

На правах рукописи



Аксенов Сергей Владимирович

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

01.04.11 – физика магнитных явлений,  
01.04.07 – физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ**  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Красноярск — 2021

Работа выполнена в Институте физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленном подразделении ФИЦ КНЦ СО РАН (ИФ СО РАН)

**Научные консультанты:**

**Вальков Валерий Владимирович**

доктор физико-математических наук, профессор,  
ИФ СО РАН, главный научный сотрудник

**Каган Максим Юрьевич**

доктор физико-математических наук,  
профессор, член-корреспондент РАН,  
ИФП РАН им. П.Л. Капицы,  
главный научный сотрудник

**Официальные оппоненты:**

**Аверкиев Никита Сергеевич**

доктор физико-математических наук, профессор,  
ФГБУН Физико-Технический  
Институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
заведующий сектором

**Мельников Александр Сергеевич**

доктор физико-математических наук,  
Институт физики микроструктур РАН,  
заведующий отделом

**Манцевич Владимир Николаевич**

доктор физико-математических наук,  
ФГБОУ ВО Московский государственный  
университет им. М.В. Ломоносова, доцент

**Ведущая организация:**

ФГБУН Физический институт

им. П.Н. Лебедева РАН

Защита состоится 25 июня 2021 г. в 14:30 часов на заседании диссертационного совета Д 003.075.01. в ИФ СО РАН по адресу: 660036 Красноярск, Академгородок, 50/38.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФ СО РАН.

Автореферат разослан

марта 2021 года.

Ученый секретарь диссертационного совета  
доктор физико-математических наук

А.Н.Втюрин

# ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

## **Актуальность темы.**

Современные технологии создания различных низкоразмерных структур, вплоть до размеров порядка межатомных расстояний, приводят к необходимости развития 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 при сверхнизких температурах, контролируя при этом интенсивность их взаимодействия с контактами, то становится доступным режим когерентного транспорта. В этом случае на проводящие свойства может существенно влиять квантомеханическая интерференция, связанная с фактической неодномерностью (в реальном и/или обратном пространствах) распространения электронных волн. Другая особенность рассмотрения транспортных явлений на атомных масштабах определяется способностью носителей возбуждать структуру за счет неупругого взаимодействия с ее собственными, спиновыми и зарядовыми, степенями свободы.

Таким образом, электронный ток 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 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.

**Целью работы** является развитие теории 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 диффе-

ренциальной проводимости (кондактанса) в системе из четырех квантовых точек. Впервые изучены транспортные свойства интерференционного устройства, в котором рукава соединены сверхпроводящей проволокой со спин-орбитальным 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; топологические связанные состояния в континууме. Эти эффекты могут быть использованы на практике для детектирования майорановских состояний и топологического фазового перехода. Предложен переключатель спин-поляризованного тока, основанный на зависимости спиновой поляризации майорановского состояния от направления 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 спариванием расширенного s-типа. При этом проведенное обобщение метода ренорм-группы для матрицы плотности на случай операторов Хаббарда позволило построить топологические фазовые диаграммы.

**На защиту выносятся следующие положения:**

1. Реализация эффекта Фано при неупругом одноэлектронном транспорте через спиновые структуры атомного масштаба.
2. Механизм индуцирования аномально высокого магнитосопротивления за счет эффекта Фано.
3. 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.
6. Способ спиновой фильтрации в системе из четырех квантовых точек, основанный на особенностях интерференции в присутствии электрон-электронных взаимодействий.
7. Метод детектирования топологически нетривиальной фазы в сверхпроводящей проволоке со спин-орбитальным взаимодействием, являющейся частью кольца Ааронова-Бома.
8. Эффект Дикке и формирование связанных состояний в континууме в интерференционном устройстве со сверхпроводящей проволокой в топологически нетривиальной фазе.

9. Механизм переключения спин-поляризованного тока в системе полуметалл / сверхпроводящая проволока / полуметалл за счет зависимости спиновой поляризации майорановского связанного состояния от направления внешнего магнитного поля.
10. Диаграмма топологических фаз проволоки со спин-орбитальным взаимодействием и сверхпроводящим спариванием расширенного *s*-типа в режиме сильных зарядовых корреляций.

**Достоверность** полученных результатов определяется корректностью использования математического аппарата, контролируемостью применяемых приближений, их аprobированностью при исследованиях других авторов, а также правильностью предельных переходов к известным результатам.

**Апробация работы.** 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 «HT-36» и «HT-37» (Санкт-Петербург, 2012; Казань, 2015), научной сессии НИЯУ МИФИ-2011 (Москва, 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 ИФП 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 ИФ СО РАН и т.д.

**Личный вклад.** Автор принимал активное участие в обсуждении и постановке задач, проводил все аналитические и численные расчеты, обсуждал полученные результаты, занимался подготовкой статей, обзоров и тезисов, докладывал и обсуждал результаты работы на научных конференциях.

**Публикации.** Основные результаты диссертационных исследований опубликова-

ны в 23 научных статьях из перечня ВАК, список которых приведен в конце автореферата.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы, изложена на 286 страницах, включает 83 рисунка. Список цитируемой литературы содержит 417 наименований.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

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** рассматривается спиновый эффект Фано при одноэлектронном транспорте через структуры атомного масштаба. В **разделе 1.1** на основе оригинальной работы Фано [1] излагается суть явления деструктивной интерференции волн при наличии состояний континуума, взаимодействующих с состоянием дискретного спектра. Приводится обзор мезоскопических систем, в транспортных характеристиках которых наблюдаются резонансы Фано, анализируются механизмы, ответственные за возникновение этого эффекта в конкретных низкоразмерных структурах. Кроме того, разбирается связь между эффектом Фано и присутствием связанных состояний в континууме (ССК).

Во **разделе 1.2** излагается общая теория рассеяния электрона на спиновой структуре атомного масштаба на примере прохождения через потенциальный профиль спинового димера со спином  $S = 0, 1$  и проекцией спина  $S^z = 0, \pm 1$ . Распространение электрона в данной ситуации носит неупругий характер, поскольку между его спином и спиновыми моментами димера реализуется обменное взаимодействие  $sf$ -типа, описываемое следующим гамильтонианом:

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

где  $c_{n\sigma}^+$  - оператор рождения электрона со спином  $\sigma$  на узле  $n$ ;  $A$  - интенсивность  $sf$ -обменного взаимодействия;  $S_n^+$ ,  $S_n^-$ ,  $S_n^z$  - спиновые операторы димера на узле  $n$ . Как следствие, решение уравнения Шредингера для случая, когда транспортируемый из левого контакта электрон обладает проекцией спина  $\sigma = +1/2$ , а димер находится в синглетном состоянии с волновой функцией  $D_{S=0, S^z=0}$ , записывается в виде

$$|\Psi_{L\uparrow}\rangle = \sum_n \left[ w_{n\uparrow} c_{n\uparrow}^+ D_{00} + u_{n\uparrow} c_{n\uparrow}^+ D_{10} + v_{n\downarrow} c_{n\downarrow}^+ D_{11} \right] |0\rangle. \quad (2)$$

Примешивание триплетных состояний димера, характеризующихся волновыми функциями  $D_{10}$  и  $D_{11}$ , описывается двумя последними слагаемыми и связано именно с присутствием  $sf$ -взаимодействия. В свою очередь, выражения для парциальных амплитуд в левом

( $n \leq 0$ ) и правом ( $n \geq 3$ ) контактах записываются как

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

где  $r_{00}$  ( $t_{00}$ ),  $r_{10}$  ( $t_{10}$ ),  $r_{11}$  ( $t_{11}$ ) - амплитуды отражения (прохождения) электрона;  $k_{L,R}$ ,  $q_{L,R}$ ,  $p_{L,R}$  - волновые вектора. В результате решения задачи рассеяния демонстрируется, что вероятность прохождения,  $T$ , существенно зависит от соотношения между энергией падающей волны,  $E$ , и энергией внутридимерного обмена,  $I$ ,

$$T = \begin{cases} \frac{t_R \sin k_R}{t_L \sin k_L} |t_{00}|^2 \equiv T_{00}, & E \leq I; \\ \frac{t_R \sin k_R}{t_L \sin k_L} |t_{00}|^2 + \frac{t_R \sin q_R}{t_L \sin k_L} |t_{10}|^2 + \frac{t_R \sin p_R}{t_L \sin k_L} |t_{11}|^2 \equiv T_{00} + T_{10} + T_{11}, & E > I + h, \end{cases} \quad (4)$$

где  $t_{L,R}$  - величина перескока в контактах;  $h \equiv (2 - g)\mu_B H$ ;  $g$  -  $g$ -фактор димера;  $H$  - магнитное поле. Таким образом, распространение электрона в рассматриваемой системе можно интерпретировать как транспорт по трем эффективным каналам, возникающим благодаря наличию возбужденных состояний спинового димера и неупругому рассеянию (в типичных мезоскопических структурах, квантовых точках и проволоках, природа каналов обычно связана с размерным квантованием). Учитывая это, во втором разделе в рамках подхода Ландауэра-Бюттилера [2, 3] также приводится вывод выражения, описывающего ток через димер,

$$I = \frac{e}{h} \int dE T(E) [f_L(E) - f_R(E)], \quad (5)$$

где  $f_{L,R}(E) \equiv f(E - \mu_{L,R})$  - функции Ферми-Дирака левого и правого контактов с электрохимическими потенциалами  $\mu_{L,R} = \mu \pm eV/2$ ;  $V$  - разность потенциалов.

Несмотря на то, что согласно формуле (4) в низкоэнергетической области,  $E \leq I$ , имеем  $T_{10} = T_{11} = 0$ , каналы, соответствующие триплетным спиновым конфигурациям, все же оказывают влияние на транспорт. В частности, в этом случае  $Re\{q_{L,R}\}$ ,  $Re\{p_{L,R}\} = 0$ , т.е. два из трех состояний системы являются локализованными. В результате, создаются предпосылки для реализации спинового эффекта Фано.

В разделе 1.3 анализ этого явления проводится для наиболее простой структуры, на которой рассеивается электрон - одиночный спиновый момент  $S = 1$  с анизотропией типа легкая ось, описываемой параметром  $D$ . В данном случае энергия антирезонанса Фано, когда  $T(E_{ares}) = 0$ , равна

$$E_{ares} = \frac{1}{2} + D + h + \varepsilon_d - \frac{A}{2} + \tau^2 \frac{\sqrt{(A - 2\varepsilon_d)^2 + 2\tau^2 - 1} + 2\varepsilon_d - A}{2(1 - 2\tau^2)}, \quad (6)$$

где  $\tau$  - параметр связи устройства с контактами;  $\varepsilon_d$  - одноэлектронная энергия на узле устройства. Все энергетические величины измеряются в единицах  $t = t_L = t_R$ .

Для изучения свойств резонансов Фано, их положений и ширин, вводится эффективный гамильтониан. Для этого по существу делается переход от уравнения Шредингера в узельном представлении к уравнению Липпмана-Швингера. Таким образом, удается показать, что волновая функция устройства (электрон + магнитная примесь) есть действие оператора одиночечной функции Грина на волновую функцию источника или возмущения [4],  $|\Psi_{dev}\rangle = \tau \hat{G}^r |\phi_L\rangle$ . Сама же функция Грина определяется искомым эффективным гамильтонианом,  $\hat{H}_{eff} = (E \cdot \hat{I} - \hat{H}_{eff})^{-1}$ , неэрмитовость которого объясняется учетом связи устройства с контактами,

$$\hat{H}_{eff} = \begin{pmatrix} \varepsilon_d + (1 - \tau^2 e^{ik})/2 & A/\sqrt{2} \\ A/\sqrt{2} & \varepsilon_d + D + h + (1 - A - \tau^2 e^{iq})/2 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

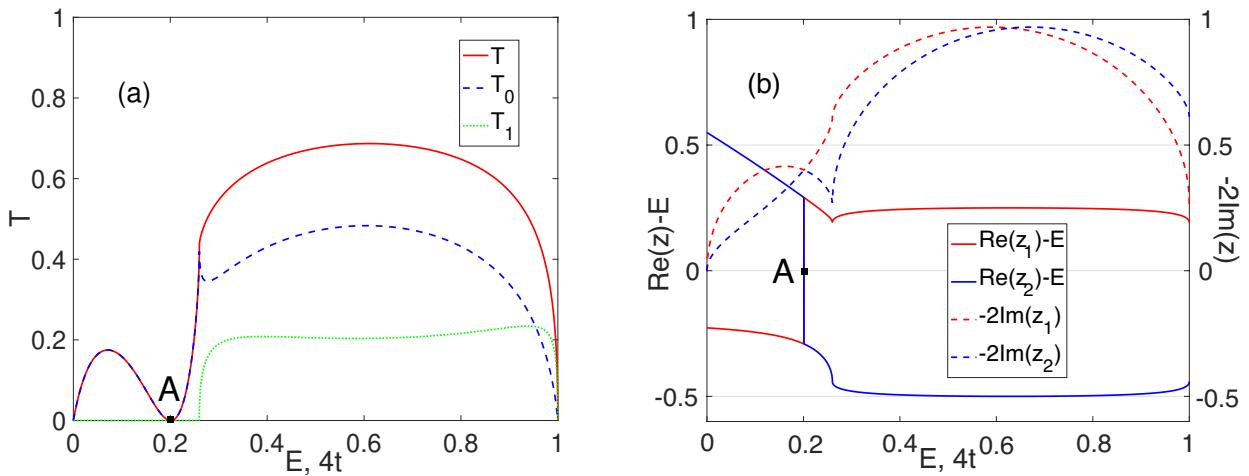


Рис. 1: (a) Зависимость полного коэффициента прохождения,  $T$ , и его компонент,  $T_0$  и  $T_1$ , от энергии транспортируемого электрона,  $E$ . (b) Аналогичное поведение реальных (сплошные кривые) и мнимых (штриховые кривые) частей собственных энергий,  $z_{1,2}$ , эффективного гамильтониана (7). Параметры:  $A = 0.5$ ,  $D = 0.25$ ,  $\varepsilon_d = 0$ ,  $\tau = 1$ ,  $g = 1$ ,  $h = 0.01$ ,  $t = 1$  эВ.

