Singlet-triplet spin blockade and charge sensing in a few-electron double quantum dot.// Phys. Rev. B. - 2005. - V.72. - P.165308.
- [224] Hsieh C.-Y., Shim Y.-P., Hawrylak P. Theory of electronic properties and quantum spin blockade in a gated linear triple quantum dot with one electron spin each.// Phys. Rev. B. - 2012. - V.85. - P.085309.
- [225] Weinmann D., Hausler W., Kramer B. Spin Blockades in Linear and Nonlinear Transport through Quantum Dots.// Phys. Rev. Lett. - 2012. - V.74. - P.984.
- [226] Urban D., Konig J. Tunable dynamical channel blockade in double-dot Aharonov-Bohm interferometers.// Phys. Rev. B. – 2009. – V.79. – P.165319.
- [227] Michaelis B., Emary C., Beenakker C.W.J. All-electronic coherent population trapping in quantum dots.// Europhys. Lett. - 2006. - V.73. - P.677.
- [228] Poltl C., Emary C., Brandes T. Two-particle dark state in the transport through a triple quantum dot.// Phys. Rev. B. - 2009. - V.80. - P.115313.
- [229] Maslova N. S., Mantsevich V. N., Arseev P. I. Spatial-Symmetry-Induced Dark States and Charge Trapping Effects in the Coupled Quantum Dots.// ЖЭΤΦ. – 2016. – T.122.
 – C.1084.
- [230] Jacob D., Wunsch B., Pfannkuche D. Charge localization and isospin blockade in vertical double quantum dots.// Phys. Rev. B. - 2004. - V.70. - P.081314(R).
- [231] Arseev P. I., Maslova N. S., Mantsevich V. N. The effect of Coulomb correlations on the nonequilibrium charge redistribution tuned by the tunneling current.// ЖЭТФ. – 2012. – T.142. – C.156.

- [232] Kitaev A. Y. Unpaired Majorana fermions in quantum wires.// Phys. Usp. 2001. V.44. – P.131.
- [233] Kitaev A. Y. Fault-tolerant quantum computation by anyons.// Ann. Phys. 2003. V.303. – P.2.
- [234] Zurek W. H. Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical.// Rev. Mod. Phys. - 2003. - V.75. - P.715.
- [235] Stern A. Non-Abelian states of matter.// Nature. 2010. V.464. P.187.
- [236] Alicea J., Oreg Y., Refael G. et al. Non-Abelian statistics and topological quantum information processing in 1D wire networks.// Nature Phys. - 2011. - V.7. - P.412.
- [237] Ivanov D. A. Non-Abelian Statistics of Half-Quantum Vortices in p-Wave Superconductors.// Phys. Rev. Lett. - 2001. - V.86. - P.268.
- [238] Fu L., Kane C. L. Superconducting proximity effect and majorana fermions at the surface of a topological insulator.// Phys. Rev. Lett. - 2008. - V.100. - P.096407.
- [239] Rakhmanov A. L., Rozhkov A. V., Nori F. Majorana fermions in pinned vortices.// Phys. Rev. B. - 2011. - V.84. - P.075141.
- [240] Akzyanov R. S., Rakhmanov A. L., Rozhkov A. V., Nori F. Majorana fermions at the edge of superconducting islands.// Phys. Rev. B. - 2015. - V.92. - P.075432.
- [241] Lutchyn R. M., Sau J. D., Das Sarma S. Majorana Fermions and a Topological Phase Transition in Semiconductor-Superconductor Heterostructures.// Phys. Rev. Lett. - 2010.
 - V.105. - P.077001.
- [242] Oreg Y., Refael G., von Oppen F. Helical Liquids and Majorana Bound States in Quantum Wires.// Phys. Rev. Lett. - 2010. - V.105. - P.177002.
- [243] Mourik V., Zuo K., Frolov S. M. et al. Signatures of Majorana Fermions in Hybrid Superconductor-Semiconductor Nanowire Devices.// Science. - 2012. - V.336. - P.1003.

