

ФЕРМИОННАЯ ЧЕТНОСТЬ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ И КАЛОРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ НАНОПРОВОЛОКИ

B. B. Вальков, B. A. Мицкан, M. C. Шустин*

*Институт физики им. Л. В. Киренского, ФИЦ КНЦ Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 17 октября 2018 г.,
после переработки 7 марта 2019 г.
Принята к публикации 5 апреля 2019 г.

Для полупроводниковой нанопроволоки с сильным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы с наведенной сверхпроводимостью и помещенной во внешнее магнитное поле определены структура и фермионная четность основного состояния при периодических граничных условиях. Показано, что учет открытых границ приводит к разбиению топологически нетривиальной области параметров на набор подобластей с различной фермионной четностью основного состояния. Такая особенность связана с возникновением в системе краевых мод с немонотонно изменяющимися энергиями возбуждений при изменении параметров системы. В точке квантового перехода, в которой происходит изменение фермионной четности основного состояния, энергия краевой моды становится равной нулю. Показано, что эффективными характеристиками, позволяющими экспериментально идентифицировать отмеченные серии квантовых переходов в открытой нанопроволоке, являются магнито- и электрокалорический эффекты. Такие эффекты при низких температурах демонстрируют аномальное поведение в области параметров, для которой в длинных нанопроволоках реализуются топологически устойчивые майорановские моды.

DOI: 10.1134/S0044451019090141

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы майорановские моды (ММ) привлекают значительный интерес мирового научного сообщества ввиду предсказания возможности их обнаружения в конденсированных средах [1–4]. В физике твердого тела ММ представляют собой возбуждения, чьи характеристики в реальном пространстве являются существенно нелокальными. Системы, содержащие майорановские моды, имеют вырожденное основное состояние. Следствием этого, во-первых, является возможность реализации нетривиальной топологической структуры основного состояния [5–7]. Во-вторых, если вырожденное основное состояние отделено от первого возбужденного существенной энергетической щелью, то ММ являются устойчивыми по отношению к незначительным локальным возмущениям. Сказанное выше обусловливает интерес к ММ как к перспективным объектам для создания защищенного от процессов деко-

геренции квантового компьютера. С фундаментальной точки зрения интерес к майорановской проблематике связан с необходимостью понимания и обнаружения особенностей свойств конденсированных сред, обусловленных их нетривиальными топологическими характеристиками.

В настоящее время установлено, что классификация топологических фаз систем невзаимодействующих фермионов может быть проведена на основе симметрийных соображений [8–10]. Примерами нелокальных симметрий, характеризующих топологические фазы, являются симметрия по отношению к инверсии времени, электрон-дырочная, киральная и зеркальная симметрии. При заданном наборе нелокальных симметрий и определенной пространственной размерности состояния системы фермионов (в предположении о наличии щели в энергетическом спектре) распадаются на набор топологически неэквивалентных классов, различаемых значениями топологических индексов. На границе полу бесконечных сред с различными значениями таких индексов реализуются топологически защищенные бесщелевые возбуждения, в частности ММ.

* E-mail: vvv@iph.krasn.ru

Классификация топологических фаз значительно усложняется при учете взаимодействия между фермионами. Последнее может приводить как к индуцированию новых топологических фаз, так и к уменьшению числа неэквивалентных топологических состояний системы. Так, в работе [11] на примере модельной одномерной системы класса симметрии BDI была продемонстрирована возможность редуцирования топологической классификации с помощью \mathbb{Z} -инварианта, к классификации на основе \mathbb{Z}_8 -топологического индекса. Впоследствии данный результат был получен другими методами с использованием формализма функций Грина [12, 13], матрицы рассеяния [14] и в рамках нелинейной сигма-модели [15, 16]. При этом были предложены способы классификации топологических фаз квазиди-номерных систем с взаимодействием [16–22]. Важным для настоящего исследования является результат, полученный в работе [16], демонстрирующий устойчивость \mathbb{Z}_2 -топологической классификации систем невзаимодействующих фермионов по отношению к включению в систему четырехфермионных взаимодействий.

Твердотельные системы, в которых могут реализовываться ММ, достаточно разнообразны. В пионерских работах [23, 24] существование таких квазичастичных возбуждений было предсказано в сердцевинах вихрей двумерных киральных сверхпроводников [23] и на концах квантовых проволок с наведенной сверхпроводимостью [24]. В обеих моделях сверхпроводящие спаривания обладали p -волновым типом симметрии. Позднее в работе [25] было указано, что сверхпроводимость p -типа симметрии может быть достигнута в реальных системах за счет совместной реализации наведенной s -волной сверхпроводимости, сильного спин-орбитального взаимодействия и внешних полей. Следуя данной идеи, были рассмотрены различные гибридные структуры, содержащие сверхпроводник s -типа симметрии, топологические 2D-изоляторы [26] и полупроводниковые нанопроволоки с сильным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы [27, 28], изучаемые в настоящей работе. Отметим, что рассматриваются также системы, в которых реализация майорановских мод возможна за счет внутренних взаимодействий [29–32].

Среди представленных систем наиболее активно в настоящее время изучаются полупроводниковые нанопроволоки с наведенной s -волной сверхпроводимостью и внешним магнитным полем (в дальнейшем — сверхпроводящие нанопроволоки). Популярность данных систем связана, во-первых, с прос-

тотой их изготовления: обычно исследуются эпитаксиально выращенные полупроводники InAs или InSb с сильным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы и с большими значениями g -факторов ($g_{\text{InAs}} \sim 10\text{--}25$ [33] и $g_{\text{InSb}} \sim 20\text{--}70$ [34]), а также стандартные БКШ-сверхпроводники типа Al, тонкие слои которых (5–10 нм) эпитаксиальным образом напыляются на поверхность нанопроволок (см., например, работу [35]). Вторым обусловливающим популярность сверхпроводящих нанопроволок обстоятельством является то, что для них были относительно подробно рассмотрены условия и алгоритмы квантовых вычислений с ММ [1, 36–39]. Отметим при этом, что возможность реализации ММ была предсказана также для цепочек магнитных атомов [40, 41] и для нанопроволок без внешнего магнитного поля [42, 43]. Однако такие системы в настоящее время являются или спекулятивными, или слабо изученными экспериментально.

Большинство экспериментальных исследований проявлений топологически нетривиальных фаз и ММ в сверхпроводящих нанопроволоках основано на анализе их транспортных характеристик. Так, возникновение ММ в таких системах было подтверждено экспериментально измерением пика в дифференциальной проводимости при нулевом напряжении [44, 45]. Однако вопрос об однозначности трактовки имеющихся экспериментальных данных, касающихся детектирования майорановских состояний в сверхпроводящих проволоках, остается не до конца разрешенным [46–48]. В ходе теоретических разработок выяснилось, что последовательное описание существующих экспериментов требует учета ряда особенностей нанопроволок, таких как туннелирование между проволокой и сверхпроводящей подложкой [49], анизотропия g -фактора проволоки [50], электронные взаимодействия [51, 52], наличие беспорядка [53, 54], эффекты многозонности [55, 56], конечные размеры системы [57–62].

Общей картиной по исследованию эффектов электрон-электронных взаимодействий в нанопроволоке [51, 52] являются следующие заключения: межэлектронные взаимодействия, с одной стороны, уменьшают щель в объемном спектре системы, уменьшая тем самым ее топологическую защищенность, но, с другой стороны, увеличивают интервал параметров, при которых может реализовываться топологическая фаза. Аналогичный вывод имеет место для системы с беспорядком [53, 54]: относительно слабый беспорядок не разрушает в системе топологическую фазу, и майорановские моды не локализуются. При этом учет сильного электрон-

ного взаимодействия или сильного беспорядка может привести или к индуцированию, или к исчезновению топологических состояний в зависимости от параметров системы. Диаграмму топологических фаз также существенно обогащает совместное рассмотрение эффектов электронных взаимодействий, беспорядка и многозонности [55, 56, 63]. Отметим, что в настоящее время общепризнанной считается возможность эффективного представления основного состояния нанопроволок с электронными взаимодействиями в виде состояний матричных произведений (matrix product states) [20–22], удобного для симметрийного анализа топологических фаз. При этом явный вид волновой функции основного состояния сверхпроводящей нанопроволоки (точнее, для ее эффективной версии — модели цепочки Китаева [24]) был получен лишь для выделенного очень узкого набора параметров [64, 65].