Демонстрируется, что действительные части собственных значений  $\hat{H}_{eff}$ ,  $z$ , определяют положения резонансов в зависимости  $T(E)$ , исходя из решения уравнения  $Re\{z(E_0)\} - E_0 = 0$ . В частности, при  $\tau = 1$ ,  $\varepsilon_d = 0$  имеем  $z_1 = z_2$  и в точности получаем энергию антирезонанса (6):  $E_0 = E_{ares} = (1 - \sqrt{1 + A^2})/2 + D + h$  (см. точку 'A' на рис. 1а и 1б). В свою очередь, мнимая часть  $z_{1,2}$  характеризует ширину данного антирезонанса,  $\gamma_0 = -2Im\{z(E_0)\}$  (см. штриховые кривые в точке 'A' на рис. 1б).

В конце раздела 1.3 показано, что знание одиночечной функции Грина  $\hat{G}^r(E)$  позволяет приближенно записать коэффициент прохождения в окрестности  $E_{ares}$  в виде, аналогичном формуле Фано, и в явной форме получить параметр асимметрии пика [1].

В разделе 1.4 особенности эффекта Фано подробно изучаются в случае спинового димера. Рассмотрение проводится для двух геометрий транспорта: 1) геометрия сканирующего микроскопа - характеризуется одним центром рассеяния; 2) геометрия разломного контакта -  $s^f$ -обмен реализуется с каждым из спинов димера.

Принципиальная разница между одиночным спином и димером заключается в том, что для последнего имеется уже два канала, отвечающих возбужденным состояниям (вместо одного). Причем они становятся неэквивалентными во внешнем магнитном поле за счет снятия вырождения по энергии триплетных состояний. Как следствие, появляются новые возможности интерференции Фано. На рис. 2 показано индуцирование нового асимметричного пика при  $h \neq 0$  для геометрии сканирующего микроскопа (а широкий резонанс слева испытывает смещение). В результате решения задачи рассеяния в слабых магнитных полях  $h \ll I, A$  приближенно получены следующие энергии соответствующих антирезонансов:

$$E_{ares1} \approx \frac{1}{2} + \varepsilon_d - \frac{A}{2} + I + \frac{\tau^2 \left[ 2\varepsilon_d - A + \sqrt{(2\varepsilon_d - A)^2 + 2\tau^2 - 1} \right]}{2(1 - 2\tau^2)}, \quad (8)$$

$$E_{ares2} \approx \frac{1}{2} + \varepsilon_d + \frac{A}{4} + I + \frac{\tau^2 \left[ 2\varepsilon_d + A/2 + \sqrt{(2\varepsilon_d + A/2)^2 + 2\tau^2 - 1} \right]}{2(1 - 2\tau^2)}. \quad (9)$$

Зависимости реальных и мнимых частей собственных значений эффективного гамильтониана у устройства с димером от энергии налетающего электрона представлены на рис. 3. Из сравнения рис. 2а и 3а видно, что корни уравнения  $\text{Re}\{z(E^{A,B})\} - E^{A,B} = 0$  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. 3б). В случае геометрии разломного контакта с двумя центрами неупруго рассеяния количество резонансов Фано и ССК удваивается.

В дальнейшем, путем рассмотрения ряда частных случаев, отличающихся видом обменных гамильтонианов, для обоих геометрий транспорта 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.

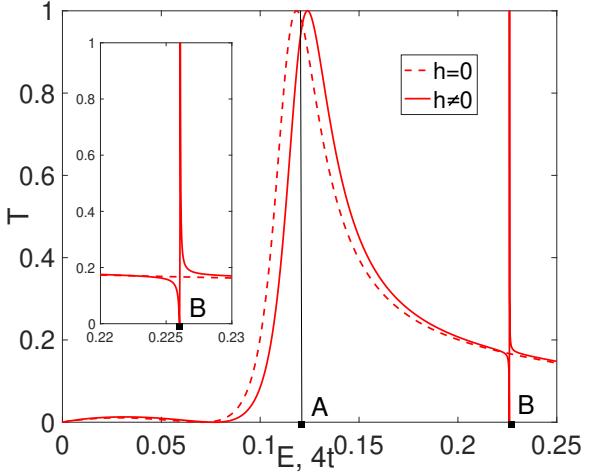


Рис. 2: Зависимость  $T = T(E)$  при  $\varepsilon_d = -0.5$  в низкоэнергетической области, когда  $sf$ -взаимодействие реализуется только на первом узле. На вставке: индуцирование пика Фано магнитным полем. Точки ‘А’ и ‘В’ на рисунке (а) отвечают решениям уравнения  $\text{Re}\{z\} - E = 0$  на рис. 3а. Другие параметры:  $A = I = 0.25$ ,  $\tau = 0.5$ ,  $h = 0.01$ ,  $t = 0.2$  эВ.

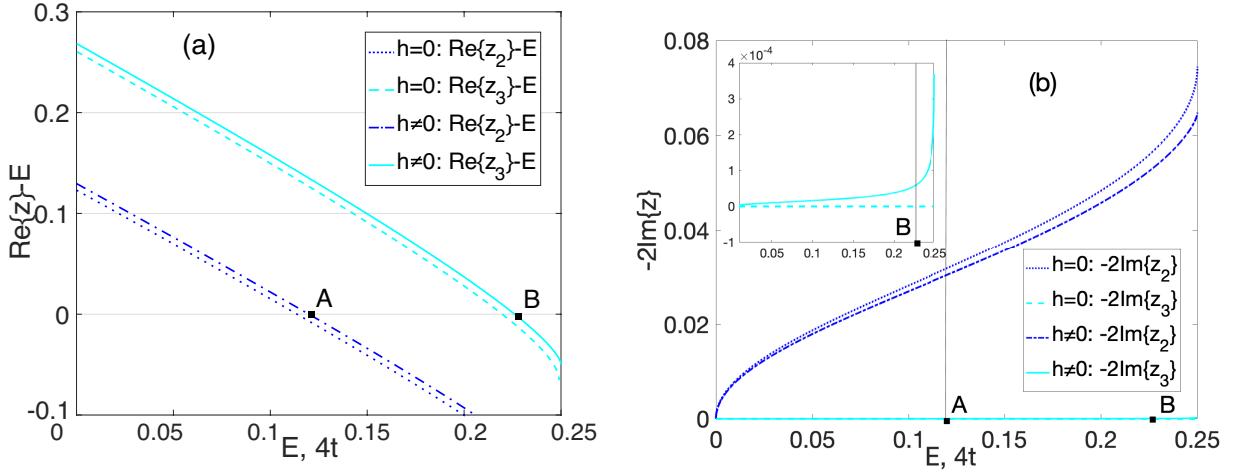


Рис. 3: Поведение реальных и мнимых частей собственных энергий,  $z_{2,3}$ , эффективного гамильтониана устройства с димером. (а)  $\text{Re}\{z\} - E$ ; (б)  $-2\text{Im}\{z\}$ . На вставке: реализация ССК при  $h = 0$ . Использованы параметры рис. 2.

В разделе 1.5 методом Ландауэра-Бюттикера рассчитано магнитосопротивление устройства, содержащего спиновый димер в качестве активного элемента,  $MR = (G(h)/G(0) - 1) \times 100\%$ , где  $G(h)$ ,  $G(0)$  - дифференциальная проводимость (кондактанс),  $G = dI/dV$ , при  $h \neq 0$  и  $h = 0$ , соответственно. Показано, что спиновый эффект Фано индуцирует как положительное, так и отрицательное магнитосопротивление, величина которого может достигать аномально больших значений (см. рис. 4).

**Вторая глава** посвящена развитию теории квантового транспорта через многоуровневые структуры атомного масштаба и изучению роли процессов многократного рассеяния в условиях сильной неравновесности. Во **введении** обсуждаются наблюдаемые в современных экспериментах особенности квантового транспорта через магнитные атомы и молекулы, а также комплексы, состоящие из их небольшого числа. При этом основное внимание уделяется эффектам, имеющим место в неравновесном режиме (нелинейный отклик).

**Раздел 2.2** посвящен описанию подхода Келдыша для неравновесных систем с атомной статистикой состояний. Как и в предыдущей главе, в качестве конкретных примеров рассматриваются анизотропная магнитная примесь и спиновый димер. Гамильтонианы соответствующих устройств, расположенных между однозонными парамагнитны-

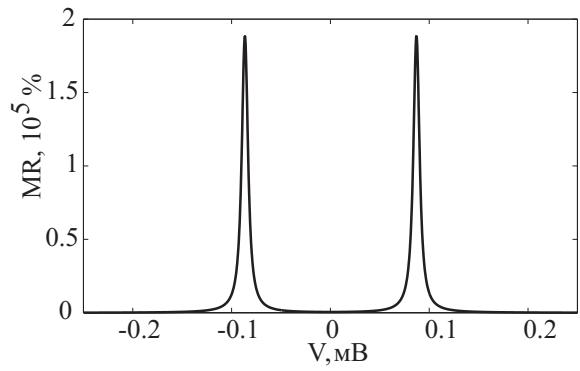


Рис. 4: Типичное магнитосопротивление устройства, содержащего димер, за счет спинового эффекта Фано.

ми контактами, имеют вид

$$1) \hat{H}_D = \sum_{\sigma} \xi_{d\sigma} n_{\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} + D (S^z)^2 - g \mu_B H S^z + A(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{S}), \quad (10)$$

$$2) \hat{H}_D = \sum_{j=1}^2 \left\{ \sum_{\sigma} \xi_{d\sigma} a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} + U n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \right\} + t_d \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^+ a_{1\sigma}) + U_{12} n_1 n_2 + \\ + I(\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2) + \sum_{j=1}^2 \{-g \mu_B H S_j^z + A(\boldsymbol{\sigma}_j \mathbf{S}_j)\}, \quad (11)$$

где  $\xi_{d\sigma} = \varepsilon_d - \sigma g_e \mu_B H - \mu$  - отсчитываемая от химпотенциала спин-зависящая энергия электрона во внешнем магнитном поле  $H$ ;  $n_{j\sigma} = a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma}$ . 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.

Поскольку случай 2) является более сложным, вывод общего выражения, описывающего туннельный ток через устройство, и кинетических уравнений осуществляется именно для этой спиновой структуры. После чего обсуждаются упрощения, связанные с наличием только одного узла в центральной части системы вместо двух.

Изначально, расчет среднего значения оператора тока подразумевает нахождение корреляторов смешанного вида в представлении взаимодействия,

$$I = e \frac{\partial}{\partial t} \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^+(t) c_{k\sigma}(t) = \frac{e}{\hbar} \sum_{k\sigma} [-it_{Lk} e^{-iteV/2\hbar} \langle c_{k\sigma}^+(t) a_{1\sigma}(t) \rangle + h.c.], \quad (12)$$

где  $t_{Lk}$  - параметр туннелирования из левого контакта в устройство; среднее в (12) вычисляется с матрицей плотности, удовлетворяющей уравнению  $i\hbar \partial \rho(t)/\partial t = [\hat{T}(t), \rho(t)]$ , в котором оператор туннелирования носителей между устройством и контактами есть

$$\hat{T}(t) = \sum_{k\sigma} [t_{Lk} e^{-iteV/2\hbar} c_{k\sigma}^+(t) a_{1\sigma}(t) + t_{Rk} e^{iteV/2\hbar} d_{k\sigma}^+(t) a_{2\sigma}(t)] + h.c. \quad (13)$$

Непосредственный расчет функций Грина, входящих в (12), в рамках стандартной теории возмущений, когда временная эволюция операторов рассматривается на классическом временном контуре, не представляется возможным, т.к. адиабатическое выключение взаимодействия (13) при  $t \rightarrow +\infty$  не гарантирует возврат к исходному основному состоянию. В результате, необходимо перейти к рассмотрению проблемы на контуре Келдыша, где возмущение возникает и исчезает при  $t \rightarrow -\infty$  [5, 6]. В результате, получаем следующую смешанную неравновесную функцию Грина:

$$G_{1,k\sigma}^{+-}(t, t) = i \langle c_{k\sigma}^+(t) a_{1\sigma}(t) \rangle = -i \langle T_C a_{1\sigma}(t) c_{k\sigma}^+(t) S_C \rangle_0, \quad (14)$$

где  $T_C$  - оператор хронологического упорядочения по времени на контуре Келдыша  $C$ ;  $S_C = T_C \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_C \hat{T}(\tau) d\tau \right)$  - матрица эволюции; индексы  $a = +$  и  $b = -$  у функции

Грина указывают на принадлежность временного аргумента соответствующего оператора нижней и верхней ветвям контура  $C$ , соответственно.

Существенная особенность рассматриваемой проблемы связана со структурой устройства. Из (10) и (11) видно, что электрон, попадая в него, будет взаимодействовать и с зарядовыми, и со спиновыми степенями свободы. Наличие 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. Поэтому непосредственное применение диаграммной техники в терминах операторов вторичного квантования становится невозможным из-за отсутствия теоремы Вика для средних от произведения этих операторов.

Для выхода из этого затруднения в диссертации осуществляется переход к атомной статистике. Это представление априори приводит к диагональной форме гамильтониана устройства,  $H_D = \sum_n E_n X^{nn}$ , где  $X^{nm} = |\Psi_n\rangle\langle\Psi_m|$  - операторы Хаббарда, описывающие переходы между собственными состояниями,  $|\Psi_n\rangle$  ( $n = 1, \dots, N_D$ ), гамильтониана  $\hat{H}_D$  [7]. Тогда, оператор туннелирования записываются как

$$\hat{T}(t) = \sum_{k\sigma,\alpha} [t_{Lk} e^{-iteV/2\hbar} \gamma_{1\sigma}(\alpha) c_{k\sigma}^+(t) + t_{Rk} e^{iteV/2\hbar} \gamma_{2\sigma}(\alpha) d_{k\sigma}^+(t)] X^\alpha(t) + h.c. \quad (15)$$

Простота временной зависимости операторов Хаббарда в представлении взаимодействия,  $X^{nm}(t) = \exp(i(E_n - E_m)t) X^{nm} \equiv \exp(iE_\alpha t) X^\alpha$ , открывает очевидный путь построения теории возмущений с применением диаграммной техники для операторов Хаббарда, поскольку для них существует теорема Вика [8].