- [244] Deng M. T., Yu C. L., Huang G. Y. et al. Anomalous Zero-Bias Conductance Peak in a Nb-InSb Nanowire-Nb Hybrid Device.// Nano Lett. - 2012. - V.12. - P.6414.
- [245] Das A., Ronen Y., Most Y. et al. Zero-bias peaks and splitting in an Al-InAs nanowire topological superconductor as a signature of Majorana fermions.// Nat. Phys. - 2012. -V.8. - P.887.
- [246] Blonder G. E., Tinkham M., Klapwijk T. M. Transition from metallic to tunneling regimes in superconducting microconstrictions: Excess current, charge imbalance, and supercurrent conversion.// Phys. Rev. B. – 1982. – V.25. – P.4515.
- [247] Law K.T., Lee P.A., Ng T.K. Majorana Fermion Induced Resonant Andreev Reflection.// Phys. Rev. Lett. - 2009. - V.103. - P.237001.
- [248] Flensberg K. Tunneling characteristics of a chain of Majorana bound states.// Phys. Rev. B. - 2010. - V.82. - P.180516(R).
- [249] Wu B. H., Cao J. C. Tunneling transport through superconducting wires with Majorana bound states.// Phys. Rev. B. - 2012. - V.85. - P.085415.
- [250] Das Sarma S., Sau J. D., Stanescu T. D. Splitting of the zero-bias conductance peak as smoking gun evidence for the existence of the Majorana mode in a superconductorsemiconductor nanowire.// Phys. Rev. B. - 2012. - V.86. - P.220506(R).
- [251] Rainis D., Trifunovic L., Klinovaja J., Loss D. Towards a realistic transport modeling in a superconducting nanowire with Majorana fermions.// Phys. Rev. B. - 2013. - V.87. - P.024515.
- [252] Deng M., Vaitiekenas S., Hansen E. B. et al. Majorana bound state in a coupled quantum-dot hybrid-nanowire system.// Science. – 2016. – V.354. – P.1557. Science 354, 1557 (2016).
- [253] Nichele F., Drachmann A. C. C., Whiticar A. M. et al. Scaling of Majorana Zero-Bias Conductance Peaks.// Phys. Rev. Lett. - 2017. - V.119. - P.136803.

- [254] Takei S., Fregoso B. M., Hui H.-Y. et al. Soft Superconducting Gap in Semiconductor Majorana Nanowires.// Phys. Rev. Lett. - 2013. - V.110. - P.186803.
- [255] Liu C.-X., Setiawan F., Sau J. D., Das Sarma S. Phenomenology of the soft gap, zerobias peak, and zero-mode splitting in ideal Majorana nanowires.// Phys. Rev. B. - 2017.
 - V.96. - P.054520.
- [256] Cheng M., Lutchyn R. M., Das Sarma S. Topological protection of Majorana qubits.// Phys. Rev. B. - 2012. - V.85. - P.165124.
- [257] Rainis D., Loss D. Topological protection of Majorana qubits.// Phys. Rev. B. 2012.
 V.85. P.174533.
- [258] Liu J., Potter A.C., Law K.T., Lee P.A. Zero-Bias Peaks in the Tunneling Conductance of Spin-Orbit-Coupled Superconducting Wires with and without Majorana End-States.// Phys. Rev. Lett. - 2012. - V.109. - P.267002.
- [259] Bagrets D., Altland A. Class D Spectral Peak in Majorana Quantum Wires.// Phys. Rev. Lett. - 2012. - V.109. - P.227005.
- [260] Rieder M.-T., Kells G., Duckheim M. et al. Endstates in multichannel spinless p-wave superconducting wires.// Phys. Rev. B. - 2012. - V.86. - P.125423.
- [261] Kells G., Meidan D., Brouwer P. Low-energy subgap states in multichannel p-wave superconducting wires.// Phys. Rev. B. - 2012. - V.85. - P.060507(R).
- [262] Lee E. J. H., Jiang X., Aguado R. et al. Zero-Bias Anomaly in a Nanowire Quantum Dot Coupled to Superconductors.// Phys. Rev. Lett. - 2012. - V.109. - P.186802.
- [263] Pikulin D. I., Dahlhaus J. P., Wimmer M. et al. A zero-voltage conductance peak from weak antilocalization in a Majorana nanowire.// New J. Phys. - 2012. - V.14. - P.125011.
- [264] Pan H., Cole W. S., Sau J. D., Das Sarma S. Generic quantized zero-bias conductance peaks in superconductor-semiconductor hybrid structures.// Phys. Rev. B. - 2020. -V.101. - P.024506.