Среди исследований эффектов конечных размеров квантовых проволок, в которых могут реализовываться ММ, можно выделить работы [57–62]. В частности, в работах [60, 61] обсуждалось важное для настоящего исследования осцилляционное поведение энергии расщепления между основным и первым возбужденным состояниями как функции длины и параметров цепочек. Позднее, в работе [62], для модели конечной цепочки Китаева было показано, что осцилляции минимальной энергии возбуждения отвечают серии квантовых переходов, сопровождающихся изменением фермионной четности основного состояния.

Если просуммировать сказанное выше, то видно, что на сегодняшний день по-прежнему актуальным является поиск эффектов, связанных с существованием ММ в сверхпроводящих нанопроволоках. Такие эффекты должны быть устойчивыми к введению в систему беспорядка, учету электронных взаимодействий и изменению пространственных размеров системы. В настоящей работе показывается, что если параметры достаточно короткой нанопроволоки отвечают условиям реализации в бесконечной цепочке ММ, то изменение внешнего магнитного поля или электростатического потенциала может сопровождаться серией магнито- и электрокалорических аномалий. В случае отсутствия беспорядка краткое рассмотрение особенностей магнитокалорического эффекта проведено в работе [66], где демонстрируется устойчивость калорических аномалий по отношению к совместному учету несильных одноузельных и междуузельных кулоновских корреляций и диагонального беспорядка. Также в работе [66] кратко рассматривается структура многочастично-

го основного состояния нанопроволоки в замкнутой геометрии. Явным образом демонстрируется связь между условиями реализации топологически нетривиальной фазы и отрицательной фермионной четности основного состояния.

Изложение результатов организовано следующим образом. В разд. 2 описывается модель полупроводниковой нанопроволоки с наведенной сверхпроводимостью и электронными взаимодействиями. В разд. 3 определяется структура основного состояния замкнутой нанопроволоки. Последнее достигается за счет использования связи \mathbb{Z}_2 -топологического инварианта и фермионной четности основного состояния. Раздел 4 посвящен анализу фермионной четности основного состояния открытой нанопроволоки, а в разд. 5 обсуждаются магнито- и электрокалорические эффекты. Особое внимание уделяется анализу данных свойств при параметрах, отвечающих нетривиальному значению \mathbb{Z}_2 -инварианта системы. Далее обсуждается устойчивость рассмотренных ранее характеристик по отношению к наличию в системе относительно слабых электронных корреляций, беспорядка, а также к изменению размеров системы (разд. 6).

2. МОДЕЛЬ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ НАНОПРОВОЛОКИ С ЭЛЕКТРОННЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

Будем рассматривать полупроводниковую нанопроволоку InSb, на поверхность которой эпитаксиальным образом напылен тонкий слой алюминия (3–5 нм), ответственный за индуцирование наведенной сверхпроводимости в системе. Учтем наличие в нанопроволоке сильного спин-орбитального взаимодействия Рашбы, а также отталкивательных электронных взаимодействий с интенсивностями U и V . Гамильтониан такой системы в приближении сильной связи имеет вид [51]

$$\mathcal{H} = \sum_{l,\sigma} \left[\xi_\sigma a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma} - \frac{t}{2} (a_{l\sigma}^\dagger a_{l+1\sigma} + a_{l+1\sigma}^\dagger a_{l\sigma}) \right] + \\ + \sum_l \left[\Delta a_{l\uparrow} a_{l\downarrow} - \frac{\alpha}{2} (a_{l\uparrow}^\dagger a_{l+1\downarrow} - a_{l\downarrow}^\dagger a_{l+1\uparrow}) + \text{H.c.} \right] + \\ + \sum_l \left(U \hat{n}_{l\uparrow} \hat{n}_{l\downarrow} + V \hat{n}_l \hat{n}_{l+1} \right), \quad (1)$$

где слагаемые в первой сумме описывают одномерную систему фермионов с интегралом перескоков $t/2$ и с зависящей от проекции спина энергией фермиона на одном узле (отсчитанной от химического потенциала μ),

$$\xi_\sigma = \epsilon_0 - \mu + \eta_\sigma h, \quad h = \frac{1}{2} g \mu_B H,$$

g — фактор Ланде, μ_B — магнетон Бора, H — внешнее магнитное поле, $a_{l\sigma}(a_{l\sigma}^\dagger)$ — оператор уничтожения (рождения) фермиона на узле с номером l и с проекцией спина $\sigma = \uparrow, \downarrow$, $\eta_\uparrow = 1$, $\eta_\downarrow = -1$. Во второй сумме гамильтониана представлены слагаемые, связанные с наличием (за счет эффекта близости) потенциала сверхпроводящего спаривания с амплитудой Δ , а также слагаемые, обусловленные спин-орбитальным взаимодействием Рашбы с параметром α . Последние слагаемые гамильтониана соответствуют учету одноузельного (U) и междуузельного (V) кулоновских взаимодействий фермионов. Оператор числа электронов на узле $\hat{n}_l = \hat{n}_{l\uparrow} + \hat{n}_{l\downarrow}$, $\hat{n}_{l\sigma} = a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma}$. Во всех разделах, кроме разд. 6, будет полагаться $U = V = 0$. Отметим, что, с точки зрения возможности реализации ММ, существенно аномально высокое значение g -фактора в системе ($g \simeq 50$), поскольку приложение полей порядка одной теслы позволит достигать реализации в системе топологически нетривиальной фазы. Поскольку в большинстве работ калорические характеристики системы не рассматривались, для анализа последних мы ограничимся полуколичественным анализом при выбранном соотношении параметров $\alpha/|t| \simeq 0.2$, $\Delta/|t| \simeq 0.3$.

3. СТРУКТУРА ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ЗАМКНУТОЙ НАНОПРОВОЛОКИ В ТОПОЛОГИЧЕСКИ ТРИВИАЛЬНОЙ И НЕТРИВИАЛЬНОЙ ФАЗАХ

Гамильтониан сверхпроводящей нанопроволоки (1) обладает электрон-дырочной симметрией, характеризуется нарушенной инвариантностью по отношению к инверсии времени и относится к классу симметрии D. Его топологические свойства классифицируются посредством \mathbb{Z}_2 -инварианта [9]. В работе [24] был предложен вид данного инварианта (число Майорана \mathcal{M}), выражаемый через фермионную четность $P(\mathcal{H}(N))$ основного состояния замкнутой нанопроволоки:

$$P(\mathcal{H}(N_1 + N_2)) = \mathcal{M} P(\mathcal{H}(N_1)) P(\mathcal{H}(N_2)). \quad (2)$$

Из представленного определения следует, что для цепочки с четным числом узлов топологический индекс \mathcal{M} совпадает с фермионной четностью такой замкнутой нанопроволоки. Случаю $\mathcal{M} = 1$ ($\mathcal{M} = -1$) соответствует волновая функция, описывающая суперпозицию состояний с четным (нечетным) числом фермионов.

Формирование отрицательной фермионной четности связано со структурой гамильтониана в особых точках зоны Бриллюэна. В рассматриваемом случае это следует из того, что в представлении квазипульса гамильтониана (1) распадается на прямую сумму квадратичных форм:

$$\mathcal{H} = \hat{h}(0) + \hat{h}(\pi) + \sum_{0 < k < \pi} \hat{r}(k), \quad (3)$$

каждая из которых действует в своем инвариантном подпространстве. В выражении (3) форма $\hat{r}(k) = \hat{h}(k) + \hat{h}(-k)$ представляется четной по квазипульсу комбинацией формы $\hat{h}(k)$:

$$\begin{aligned} \hat{h}(k) = & \sum_{\sigma} \xi_{k\sigma} \hat{n}_{k\sigma} + \\ & + \left(i \alpha_k a_{k\downarrow}^\dagger a_{k\uparrow} + \Delta a_{k\uparrow} a_{-k\downarrow} + \text{H.c.} \right), \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$\xi_{k\sigma} = \xi_k + \eta_\sigma h, \quad \xi_k = t \cos k - \mu, \quad \alpha_k = \alpha \sin k.$$

Выделение форм

$$\begin{aligned} \hat{h}(0) = & \sum_{\sigma} \xi_{0\sigma} \hat{n}_{0\sigma} + (\Delta a_{0\uparrow} a_{0\downarrow} + \text{H.c.}), \\ \hat{h}(\pi) = & \sum_{\sigma} \xi_{\pi\sigma} \hat{n}_{\pi\sigma} + (\Delta a_{\pi\uparrow} a_{\pi\downarrow} + \text{H.c.}), \\ \hat{n}_{0\sigma} = & a_{0\sigma}^\dagger a_{0\sigma}, \quad \hat{n}_{\pi\sigma} = a_{\pi\sigma}^\dagger a_{\pi\sigma} \end{aligned} \quad (5)$$

из общего суммирования в гамильтониане (3) связано с тремя факторами. Первый вытекает из того, что точки $k = 0$ и $k = \pi$ являются симметричными в том смысле, что $k = -k + G$, где G — вектор обратной решетки. Второй фактор определяется обращением в нуль спин-орбитального взаимодействия в этих точках. Третий и самый существенный фактор происходит из-за того, что изменение фермионной четности основного состояния квантовой проволоки при изменении параметров системы (например, магнитного поля) определяется только изменением структуры основного состояния форм $\hat{h}(0)$ и $\hat{h}(\pi)$.