Для удобства последующего вывода выражения, описывающего ток, вводятся спектральные функции левого (правого) контакта,  $M_{1(2)\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_k t_{L(R)k}^2 g_{L(R)k\sigma}^{ab}(\omega \pm eV/2)$ , где  $g_{L(R)k\sigma}^{ab}(\omega)$  - затравочные неравновесные функции Грина контактов; а также спектральные функции устройства,

$$W_{i\sigma,j\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_{\alpha\beta} \gamma_{i\sigma}(\alpha) \gamma_{j\sigma}(\beta) D_{\alpha\beta}^{ab}(\omega), \quad i, j = 1, 2. \quad (16)$$

В их определение входят фурье-образы неравновесных функций Грина устройства,  $D_{\alpha\beta}^{ab}(\tau_a - \tau_b') = -i \left\langle T_C X^\alpha(\tau_a) X^{-\beta}(\tau_b') \tilde{S}_C \right\rangle_0$ , сrenomированной матрицей рассеяния

$$\tilde{S}_C = T_C \exp \left\{ -i \iint_C d\tau_1 d\tau_2 \sum_{\alpha\beta} \tilde{V}_{\alpha\beta}(\tau_1 - \tau_2) X^{-\alpha}(\tau_1) X^\beta(\tau_2) \right\}, \quad (17)$$

которая определяется через эффективное взаимодействие,

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{\alpha\beta}(\tau_1 - \tau_2) = \sum_\sigma & \left[ \gamma_{1\sigma}(\alpha) \gamma_{1\sigma}(\beta) e^{i\frac{eV}{2}(\tau_1 - \tau_2)} M_{1\sigma}(\tau_1 - \tau_2) + \right. \\ & \left. + \gamma_{2\sigma}(\alpha) \gamma_{2\sigma}(\beta) e^{-i\frac{eV}{2}(\tau_1 - \tau_2)} M_{2\sigma}(\tau_1 - \tau_2) \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

В результате, анализ диаграммного ряда для функций Грина (14) дает

$$I = \frac{e}{h} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega [M_{1\sigma}^{-+}(\omega) W_{1\sigma,1\sigma}^{+-}(\omega) - M_{1\sigma}^{+-}(\omega) W_{1\sigma,1\sigma}^{-+}(\omega)]. \quad (19)$$

Электрон, пришедший в устройство из левого контакта, может перейти в правый контакт или вернуться обратно в левый, а затем снова туннелировать в область устройства. Это сопровождается переходом последнего в возбужденные состояния. Эффекты такого многократного отражения учитываются, если в ряду теории возмущений для  $D_{\alpha\beta}^{ab}$  сохранить слагаемые всех порядков по параметрам туннельной связи устройства с левым и правым контактами. Это означает, что в беспетлевом приближении  $D_{\alpha\beta}^{ab}$  удовлетворяют следующим уравнениям Дайсона для хаббардовских функций Грина [9]:

$$D_{\alpha\beta}(\tau - \tau') = \delta_{\alpha\beta} D_{0\alpha}(\tau - \tau') + \sum_{\nu} \iint_C d\tau_1 d\tau_2 D_{0\alpha}(\tau - \tau_1) \tilde{V}_{\alpha\nu}(\tau_1 - \tau_2) D_{\nu\beta}(\tau_2 - \tau'), \quad (20)$$

где  $D_{0\alpha}(\tau - \tau')$  - затравочные неравновесные функции Грина устройства. Пользуясь методом Келдыша [5], выводится система уравнений на полные функции Грина  $D_{\alpha\beta}^{ab}$ ,

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}^{+-}(\omega) &= \sum_{\nu} D_{\alpha}(\omega) [\tilde{V}_{\alpha\nu}^{++}(\omega) D_{\nu\beta}^{+-}(\omega) - \tilde{V}_{\alpha\nu}^{+-}(\omega) D_{\nu\beta}^{--}(\omega)], \\ D_{\alpha\beta}^{--}(\omega) &= -\delta_{\alpha\beta} D_{\alpha}(\omega) - \sum_{\nu} D_{\alpha}(\omega) [\tilde{V}_{\alpha\nu}^{--}(\omega) D_{\nu\beta}^{--}(\omega) - \tilde{V}_{\alpha\nu}^{-+}(\omega) D_{\nu\beta}^{+-}(\omega)], \\ D_{\alpha\beta}^{-+}(\omega) &= \sum_{\nu} D_{\alpha}(\omega) [\tilde{V}_{\alpha\nu}^{-+}(\omega) D_{\nu\beta}^{++}(\omega) - \tilde{V}_{\alpha\nu}^{--}(\omega) D_{\nu\beta}^{-+}(\omega)], \\ D_{\alpha\beta}^{++}(\omega) &= \delta_{\alpha\beta} D_{\alpha}(\omega) + \sum_{\nu} D_{\alpha}(\omega) [\tilde{V}_{\alpha\nu}^{++}(\omega) D_{\nu\beta}^{++}(\omega) - \tilde{V}_{\alpha\nu}^{+-}(\omega) D_{\nu\beta}^{-+}(\omega)], \end{aligned} \quad (21)$$

где  $D_{\alpha}(\omega) = b_{\alpha}/(\omega + E_{\alpha})$ ,  $b_{\alpha} = \langle X^{nn} \rangle + \langle X^{mm} \rangle \equiv N_n + N_m$ .

Учитывая расщепленный характер зависимости эффективного взаимодействия (18) от корневых векторов  $\alpha$  и  $\beta$  [10], решение системы (21) приводит к следующим окончательным выражениям для тока через многоуровневую структуру атомного масштаба, 1) одиночную примесь или 2) димер,

$$1) I = \frac{4e}{h} \sum_{\sigma} \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{L_{11\sigma}^2 (f_L - f_R)}{1 + \Gamma_{\sigma}^2 L_{11\sigma}^2}, \quad (22)$$

$$2) I = \frac{4e}{h} \sum_{\sigma} \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{L_{12\sigma}^2 (f_L - f_R)}{\left[1 - \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} (L_{11\sigma}^2 - L_{12\sigma}^2)\right]^2 + \Gamma_{\sigma}^2 L_{11\sigma}^2}, \quad (23)$$

где  $L_{ij\sigma}(\omega) = \sum_{\alpha} \gamma_{i\sigma}(\alpha) \gamma_{j\sigma}(\alpha) D_{\alpha}(\omega)$ ,  $\Gamma_{\sigma} = \Gamma_{1\sigma} + \Gamma_{2\sigma}$ . При записи (22) и (23) использовано приближение широкозонных металлических контактов, когда  $t_{Lk}, t_{Rk} \ll W$ ,  $W = 4t$  - ширина зоны контактов. В результате можно пренебречь реальными частями  $M_{j\sigma}^{ab}(\omega)$ , а мнимые части рассматривать постоянными, т.е.  $\Gamma_{1(2)\sigma} = \pi t_{L(R)k}^2 g_{L(R)\sigma} = const$ , где  $g_{L(R)\sigma}$  - спин-зависящая плотность состояний левого (правого) контакта.

Входящие в выражение для тока суммы линейных пропагаторов содержат концевые множители  $b_\alpha$ , которые определяются через числа заполнения состояний устройства. Для получения кинетических уравнений, которым должны удовлетворять  $N_m$ , используются неравновесные функции  $D_{\alpha\alpha}^{+-}(\omega)$ ,  $N_m = \int d\omega D_{\alpha\alpha}^{+-}(\omega) / 2\pi i$ , которые также являются решениями системы (21),

$$1) N_m = \sum_{\sigma} \int \frac{d\omega}{\pi} \gamma_{1\sigma}^2(\alpha) D_{\alpha}^2 \frac{\Gamma_{1\sigma} n_1 + \Gamma_{2\sigma} n_2}{1 + \Gamma_{\sigma}^2 L_{11\sigma}^2}, \quad (24)$$

$$2) N_m = \sum_{\sigma} \int \frac{d\omega}{\pi} \gamma_{1\sigma}^2(\alpha) D_{\alpha}^2 \frac{\Gamma_{1\sigma} n_1 + \Gamma_{2\sigma} n_2 + \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} (\Gamma_{1\sigma} n_2 + \Gamma_{2\sigma} n_1) \delta_{\sigma}^2(\alpha)}{[1 - \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} (L_{11\sigma}^2 - L_{12\sigma}^2)]^2 + \Gamma_{\sigma}^2 L_{11\sigma}^2}, \quad (25)$$

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

В разделе 2.3 развитая теория применяется для анализа транспортных свойств одиночной анизотропной магнитной примеси. Рассматривается режим туннельной связи и низких температур, который часто реализуется в экспериментальных исследованиях [11], т.е.  $T, \Gamma_{\sigma} \ll E_{\alpha}$ . Тогда,

$$N_m \simeq \frac{b_{\alpha}}{\pi} \left[ \arctg \left( \frac{W/2 + eV/2 - \omega_{0\alpha}}{\kappa_{\alpha}} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\Gamma_{L\sigma}}{\Gamma_{\sigma}} \arctg \left( \frac{\omega_{0\alpha} - eV/2}{\kappa_{\alpha}} \right) + \frac{\Gamma_{R\sigma}}{\Gamma_{\sigma}} \arctg \left( \frac{\omega_{0\alpha} + eV/2}{\kappa_{\alpha}} \right) \right], \quad (26)$$

где введены следующие обозначения:

$$\omega_{0\alpha} = E_{\alpha} + \lambda_{\alpha} \kappa_{\alpha}, \quad \kappa_{\alpha} = \frac{b_{\alpha} \gamma_{\sigma}^2(\alpha) \Gamma_{\sigma}}{1 + \lambda_{\alpha}^2}, \quad \lambda_{\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{b_{\beta} \gamma_{\sigma}^2(\beta) \Gamma_{\sigma}}{E_{\beta} - E_{\alpha}}. \quad (27)$$

Демонстрируется, что при сделанных предположениях основной вклад в туннельный ток вносят диагональные слагаемые,  $I \simeq \sum_{\alpha} I_{\alpha\alpha}$ , поэтому

$$I \simeq \frac{4e}{h} \sum_{\alpha} \frac{\Gamma_{L\sigma} \Gamma_{R\sigma}}{\Gamma_{\sigma}} b_{\alpha} \gamma_{\sigma}^2(\alpha) \left[ \arctg \left( \frac{\omega_{0\alpha} + eV/2}{\kappa_{\alpha}} \right) - \arctg \left( \frac{\omega_{0\alpha} - eV/2}{\kappa_{\alpha}} \right) \right]. \quad (28)$$

На рис. 5а изображена зависимость чисел заполнения собственных состояний гамильтониана устройства с одиночным анизотропным спином (10),  $|N_e, S_{tot}^z\rangle$  (где  $N_e$  - число электронов,  $S_{tot}^z$  -  $z$ -проекция полного спина), от энергии электрического поля смещения. Здесь выделяются несколько особенностей поведения каждой пары  $N_{n,m}$  ( $eV$ ) для перехода, которому отвечает корневой вектор  $\alpha = \alpha(n, m)$ . Первая следует из решения кинетического уравнения (26). Если имеется только один переход  $\alpha$ , то  $N_{n,m}$  скачкообразно изменяются в окрестности  $eV/2 \sim |E_{\alpha}|$ : при  $E_{\alpha} < 0$  ( $> 0$ ) и  $eV/2 < |E_{\alpha}|$  верхний уровень остается незаполненным,  $N_m = 0$  ( $N_n = 0$ ). В свою очередь, когда  $eV/2 > |E_{\alpha}|$ , заполнение уровней одинаково,  $N_n = N_m$ . Если одноэлектронных возбуждений несколько (см. вставку на рис. 5а), то начинает влиять условие полноты,  $\sum_{n=1}^{N_P} N_n = 1$ . В результате, при активации новых переходов одновременно уменьшаются  $N_i$ , заполненные ранее. При больших напряжениях вероятность заполнения всех атомных орбиталей одинакова. Анализ выражения

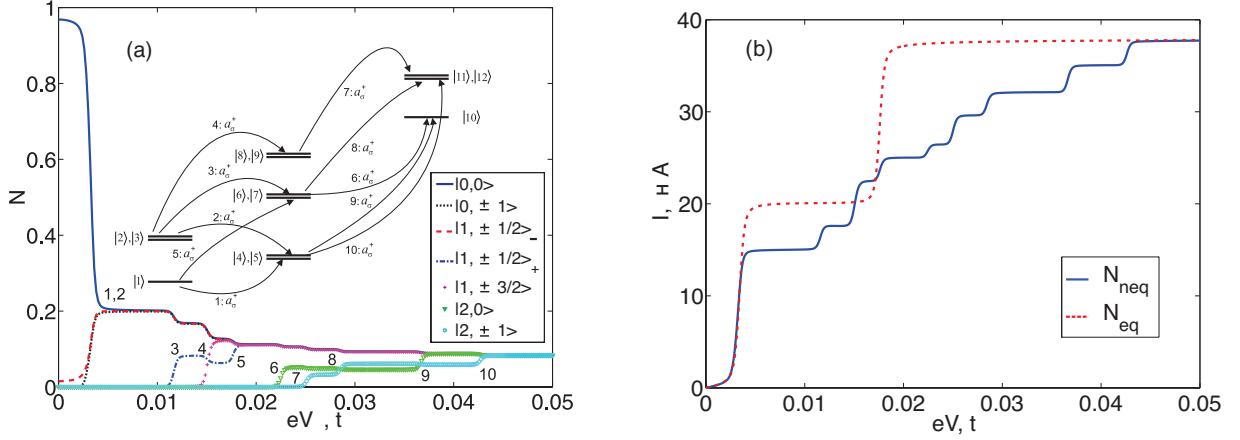


Рис. 5: Зависимость неравновесных чисел заполнения (а) и тока (б) от энергии электрического поля смещения для параметров  $t = 1$  эВ,  $t_L = t_R = t/100$ ,  $\varepsilon_d = A = 0.005$ ,  $D = 0.003$ ,  $U = 0.01$ ,  $H = 0$ ,  $T = 1$  К. На вставке представлены возможные электронные переходы между атомными орбиталями устройства,  $|N_e, S_{tot}^z\rangle$ .