- [265] Krogstrup P., Ziino N., Chang W. et al. Epitaxy of semiconductor-superconductor nanowires.// Nature Mat. - 2015. - V.14. - P.400.
- [266] Chang W., Albrecht S. M., Jespersen T. S. et al. Hard gap in epitaxial semiconductorsuperconductor nanowires.// Nature Nanotech. – 2015. – V.10. – P.232.
- [267] Gul O., Zhang H., de Vries F. et al. Hard Superconducting Gap in InSb Nanowires.// Nano Lett. - 2017. - V.17. - P.2690.
- [268] Gazibegovic S., Car D., Zhang H. et al. Epitaxy of advanced nanowire quantum devices.// Nature. - 2017. - V.548. - P.434.
- [269] Zhang H., Gul O., Conesa-Boj S. et al. Ballistic superconductivity in semiconductor nanowires.// Nat. Commun. - 2017. - V.8. - P.16025.
- [270] Zhang H., Liu C.-X., Gazibegovic S. et al. Quantized Majorana conductance.// Nature. - 2018. - V.556. - P.74.
- [271] Franz M., Pikulin D.I. Quantized, finally.// Nat. Phys. 2018. V.14. P.334.
- [272] Zhang H., Liu C.-X., Gazibegovic S. et al. Editorial Expression of Concern: Quantized Majorana conductance.// Nature. - 2020. - V.581. - P.E4.
- [273] Moore C., Stanescu T., Tewari S. Two-terminal charge tunneling: Disentangling Majorana zero modes from partially separated Andreev bound states in semiconductorsuperconductor heterostructures.// Phys. Rev. B. - 2018. - V.97. - P.165302.
- [274] Kells G., Meidan D., Brouwer P. Near-zero-energy end states in topologically trivial spin-orbit coupled superconducting nanowires with a smooth confinement.// Phys. Rev. B. 2012. V.86. P.100503(R).
- [275] Stanescu T. D., Lutchyn R. M., Das Sarma S. Dimensional crossover in spin-orbitcoupled semiconductor nanowires with induced superconducting pairing.// Phys. Rev. B. - 2013. - V.87. - P.094518.
- [276] Haim A., Berg E., von Oppen F., Oreg Y. Signatures of Majorana Zero Modes in Spin-Resolved Current Correlations.// Phys. Rev. Lett. - 2015. - V.114. - P.166406.

- [277] Chen J., Woods B. D., Yu P. et al. Ubiquitous non-majorana zero-bias conductance peaks in nanowire devices.// Phys. Rev. Lett. - 2019. - V.123. - P.107703.
- [278] Woods B. D., Chen J., Frolov S. M., Stanescu T. D. Zero-energy pinning of topologically trivial bound states in multiband semiconductor-superconductor nanowires.// Phys. Rev. B. – 2019. – V.100. – P.125407.
- [279] Liu C.-X., Sau J. D., Stanescu T. D., Das Sarma S. Andreev bound states versus Majorana bound states in quantum dot-nanowire-superconductor hybrid structures: Trivial versus topological zero-bias conductance peaks.// Phys. Rev. B. – 2017. – V.96. – P.075161.
- [280] Moore C., Zeng C., Stanescu T., Tewari S. Quantized zero-bias conductance plateau in semiconductor-superconductor heterostructures without topological Majorana zero modes.// Phys. Rev. B. - 2018. - V.98. - P.155314.
- [281] Lee E. J. H., Jiang X., Houzet M. et al. Spin-resolved Andreev levels and parity crossings in hybrid superconductor-semiconductor nanostructures.// Nature Nanotech. - 2014. - V.9. - P.79.
- [282] Liu C.-X., Sau J. D., Das Sarma S. Distinguishing topological Majorana bound states from trivial Andreev bound states: Proposed tests through differential tunneling conductance spectroscopy.// Phys. Rev. B. - 2018. - V.97. - P.214502.
- [283] Reeg C., Dmytruk O., Chevallier D. et al. Zero-energy Andreev bound states from quantum dots in proximitized Rashba nanowires.// Phys. Rev. B. - 2018. - V.98. -P.245407.
- [284] Deng M., Vaitiekenas S., Prada E. et al. Nonlocality of Majorana modes in hybrid nanowires.// Phys. Rev. B. - 2018. - V.98. - P.085125.
- [285] Li J., Yu T., Lin H.-Q., You J. Probing the non-locality of Majorana fermions via quantum correlations.// Sci. Rep. - 2015. - V.4. - P.4930.
- [286] Prada E., Aguado R., San-Jose P. Measuring Majorana nonlocality and spin structure with a quantum dot.// Phys. Rev. B. - 2017. - V.96. - P.085418.

- [287] Clarke D. J. Experimentally accessible topological quality factor for wires with zero energy modes.// Phys. Rev. B. - 2017. - V.96. - P.201109(R).
- [288] Ricco L.S., de Souza M., Figueira M.S. et al. Spin-dependent zero-bias peak in a hybrid nanowire-quantum dot system: Distinguishing isolated Majorana fermions from Andreev bound states.// Phys. Rev. B. – 2019. – V.99. – P.155159.
- [289] Lee M., Lim J. S., Lopez R. Kondo effect in a quantum dot side-coupled to a topological superconductor.// Phys. Rev. B. - 2013. - V.87. - P.241402(R).
- [290] Nilsson J., Akhmerov A. R., Beenakker C. W. J. Splitting of a Cooper Pair by a Pair of Majorana Bound States.// Phys. Rev. Lett. - 2008. - V.101. - P.120403.
- [291] Liu J., Zhang F.-C., Law K. Majorana fermion induced nonlocal current correlations in spin-orbit coupled superconducting wires.// Phys. Rev. B. – 2013. – V.88. – P.064509.
- [292] Bolech C. J., Demler E. Observing Majorana bound States in p-Wave Superconductors Using Noise Measurements in Tunneling Experiments.// Phys. Rev. Lett. - 2007. - V.98.
 - P.237002.
- [293] Liu D. E., Cheng M., Lutchyn R. M. Probing Majorana physics in quantum-dot shotnoise experiments.// Phys. Rev. B. - 2015. - V.91. - P.081405(R).
- [294] Haim A., Berg E., von Oppen F., Oreg Y. Current correlations in a Majorana beam splitter.// Phys. Rev. B. - 2015. - V.92. - P.245112.
- [295] Valentini S., Governale M., Fazio R., Taddei F. Finite-frequency noise in a topological superconducting wire.// Physica E. - 2016. - V.82. - P.254.
- [296] Smirnov S. Non-equilibrium Majorana fluctuations.// New J. Phys. 2017. V.19. -P.063020.
- [297] Smirnov S. Universal Majorana thermoelectric noise.// Phys. Rev. B. 2018. V.97.
 P.165434.
- [298] Albrecht S. M., Higginbotham A., Madsen M. et al. Exponential protection of zero modes in Majorana islands.// Nature. - 2016. - V.531. - P.206.