Очевидно, что среди четырех собственных векторов формы $\hat{h}(0)$ (и аналогично формы $\hat{h}(\pi)$) два вектора соответствуют состоянию с одним фермионом:

$$|F_{Q\sigma}\rangle = a_{Q\sigma}^\dagger |0\rangle, \quad Q = 0, \pi, \quad \sigma = \uparrow, \downarrow. \quad (6)$$

Другие два собственных вектора имеют вид линейной комбинации векторов, соответствующих состояниям с четным числом фермионов:

$$\begin{aligned} |\Phi_{Q,\pm}\rangle &= \hat{R}_{Q,\pm} |0\rangle, \\ \hat{R}_{Q,\pm} &= A_{Q,\pm} + B_{Q,\pm} a_{Q\downarrow}^\dagger a_{Q\uparrow}^\dagger. \end{aligned} \quad (7)$$

В этих выражениях вакуумное состояние всей системы фермионов обозначено посредством $|0\rangle$.

Для дальнейшего важным является соотношение между энергией $E_{Q\downarrow}^F = \xi_{Q\downarrow}$ однофермионного состояния $|F_{Q\downarrow}\rangle$ и энергией $E_{Q,-}^\Phi = \xi_Q - \sqrt{\xi_Q^2 + |\Delta|^2}$ состояния $|\Phi_{Q,-}\rangle$. Из требования, чтобы энергия состояния $|F_{0\downarrow}\rangle$ была меньше энергии состояния $|\Phi_{0,-}\rangle$, получаем условие реализации однофермионного состояния в точке $k = 0$:

$$h > \sqrt{(t - \mu)^2 + |\Delta|^2}. \quad (8)$$

Рассмотрение аналогичного условия для точки $k = \pi$ приводит к неравенству

$$h > \sqrt{(t + \mu)^2 + |\Delta|^2}. \quad (9)$$

При его выполнении состояние с квазимпульсом $k = \pi$ заполнено строго одним электроном.

Из вида квадратичной формы $\hat{r}(k)$ следует, что ее собственный вектор, соответствующий нулевому значению суммарного квазимпульса и наименьшей энергии, можно представить следующим образом:

$$|\psi_k\rangle = \hat{R}_k |0\rangle, \quad (10)$$

где оператор, порождающий суперпозицию состояний с четным числом фермионов, определяется выражением

$$\begin{aligned} \hat{R}_k = A_k + B_k a_{-k\downarrow}^\dagger a_{k\uparrow}^\dagger + C_k a_{k\downarrow}^\dagger a_{-k\uparrow}^\dagger + D_k a_{-k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow}^\dagger + \\ + F_k a_{-k\downarrow}^\dagger a_{k\downarrow}^\dagger + G_k a_{-k\downarrow}^\dagger a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\downarrow}^\dagger a_{-k\uparrow}^\dagger. \end{aligned} \quad (11)$$

Фигурирующие здесь коэффициенты A_k, B_k, \dots, G_k и шесть уровней энергии определяются из решения задачи на собственные значения $H_k^{ev} \vec{X}_k = E_k \vec{X}_k$, где

$$H_k^{ev} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta & \Delta & 0 & 0 & 0 \\ \Delta^* & 2\xi_k & 0 & i\alpha_k & -i\alpha_k & \Delta \\ \Delta^* & 0 & 2\xi_k & -i\alpha_k & i\alpha_k & \Delta \\ 0 & -i\alpha_k & i\alpha_k & \xi_{k\uparrow} & 0 & 0 \\ 0 & i\alpha_k & -i\alpha_k & 0 & \xi_{k\downarrow} & 0 \\ 0 & \Delta^* & \Delta^* & 0 & 0 & 4\xi_k \end{pmatrix},$$

$$\vec{X}_k = (A_k, B_k, C_k, D_k, F_k, G_k)^T.$$

Проведенный анализ собственных векторов квадратичных форм гамильтониана показывает, что функция основного состояния замкнутой сверхпроводящей нанопроволоки с четным числом узлов может быть представлена в одном из четырех качественно различных видов. Каждый

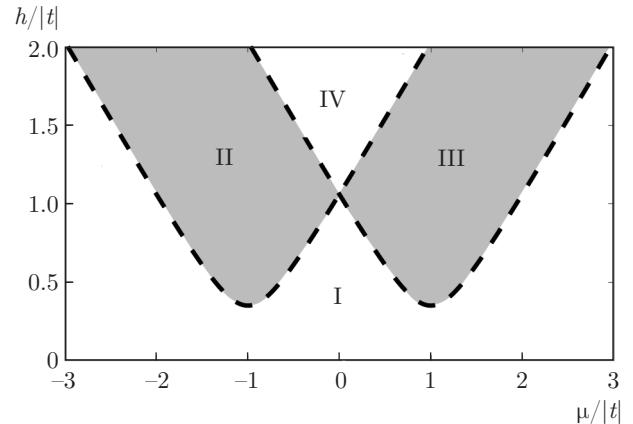


Рис. 1. Диаграмма топологических фаз замкнутой нанопроволоки в переменных химический потенциал – внешнее магнитное поле. Области II и III соответствуют нетривиальной ($\mathcal{M} = -1$), а I и IV – тривиальной ($\mathcal{M} = 1$) топологическим фазам. Параметр сверхпроводящего спаривания $\Delta = 0.35|t|$ (в замкнутой геометрии фазовая диаграмма не зависит от α)

вид функции основного состояния реализуется в своей области параметров. Эти области показаны на рис. 1 при $\Delta = 0.35|t|$. Структура волновой функции основного состояния в этих областях задается выражениями

$$\begin{aligned} |\Psi^{(I)}\rangle &= (\hat{R}_{0,-})(\hat{R}_{\pi,-}) \left(\prod_{0 < k < \pi} \hat{R}_k \right) |0\rangle, \\ |\Psi^{(II)}\rangle &= (\hat{R}_{0,-})(a_{\pi\downarrow}^\dagger) \left(\prod_{0 < k < \pi} \hat{R}_k \right) |0\rangle, \\ |\Psi^{(III)}\rangle &= (a_{0\downarrow}^\dagger)(\hat{R}_{\pi,-}) \left(\prod_{0 < k < \pi} \hat{R}_k \right) |0\rangle, \\ |\Psi^{(IV)}\rangle &= (a_{0\downarrow}^\dagger)(a_{\pi\downarrow}^\dagger) \left(\prod_{0 < k < \pi} \hat{R}_k \right) |0\rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

Из приведенной структуры функции основного состояния в различных областях фазовой диаграммы наглядно видно, что фермионная четность основного состояния нанопроволоки определяется только характером заполнения состояний с квазимпульсами $k = 0$ и $k = \pi$. Функции $|\Psi^{(I)}\rangle$ и $|\Psi^{(IV)}\rangle$ представляются в виде суперпозиции состояний с четным числом фермионов. Соответственно этому число Майорана $\mathcal{M} = +1$. Для функций $|\Psi^{(II)}\rangle$ и $|\Psi^{(III)}\rangle$ в суперпозицию входят состояния с нечетным числом фермионов. Поэтому при параметрах системы, попадающих в области II и III, основное состояние рассматриваемой квантовой проволоки обладает отрицательной фермионной четностью и в нанопрово-

локе реализуется топологически нетривиальная фаза со значением числа Майорана $\mathcal{M} = -1$. Отметим, что число Майорана вычислялось ранее через пфаффиан матрицы Боголюбова – де Жена в представлении майорановских операторов [24]. Оба подхода дают одинаковый результат, однако в представлении (12) наглядно проявляется структура волновой функции основного состояния.