(28) показывает, что ток и  $N_i(eV)$  изменяются синхронно: при  $eV/2 < |E_\alpha|$  вклад от канала  $\alpha$  отсутствует,  $I_{\alpha\alpha} = 0$ ; при  $eV/2 > |E_\alpha|$  имеем  $I_{\alpha\alpha} = 2e\Gamma_{L\sigma}\Gamma_{R\sigma}b_\alpha\gamma_\sigma^2(\alpha)/\Gamma_\sigma$ . Таким образом, на рис. 5b реализуется поведение, аналогичное наблюдаемому в режиме кулоновской блокады. Пунктирной кривой показана вольт-амперная характеристика (ВАХ) для случая, когда не учитываются неравновесные процессы многократного неупругого рассеяния, приводящие к переходам из одних возбужденных состояний в другие.

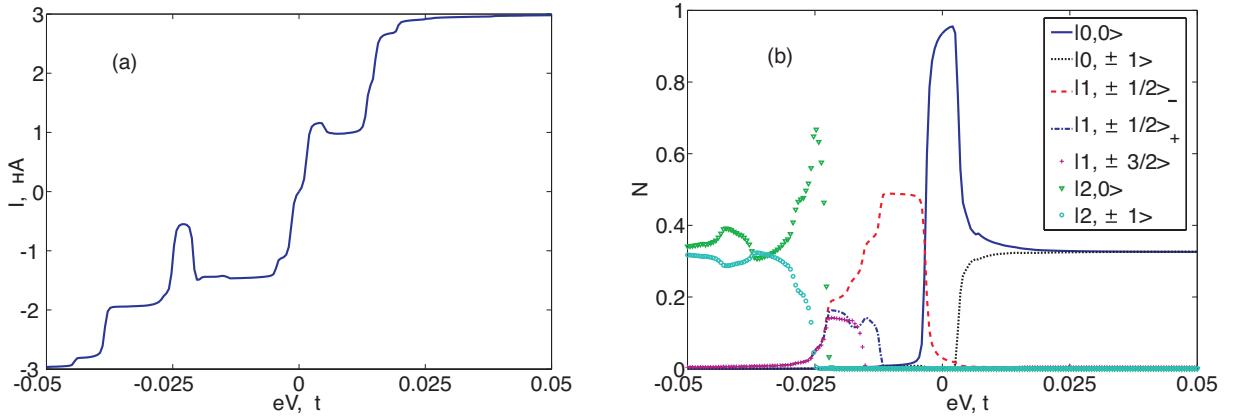


Рис. 6: Влияние асимметрии связи устройства с контактами на (а) ВАХ и (б) неравновесные числа заполнения для параметров рис. 5 и  $D = -0.003$ ,  $t_L = t/50$ ,  $t_R = t_L/10$ .

Поскольку величина добавки в ток вследствие включения нового канала  $\alpha$  ( $n, m$ ) определяется множителем  $(N_n + N_m)\gamma_\sigma^2(n, m)$ , то возможен эффект отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП), показанный на рис. 6а. Он объясняется действием условия полноты. ОДП можно усилить при асимметричном подключении к контактам ( $t_L \neq t_R$ ). В этом случае наблюдается диодный эффект, когда при большом напряжении

положительной (отрицательной) полярности заполняются состояния из безэлектронного (двухэлектронного) сектора гильбертова пространства (см. рис. 6b). В результате, взаимное изменение «нового» и «старых» чисел заполнения будет особенно значительным, а, следовательно, и уменьшение вкладов в ток от каналов, активированных ранее (см.  $eV \approx -0.002$  на рис. 6a и 6b). Дополнительно, в режиме асимметричной связи демонстрируется возможность переключения между состояниями с разными значениями проекции полного спина устройства.

В разделе 2.4 анализируются эффекты неравновесности в случае спинового димера. В такой ситуации для проекции спина  $\sigma$  возможны переходы с одинаковой энергией,  $E_\alpha = E_\beta$ . С учетом этого выводятся кинетические уравнения при  $T, \Gamma_\sigma \ll E_\alpha$ ,

$$N_m \approx \frac{b_\alpha^2 \gamma_{1\sigma}^2(\alpha)}{\kappa_\sigma(\alpha)} \left\{ \frac{\Gamma_\sigma}{2} + \frac{\Gamma_{1\sigma}}{\pi} \operatorname{arctg} \left( \frac{E_\alpha - eV/2}{\kappa_\sigma(\alpha)} \right) + \frac{\Gamma_{2\sigma}}{\pi} \operatorname{arctg} \left( \frac{E_\alpha + eV/2}{\kappa_\sigma(\alpha)} \right) \right\}, \quad (29)$$

где  $\kappa_\sigma(\alpha) = \sqrt{(\Gamma_{1\sigma}^2 + \Gamma_{2\sigma}^2) B_{11\sigma}^2(\alpha) + 2\Gamma_{1\sigma}\Gamma_{2\sigma}B_{12\sigma}^2(\alpha)}$ ,  $B_{11(12)\sigma}(\alpha) = b_\alpha \gamma_{1\sigma}(\alpha) \gamma_{1(2)\sigma}(\alpha) + \sum_\beta b_\beta \gamma_{1\sigma}(\beta) \gamma_{1(2)\sigma}(\beta)$ . В множителях  $B_{11(12)\sigma}(\alpha)$  суммирование идет по корневым векторам  $\beta$ , отвечающим условию  $E_\beta = E_\alpha$ . Определяющими вкладами в суммарный электронный ток, кроме диагональных, являются недиагональные  $I_{\alpha\beta}$ , для которых  $E_\alpha = E_\beta$ ,

$$\begin{aligned} I_{\alpha\alpha} &\approx \frac{4e}{h} \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} \frac{b_\alpha^2 \gamma_{1\sigma}^4(\alpha)}{\kappa_\sigma(\alpha)} \left\{ \operatorname{arctg} \left( \frac{E_\alpha + eV/2}{\kappa_\sigma(\alpha)} \right) - \operatorname{arctg} \left( \frac{E_\alpha - eV/2}{\kappa_\sigma(\alpha)} \right) \right\}, \\ I_{\alpha\beta} &\approx \frac{4e}{h} \Gamma_{1\sigma} \Gamma_{2\sigma} \Theta_{12}^\sigma(\alpha) \Theta_{12}^\sigma(\beta) \frac{b_\alpha b_\beta \gamma_{1\sigma}^2(\alpha) \gamma_{1\sigma}^2(\beta)}{\kappa_\sigma(\alpha)} \left\{ \operatorname{arctg} \left( \frac{E_\alpha + eV/2}{\kappa_\sigma(\alpha)} \right) - \operatorname{arctg} \left( \frac{E_\alpha - eV/2}{\kappa_\sigma(\alpha)} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (30)$$

где  $\Theta_{12}^\sigma(\alpha) = \operatorname{sign}[\gamma_{1\sigma}(\alpha) \gamma_{2\sigma}(\alpha)]$ .

На примере системы с небольшим числом переходов при  $U, U_{12} \gg t, t_d \gg A \gg I, H = 0$  и симметричном подключении к контактам анализируется поведение чисел заполнения. Предполагается, что к устройству приложено такое поле затвора, что в нем отсутствует электрон при  $V = 0$ . Тогда синглетное состояние  $|S_{tot} = 0, S_{tot}^z = 0\rangle \equiv |1\rangle$  является основным. Выше по энергии располагаются вырожденные одноэлектронные уровни, которым отвечают волновые функции  $|1/2, \pm 1/2\rangle^u \equiv |19, 20\rangle$ . Далее следуют триплетные состояния димера,  $|1, 0\rangle \equiv |2\rangle$  и  $|1, \pm 1\rangle \equiv |3, 4\rangle$ , когда электрон в устройстве снова отсутствует. Энергии переходов в триплетные состояния димера одинаковы,  $E_{2,19} = E_{4,20}$ . Однако, учитывая, что интенсивности переходов отличаются,  $\gamma_{i\uparrow}^2(4, 20) = 2\gamma_{i\uparrow}^2(2, 19)$ , решение системы кинетических уравнений (29) при  $eV/2 > |E_{1,19}|, E_{2,19}$  дает

$$N_2 = \frac{7}{2} - 2\sqrt{3}, \quad N_1 = N_{19} = \sqrt{2N_2} - N_2, \quad N_3 = N_4 = \frac{1}{2} - N_{19} - \frac{1}{2}\sqrt{1 - 4N_{19}}. \quad (31)$$

Таким образом, если напряжение исток-сток достаточно сильное для активации переходов в триплетные состояния димера, то в отсутствии магнитного поля 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.

В разделе 2.5 метод неравновесных функций Грина в атомном представлении используется для описания теории стационарного эффекта Джозефсона, когда между сверхпроводниками s-типа находится многоуровневая структура атомного масштаба. Присутствие недиагональных членов в БКШ гамильтонианах контактов приводит к необходимости учета соответствующих аномальных средних при построении диаграммных рядов для расчета сверхтока. Для этих целей удобным оказывается представление Горькова-Намбу, использующее четырехкомпонентные операторы [12, 13],

$$\hat{\Psi}_k = \begin{bmatrix} c_{k\uparrow} & c_{-k\downarrow}^+ & c_{-k\downarrow} & c_{k\uparrow}^+ \end{bmatrix}^T, \quad \hat{\Psi}_\alpha = \begin{bmatrix} X^\alpha & X^{-\alpha} & X^\alpha & X^{-\alpha} \end{bmatrix}^T. \quad (32)$$

Оперируя матрицами неравновесных функций Грина,

$$\hat{G}_{ij}^{ab}(\tau - \tau') = -i \langle T_C \hat{\Psi}_i(\tau) \otimes \hat{\Psi}_j^+(\tau') \rangle, \quad (33)$$

и следуя ходу рассуждений, описанному выше, получены следующие выражения, характеризующие стационарный джозефсоновский ток через структуру атомного масштаба в случае коллинеарного магнитного поля и одним узлом в центре:

$$I_J = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n(\omega) j(\omega) \sin(\Theta_L - \Theta_R) = I_{Jc} + I_{Jd}, \quad (34)$$

$$j_c = 4e\Gamma_L\Gamma_R i\beta\beta_0^2 \left[ \frac{L_{e\uparrow}L_{h\downarrow}(L_{e\uparrow} + L_{h\downarrow})}{|Z_{e\uparrow,h\downarrow}|^2} + \frac{L_{e\downarrow}L_{h\uparrow}(L_{e\downarrow} + L_{h\uparrow})}{|Z_{e\downarrow,h\uparrow}|^2} \right], \quad |\omega| > \Delta; \quad (35)$$

$$j_d = 4e\Gamma_L\Gamma_R\beta_0^2 \text{Im} \left\{ \frac{L_{e\uparrow}L_{h\downarrow}}{Z_{e\uparrow,h\downarrow}} + \frac{L_{e\downarrow}L_{h\uparrow}}{Z_{e\downarrow,h\uparrow}} \right\}, \quad |\omega| < \Delta, \quad (36)$$

где  $Z_{e\uparrow,h\downarrow(e\downarrow,h\uparrow)} = (1 + L_{e\uparrow(\downarrow)}\Gamma\beta)(1 + L_{h\downarrow(\uparrow)}\Gamma\beta) - |B|^2\beta_0^2 L_{e\uparrow(\downarrow)}L_{h\downarrow(\uparrow)}$ ,  $L_{e\sigma} = L_{ii\sigma}$ ,  $L_{h\sigma} = L_{ii\sigma}$  ( $E_\alpha \rightarrow -E_\alpha$ ),  $\beta_0 = \beta\Delta/\omega$ ,  $\beta = \omega/\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}$  при  $|\omega| < \Delta$  и  $\beta = i|\omega|/\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}$  при  $|\omega| > \Delta$ ,  $B = \Gamma_L e^{i\Theta_L} + \Gamma_R e^{i\Theta_R}$ ,  $\Theta_{L,R}$  - фазы сверхпроводящего параметра порядка контактов. Ток Джозефсона имеет две составляющие:  $I_{Jc}$  - вклад от квазичастичных возбуждений при  $|\omega| > \Delta$  и  $I_{Jd}$  - ток, переносимый андреевскими связанными состояниями (ACC), когда  $|\omega| < \Delta$ . Энергии ACC являются корнями уравнения  $Z_{e\uparrow,h\downarrow(e\downarrow,h\uparrow)} = 0$ .

В заключении данного раздела на примере магнитной димерной молекулы демонстрируется, 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 ACC.

В третьей главе исследуется влияние кулоновских взаимодействий на транспортные свойства системы квантовых точек (КТ). Раздел 3.1 посвящен обзору некоторых основных эффектов, которые имеют место при рассмотрении транспорта через отдельные точки и их наборы. В частности, отмечается, что транспортные и спектральные свойства структур из четырех точек (далее ЧТС - четырехточечная структура) в общем случае, когда предполагаются конечными взаимодействиями электронов как внутри точек, так и

между ними, а также учитываются эффекты анизотропии, являются слабо изученными. Кроме того, обсуждается аналогия, которую можно проследить между системами КТ и хаббардовскими системами.

В разделе 3.2 излагается теория транспорта в ЧТС. Ее гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}_D = \sum_{\sigma;j=1}^4 \xi_{j\sigma} a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_{j=1}^4 n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} + V \sum_{\sigma\sigma'} n_{2\sigma} n_{3\sigma'} + \\ + \sum_{\sigma} [t_1 (a_{1\sigma}^+ + a_{4\sigma}^+) a_{2\sigma} + t_2 (a_{1\sigma}^+ + a_{4\sigma}^+) a_{3\sigma} + t_0 a_{2\sigma}^+ a_{3\sigma} + h.c.], \quad (37)$$

где  $\xi_{j\sigma} = \varepsilon_j - \sigma h - \mu$ ;  $t_i$  ( $i = 0, 1, 2$ ) - параметр перескока между КТ;  $U$  - интенсивность кулоновского взаимодействия внутри каждой точки;  $V$  - интенсивность отталкивания электронов, находящихся на соседних КТ в центральной части устройства (2- и 3-ая КТ).