- [299] Hekking F., Glazman L., Matveev K., Shekhter R. Coulomb blockade of two-electron tunneling.// Phys. Rev. Lett. - 1993. - V.70. - P.4138.
- [300] Hergenrother J. M., Tinkham M. Charge transport by Andreev reflection through a mesoscopic superconducting island.// Phys. Rev. Lett. - 1994. - V.72. - P.1742.
- [301] Averin D. V., Nazarov Yu. V. Single-electron charging of a superconducting island.// Phys. Rev. Lett. - 1992. - V.69. - P.1993. Phys. Rev. Lett. 69, 1993 (1992).
- [302] Fu L. Electron Teleportation via Majorana Bound States in a Mesoscopic Superconductor.// Phys. Rev. Lett. - 2010. - V.104. - P.056402.
- [303] Zazunov A., Yeyati A. L., Egger R. Coulomb blockade of Majorana-fermion-induced transport.// Phys. Rev. B. - 2011. - V.84. - P.165440.
- [304] Hutzen R., Zazunov A., Braunecker B.et al. Majorana Single-Charge Transistor.// Phys. Rev. Lett. - 2012. - V.109. - P.166403.
- [305] Khaymovich I. M., Pekola J. P., Melnikov A. S. Nonlocality and dynamic response of Majorana states in fermionic superfluids.// New J. Phys. - 2017. - V.19. - P.123026.
- [306] Chiu C.-K., Sau J. D., Das Sarma S. Conductance of a superconducting Coulombblockaded Majorana nanowire.// Phys. Rev. B. - 2017. - V.96. - P.054504.
- [307] Yacoby A., Heiblum M., Umansky V. et al. Unexpected Periodicity in an Electronic Double Slit Interference Experiment.// Phys. Rev. Lett. - 1994. - V.73. - P.3149.
- [308] Cabosart D., Faniel S., Martins F. et al. Imaging coherent transport in a mesoscopic graphene ring.// Phys. Rev. B. - 2014. - V.90. - P.205433.
- [309] Akhmerov A. R., Dahlhaus J. P., Hassler F. et al. Quantized Conductance at the Majorana Phase Transition in a Disordered Superconducting Wire.// Phys. Rev. Lett. – 2011. – V.106. – P.057001.
- [310] Whiticar A. M., Fornieri A., O'Farrell E. C. T. et al. Interferometry and coherent single-electron transport through hybrid superconductor-semiconductor Coulomb islands.// e-print arXiv:1902.07085. – 2019.

- [311] Ioselevich P. A., Feigelman M. V. Anomalous Josephson Current via Majorana Bound States in Topological Insulators.// Phys. Rev. Lett. - 2011. - V.106. - P.077003.
- [312] Snelder M., Veldhorst M., Golubov A.A., Brinkman A. Andreev bound states and current-phase relations in three-dimensional topological insulators.// Phys. Rev. B. – 2013. – V.87. – P.104507.
- [313] Jacquod P., Buttiker M. Signatures of Majorana fermions in hybrid normalsuperconducting rings.// Phys. Rev. B. - 2013. - V.88. - P.241409(R).
- [314] Tripathi K. M., Das S., Rao S. Fingerprints of Majorana Bound States in Aharonov-Bohm Geometry.// Phys. Rev. Lett. - 2016. - V.116. - P.166401.
- [315] Sau J. D., Swingle B., Tewari S. Proposal to probe quantum nonlocality of Majorana fermions in tunneling experiments.// Phys. Rev. B. - 2015. - V.92. - P.020511.
- [316] Hell M., Flensberg K., Leijnse M. Distinguishing Majorana bound states from localized Andreev bound states by interferometry.// Phys. Rev. B. - 2018. - V.97. - P.161401(R).
- [317] Flensberg K. Non-Abelian Operations on Majorana Fermions via Single-Charge Control.// Phys. Rev. Lett. - 2011. - V.106. - P.090503.
- [318] Liu D. E., Baranger H. U. Detecting a Majorana-fermion zero mode using a quantum dot.// Phys. Rev. B. - 2011. - V.84. - P.201308(R).
- [319] Chiu C.-K., Sau J. D., Das Sarma S. Conductance interference in a superconducting Coulomb blockaded Majorana ring.// Phys. Rev. B. - 2018. - V.97. - P.035310.
- [320] Dessotti F. A., Ricco L. S., de Souza M. et al. Probing the antisymmetric Fano interference assisted by a Majorana fermion.// J. Appl. Phys. - 2014. - V.116. - P.173701.
- [321] Shang E.-M., Pan Y.-M., Shao L.-B., Wang B.-G. Detection of Majorana fermions in an Aharonov-Bohm interferometer.// Chin. Phys. B. - 2014. - V.23. - P.057201.
- [322] Ueda A., Yokoyama T. Anomalous interference in Aharonov-Bohm rings with two Majorana bound states.// Phys. Rev. B. - 2014. - V.90. - P.081405(R).