4. СЕРИЯ КВАНТОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ОТКРЫТОЙ НАНОПРОВОЛОКЕ

Приведенные в предыдущем разделе рассуждения относились к цепочке в замкнутой геометрии. В этом случае число Майорана \mathcal{M} имеет непосредственную связь с фазой Зака – Берри [7, 67]. Это позволяет рассматривать \mathcal{M} как \mathbb{Z}_2 -инвариант, который классифицирует разные топологические фазы: при $\mathcal{M} = 1$ ($\mathcal{M} = -1$) замкнутая цепочка находится в тривиальной (нетривиальной) топологической фазе. При рассмотрении открытой нанопроволоки связь фермионной четности основного состояния с топологическими характеристиками теряется.

Условимся в дальнейшем считать топологически нетривиальной областью параметров (ТНОП) открытой нанопроволоки ту область параметров, для которой замкнутая нанопроволока находится в топологически нетривиальной фазе. В случае достаточно длинных открытых цепочек во всей ТНОП реализуются топологически защищенные майорановские моды. Для эффективного поиска условий реализации ММ при рассмотрении цепочки в открытой геометрии была введена [57, 58] майорановская поляризация \mathcal{P} . В целях дальнейшего рассмотрения эту величину удобно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= \frac{2 \left| \sum'_{l\sigma} u_{l\sigma,0}^* v_{l\sigma,0} \right|}{\sum'_{l\sigma} (u_{l\sigma,0}^2 + v_{l\sigma,0}^2)} = \\ &= \frac{\left| \sum'_{l\sigma} (w_{l\sigma,0}^2 - z_{l\sigma,0}^2) \right|}{\sum'_{l\sigma} (w_{l\sigma,0}^2 + z_{l\sigma,0}^2)}. \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь суммирование ведется по узлам l , принадлежащим только левой (либо только правой) половине цепочки, а $w_{l\sigma,0}$ и $z_{l\sigma,0}$ – коэффициенты разложения самосопряженных операторов $b' = (\alpha_0 + \alpha_0^\dagger)/2$ и

$b'' = (\alpha_0^\dagger - \alpha_0)/2$ по одноузельным майорановским операторам $\gamma_{Al\sigma}$, $\gamma_{Bl\sigma}$:

$$\begin{aligned} \gamma_{Al\sigma} &= \frac{1}{2} \left(e^{i\theta/2} a_{l\sigma}^\dagger + e^{-i\theta/2} a_{l\sigma} \right), \\ \gamma_{Bl\sigma} &= \frac{i}{2} (e^{i\theta/2} a_{l\sigma}^\dagger - e^{-i\theta/2} a_{l\sigma}), \\ b' &= \sum_{l=1;\sigma}^N w_{l\sigma,0} \gamma_{Al\sigma}, \quad b'' = \sum_{l=1;\sigma}^N z_{l\sigma,0} \gamma_{Bl\sigma}. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь θ – фаза сверхпроводящего параметра порядка $\Delta = |\Delta| e^{i\theta}$. Действительные функции $w_{l\sigma,0}$ и $z_{l\sigma,0}$ могут быть выражены через коэффициенты $u_{l\sigma,0}$ и $v_{l\sigma,0}$ преобразования Боголюбова для квазичастицы α_0 , отвечающей моде с минимальной энергией ε_0 :

$$\begin{aligned} w_{l\sigma,0} &= e^{-i\theta/2} (u_{l\sigma,0} + v_{l\sigma,0}), \\ z_{l\sigma,0} &= e^{-i\theta/2} (u_{l\sigma,0} - v_{l\sigma,0}), \\ \alpha_m &= \sum_{l,\sigma} \left(u_{l\sigma,m}^* a_{l\sigma} + v_{l\sigma,m} a_{l\sigma}^\dagger \right). \end{aligned} \quad (15)$$

При этом коэффициенты $u_{l\sigma,0}$ и $v_{l\sigma,0}$ формируют собственные векторы матрицы Боголюбова – де Жена:

$$H = \begin{pmatrix} A_{\uparrow\uparrow} & A_{\uparrow\downarrow} & B_{\uparrow\uparrow} & B_{\uparrow\downarrow} \\ A_{\uparrow\downarrow}^\dagger & A_{\downarrow\downarrow} & -B_{\uparrow\downarrow}^T & B_{\downarrow\downarrow} \\ -B_{\uparrow\uparrow}^* & -B_{\uparrow\downarrow}^* & -A_{\uparrow\uparrow}^* & -A_{\uparrow\downarrow}^* \\ B_{\uparrow\downarrow}^* & -B_{\downarrow\downarrow}^* & -A_{\uparrow\downarrow}^T & -A_{\downarrow\downarrow}^* \end{pmatrix} \quad (16)$$

с собственным значением ε_0 . Отличными от нуля компонентами эрмитовой ($A_{\sigma\sigma}'$) и антисимметричной ($B_{\sigma\sigma}'$) матриц здесь являются величины

$$\begin{aligned} (A_{\uparrow\downarrow})_{l,l+1} &= -(A_{\uparrow\downarrow})_{l+1,l} = -\alpha/2, \\ (B_{\uparrow\downarrow})_{l,l} &= -\Delta, \\ (A_{\sigma\sigma})_{l,l} &= \epsilon_0 - \mu + \eta_\sigma h, \quad (A_{\sigma\sigma})_{l,l+1} = -t/2. \end{aligned} \quad (17)$$

Удобство введения майорановской поляризации \mathcal{P} состоит в том, что $\mathcal{P} = 0$ при рассмотрении длинных цепочек вне ТНОП и $\mathcal{P} = 1$ внутри данной области. Равенство $\mathcal{P} = 1$ означает отсутствие перекрытия распределений $w_{l\sigma,0}$ и $z_{l\sigma,0}$ и соответствует локализации данных функций вблизи различных краев цепочки. Легко показать, что данное условие также отвечает электрической и спиновой нейтральности майорановского возбуждения. Так, изменение распределений электронной и спиновой плотностей,

$$\begin{aligned} \delta n_{l\sigma} &= \langle 1 | a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma} | 1 \rangle - \langle 0 | a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma} | 0 \rangle = \\ &= |u_{l\sigma,0}|^2 - |v_{l\sigma,0}|^2 = w_{l\sigma,0} z_{l\sigma,0} \end{aligned} \quad (18)$$

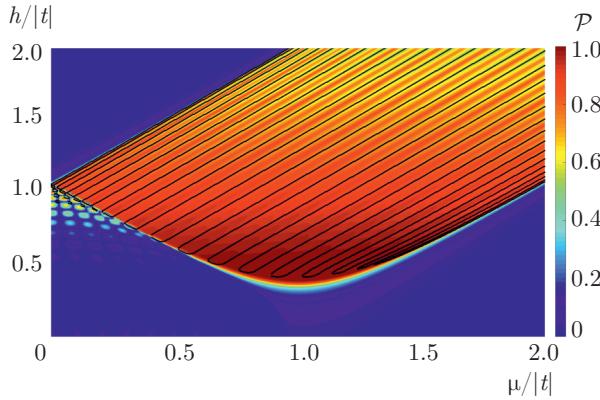


Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимость майорановской поляризации \mathcal{P} от магнитного поля h и химического потенциала μ для открытой цепочки из 30 узлов с наведенным потенциалом сверхпроводящего спаривания ($\Delta = 0.35|t|$) и спин-орбитальным взаимодействием Рашибы ($\alpha = 0.22|t|$). Чёрными линиями обозначены нулевые моды

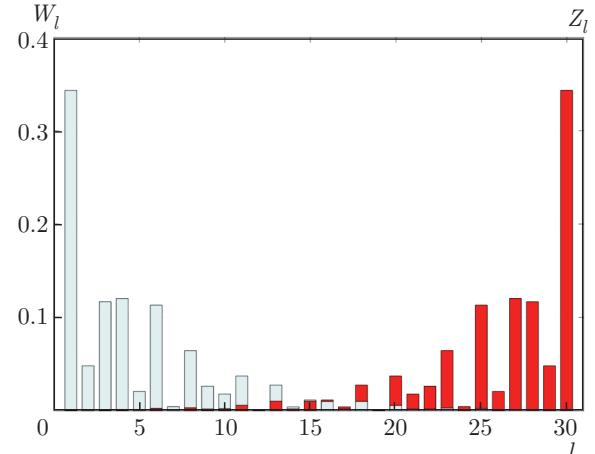


Рис. 3. Распределения $W_l = |\sum_\sigma w_{l,0}|^2$ и $Z_l = |\sum_\sigma z_{l,0}|^2$ при $h = 0.8|t|$ и $\mu = 0.5|t|$ (соответствует ТНОП, $\mathcal{P} = 0.91$). Поведение Z_l аналогично поведению W_l при замене $l \rightarrow N - l + 1$

и

$$\begin{aligned} \delta s_l^z &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \eta_{\sigma} w_{l,0} z_{l,0}, \\ \delta s_l^x &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} w_{l,0} z_{l,0} \end{aligned} \quad (19)$$

при переходе сверхпроводящей нанопроволоки из основного состояния $|0\rangle$ в состояние с заполненной майорановской модой $|1\rangle = \alpha_0^\dagger |0\rangle$ равно нулю в описанном случае. Таким образом, наблюдение майорановских мод в длинных нанопроволоках посредством измерения спиновой и электронной плотностей не представляется возможным.