Левый и правый однозонные парамагнитные контакты связаны с 1- и 4-ой КТ, соответственно. Их влияние описывается уравнениями Дайсона, которым удовлетворяют неравновесные функции Грина ЧТС,  $G_{ij\sigma}(\tau - \tau') = -i \langle T_C a_{i\sigma}(\tau) a_{j\sigma}^+(\tau') \rangle$ ,  $i, j = 1, \dots, 4$ :

$$G_{ij\sigma}(\tau - \tau') = g_{ij\sigma}(\tau - \tau') + \iint_C d\tau_1 \tau_2 \left[ g_{i1\sigma}(\tau - \tau_1) \Sigma_{L\sigma}(\tau_1 - \tau_2) G_{1j\sigma}(\tau_2 - \tau') + \right. \\ \left. + g_{i4\sigma}(\tau - \tau_1) \Sigma_{R\sigma}(\tau_1 - \tau_2) G_{4j\sigma}(\tau_2 - \tau') \right], \quad (38)$$

где  $g_{ij\sigma}(\tau - \tau')$  - затравочные функции Грина ЧТС;  $\Sigma_{L(R)\sigma}(\tau_1 - \tau_2) = \sum_k t_{L(R)}^2 e^{\pm \frac{i e V}{2} (\tau_1 - \tau_2)} g_{L(R)k\sigma}(\tau_1 - \tau_2)$  - собственно-энергетические функции контактов. При выводе (38) рассматривается немагнитный случай, в частности, пренебрегается спин-флип процессами,  $\langle a_{i\sigma} a_{j\bar{\sigma}}^+ \rangle = 0$ . С учетом (38) ток в ЧТС при симметричном подключении к контактам описывается выражением

$$I = \frac{e}{\hbar} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \Gamma^2 |G_{14\sigma}^r|^2 (f_L - f_R), \quad (39)$$

где  $G_{14\sigma}^r = G_{14\sigma}^{++} - G_{14\sigma}^{+-}$  - запаздывающая функция Грина.

Чтобы описать влияние кулоновских взаимодействий внутри точек и между ними на кинетические процессы, применяется метод уравнений движения [14] для неравновесных функций Грина. В рассматриваемой модели 2(1)-ая и 3(4)-ая КТ идентичны, поэтому они обозначаются индексами  $\alpha$  ( $\beta$ ) и  $\bar{\alpha}$  ( $\bar{\beta}$ ), соответственно. Для получения замкнутой системы уравнений используется схема расцепления для немагнитного случая [15], применимая для описания эффекта кулоновской блокады при температурах выше температуры Кондо [16, 17]. В этом подходе расцепляются уравнения на функции Грина третьего порядка, например,  $\langle \langle n_{3\sigma} n_{2\bar{\sigma}} a_{2\sigma} | a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle^{r,+}$ . Тогда, для запаздывающих функций после ряда преобразований получаем

$$\langle \langle a_{\alpha\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r = (g_{\alpha\sigma} - K_{\alpha\sigma}) \left( 1 + t_0 \langle \langle a_{\bar{\alpha}\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r + t(\alpha) [\langle \langle a_{\beta\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r + \langle \langle a_{\bar{\beta}\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r] \right), \\ \langle \langle a_{\beta\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r = \frac{g_{\beta\sigma}^{(0)}}{1 + itg_{\beta\sigma}^{(0)}/2} [t(\alpha) \langle \langle a_{\alpha\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r + t(\bar{\alpha}) \langle \langle a_{\bar{\alpha}\sigma} | a_{\alpha\sigma}^+ \rangle \rangle^r], \quad (40)$$

где

$$\begin{aligned}
K_{\alpha\sigma} &= \frac{UV\langle a_{\alpha\bar{\sigma}}^+ a_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle^2}{b_{\alpha\sigma 1} b_{\alpha\sigma 4}} \left( \frac{1}{b_{\alpha\sigma 2}} + \frac{1}{b_{\alpha\sigma 3}} \right), \quad g_{\alpha\sigma} = g_{\alpha\sigma}^{(0)} + \frac{V}{b_{\alpha\sigma 1}} \left[ g_{\alpha\sigma}^{(1)} + g_{\alpha\sigma}^{(2)} + \frac{U}{b_{\alpha\sigma 2}} g_{\alpha\sigma}^{(3)} \right], \\
g_{\alpha\sigma}^{(0)} &= \frac{1 - \langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle}{b_{\alpha\sigma 1}} + \frac{\langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle}{b_{\alpha\sigma 2}}, \quad g_{\alpha\sigma}^{(1)} = \frac{(1 - \langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle) \langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle}{b_{\alpha\sigma 3}} + \frac{\langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle \langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle}{b_{\alpha\sigma 4}}, \\
g_{\alpha\sigma}^{(2)} &= \frac{(1 - \langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle) \langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle}{b_{\alpha\sigma 3}} + \frac{\langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle \langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle}{b_{\alpha\sigma 4}}, \quad g_{\alpha\sigma}^{(3)} = \frac{\langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle \langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle}{b_{\alpha\sigma 4}} + \frac{\langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle \langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle}{b_{\alpha\sigma 4}}, \quad g_{\beta\sigma}^{(0)} = g_{\alpha\rightarrow\beta,\sigma}^{(0)}, \\
b_{\alpha\sigma 1} &= \omega + i\delta - \xi_{\alpha\sigma}, \quad b_{\alpha\sigma 2} = b_{\alpha\sigma 1} - U, \quad b_{\alpha\sigma 3} = b_{\alpha 1} - V(1 + \langle n_{\alpha\bar{\sigma}} \rangle), \quad b_{\alpha\sigma 4} = b_{\alpha\sigma 3} - U.
\end{aligned} \tag{41}$$

Числа заполнения и корреляторы получаются на основе самосогласованного решения интегральных уравнений типа  $\langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle = \int d\omega G_{ji\sigma}^{+-}/2\pi$ ,  $i, j = \alpha, \beta$ . В свою очередь, функции Грина  $G_{ji\sigma}^{+-}$  определяются из уравнений аналогичных (40), которые выводятся с учетом особенностей определения соответствующих смешанных функций Грина, т.е.

$$(\omega + i\delta) \langle \langle c_{L(R)k\sigma} | a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle^{+-} = t_{L(R)} \left( g_{L(R)k\sigma}^r \langle \langle a_{1(4)\sigma} | a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle^{+-} + g_{L(R)k\sigma}^{+-} \langle \langle a_{1(4)\sigma} | a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle^a \right), \tag{42}$$

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

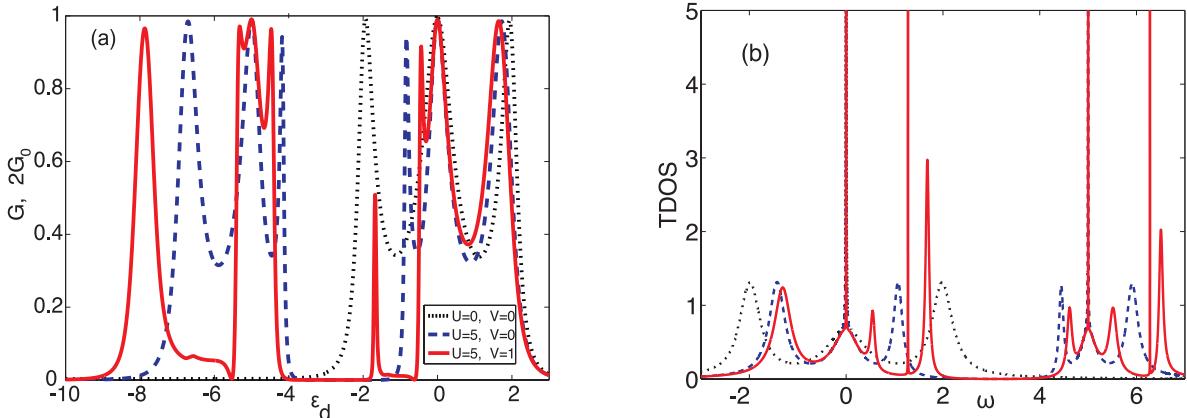


Рис. 7: (а) Кондактанс и (б) плотность состояний четырехточечной структуры при  $k_B T = 0.01$ ,  $t_1 = t_2 = 1$ ,  $\mu = t_0 = h = 0$ . Все энергетические величины измеряются в единицах  $\Gamma$ .

В разделе 3.3 анализируются спектральные и транспортные свойства ЧТС в приближении линейного отклика,  $eV \rightarrow 0$ . Для такого случая кондактанс равен

$$G = -G_0 \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \Gamma^2 |G_{14\sigma}^r|^2 \frac{\partial f}{\partial \omega}, \quad G_0 = \frac{e^2}{h}. \tag{43}$$

На рис. 7а представлена зависимость кондактанса от энергии электрического поля затвора,  $\epsilon_d$ , которая управляет положением уровня энергии отдельной КТ. В свою очередь, на рис. 7б изображена зависимость суммарной плотности состояний от частоты  $TDOS = i \sum_{\sigma,j=1}^4 (G_{jj\sigma}^r - G_{jj\sigma}^a) / 2\pi$ . В нулевом магнитном поле ( $h = 0$ ) и при отсутствии зарядовых корреляций собственные энергии симметричной ЧТС ( $t_1 = t_2$ ) равны

$E_1 = \varepsilon_d$ ,  $E_2 = \varepsilon_d - t_0$ ,  $E_{3,4} = \varepsilon_d + t_0/2 \pm \sqrt{t_0^2 + 16t_1^2}/2$ . Следовательно, решения уравнений  $E_j = 0$  ( $j = 1, \dots, 4$ ) дают значения  $\varepsilon_d$  и  $\omega$ , при которых в зависимостях  $G(\varepsilon_d)$  и  $TDOS(\omega)$  возникают резонансные особенности (см. пунктирные кривые на рис. 7). Видно, что в обоих случаях и в кондактансе, и в плотности состояний имеется резонансная структура, состоящую из трех максимумов (далее ТПР - трехпиковый резонанс). При этом состояние с энергией  $E_2$  есть ССК, поскольку ему соответствует бесконечно узкий пик, ширина которого пропорциональна  $\delta^2$  ( $\delta \rightarrow 0$ ). Однако, это состояние никак не влияет на поведение кондактанса. 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.

Сильное кулоновское отталкивание электронов с различными проекциями спина в каждой КТ приводит к расщеплению ее энергий возбуждения,  $\xi_{j\sigma}$  и  $\xi_{j\sigma} + U$  ( $j = 1, \dots, 4$ ). Следовательно, в зависимостях  $G(\varepsilon_d)$  и  $TDOS(\omega)$  в силу электрон-дырочной симметрии возникают две ТПР, которые разделены явно выраженной диэлектрической зоной при  $-4 \leq \varepsilon_d \leq -1$ , где  $G$  и  $TDOS$  близки к нулю, и ЧТС заполнена наполовину (см. штриховые кривые на рис. 7). Таким образом, ТПР представляют собой прообразы верхней и нижней хаббардовских подзон. Учет кулоновского взаимодействия электронов, находящихся во 2-й и 3-й КТ, приводит к расщеплению центрального пика в обоих ТПР (см. сплошные кривые на рис. 7). При этом в каждой из подзон появляется по одному асимметричному пику Фано, а также вблизи них реализуются достаточно широкие полосы с низкой проводимостью (см., например,  $G \sim 0.1$  в области  $-7 \leq \varepsilon_d \leq -5.5$ ).

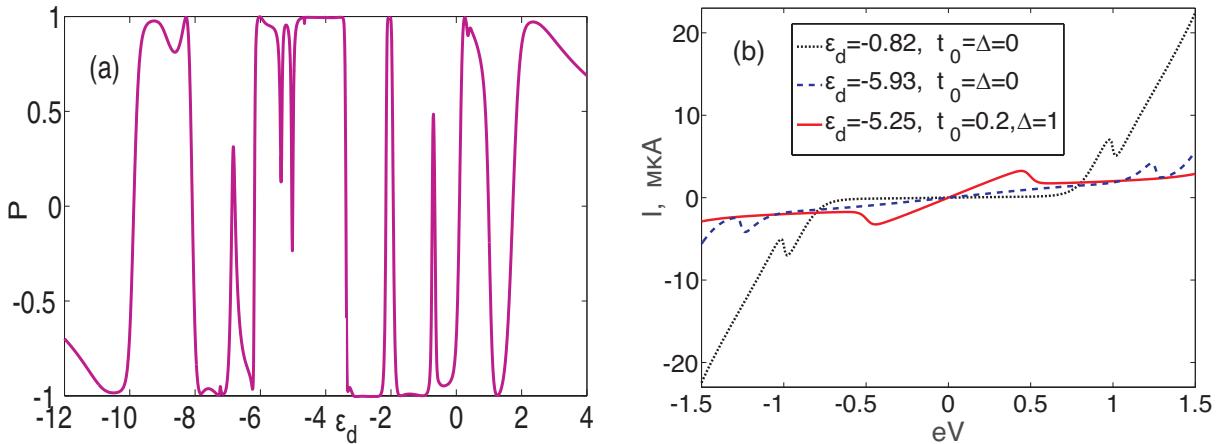


Рис. 8: (a) Эффект спиновой фильтрации при  $U = 6$ ,  $h = 0.5$ ,  $V = t_2 = t_0 = \Delta = 1$ ,  $k_B T = 0.01$ . (b) Отрицательный кондактанс ЧТС при  $U = 5$ ,  $V = 1$ ,  $t_1 = 1$ ,  $t_2 = 0.1$ ,  $t_0 = \Delta = h = 0$ ,  $k_B T = 0.01$ .