- [323] Jiang C., Zheng Y.-S. Fano effect in the Andreev reflection of the Aharonov-Bohm-Fano ring with Majorana bound states.// Sol. State Commun. – 2015. – V.212. – P.14.
- [324] Schuray A., Weithofer L., Recher P. Fano resonances in Majorana bound states-quantum dot hybrid systems.// Phys. Rev. B. - 2017. - V.96. - P.085417.
- [325] Zhang Y.-J., Zhang S., Yi G.-Y. et al. Interference effects in the Aharonov-Bohm geometries with Majorana bound states.// Superlattices and Microstructures. – 2018. – V.113. – P.25.
- [326] Rainis D., Saha A., Klinovaja J. et al. Transport Signatures of Fractional Fermions in Rashba Nanowires.// Phys. Rev. Lett. - 2014. - V.112. - P.196803.
- [327] Zeng Z. Y., Li B., Claro F. Electronic transport in hybrid mesoscopic structures: A nonequilibrium Green function approach.// Phys. Rev. B. – 2003. – V.68. – P.115319.
- [328] Nowak M. P., Szafran B., Peeters F. M. Fano resonances and electron spin transport through a two-dimensional spin-orbit-coupled quantum ring.// Phys. Rev. B. – 2011. – V.84. – P.235319.
- [329] Landron de Guevara M. L., Orellana P. A. Electronic transport through a parallelcoupled triple quantum dot molecule: Fano resonances and bound states in the continuum.// Phys. Rev. B. - 2006. - V.73. - P.205303.
- [330] Shahbazyan T. V., Raikh M. E. Two-channel resonant tunneling.// Phys. Rev. B. 1994. – V.49. – P.17123.
- [331] Vorrath T., Brandes T. Dicke effect in the tunnel current through two double quantum dots.// Phys. Rev. B. - 2003. - V.68. - P.035309.
- [332] Myoung N., Ryu J.-W., Park H. et al. Splitting of conductance resonance through a magnetic quantum dot in graphene.// Phys. Rev. B. - 2019. - V.100. - P.045427.

- [333] Вальков В. В., Мицкан В. А., Шустин М. С. Каскад квантовых переходов и магнетокалорические аномалии в открытой нанопроволоке.// Письма в ЖЭТФ. – 2017. – Т.106. – С.762.
- [334] Вальков В. В., Мицкан В. А., Шустин М. С. Фермионная четность основного состояния и калорические свойства сверхпроводящей нанопроволоки.// ЖЭТФ. – 2019. – Т.156. – С.507.
- [335] Боголюбов Н. Н. Лекции по квантовой статистике. Киев: Наукова думка. 1949.
- [336] Боголюбов Н. Н. О новом методе в теории сверхпроводимости.// ЖЭТФ. 1958. – Т.34. – С.58.
- [337] Sedlmayr N., Bena C. Visualizing Majorana bound states in one and two dimensions using the generalized Majorana polarization.// Phys. Rev. B. – 2015. – V.92. – P.115115.
- [338] Sedlmayr N., Aguiar-Hualde J. M., Bena C. Majorana bound states in open quasi-onedimensional and two-dimensional systems with transverse Rashba coupling.// Phys. Rev.
 B. - 2016. - V.93. - P.155425.
- [339] Bulgakov E. N., Maksimov D. N. Topological Bound States in the Continuum in Arrays of Dielectric Spheres.// Phys. Rev. Lett. - 2017. - V.118. - P.267401.
- [340] Benalcazar W. A., Cerjan A. Bound states in the continuum of higher-order topological insulators.// Phys. Rev. B. - 2020. - V.101. - P.161116(R).
- [341] Anderson P. W. Localized magnetic states in metals.// Phys. Rev. 1961. V.124. -P.41.
- [342] Miroshnichenko A. E., Kivshar Y. S. Engineering Fano resonances in discrete arrays.// Phys. Rev. E. - 2005. - V.72. - P.056611.
- [343] Leijnse M., Flensberg K. Quantum Information Transfer between Topological and Spin Qubit Systems.// Phys. Rev. Lett. - 2011. - V.107. - P.210502.