При уменьшении длины цепочки распределения $w_{l,0}$ и $z_{l,0}$ внутри ТНОП начинают перекрываться. Степень такого перекрытия можно отображать, строя карту майорановской поляризации \mathcal{P} , приведенную на рис. 2. В параметрических областях, в которых $0 < \mathcal{P} < 1$, реализуются краевые моды (в смысле, указанном в работе [68]) с перекрывающимися распределениями $w_{l,0}$ и $z_{l,0}$ (рис. 3). Энергия таких мод, вообще говоря, отлична от нуля, однако при определенных значениях параметров модели в системе могут возникнуть бесщелевые возбуждения. Последние реализуются не в широкой параметрической области, а на специальных параметрических линиях, изображенных на рис. 2 и 4. Стоит отметить, что по последней причине такие бесщелевые возбуждения не представляют интереса с точки зрения квантовых вычислений. Однако ниже будет приведен подход, позволяющий при исследовании короткой открытой цепочки эффективно опре-

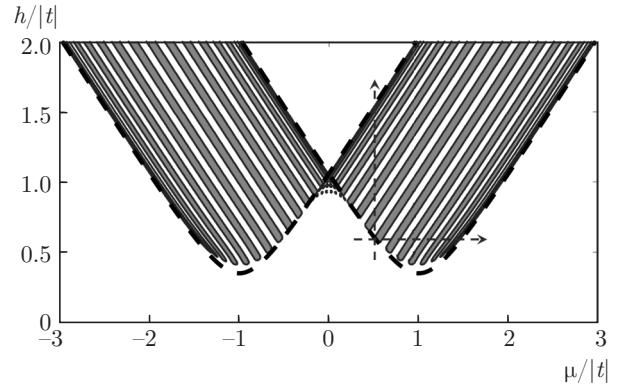


Рис. 4. (В цвете онлайн) Фазовая диаграмма открытой нанопроволоки ($N = 30$) при $\Delta = 0.35|t|$, $\alpha = 0.22|t|$. Закрашенные области соответствуют параметрам, для которых основное состояние содержит парциальные вклады с нечетным числом фермионов. Границами этих областей служат линии, для точек которых реализуется квантовый фазовый переход. Штриховыми линиями показаны границы реализации топологической нетривиальной фазы для замкнутой нанопроволоки (см. рис. 1). Изменение параметров вдоль синих штриховых линий со стрелками соответствует полевым зависимостям на рис. 5 (вертикальные штрихи соответствуют рис. 5a, горизонтальные штрихи — рис. 5b)

делять топологически нетривиальную область параметров.

С точки зрения собственных состояний гамильтонiana (1), возникновение нулевой моды на специальных параметрических линиях означает вырождение основного состояния. При этом существенно,

что при прохождении таких параметрических точек два состояния с различной фермионной четностью сменяют друг друга в качестве основного, и в системе реализуются квантовые переходы. Таким образом, линии нулевых мод в настоящей системе являются параметрическими линиями квантовых критических точек. Для открытой нанопроволоки результат вычисления индекса фермионной четности P позволяет построить фазовую диаграмму системы, приведенную на рис. 4. Значение P может быть найдено как знак пфаффиана матрицы Боголюбова – де Жена (16), приведенной к антисимметричной форме:

$$P = \text{sign} \left(\text{Pf} \left(\tilde{H} \right) \right), \quad \tilde{H} = R^T H \Lambda R, \\ R = \begin{pmatrix} \hat{I} & -i\hat{I} \\ \hat{I} & i\hat{I} \end{pmatrix}, \quad \Lambda = \begin{pmatrix} \hat{0} & \hat{I} \\ \hat{I} & \hat{0} \end{pmatrix}, \quad (20)$$

где \hat{I} — единичная матрица размерности $2N \times 2N$.

Закрашенным областям на рис. 4 соответствует значение $P = -1$, при котором парциальные вклады в основное состояние содержат нечетное число фермионов. Границами этих областей служат параметрические линии, для которых основное состояние двукратно вырождено и минимальная энергия возбуждения равна нулю. Границы топологических фаз замкнутой цепочки, изображенные на рис. 1, вновь представлены толстыми штриховыми линиями. Видно, что линии нулевых мод могут реализовываться как в ТНОП, так и за ее пределами. Когда увеличивается длина нанопроволоки, линии смены фермионной четности исчезают в параметрической области с $M = 1$, тогда как в области параметров с $M = -1$ их число растет, и в пределе $N \rightarrow \infty$ они формируют квазиконтинuum в ТНОП.

Таким образом, особенностью ТНОП в нанопроволоке является реализация в ней каскада квантовых переходов при изменении внешних параметров (внешнего магнитного поля или напряжения). Такой каскад может быть эффективно обнаружен с помощью наблюдаемых характеристик. В частности, перераспределения спиновой и электронной плотностей (18) становятся отличными от нуля для параметров, отвечающих таким линиям. Однако, видимо, наиболее эффективное детектирование ТНОП может быть осуществлено посредством измерения магнито- и электрокалорических эффектов.

5. МАГНИТО- И ЭЛЕКТРОКАЛОРИЧЕСКИЕ АНОМАЛИИ

Известно, что эффективными термодинамическими характеристиками, позволяющими идентифицировать квантовые переходы, являются калорические эффекты: магнитный и электрический [69, 70]. Такие эффекты проявляют себя в изменении температуры системы при адиабатическом изменении магнитного поля или напряжения и определяются выражениями

$$\left(\frac{\partial T}{\partial h} \right)_{S,\mu} = -T \left(\frac{\partial \langle M \rangle / \partial T}{C(T)} \right)_{\mu,h}, \\ \left(\frac{\partial T}{\partial \mu} \right)_{S,h} = -T \left(\frac{\partial \langle N \rangle / \partial T}{C(T)} \right)_{\mu,h}, \quad (21)$$

где $\langle N \rangle$, $\langle M \rangle$ — соответственно концентрация электронов, удельная намагниченность и удельная теплоемкость. Довольно просто показать, что величины (21) имеют разные знаки в правой и левой окрестностях квантовой критической точки и испытывают расходимость в этих точках при низких температурах. Первая особенность связана с изменением числа фермионов и спиновой структуры основного состояния при квантовых переходах. Соответственно, величины $\langle N \rangle$ и $\langle M \rangle$ изменяются в квантовой критической точке скачкообразно при $T = 0$. При низких, но конечных температурах квантовый фазовый переход сменяется кроссовером и, соответственно, производные этих величин по температуре имеют разные знаки в окрестностях критической точки. Для демонстрации второй особенности перепишем выражения для теплоемкости и производных $\partial \langle M \rangle / \partial T$, $\partial \langle N \rangle / \partial T$ в виде

$$\frac{\partial \langle N \rangle}{\partial T} = \frac{1}{2T^2} \sum_{m=1}^{2N} A_m \varepsilon_m f(\varepsilon_m/T) [1 - f(\varepsilon_m/T)], \\ \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial T} = \frac{1}{2T^2} \sum_{m=1}^{2N} B_m \varepsilon_m f(\varepsilon_m/T) [1 - f(\varepsilon_m/T)], \quad (22)$$

$$C(T) = \frac{1}{T^2} \sum_{m=1}^{2N} \varepsilon_m^2 f(\varepsilon_m/T) [1 - f(\varepsilon_m/T)],$$

где

$$A_m = \sum_{l=1,\sigma}^N (|u_{l\sigma,m}|^2 - |v_{l\sigma,m}|^2), \\ B_m = \sum_{l=1,\sigma}^N \eta_\sigma (|u_{l\sigma,m}|^2 - |v_{l\sigma,m}|^2),$$

$f(\varepsilon_m/T)$ — функция Ферми–Дирака.