Из зависимости  $TDOS(\omega)$  следует, что ненулевые  $U$  и  $V$  приводят к появлению многочастичных ССК [18]. Их время жизни можно сделать конечным, если нарушить симметрию системы (например, если  $\xi_{2\sigma} - \xi_{3\sigma} = 2\Delta \neq 0$  или  $t_1 \neq t_2$ ), и, как следствие, по-

лучить новые резонансы Фано. Таким образом, учет квантовой интерференции, эффектов анизотропии и зарядовых корреляций приводит к возникновению набора зон с высокой и низкой проводимостью, переключение между которыми осуществляется действием электрического поля затвора. Такое поведение закладывает основу для реализации спинового фильтра на основе ЧТС. Действительно, в ненулевых магнитных полях спин-зависящие кондактансы,  $G_\sigma$ , испытывают зеемановское расщепление. Следовательно, при некоторых  $\varepsilon_d$  и  $h$  достигается идеальная спиновая фильтрация, когда  $G_\sigma \approx 1$  и  $G_{\bar{\sigma}} \approx 0$ . Другими словами, реализуется спин-поляризованное окно, где коэффициент спиновой поляризации тока принимает экстремальные значения,  $P = (G_\uparrow - G_\downarrow) / (G_\uparrow + G_\downarrow) \approx \pm 1$ . На рис. 8а приведено характерное поведение этой величины.

В разделе 3.4 изучается нелинейный отклик ЧТС. Показано, что в этой ситуации в анизотропной системе возникает эффект ОДП, 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,  $\Delta$ , а также при учете перескока между этими точками,  $t_0$ , как показано на рис. 8б.

**Четвертая глава** диссертации посвящена изучению транспортных свойств систем, содержащих топологические сверхпроводники. В разделе 4.1 приводится обзор экспериментальных и теоретических работ, ставящих своей целью обнаружение майорановского связанного состояния (МСС) в полупроводниковых проволоках с сильным спин-орбитальным взаимодействием, наведенным за счет эффекта близости сверхпроводящим спариванием (далее СП - сверхпроводящая проволока) и помещенных в магнитное поле. В частности, обсуждаются возможности и проблемы измерения квантованного пика кондактанса при нулевом напряжении методом локальной спектроскопии; особенности флюктуаций тока, связанные с присутствием МСС в системе; исследования нелокальности МСС; транспорт в СП в режиме кулоновской блокады.

В разделе 4.2 изучаются особенности транспортных свойств интерферометра (кольца). При этом предполагается, что его рукава соединены мостиком, роль которого играет упомянутая СП. Во вводной части дается обзор исследований по интерферометрии с участием МСС. Далее излагается необходимая теория, основанная на неравновесных функциях Грина, приближении сильной связи и представлении Горькова-Намбу. Гамильтониан кольца есть  $\hat{H}_D = \hat{H}_W + \sum_{i=1}^4 \hat{H}_{li} + \hat{H}_T$ . Первое слагаемое описывает СП,

$$\begin{aligned} \hat{H}_W = & \sum_{j=1}^N \left[ \sum_{\sigma} (\epsilon_d - \mu) a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} + (\Delta a_{j\uparrow}^+ a_{j\downarrow}^+ + iha_{j\uparrow}^+ a_{j\downarrow} + h.c.) \right] + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\sigma; j=1}^{N-1} [-ta_{j\sigma}^+ a_{j+1,\sigma} + i\alpha\sigma a_{j\bar{\sigma}}^+ a_{j+1,\sigma} + h.c.] + \sum_j (U \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} + V \hat{n}_j \hat{n}_{j+1}), \end{aligned} \quad (44)$$

где  $\alpha$  - интенсивность спин-орбитального взаимодействия Рашбы;  $\Delta$  - параметр сверхпроводящего спаривания s-типа;  $h$  - зеемановская энергия, связанная с магнитным полем в плоскости устройства. Тогда, при  $U, V = 0$  топологически нетривиальная фаза реализу-

ется, если выполняется неравенство [19]

$$(\epsilon_d - \mu - t)^2 + \Delta^2 < h^2 < (\epsilon_d - \mu + t)^2 + \Delta^2. \quad (45)$$

Проволоки в нормальной фазе (НП), которые составляют рукава кольца, предполагаются одинаковыми. Их гамильтонианы,  $\hat{H}_{l1-4}$ , получаются из (44) при  $\Delta = \alpha = 0$ . СП верхним концом связана с последними узлами верхних левой и правой НП (их гамильтонианы -  $\hat{H}_{l1}$  и  $\hat{H}_{l2}$ ), а нижним - с первыми узлами нижних левой и правой НП (их гамильтонианы -  $\hat{H}_{l3}$  и  $\hat{H}_{l4}$ ). Это взаимодействие описывается туннельным гамильтонианом,

$$\hat{H}_T = -t_0 \sum_{\sigma} [(b_{Ln\sigma}^+ + b_{Rn\sigma}^+) a_{1\sigma} + (d_{L1\sigma}^+ + d_{R1\sigma}^+) a_{N\sigma}] + h.c. \quad (46)$$

Связь устройства (СП + НП) с контактами описывается гамильтонианом, который одновременно является оператором взаимодействия при применении диаграммной техники для неравновесных функций Грина,

$$\hat{V} = - \sum_{k\sigma} \left[ c_{Lk\sigma}^+ \left( t_1 e^{-i\frac{\Phi_L}{2}} b_{L1\sigma} + t_2 e^{i\frac{\Phi_L}{2}} d_{Ln\sigma} \right) + c_{Rk\sigma}^+ \left( t_2 e^{i\frac{\Phi_R}{2}} b_{R1\sigma} + t_1 e^{-i\frac{\Phi_R}{2}} d_{Rn\sigma} \right) \right] + h.c.,$$

где  $\Phi_{L(R)} = \phi_{L(R)}/\phi_0$ ,  $\phi_{L(R)}$  - магнитный поток сквозь левое (правое) полукольцо,  $\phi_0 = \hbar/e$  - квант потока.

Для расчета стационарного тока при  $U, V = 0$  гамильтониан кольца диагонализуется на основе операторов 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  $\sigma$  на  $l$ -ом узле НП или СП. После введения матричных неравновесных функций Грина с помощью введенных операторов поля,  $\hat{f}_l$ , по аналогии с (33), и проведения ряда преобразований получено следующее выражение на ток в левом контакте:

$$I = \frac{2e}{h} \sum_{i,j=1,n} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega Tr \left[ \hat{\sigma} Re \left\{ \hat{\Sigma}_{Li,Lj}^r(\omega) \hat{G}_{Lj,Li}^{+-}(\omega) + \hat{\Sigma}_{Li,Lj}^{+-}(\omega) \hat{G}_{Lj,Li}^a(\omega) \right\} \right], \quad (47)$$

где  $\hat{\sigma} = diag(1, -1, 1, -1)$ . Блоки матрицы опережающей функции Грина устройства,  $\hat{G}_{Lj,Li}^a$ , определяются в результате решения уравнения Дайсона,

$$\hat{G}^a = \left[ \left( \omega - \hat{h}_D - \hat{\Sigma}^r(\omega) \right)^{-1} \right]^+, \quad (48)$$

где  $\hat{\Sigma}^r(\omega)$  - матрица запаздывающей собственno-энергетической функции, отражающей влияние обоих контактов на кольцо. В приближении широкозонных контактов она имеет следующие ненулевые блоки:

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}_{L1,L1}^r &= \hat{\Sigma}_{Rn,Rn}^r = -\frac{i}{2} \hat{\Gamma}_{11}, \quad \hat{\Sigma}_{R1,R1}^r = \hat{\Sigma}_{Ln,Ln}^r = -\frac{i}{2} \hat{\Gamma}_{22}, \\ \hat{\Sigma}_{\alpha 1,\alpha n}^r &= -\frac{i}{2} \hat{\Gamma}_{12} \left( \hat{\Phi}_{\alpha}^2 \right)^+, \quad \hat{\Sigma}_{\alpha n,\alpha 1}^r = -\frac{i}{2} \hat{\Gamma}_{12} \hat{\Phi}_{\alpha}^2, \quad \hat{\Phi}_{\alpha} = diag \left( e^{i\frac{\Phi_{\alpha}}{2}}, e^{-i\frac{\Phi_{\alpha}}{2}}, e^{i\frac{\Phi_{\alpha}}{2}}, e^{-i\frac{\Phi_{\alpha}}{2}} \right), \quad \alpha = L, R, \end{aligned} \quad (49)$$

где  $\hat{\Gamma}_{ii} = \Gamma_{ii}\hat{I}_4$  - функции уширения уровней устройства ( $i = 1, 2$ );  $\hat{I}_4$  - единичная матрица  $4 \times 4$ ;  $\Gamma_{12} = \sqrt{\Gamma_{11}\Gamma_{22}}$ . При непосредственном рассмотрении симметричного (асимметричного) подключения кольца к контактам предполагается, что  $\Gamma_{22} = \Gamma_{11} = 0.01$  ( $\Gamma_{22} = \Gamma_{11}/2 = 0.01$ ). Значения  $\Gamma_{11,22}$ , а также других энергетических величин приведены в единицах  $t$ . Блоки  $\hat{G}_{Li,Lj}^{+-}$  в (47) получаются из решения уравнения Келдыша,  $\hat{G}^{+-} = \hat{G}^r \hat{\Sigma}^{+-} \hat{G}^a$ . При этом ненулевые блоки  $\hat{\Sigma}^{+-}$  равны

$$\hat{\Sigma}_{\alpha i, \alpha j}^{+-} = -2\hat{\Sigma}_{\alpha i, \alpha j}^r \hat{F}_\alpha, \quad \alpha = L, R, \quad i, j = 1, n, \quad (50)$$

$$\hat{F}_{L(R)} = \text{diag} \left( f(\omega \pm eV/2), f(\omega \mp eV/2), f(\omega \pm eV/2), f(\omega \mp eV/2) \right).$$

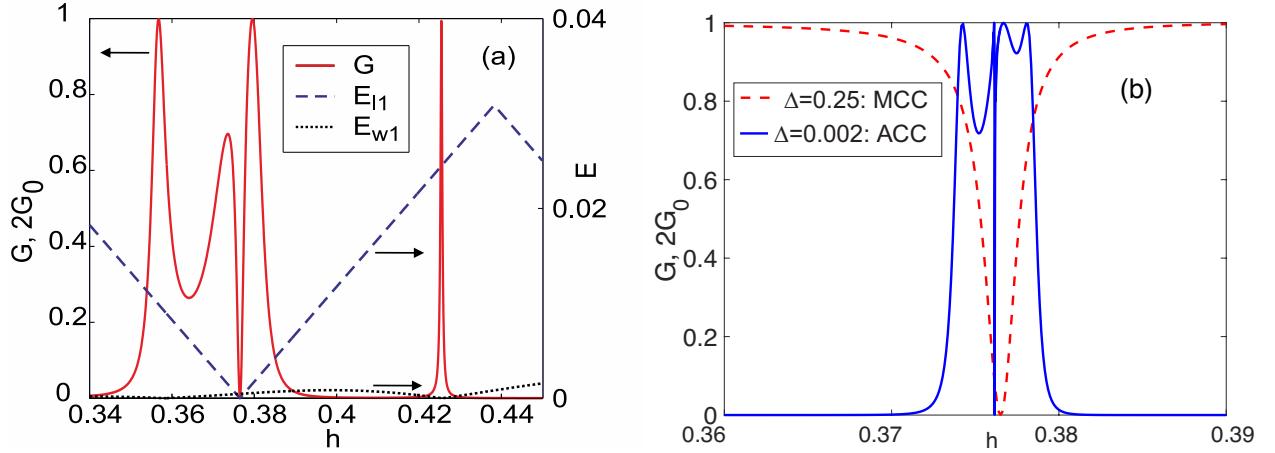


Рис. 9: (а) Резонансы Брейта-Вигнера и Фано в кондактансе кольца, когда мостик находится в топологической фазе, при  $N = 30$ . Положение резонанса Брейта-Вигнера/Фано (ось  $y$  слева) совпадает с минимумом энергии  $E_{W1}/E_{l1}$  (ось  $y$  справа). (б) Зависимость ширины резонанса Фано от типа возбуждения мостика с наименьшей энергией при  $N = 150$ . Параметры:  $n = 20$ ,  $\alpha = 0.2$ ,  $\Delta = 0.25$ ,  $\varepsilon_d = 1$ ,  $t_0 = 0.1$ ,  $t_1 = t_2 = 1$ ,  $\mu = U = V = 0$ ,  $\Phi = 0$ .

В результате анализа зависимости кондактанса от зеемановской энергии,  $G(h)$ , при симметричном подключении к kontaktам в режиме линейного отклика, низких температур и  $U = V = 0$  показано, что мостику в фазе топологической сверхпроводимости соответствует набор резонансов двух типов (см. сплошную кривую на рис. 9а). К первому относятся симметричные резонансы брейт-вигнеровского типа, ко второму - асимметричные резонансы или Фано резонансы. Наличие двух типов резонансов в кондактансе на качественном уровне объясняется присутствием в устройстве нескольких взаимодействующих каналов для транспорта носителей (по аналогии с двойной квантовой точкой [20]). Если основной вклад создается каналом, относящимся к СП ( $\mu = E_{W1}$ ), то реализуются лоренцевские пики (см. зависимость  $E_{W1}(h)$ , изображенную пунктирной кривой). Если, наоборот, в транспорте главным образом участвует канал НП ( $\mu = E_{l1}$ ), то имеет место интерференция по сценарию Фано (см. зависимость  $E_{l1}(h)$ , показанную штриховой кривой). Влияние кулоновского отталкивания в СП на низкоэнергетический транспорт

изучается на основе приближение среднего поля, когда  $U, V \ll t$  [22]. В этом случае наблюдается смещение симметричных резонансов, а пики Фано сохраняют свое положение. Схожий эффект имеет место и при введении диагонального беспорядка в СП.

Независимо от длины сверхпроводящего мостика пики Фано появляются при любых ненулевых  $\alpha, \Delta$  и  $\mu$ , если магнитное поле удовлетворяет условию (45). Другими словами, данные резонансы присутствуют независимо от пространственного распределения плотности вероятности состояния с энергией  $E_{W1}$ , изменяющегося с краевого (МСС) на объемное (АСС - андреевское связанные состояние) при уменьшении ширины щели в спектре возбуждений СП [21]. Однако, свойства резонансов Фано существенно зависят от типа этого состояния, которым можно управлять с помощью магнитного поля или изменения величину сверхпроводящего спаривания. Последний случай представлен на рис. 9b. Видно, что ширина резонанса существенно уменьшается, если реализуется АСС.