- [344] Sticlet D., Bena C., Simon P. Spin and Majorana Polarization in Topological Superconducting Wires.// Phys. Rev. Lett. - 2012. - V.108. - P.096802.
- [345] Nagai Y., Nakamura H., Machida M. Spin-Polarized Majorana Bound States inside a Vortex Core in Topological Superconductors.// J. Phys. Soc. J. – 2014. – V.83. – P.064703.
- [346] Guigou M., Sedlmayr N., Aguiar-Hualde J., Bena C. Signature of a topological phase transition in long SN junctions in the spin-polarized density of states.// Eur. Phys. Lett. 2016. V.115. P.47005.
- [347] Serina M., Loss D., Klinovaja J. Boundary spin polarization as a robust signature of a topological phase transition in Majorana nanowires.// Phys. Rev. B. - 2018. - V.98. -P.035419.
- [348] He J. J., Ng T. K., Lee P. A., Law K. T. Selective Equal-Spin Andreev Reflections Induced by Majorana Fermions.// Phys. Rev. Lett. - 2014. - V.112. - P.037001.
- [349] He J. J., Wu J., Choy T.-P. Correlated spin currents generated by resonant-crossed Andreev reflections in topological superconductors.// Nat. Commun. – 2014. – V.5. – P.3232.
- [350] Wu B.H., Yi W., Cao J.C., Guo G.-C. Noncollinear Andreev reflections in semiconductor nanowires.// Phys. Rev. B. - 2014. - V.90. - P.205435.
- [351] Murapaka C., Sethi P., Goolaup S., Lew W. S. Reconfigurable logic via gate controlled domain wall trajectory in magnetic network structure.// Sci. Rep. – 2016. – V.6. – P.20130.
- [352] Khlus V. A. Current and voltage fluctuations in microjunctions between normal metals and superconductors.// ЖЭΤΦ. – 1987. – Т.93. – С.2179.
- [353] Langreth D. C., Wilkins J. W. Theory of Spin Resonance in Dilute Magnetic Alloys.// Phys. Rev. B. - 1972. - V.6. - P.3189.
- [354] Keizer R. S., Goennenwein S. T. B., Klapwijk T. M. et al. A spin triplet supercurrent through the half-metallic ferromagnet CrO₂.// Nature. – 2006. – V.439. – P.825.

- [355] Beri B., Kupferschmidt J. N., Beenakker C. W. J., Brouwer P. W. Quantum limit of the triplet proximity effect in half-metal-superconductor junctions.// Phys. Rev. B. – 2009. – V.79. – P.024517.
- [356] Kupferschmidt J. N., BrouwerP. W. Andreev reflection at half-metal/superconductor interfaces with nonuniform magnetization.// Phys. Rev. B. - 2011. - V.83. - P.014512.
- [357] You J.-B., Shao X.-Q., Tong Q.-J. et al. Majorana transport in superconducting nanowire with Rashba and Dresselhaus spin-orbit couplings.// J. Phys.: Cond. Mat. – 2015. – V.27. – P.225302.
- [358] Cao Y., Wang P., Xiong G. et al. Probing the existence and dynamics of Majorana fermion via transport through a quantum dot.// Phys. Rev. B. - 2012. - V.86. - P.115311.
- [359] Yu P., Chen J., Gomanko M. et al. Non-Majorana states yield nearly quantized conductance in superconductor-semiconductor nanowire devices.// e-print arXiv:2004.08583. – 2020.
- [360] Schnyder A. P., Ryu S., Furusaki A., Ludwig A. W. W. Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions.// Phys. Rev. B. - 2008. -V.78. - P.195125.
- [361] Kitaev A. Periodic table for topological insulators and superconductors.// AIP Conf. Proc. - 2009. - V.1134. - P.22.
- [362] Sato Y., Matsuo S., Hsu C.-H. et al. Strong electron-electron interactions of a Tomonaga-Luttinger liquid observed in InAs quantum wires.// Phys. Rev. B. - 2019.
 - V.99. - P.155304.
- [363] Tomonaga S.-i. Remarks on Bloch's Method of Sound Waves applied to Many-Fermion Problems.// Prog. Theor. Phys. - 1950. - V.5. - P.544.
- [364] Luttinger J. M. An Exactly Soluble Model of a Many-Fermion System.// J. Math. Phys. - 1963. - V.4. - P.1154.