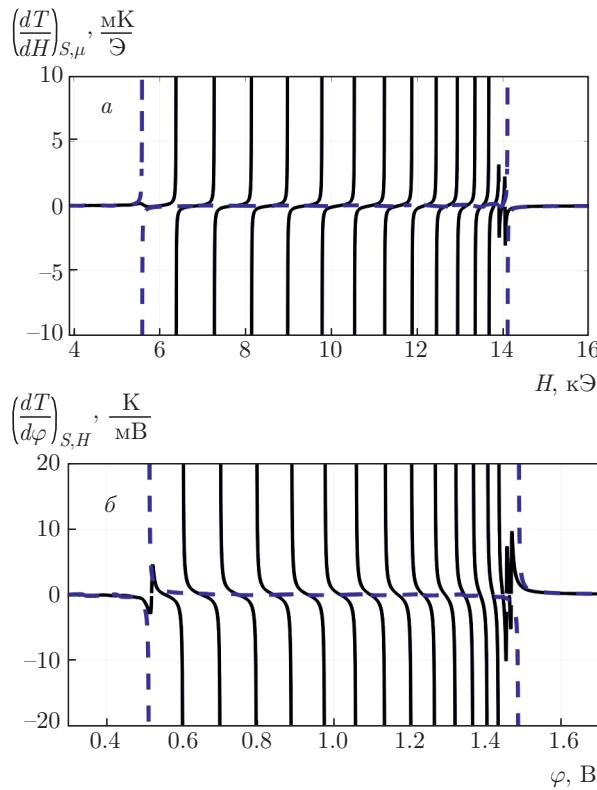


Рис. 5. (В цвете онлайн) Полевые зависимости магнито-калорического (*a*, $\mu/|t| = 0.5$) и электрокалорического (*б*, $h/|t| = 0.6$) эффектов. $T = 57$ мК, остальные параметры соответствуют рис. 4. Из сопоставления с рис. 4 видно, что калорические эффекты демонстрируют аномальное поведение в ТНОП

Из рассмотрения данных выражений видно, что при температурах, много меньших характерной щели объемного спектра, основной вклад в функции $\partial\langle N \rangle / \partial T$, $\partial\langle M \rangle / \partial T$ и $C(T)$ дают краевые моды с осциллирующей энергией возбуждений ε_0 . При этом в окрестностях параметрических линий нулевых мод должна наблюдаться обратная зависимость калорических эффектов (21) от минимальной энергии возбуждения ε_0 (поскольку теплоемкость системы $C(T) \propto \varepsilon_0^2$, а приращения $\partial\langle N \rangle / \partial T$, $\partial\langle M \rangle / \partial T \propto \varepsilon_0$). Таким образом, при низких температурах калорические эффекты должны испытывать расходимость в квантовых критических точках и иметь практически нулевое значение вдали от них. Такое поведение изображено на рис. 5. Штриховыми линиями показаны зависимости калорических эффектов для замкнутой нанопроволоки, в которой квантовые переходы сопровождаются изменением значения топологического индекса M . Сплошными линиями приведены аналогичные зависимости для открытой нанопроволоки.

На рис. 5 видно, что величины магнито- и электрокалорического эффектов имеют яркие особенности в ТНОП при низких температурах. Идентификация этих особенностей может служить критерием для обнаружения ТНОП, дополнительным к уже предложенным в литературе (см., например, работы [2, 45, 71]).

6. УСТОЙЧИВОСТЬ КАЛОРИЧЕСКИХ АНОМАЛИЙ

В настоящем разделе демонстрируется устойчивость серий магнито- и электрокалорических аномалий в ТНОП по отношению к учету электрон-электронных взаимодействий, диагонального беспорядка и изменений размеров системы.

Как было показано в работе [16], классификация топологических фаз одномерных систем с помощью \mathbb{Z}_2 -инварианта сохраняется при добавлении к квадратичному гамильтониану четырехфермионных слагаемых. Соответственно этому, при изучении областей реализации топологически нетривиальной фазы системы, описываемой гамильтонианом (1) с ненулевыми значениями параметров однозначных ($U > 0$) и междуузельных ($V > 0$) электрон-электронных взаимодействий, мы по-прежнему использовали определение топологического индекса (2). Так, число Майорана M системы с взаимодействиями отождествлялось с фермионной четностью основного состояния соответствующей замкнутой цепочки с четным числом узлов. Спектральные и термодинамические особенности ТНОП исследовались численно при использовании следующих двух подходов.

В первом подходе использовалась точная диагонализация гамильтониана для цепочки с небольшим числом узлов, с помощью которой находились низкоэнергетические ветви спектра фермиевских возбуждений. Последнее осуществлялось на основе представления Лемана [72]:

$$-i\langle T_t \tilde{a}_{l\sigma}^\dagger(t) \tilde{a}_{l'\sigma'}(t') \rangle_\omega = \sum_{s=1}^{4^N-1} \left(\frac{\left(a_{l\sigma}^\dagger\right)_{0s} (a_{l'\sigma'})_{s0}}{\omega - E_s + E_0 + i\delta} + \frac{(a_{l'\sigma'})_{0s} \left(a_{l\sigma}^\dagger\right)_{s0}}{\omega + E_s - E_0 - i\delta} \right), \quad (23)$$

где $\left(a_{l\sigma}^\dagger\right)_{s0} = \langle s | a_{l\sigma}^\dagger | 0 \rangle$. Здесь $|0\rangle$ и $|s\rangle$ — основное и s -е собственные возбужденные состояния гамильтониана (1), E_0 и E_s — энергии соответствующих

состояний. Известно, что в отсутствие кулоновского взаимодействия эффективными являются $2N$ переходов, для которых энергии и матричные элементы $\left(a_{l\sigma}^\dagger\right)_{m0}$ и $(a_{l\sigma})_{m0}$ соотносятся с энергиями и $u-v$ -коэффициентами боголюбовских возбуждений следующим образом:

$$\begin{aligned} E_m - E_0 &= \varepsilon_m, \quad m = 1, \dots, 2N, \\ \left| \left(a_{l\sigma}^\dagger \right)_{m0} \right| &= |u_{l\sigma,m}|, \quad |(a_{l\sigma})_{m0}| = |v_{l\sigma,m}|. \end{aligned} \quad (24)$$

При наличии четырехфермионного взаимодействия отличными от нуля являются, вообще говоря, 2^{2N-1} матричных элементов $\left(a_{l\sigma}^\dagger\right)_{m0}$ и $(a_{l\sigma})_{m0}$. Однако если из этих 2^{2N-1} переходов можно выбрать $2N$ переходов так, чтобы выполнялось условие

$$\sum_{m=1}^{2N} \left(\left| \left(a_{l\sigma}^\dagger \right)_{m0} \right|^2 + |(a_{l\sigma})_{m0}|^2 \right) \cong 1,$$

то соотношение (24) также будет выполняться с высокой точностью при замене $u_{l\sigma,m}, v_{l\sigma,m}, \varepsilon_m \rightarrow \tilde{u}_{l\sigma,m}, \tilde{v}_{l\sigma,m}, \tilde{\varepsilon}_m$. При этом под $\tilde{u}_{l\sigma,m}, \tilde{v}_{l\sigma,m}$ и $\tilde{\varepsilon}_m$ уже подразумеваются коэффициенты $u-v$ -преобразования Боголюбова и энергии фермиевских возбуждений, получаемые при рассмотрении системы в рамках второго метода, а именно, в обобщенном приближении среднего поля [73, 74].