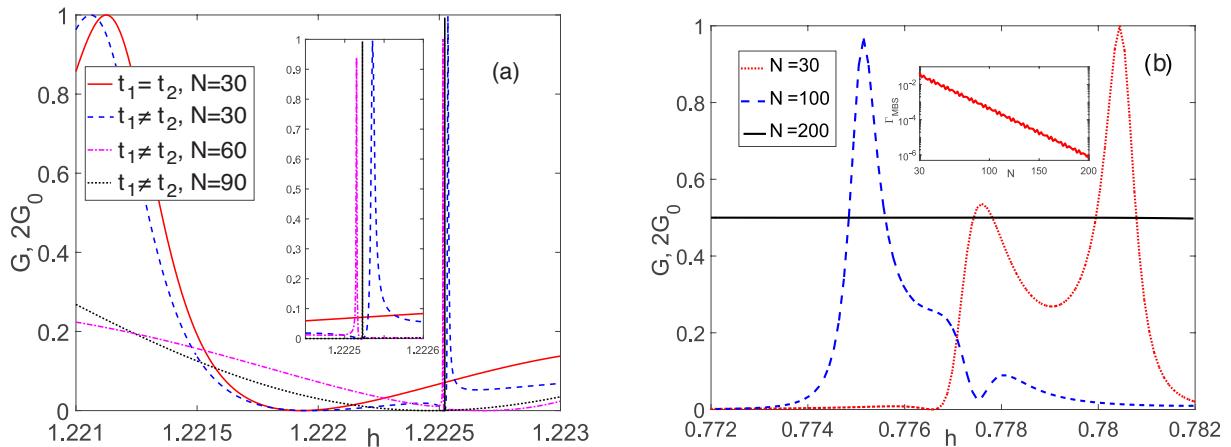


Рис. 10: (a) Коллапс резонанса Фано, индуцированного асимметрией туннельных процессов в кольце, с ростом нелокальности майорановского связанного состояния. Вставка: коллапс в большем разрешении по  $h$ . (b) Поведение  $G(h)$  для случая Т-образной геометрии. Вставка: пекрытие майорановских мод,  $\Gamma_{MBS}$ , как функция длины мостика при  $h = 0.777$ . Остальные параметры совпадают с использованными для построения рис. 9.

Особенности транспорта, связанные с нелокальностью МСС, имеют место при рассмотрении асимметричного кольца. В этом случае возникает набор новых узких асимметричных резонансов в окрестностях широких антирезонансов (ср. сплошную и штриховую кривые на рис. 10а). Тогда, в небольшом интервале зеемановских энергий имеются широкий и узкий резонансы Фано, а также широкий резонанс Брейта-Вигнера. Последние два указывают на возникновение топологического эффекта Дикке, поскольку мостик находится в нетривиальной фазе [23]. С ростом длины мостика,  $N$ , индуцированные асимметрией связи с контактами резонансы Фано коллапсируют, что хорошо видно на вставке рис. 10а. Другими словами, реализуются топологические ССК, поскольку резонансы Фано исчезают, только если имеет место истинное МСС с двумя невзаимодействующими

майорановскими модами (ММ).

Коллапсирующий пик Фано определяется ССК, возникающим за счет вырождения собственных состояний закрытой системы с нулевой энергией. Следовательно, исчезновение данного резонанса может указывать на увеличение кратности вырождения этого состояния, если перекрытие майорановских волновых функций становится пренебрежимо малым. Для проверки этой гипотезы анализируется бессpinовая модель кольца с  $n = 1$ . В данной ситуации в роли мостика, соединяющего четыре КТ с энергиями  $\xi_j$  ( $j = 1, \dots, 4$ ), рассматривается цепочка Китаева с четным числом узлов [24]. Диагонализуя гамильтониан устройства в таком случае при  $\xi_j = \xi = \varepsilon - \mu = 0$ , получим следующее уравнение на спектр:

$$\begin{aligned} E^4 & \left( E \cdot P_1 - 2t_0^2 \delta_1^{N/2-1} \right) \left( E \cdot P_2 + 2t_0^2 \delta_1^{N/2-1} \right) . \\ & \cdot \left( E \cdot P_3 - 2t_0^2 \delta_2^{N/2-1} \right) \left( E \cdot P_4 + 2t_0^2 \delta_2^{N/2-1} \right) = 0, \end{aligned} \quad (51)$$

где  $\delta_{1,2} = t \mp \Delta$ ;  $P_i$  -  $i$ -ый полином  $N/2$ -ой степени, причем в силу электрон-дырочной симметрии  $P_{2,4} = P_{1,3}$  ( $E \rightarrow -E$ ). Из (51) 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 резонанса Фано на рис. 10а.

Принципиальное отличие квантового транспорта через МСС и АСС также демонстрируется в случае Т-образной геометрии подключения, когда непосредственная связь между нижними НП и контактами отсутствует. На рис. 10б приведены зависимости  $G(h)$  для нескольких значений  $N$ . На вставке рис. 10б показано экспоненциальное уменьшение перекрытия волновых функций ММ,  $\Gamma_{MBS}$ , с ростом длины проволоки. Видно, что  $\Gamma_{MBS}$  уменьшается на два порядка, если число узлов в проволоке увеличивается с  $N = 30$  до  $N = 100$ . При этом состояние с энергией  $E_{W1}$  из андреевского становится майорановским, и антирезонанс в окрестности  $h = 0.777$  поднимается, т.е.  $G \neq 0$  (ср. пунктирную и штриховую кривые на рис. 10б). При дальнейшем росте  $N$  значение  $\Gamma_{MBS}$  уменьшается еще на несколько порядков. В результате возникает плато проводимости высотой  $G_0$  (см. сплошную кривую). Отмеченные особенности подтверждаются аналитическими расчетами транспорта для двух моделей СП: 1) пара ММ,  $\gamma_A$  и  $\gamma_B$ , взаимодействующих с интенсивностью  $\varepsilon_0$ ,  $\hat{H}_W = i\varepsilon_0\gamma_A\gamma_B/2$ ; 2) одно АСС,  $\alpha$ , с энергией  $\xi$ ,  $\hat{H}_W = \xi\alpha^+\alpha$ .

Таким образом, рассмотренное кольцо с СП делает возможным детектирование топологического фазового перехода в мостике за счет одновременного возникновения и симметричных, и асимметричных резонансов. Кроме того, анализ свойств резонансов Фано позволяет отличить истинное МСС, имеющее краевой характер, от низкоэнергетического возбуждения объемного типа, т.е. АСС.

В разделе 4.3 изучается возможность детектирования фазы топологической сверхпроводимости в проволоке со спин-орбитальной связью Рашбы средствами спин-поляризованной спектроскопии. Для этого изучается зависимость спиновой поляризации

МСС от направления магнитного поля. 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;  $\sigma^i$ ,  $\tau^i$  ( $i = x, y, z$ ) - матрицы Паули в спиновом и электрон-дырочном пространствах;  $\tau_0$  - единичная матрица. Если магнитное поле изменяется в плоскости  $xz$ , а вектор эффективного поля Рашбы коллинеарен оси  $y$ , то имеем  $S_j^x = u_{1j\uparrow}u_{1j\downarrow} + u_{1j\downarrow}u_{1j\uparrow}$ ,  $S_j^y = 0$ ,  $S_j^z = u_{1j\uparrow}^2 - u_{1j\downarrow}^2 \equiv S_{j\uparrow}^z - S_{j\downarrow}^z$ , где  $u_{l=1,j\sigma}$ ,  $v_{l=1,j\sigma}$  - коэффициенты преобразования Боголюбова [25]. На рис. 11а изображена зависимость  $S_{j=1}^z \equiv S_L^z$  от компонент зеемановской энергии,  $h_x$  и  $h_z$ . Эта характеристика отлична от нуля преимущественно в нетривиальной фазе, где параметры системы удовлетворяют неравенству (45) при  $\varepsilon_d = t$ . При этом существуют направления магнитного поля, для которых  $S_L^z \approx 0$  даже в топологически нетривиальной фазе. Кроме того, для ориентаций поля, когда  $|S_{L,R}^z|$  максимальен, одна из соответствующих спин-зависящих компонент,  $S_{L\uparrow}^z$  или  $S_{L\downarrow}^z$ , стремится к нулю.

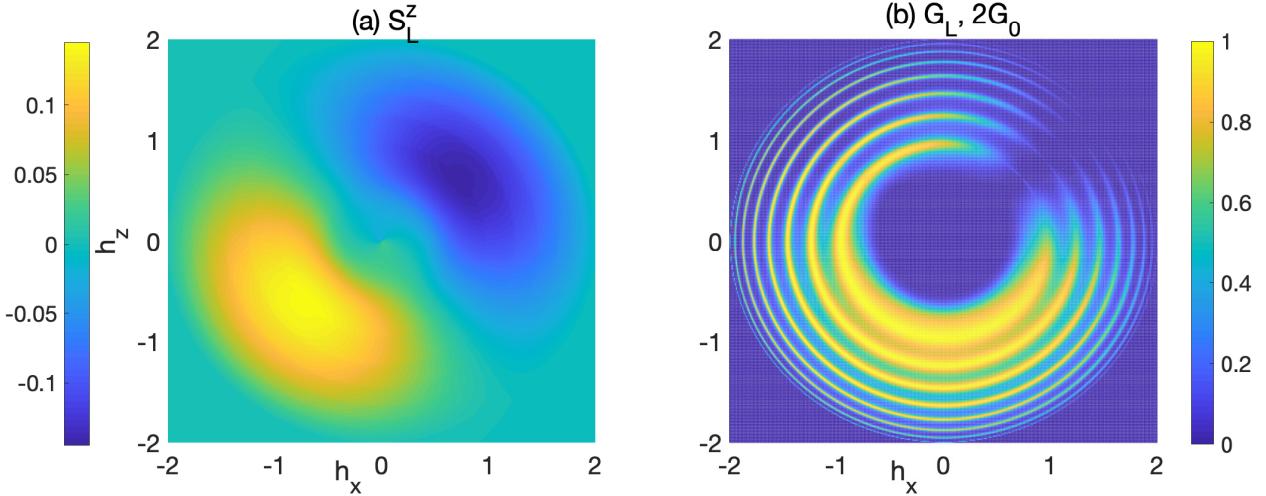


Рис. 11: (а) Зависимость  $z$ -компоненты спиновой поляризации майорановского состояния на левом конце сверхпроводящей проволоки,  $S_L^z$ , и (б) кондактанса левого полуметаллического контакта,  $G_L$ , от энергии магнитного поля. Параметры:  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\Delta = 0.4$ ,  $\alpha = 2$ ,  $N = 30$ .

Далее анализируются особенности транспорта в системе, где СП последовательно и напрямую соединена с левым и правым полуметаллическими контактами. Последнее означает, что имеются носители только с одной проекцией спина (носители с  $\sigma = \uparrow$ ), т.е.  $\Gamma_{L,R} = \Gamma_{L,R}^+$ ,  $\Gamma_{L,R}^- = 0$ . Тогда ток определяется процессами локального андреевского отражения и нелокального переноса заряда,  $I_L = I_L^{LAR} + I_L^{ET}$ . В общем случае андреевские процессы в системе полуметалл/сверхпроводник невозможны. В диссертации на примере СП из двух узлов ( $N = 2$ ) и  $h_x = 0$  демонстрируется, что ненулевой вклад в спин-поляризованный ток от андреевского канала возникает вследствие спин-орбитального взаимодействия.

На рис. 11б показана зависимость  $G_L(h_x, h_z)$  при малом напряжении смещения,  $eV = 10^{-3} \ll h_{x,z}$ ,  $\alpha$ ,  $\Delta$ . В результате, в возникающем энергетическом диапазоне меж-

ду электрохимическими потенциалами полуметаллических контактов ток может создаваться только за счет прохождения через МСС. Другими словами, спин-поляризованный транспорт существенно зависит от  $\sigma = \uparrow$  компоненты плотности вероятности МСС на концах проволоки, которая пропорциональна  $S_{L,R\uparrow}^z$ . Кондактанс левого контакта приобретает максимальные значения преимущественно в нижней полуплоскости,  $h_z < 0$ , где также наибольшие значения имеет  $S_{L\uparrow}^z$  (см. рис. 11а). Контуры постоянных значений кондактанса имеют вид концентрических колец, где  $G_L = 2G_0$  за счет локального андреевского отражения [26]. Это связано с осцилляторным поведением энергии майорановского возбуждения в магнитном поле. Кольца имеют разрывы, где  $G_L \rightarrow 0$ . Они образуются при ориентациях магнитного поля, для которых  $S_{L\uparrow}^z \rightarrow 0$ . Одновременно, фактор Фано правого контакта, характеризующий автокорреляции тока на нулевой частоте, стремится к 2. Такое поведение указывает на отсутствие эффективной связи между левым контактом и соответствующим концом проволоки и, как следствие, доминированием процессов локального андреевского отражения на противоположном интерфейсе. Описанный эффект можно использовать для реализации переключателя спин-поляризованного тока. Если  $h_x \approx \pm h_z$ , то  $I_{L(R)} \approx 0$  и  $I_0 \approx \pm |I_{R(L)}|$  (где  $I_0$  - ток в заземленном сверхпроводнике, на котором располагается нанопроволока). Если же  $h_x \neq \pm h_z$ , то  $I_L \approx -I_R$  и  $I_0 \approx 0$ .

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 применения DMRG в случае СП со спариванием расширенного s-типа ( $\Delta, \Delta_1$  - параметры одно- и межузельного сверхпроводящего спаривания, соответственно), зарядовые корреляции в которой описываются моделью Шубина-Вонсовского, обсуждаются в **разделе 5.3**. Во вводной части этого раздела описаны топологические свойства соответствующего гамильтониана без зарядовых корреляций ( $U = V = 0$ ). Он относится к симметрийному классу BDI. В результате, в BDI-проводке помимо возникновения одиночного МСС (далее ОМС - одиночное майорановское состояние) возможно образование двух МСС (далее ДМС - двойное майорановское состояние). Причем последние реализуются только при условии  $|\Delta| < 2|\Delta_1|$ .