- [365] Bockrath M., Cobden D.H., Lu J. et al. Luttinger-liquid behaviour in carbon nanotubes.// Nature. – 1999. – V.397. – P.598.
- [366] Wong C. L. M., Law K. T. Majorana Kramers doublets in d_{x²-y²}-wave superconductors with Rashba spin-orbit coupling.// Phys. Rev. B. - 2012. - V.86. - P.184516.
- [367] Nakosai S., Budich J. C., Tanaka Y. et al. Majorana bound states and non-local spin correlations in a quantum wire on an unconventional superconductor.// Phys. Rev. Lett. - 2013. - V.110. - P.117002.
- [368] Zhang F., Kane C. L., Mele E. J. Time-Reversal-Invariant Topological Superconductivity and Majorana Kramers Pairs.// Phys. Rev. Lett. – 2013. – V.111. – P.056402.
- [369] Thakurathi M., Simon P., Mandal I. et al. Majorana Kramers pairs in Rashba double nanowires with interactions and disorder.// Phys. Rev. B. - 2018. - V.97. - P.045415.
- [370] Haim A., Keselman A., Berg E., Oreg Y. Time-Reversal-Invariant Topological Superconductivity Induced by Repulsive Interactions in Quantum Wires.// Phys. Rev. B. - 2014. - V.89. - P.220504(R).
- [371] Fradkin E., Kadanoff L. P. Disorder variables and parafermions in two-dimensional statistical mechanics.// Nucl. Phys. B. – 1980. – V.170. – P.1.
- [372] Fendley P. Parafermionic edge zero modes in Z_n-invariant spin chains.// J. Stat. Mech. - 2012. - V.2012. - P.11020.
- [373] Klinovaja J., Loss D. Time-reversal invariant parafermions in interacting Rashba nanowires.// Phys. Rev. B. - 2014. - V.90. - P.045118.
- [374] Fidkowski L., Kitaev A. Effects of interactions on the topological classification of free fermion systems.// Phys. Rev. B. – 2010. – V.81. – P.134509.
- [375] Turner A. M., Pollmann F., Berg E. Topological phases of one-dimensional fermions: An entanglement point of view.// Phys. Rev. B. - 2011. - V.83. - P.075102.

- [376] Wang C., Senthil T. Interacting fermionic topological insulators/superconductors in three dimensions.// Phys. Rev. B. - 2014. - V.89. - P.195124.
- [377] Katsura H., Schuricht D., Takahashi M. Exact ground states and topological order in interacting Kitaev/Majorana chains.// Phys. Rev. B. – 2015. – V.92. – P.115137.
- [378] Kells G. Many-body Majorana operators and the equivalence of parity sectors.// Phys.
 Rev. B. 2015. V.92. P.081401(R).
- [379] Miao J.-J., Jin H.-K., Zhang F.-C., Zhou Y. Exact Solution for the Interacting Kitaev Chain at the Symmetric Point.// Phys. Rev. Lett. - 2017. - V.118. - P.267701.
- [380] Fendley P. Strong zero modes and eigenstate phase transitions in the XYZ/interacting Majorana chain.// J. Phys. A. - 2016. - V.49. - P.30LT01.
- [381] Boeyens J., Snyman I. Zero-energy quasiparticles in an interacting nanowire containing a topological Josephson junction.// e-print arXiv:2003.03276. – 2020.
- [382] Das Sarma S., Freedman M., Nayak C. Majorana zero modes and topological quantum computation.// Quantum Inf. – 2015. – V.1. – P.15001.
- [383] Nag A., Sau J. D. Diabatic errors in Majorana braiding with bosonic bath.// Phys. Rev. B. - 2019. - V.100. - P.014511.
- [384] Zhang Z.-T., Mei F., Meng X.-G. et al. Effects of decoherence on diabatic errors in Majorana braiding.// Phys. Rev. A. - 2019. - V.100. - P.012324.
- [385] Schmidt M. J., Rainis D., Loss D. Four-Majorana qubit with charge readout: Dynamics and decoherence.// Phys. Rev. B. - 2012. - V.86. - P.085414.
- [386] Li T., Coish W. A., Hell M. et al. Four-Majorana qubit with charge readout: Dynamics and decoherence.// Phys. Rev. B. - 2018. - V.98. - P.205403.
- [387] Lai H.-L., Yang P.-Y., Huang Y.-W., Zhang W.-M. Exact master equation and non-Markovian decoherence dynamics of Majorana zero modes under gate-induced charge fluctuations.// Phys. Rev. B. – 2018. – V.97. – P.054508.