Для анализа системы в рамках этого приближения преобразуем четырехфермионные слагаемые гамильтониана (1) с использованием расцепления:

$$\begin{aligned} a_{l\sigma}^\dagger a_{m\sigma'}^\dagger a_{m\sigma'} a_{l\sigma} &\rightarrow \\ &\rightarrow \langle a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma} \rangle a_{m\sigma'}^\dagger a_{m\sigma'} + \langle a_{m\sigma'}^\dagger a_{m\sigma'} \rangle a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma} - \\ &- \langle a_{l\sigma}^\dagger a_{m\sigma'} \rangle a_{m\sigma'}^\dagger a_{l\sigma} - \langle a_{m\sigma'}^\dagger a_{l\sigma} \rangle a_{l\sigma}^\dagger a_{m\sigma'} - \\ &- \langle a_{m\sigma'}^\dagger a_{l\sigma} \rangle^* a_{l\sigma}^\dagger a_{m\sigma'} - \langle a_{l\sigma}^\dagger a_{m\sigma'} \rangle a_{l\sigma} a_{m\sigma'}. \end{aligned} \quad (25)$$

В этом случае гамильтониан системы в форме Боголюбова – де Жена может быть записан в виде

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \mathbf{a}^\dagger \cdot H \mathbf{a}, \quad (26)$$

$$H = \begin{pmatrix} A_{\uparrow\uparrow} & A_{\uparrow\downarrow} & B_{\uparrow\uparrow} & B_{\uparrow\downarrow} \\ A_{\downarrow\uparrow}^\dagger & A_{\downarrow\downarrow} & -B_{\uparrow\downarrow}^T & B_{\downarrow\downarrow} \\ -B_{\uparrow\uparrow}^* & -B_{\uparrow\downarrow}^* & -A_{\uparrow\uparrow}^* & -A_{\uparrow\downarrow}^* \\ B_{\uparrow\downarrow}^\dagger & -B_{\downarrow\downarrow}^* & -A_{\uparrow\downarrow}^T & -A_{\downarrow\downarrow}^* \end{pmatrix}, \quad (27)$$

$\mathbf{a}^\dagger = (a_{\uparrow\uparrow}^\dagger, a_{\uparrow\downarrow}^\dagger, a_{\downarrow\uparrow}^\dagger, a_{\downarrow\downarrow}^\dagger)$, $\mathbf{a}_\sigma = (a_{1\sigma}, \dots, a_{N\sigma})$, а матрицы $A_{\sigma,\sigma'}, B_{\sigma,\sigma'}$ имеют следующие ненулевые компоненты, зависящие от интенсивности электронных взаимодействий ($A_{\sigma\sigma} = A_{\sigma\sigma}^\dagger, B_{\sigma\sigma} = -B_{\sigma\sigma}^T$):

$$\begin{aligned} (A_{\sigma\sigma})_{l,l} &= \Delta\mu_l - \mu + \eta_\sigma h + U \langle a_{l,\bar{\sigma}}^\dagger a_{l,\bar{\sigma}} \rangle + \\ &+ V \left(\sum_{\sigma'} \langle a_{l-1,\sigma'}^\dagger a_{l-1,\sigma'} \rangle + \langle a_{l+1,\sigma'}^\dagger a_{l+1,\sigma'} \rangle \right), \\ (A_{\sigma\sigma})_{l,l+1} &= -\frac{t}{2} - V \langle a_{l\uparrow}^\dagger a_{l+1\uparrow} \rangle, \\ (A_{\uparrow\downarrow})_{l,l} &= -U \langle a_{l\downarrow}^\dagger a_{l\uparrow} \rangle, \\ (A_{\uparrow\downarrow})_{l,l+1} &= -\frac{\alpha}{2} - V \langle a_{l+1\downarrow}^\dagger a_{l\uparrow} \rangle, \\ (A_{\uparrow\downarrow})_{l+1,l} &= \frac{\alpha}{2} - V \langle a_{l+1\downarrow}^\dagger a_{l\uparrow} \rangle^*, \\ (B_{\sigma\sigma})_{l,l+1} &= \frac{V}{2} \langle a_{l\sigma}^\dagger a_{l+1\sigma} \rangle^*, \\ (B_{\uparrow\downarrow})_{l,l} &= -\Delta^* - \frac{U}{2} \langle a_{l\downarrow}^\dagger a_{l\uparrow} \rangle^*, \\ (B_{\uparrow\downarrow})_{l,l+1} &= \frac{V}{2} \langle a_{l\uparrow}^\dagger a_{l+1\downarrow} \rangle^*. \end{aligned} \quad (28)$$

В выражение для $(A_{\sigma\sigma})_{l,l}$ была включена зависящая от номера узла энергия электронов в цепочке, $\Delta\mu_l$, моделирующая наличие в системе диагонального беспорядка. В настоящей работе рассматривался случай относительно слабого диагонального беспорядка: $\Delta\mu_l \in [-t/2, t/2]$. Собственные векторы $\mathbf{Y}_m = (\tilde{\mathbf{u}}_{\uparrow m}, \tilde{\mathbf{u}}_{\downarrow m}, \tilde{\mathbf{v}}_{\uparrow m}^*, \tilde{\mathbf{v}}_{\downarrow m}^*)^T$ гамильтониана Боголюбова – де Жена (27) описывают электроноподобные и дырочно-подобные волновые функции состояния с энергией возбуждения $\tilde{\varepsilon}_m$. Последние вычислялись самосогласованно с равновесными корреляционными функциями:

$$\begin{aligned} \langle a_{l\sigma}^\dagger a_{l'\sigma'} \rangle &= \sum_{m=1}^{2N} \left[\tilde{u}_{l\sigma,m} \tilde{u}_{l'\sigma',m}^* f(\tilde{\varepsilon}_m/T) + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{v}_{l\sigma,m} \tilde{v}_{l'\sigma',m}^* (1 - f(\tilde{\varepsilon}_m/T)) \right], \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \langle a_{l\sigma}^\dagger a_{l'\sigma'}^\dagger \rangle &= \sum_{m=1}^{2N} \left[\tilde{u}_{l\sigma,m} \tilde{v}_{l'\sigma',m}^* f(\tilde{\varepsilon}_m/T) + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{v}_{l\sigma,m} \tilde{u}_{l'\sigma',m}^* (1 - f(\tilde{\varepsilon}_m/T)) \right]. \end{aligned} \quad (30)$$

Для коротких цепочек ($N = 6$) сопоставление результатов расчетов, полученных двумя описанными выше методами, показало, что при $U, V \lesssim |t|$ низкоэнергетические ветви спектра возбуждений $\tilde{\varepsilon}_m$ и отвечающие им одночастичные волновые функции совпадают с точностью до нескольких процентов (что продемонстрировано для случая $U = 0.5|t|$, $V = 0.3|t|$ на рис. 6). Соответственно, параметрические линии смены фермионной четности основного состояния также хорошо воспроизводятся в рамках среднеполевого подхода.

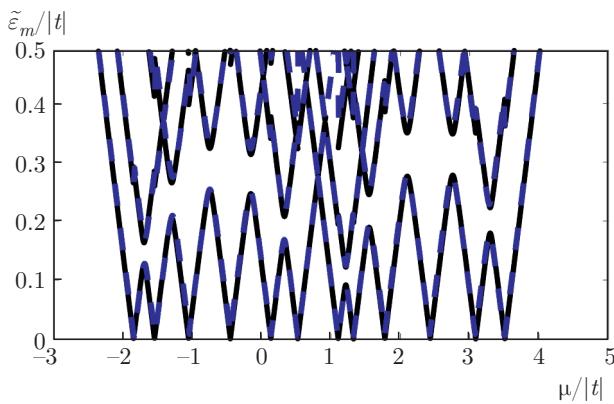


Рис. 6. (В цвете онлайн) Зависимость минимальных энергий возбуждения $\tilde{\varepsilon}_m$ открытой нанопроволоки с кулоновскими взаимодействиями при $N = 6$, $h = |t|$, $U = 0.5|t|$, $V = 0.3|t|$ от значения химического потенциала. Сплошная черная линия отражает зависимость, вычисленную в рамках обобщенного приближения среднего поля. Штриховая синяя линия отражает зависимость $\tilde{\varepsilon}_0$, найденную с помощью точной диагонализации и представления Лемана.

$$\Delta = 0.35|t|, \alpha = 0.22|t|$$

Расчет спектральных свойств, характеристик основного состояния и низкотемпературной термодинамики нанопроволок с большим числом узлов при учете кулоновских взаимодействий проводился в рамках обобщенного приближения среднего поля. Оказалось, что при учете электрон-электронных взаимодействий отмеченные в предыдущих разделах особенности системы сохраняются: для замкнутых цепочек имеется область параметров, для которой реализуется топологически нетривиальная фаза. При изменении параметров внутри данной области для открытой цепочки реализуется каскад квантовых переходов с изменением фермионной четности основного состояния, сопровождающийся калорическими аномалиями.