На основе расчетов DMRG демонстрируется, что с ростом интенсивности хаббардовского отталкивания топологическая фаза с ДМС возникает даже при  $|\Delta| > 2|\Delta_1|$ . На рис. 12а этот эффект проявляется в зависимости двух наименьших энергий возбуждения,  $E_{1,2}$ , от химического потенциала в слабом магнитном поле. При  $U = 0$  обе энергии отличны от нуля, что указывает на реализацию топологически тривиальной фазы (см. кривые с кружками-маркерами). Когда же  $U = 3$ , фаза с ДМС, где  $E_{1,2} = 0$ , появляется слева и справа от области с ОМС, где  $E_1 = 0, E_2 \neq 0$  (см. кривые с крестиками-маркерами). Индуцирование ДМС при сильном  $U$  и  $|\Delta| > 2|\Delta_1|$  качественно объясняется значительным

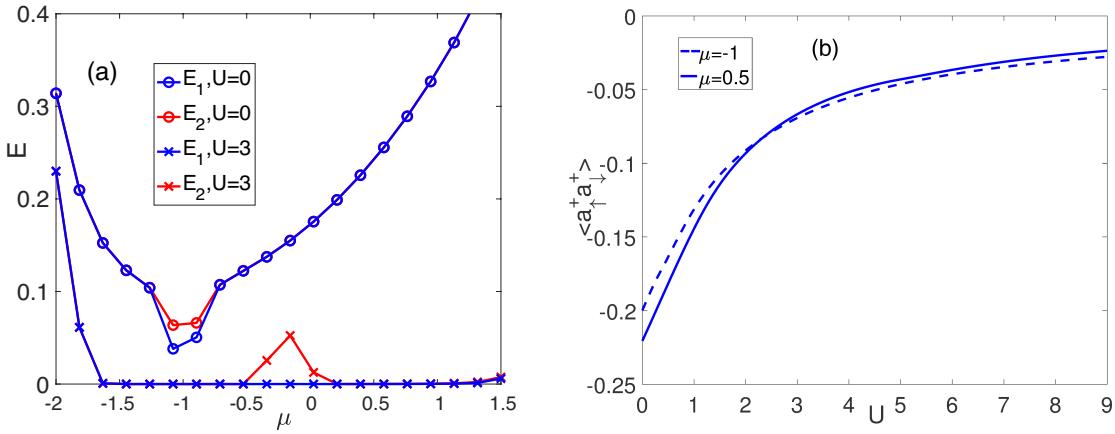


Рис. 12: (а) Зависимость первых двух энергий возбуждения от химического потенциала. (б) Зависимость среднего значения локального аномального коррелятора от величины хаббардовского отталкивания. Параметры:  $N = 100$ ,  $\epsilon_d = 0$ ,  $\Delta = -0.5$ ,  $\Delta_1 = 0.2$ ,  $\alpha = 1.5$ ,  $h = 0.1$ ,  $V = 0$ .

подавлением эффективного спаривания на узле, что отчетливо видно по поведению соответствующего среднего аномального коррелятора,  $\langle a_{\uparrow}^{+}a_{\downarrow}^{+} \rangle = \sum_f \langle a_{f\uparrow}^{+}a_{f\downarrow}^{+} \rangle / N$ , на рис. 12b. Т.к. при  $h \neq 0$  крамерсовское вырождение отсутствует, то второе состояние в ДМС сильнее подвержено влиянию возрастающего  $U$ . Как следствие, отмечается, что в достаточно сильных магнитных полях ДМС могут преобразовываться в ОМС.

Оценка вклада майорановских одиночастичных возбуждений в общую структуру переходов между вырожденными многочастичными состояниями из секторов с разной фермионной четностью осуществляется на основе расчета нормы  $j$ -го возбуждения,  $norm_j = \sum_{f\sigma} (|u_{jf\sigma}|^2 + |v_{jf\sigma}|^2)$ , где  $u_{jf\sigma} = \langle \Psi_j | a_{f\sigma} | \Psi_0 \rangle$ ,  $v_{jf\sigma} = \langle \Psi_j | a_{f\sigma}^{+} | \Psi_0 \rangle$ ,  $|\Psi_0\rangle = |\Psi_1^{ev/od}\rangle$  - 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. Показано, что при сильных кулоновских взаимодействиях в слабых (сильных) магнитных полях  $norm_j \approx 0.5$  ( $norm_j \approx 1$ ), поскольку средние спин-зависимые концентрации,  $n_{\sigma} = \sum_f \langle a_{f\sigma}^{+}a_{f\sigma} \rangle / N$ , являются соизмеримыми (несоизмеримыми) величинами.

В разделе 5.4 для построения диаграмм топологических фаз в режиме сильных корреляций процедура DMRG обобщается на случай атомной статистики. Необходимость этого шага связана с построением эффективного гамильтониана  $t - J_{\alpha} - V$  модели, в котором состояния с двумя частицами на узле отынтегрированы аналитически. Последнее приводит к улучшению сходимости и ускорению расчетов, т.к. число используемых в алгоритме DMRG собственных состояний сокращается с  $4^{N_0}$  до  $3^{N_0}$ , где  $N_0$  - количество узлов в исходном кластере; а самый большой размер матриц при соответствующих вычислениях уменьшается с  $4^{2(N_0+1)}$  до  $3^{2(N_0+1)}$ .

На рис. 13а представлена фазовая диаграмма в координатах  $(\mu, h)$ , построенная в

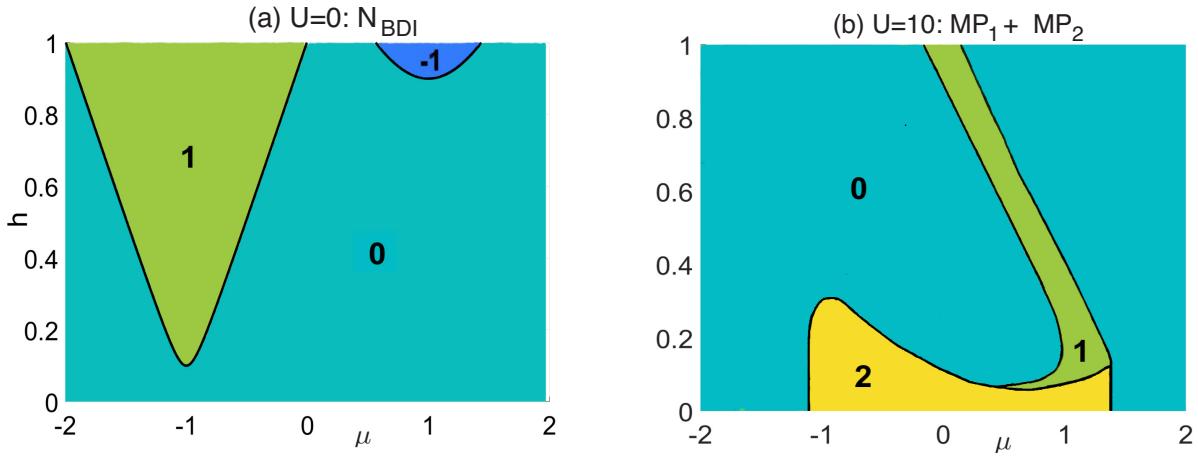


Рис. 13: Карты топологических фаз для проволоки в отсутствии зарядовых корреляций (а) и в сильно коррелированном режиме (б) для параметров рис. 12.

результате расчета топологического инварианта  $N_{BDI}$  при  $U = V = 0$  ( $|N_{BDI}|$  равен числу МСС). Для анализа топологических фаз и майорановских квазичастиц при  $U, V \neq 0$  используется понятие майорановской поляризации,

$$MP_j = \frac{\sum'_{f\sigma} (w_{jf\sigma}^2 - z_{jf\sigma}^2)}{\sum'_{f\sigma} (w_{jf\sigma}^2 + z_{jf\sigma}^2)}, \quad w_{jf\sigma} (z_{jf\sigma}) = \langle \Psi_j | (X_f^{0\sigma} \pm X_f^{\sigma 0}) | \Psi_0 \rangle, \quad j = 1, 2. \quad (52)$$

Апостроф указывает на то, что суммирование по  $f$  выполняется по половине узлов СП. При  $N \rightarrow \infty$ :  $MP_j \rightarrow 0$  в случае объемного возбуждения, и  $MP_j \rightarrow 1$  при реализации МСС. На рис. 13б приведена карта  $MP_1(\mu, h) + MP_2(\mu, h)$ , когда  $U = 10$ ,  $V = 0$ . Границы фаз построены на основе зависимостей майорановских поляризаций от длины системы. Сравнение графиков (а) и (б) говорит о значительной трансформации левой параболы с ОМС внутри (см. область, где  $N_{BDI} = 1$ ). Видно, что корреляции подавляют топологическую фазу в широком диапазоне параметров. Одновременно с этим возникает область с ДМС за счет сильного хаббардовского отталкивания.

Отмеченные эффекты сохраняются, если дополнительно учитывается межузельное взаимодействие, и  $V \ll U$ . При этом граница фаз параболической формы вытягивается вправо и опускается ниже. Полоса с ОМС становится уже, а также уменьшается размер области с ДМС под параболой. На основании DMRG расчетов в  $t$ -модели делается вывод о том, что в пределе  $U \rightarrow 0$  проволока находится в топологически тривиальной фазе.

**Раздел 5.5** посвящен изучению особенностей магнитокалорического эффекта, позволяющим детектировать майорановские состояния в сверхпроводящей проволоке с учетом сильного кулоновского отталкивания.

**В заключении** формулируются основные результаты, полученные в диссертационной работе.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

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 гамильтонiana, 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 кинетических 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 одиночастичными, 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 спин-орбитальной 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 угла 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 Щубина-Вонсовского со спин-орбитальным взаимодействием показано, что увеличение интенсивности одноузельных и междуузельных 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 ( $t - J_\alpha - V$ ) 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.

## ПУБЛИКАЦИИ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ДИССЕРТАЦИИ

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. *Индуктирование 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 spin-filtering 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.

## СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Fano U. *Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts.*// Phys. Rev. – 1961. – V.124. – P.1866.
- [2] Landauer R. *Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction.*// IBM J. Res. Dev. – 1957. – V.1. – P.233.
- [3] Buttiker M. *Four-Terminal Phase-Coherent Conductance.*// Phys. Rev. Lett. – 1986. – V.57. – P.1761.
- [4] Datta S. *Electronic transport in mesoscopic systems.* – Cambridge: Cambridge University Press. – 1995.
- [5] Келдыш Л. В. *Диаграммная техника для неравновесных процессов.*// ЖЭТФ. – 1964. – Т.47. – С.1515.
- [6] Арсеев П. И. *О диаграммной технике для неравновесных систем: вывод, некоторые особенности и некоторые применения.*// УФН. – 2015. – Т.185. – С.1271.
- [7] Hubbard J. C. *Electron correlations in narrow energy bands. IV. The atomic representation.*// Proc. R. Soc. London A. – 1965. – V.285. – P.542.
- [8] Вальков В. В., Овчинников С. Г. *Квазичастицы в сильно коррелированных системах.* – Новосибирск: Изд-во СО РАН. – 2001.
- [9] Зайцев Р. О. *Обобщенная диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном антиферромагнетике.*// ЖЭТФ. – 1975. – Т.68. – С.207.
- [10] Вальков В. В., Валькова Т. А. *Низкотемпературная намагниченность легкопластинчатого ферромагнетика.*// ФНТ. – 1985. – Т.11. – С.951.
- [11] Heersche H. B., de Groot Z., Folk J. A. et al. *Electron Transport through Single Mn<sub>12</sub> Molecular Magnets.*// Phys. Rev. Lett. – 2006. – V.96. – P.206801.
- [12] Gor'kov L. P. *On the Energy Spectrum of Superconductors.*// ЖЭТФ – 1958. – Т.34. – С.735.
- [13] Nambu Y. *Quasi-Particles and Gauge Invariance in the Theory of Superconductivity.*// Phys. Rev. – 1960. – V.117. – P.648.
- [14] Зубарев Д. Н., *Двухвременные функции Грина в статистической физике.*// УФН. – 1960. – Т.71. – С.71.
- [15] 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.

- [16] Lacroix C. *Density of states for the Anderson model.*// J. Phys. F: Metal Phys. – 1981. – V.11. – P.2389.
- [17] Meir Y., Wingreen N. S., Lee P. A. *Transport through a Strongly Interacting Electron System: Theory of Periodic Conductance Oscillations.*// Phys. Rev. Lett. – 1991. – V.66. – P.3048.
- [18] Sadreev A. F., Babushkina T. V. *Two-electron bound states in continuum in quantum dots.*// Письма в ЖЭТФ. – 2008. – Т.88. – С.360.
- [19] Oreg Y., Refael G., von Oppen F. *Helical Liquids and Majorana Bound States in Quantum Wires.*// Phys. Rev. Lett. – 2010. – V.105. – P.177002.
- [20] 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.
- [21] 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.
- [22] Вальков Б. В., Мицкан В. А., Шустин М. С. *Каскад квантовых переходов и магнетокалорические аномалии в открытой нанопроволоке.*// Письма в ЖЭТФ. – 2017. – Т.106. – С.762.
- [23] Volya A., Zelevinsky V. *Non-Hermitian effective Hamiltonian and continuum shell model.*// Phys. Rev. C. – 2003. – V.67. – P.054322.
- [24] Kitaev A. Y. *Unpaired Majorana fermions in quantum wires.*// Phys. Usp. – 2001. – V.44. – P.131.
- [25] Боголюбов Н. Н. *Лекции по квантовой статистике.* – Киев: Наукова думка. – 1949.
- [26] Law K. T., Lee P. A., Ng T. K. *Majorana Fermion Induced Resonant Andreev Reflection.*// Phys. Rev. Lett. – 2009. – V.103. – P.237001.

Подписано в печать 2021 г.

Формат 60 × 84/16. Усл. печ. л. 2. Тираж 70 экз. Заказ №

Отпечатано в типографии ИФ СО РАН

660036, Красноярск, Академгородок, ИФ СО РАН