- [388] Dominguez F., Cayao J., San-Jose P. et al. Zero-energy pinning from interactions in Majorana nanowires.// npj Quant. Mat. - 2017. - V.2. - P.13.
- [389] Peng Y., Pientka F., Glazman L. I., von Oppen F. Strong localization of Majorana end states in chains of magnetic adatoms.// Phys. Rev. Lett. - 2015. - V.114. - P.106801.
- [390] Ng H. T. Decoherence of interacting Majorana modes.// Sci. Rep. 2015. V.5. -P.12530.
- [391] Gergs N. M., L. Fritz, Schuricht D. Topological order in the Kitaev/Majorana chain in the presence of disorder and interactions zero modes under gate-induced charge fluctuations.// Phys. Rev. B. - 2016. - V.93. - P.075129.
- [392] Wieckowski A., Ptok A. Influence of long-range interaction on Majorana zero modes.// Phys. Rev. B. - 2019. - V.100. - P.144510. Phys. Rev. B 100, 144510 (2019).
- [393] White S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups.// Phys. Rev. Lett. - 1992. - V.69. - P.2863.
- [394] White S. R. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups.// Phys.
 Rev. B. 1993. V.48. P.10345.
- [395] Lutchyn R. M., Fisher M. P. A. Interacting topological phases in multiband nanowires.// Phys. Rev. B. - 2011. - V.84. - P.214528.
- [396] Gangadharaiah S., Braunecker B., Simon P., Loss D. Majorana Edge States in Interacting One-Dimensional Systems.// Phys. Rev. Lett. - 2011. - V.107. - P.036801.
- [397] Stoudenmire E., Alicea J., Starykh O., Fisher M. Interaction effects in topological superconducting wires supporting Majorana fermions.// Phys. Rev. B. – 2011. – V.84. – P.014503.
- [398] Thomale R., Rachel S., Schmitteckert P. Tunneling spectra simulation of interacting Majorana wires.// Phys. Rev. B. - 2013. - V.88. - P.161103(R).
- [399] Tanaka Y., Kashiwaya S. Theory of Tunneling Spectroscopy of d-Wave Superconductors.// Phys. Rev. Lett. - 1995. - V.74. - P.3451.

- [400] Hogan-O'Neill J. J., Martin A. M., Annett J. F. Tilt grain-boundary effects in s- and d-wave superconductors.// Phys. Rev. B. - 1999. - V.60. - P.3568.
- [401] White S. R., Noack R. M. in: Peschel I., Wang X., Kaulke M., Hallberg K. (Eds.), Density matrix renormalization: a new numerical method in physics. – Berlin: Springer. – 1999.
- [402] Wilson K. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem.// Rev. Mod. Phys. - 1975. - V.47. - P.773.
- [403] White S. R., Noack R. M. Real-space quantum renormalization groups.// Phys. Rev. Lett. - 1992. - V.68. - P.3487.
- [404] Schollwock U. The density-matrix renormalization group.// Rev. Mod. Phys. 2005.
 V.77. P.259.
- [405] Golub G., van Loan C.F. Matrix computations. Baltimore: The Johns Hopkins University Press. – 2013.
- [406] Cohen-Tannoudji C., Diu B., Laloe F. *Квантовая механика. Том I.* Екатеринбург: Издательство Уральского университета. – 2000.
- [407] White S.R. Strongly correlated electron systems and the density matrix renormalization group.// Phys. Rep. 1998. V.301. P.187.
- [408] Schubin S., Wonsowsky S. On the electron theory of metals.// Proc. Roy. Soc. A. 1934. – V.145. – P.159.
- [409] Vonsovsky S. V., Katsnelson M. I. Some types of instabilities in the electron energy spectrum of the polar model of the crystal. I. The maximum-polarity state.// J. Phys. C: Solid State Phys. - 1979. - V.12. - P.2043.
- [410] Qi X.-L., Hughes T. L., Raghu S., Zhang S.-C. Time-Reversal-Invariant Topological Superconductors and Superfluids in Two and Three Dimensions.// Phys. Rev. Lett. – 2009. – V.102. – P.187001.

- [411] Кухаренко Б. Г. Антиферромагнитный резонанс во фторидах переходных металлов.// ЖЭТФ. – 1975. – Т.69. – С.632.
- [412] Вальков В. В., Валькова Т. А. Применение индефинитной метрики для перехода к бозе-описанию SU(3)-гамильтонианов. Спектр возбуждений спиновых нематиков.// ЖЭТФ. – 1991. – Т.99. – С.1881.
- [413] Боголюбов Н. Н. Собрание научных трудов в двенадцати томах. Том VI. Равновесная статистическая механика. – М.: Наука. – 2006.
- [414] Chao K. A., Spalek J., Oles A. M. Kinetic exchange interaction in a narrow S-band.//
 J. Phys. C. 1977. V.10. P.L271.
- [415] Изюмов Ю. А. Сильно коррелированные электроны: t J-модель.// УФН. 1997.
 Т.167. В.5. С.465.
- [416] Zhu L., Garst M., Rosch A., Si Q. Universally Diverging Gruneisen Parameter and the Magnetocaloric Effect Close to Quantum Critical Points.// Phys. Rev. Lett. - 2003.
 - V.91. - P.066404.
- [417] Garst M., Rosch A. Sign change of the Gruneisen parameter and magnetocaloric effect near quantum critical points.// Phys. Rev. B. - 2005. - V.72. - P.205129.