Примеры карты фермионной четности открытой цепочки и линий топологических переходов замкнутой цепочки для случая $U = 0.5|t|$, $V = 0.3|t|$ и при остальных параметрах, отвечающих рис. 4, приведены на рис. 7. Видно, что квантовые переходы в ТНОП сохраняются при учете взаимодействий, сама ТНОП может изменять свое положение в фазовом пространстве системы. Ввиду того, что взаимодействие является электрон-электронным, наибольшему изменению подвергаются области, для которых числа заполнения одноэлектронных состояний $\langle a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma} \rangle \simeq 1$. На рис. 8а представлена полевая зависимость электрокалорического эффекта для нанопроволоки с $N = 30$ и $h = 0.5|t|$. Также на рис. 8б приведена полевая зависимость магнитокалоричес-

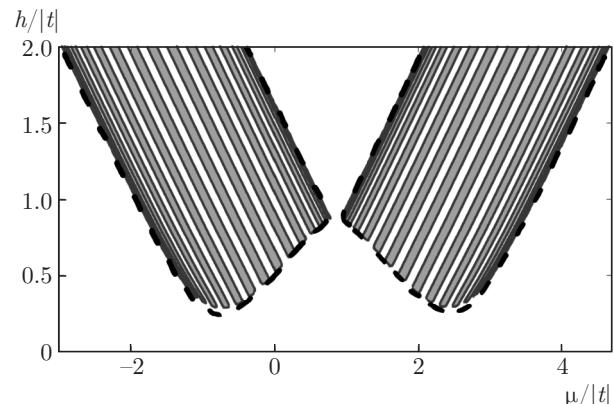
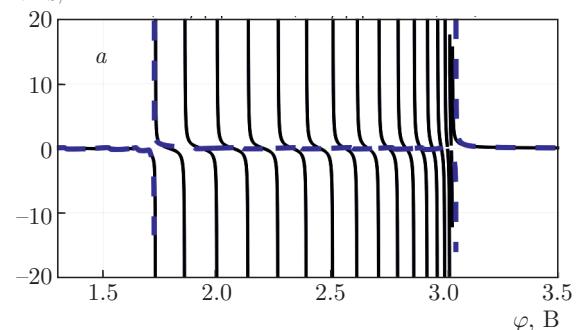


Рис. 7. (В цвете онлайн) Карта фермионной четности открытой цепочки, состоящей из 30 узлов, а также границы топологических фаз (штриховые кривые) замкнутой цепочки при учете электронных корреляций: $U = -0.5|t|$, $V = 0.3|t|$. Диагональный беспорядок отсутствует ($\Delta\mu_l = 0$). Остальные параметры и цветовые обозначения такие же, как на рис. 4

$$\left(\frac{dT}{d\varphi}\right)_{S,H}, \frac{\text{К}}{\text{мВ}}$$



$$\left(\frac{dT}{dH}\right)_{S,\mu}, \frac{\text{мК}}{\text{Э}}$$

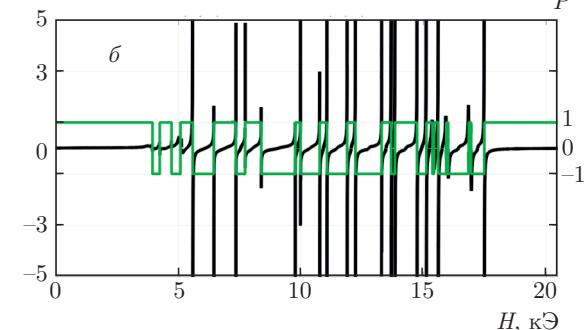


Рис. 8. (В цвете онлайн) *а*) Полевая зависимость электрокалорического эффекта для $h = 0.5|t|$, $U = 0.5|t|$, $V = -0.3|t|$, $\Delta\mu_l = 0$. *б*) Зависимость от внешнего магнитного поля величины магнитокалорического эффекта для более длинной цепочки ($N = 50$) с электрон-электронными взаимодействиями ($U = 0.5|t|$, $V = 0.3|t|$) и при наличии диагонального беспорядка $\Delta\mu_l \in [-t/2, t/2]$. На правой оси отложена фермионная четность P основного состояния (зеленая линия)

кого эффекта для более длинной цепочки с 50 узлами, полученная при одновременном учете электронных корреляций ($U = 0.5|t|$, $V = 0.3|t|$) и диагонального беспорядка. Видно, что калорические аномалии реализуются в ТНОП и при учете электрон-электронных взаимодействий, беспорядка и вариаций размеров системы.

Отметим, что температуры, при которых ярко проявляются аномалии магнито- и электрокалорического эффектов, должны быть много меньше характерной щели спектра объемных возбуждений и порядка характерной энергии краевых мод ε_0 . Поскольку $\varepsilon_0 \propto e^{-L/l_0}$, такая температура уменьшается при увеличении длины цепочки. Однако при температурах $T \approx 20$ мК (при которых в недавних экспериментах наблюдался квантованный пик дифференциальной проводимости [45]) калорические аномалии по-прежнему ярко проявляются для цепочек с $N \approx 200$. Нанопроволоки такой длины можно считать промежуточными между предельными случаями режима квантовых точек (к которым относились предыдущие построения) и режимом длинных цепочек с хорошо определенными майорановскими фермионами на краях.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный анализ показал, что в полупроводниковой нанопроволоке с сильным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы и наведенной сверхпроводимостью при изменении внешнего магнитного поля реализуются калорические эффекты, если параметры нанопроволоки соответствуют топологически нетривиальной фазе, определяемой для периодических граничных условий. Этот эффект может использоваться в качестве альтернативного метода (относительно предложенных ранее [2, 45] методов) экспериментальной идентификации топологически нетривиальной области параметров нанопроволоки. Востребованность предложенного инструмента изучения квантовых нанопроволок с нетривиальными свойствами обусловлена активным исследованием явлений, связанных с проявлением майорановских мод в конденсированных средах. Для практических целей важно, что предсказанные калорические аномалии являются устойчивыми по отношению к включению кулоновского отталкивания и диагонального беспорядка.

Отметим также, что представленные эффекты не ограничиваются сверхпроводящей нанопроволокой и могут иметь место в других квазиодномерных

системах класса симметрии D, например, таких как ансамбль электронов на треугольной решетке в фазе сосуществования киральной сверхпроводимости и неколлинеарного магнитного порядка, рассмотренной в геометрии цилиндра [31, 32].

Благодарности. Авторы выражают признательность С. В. Аксенову, А. Д. Федосееву и А. О. Злотникову за полезные замечания и обсуждения результатов.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты №№ 16-02-00073, 18-32-00443, 18-42-243017, 18-42-243018), Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научных проектов «Контактные явления и магнитный беспорядок в проблеме формирования и детектирования топологически защищенных краевых состояний в полупроводниковых nanoструктурах» (проект № 18-42-243018) и «Проявление кулоновских взаимодействий и эффектов ограниченной геометрии в свойствах топологических краевых состоянийnanoструктур со спин-орбитальным взаимодействием» (проект № 18-42-243017). Один из авторов (Ш. М. С.) благодарит за поддержку Совет по грантам Президента РФ (проекты №№ МК-3594.2018.2, МК-3722.2018.2).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Alicea, Rep. Progr. Phys. **75**, 076501 (2012).
2. C. Beenakker, Ann. Rev. Condens. Matter Phys. **4**, 113 (2013).
3. T. D. Stanescu and S. Tewari, J. Phys.: Condens. Matter **25**, 233201 (2013).
4. S. R. Elliott and M. Franz, Rev. Mod. Phys. **87**, 137 (2015).
5. F. Wilczek and A. Zee, Phys. Rev. Lett. **52**, 2111 (1984).
6. С. И. Виницкий, В. Л. Дербов, В. М. Дубовик и др., УФН **160**, 1 (1990).
7. P. Ghosh, Jay D. Sau, S. Tewari, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **82**, 184525 (2010).
8. A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, Phys. Rev. B **78**, 195125 (2008).
9. A. Yu. Kitaev, AIP Conf. Proc. **1134**, 22 (2009).
10. C.-K. Chiu, J. C. Y. Teo, A. P. Schnyder, and S. Ryu, Rev. Mod. Phys. **88**, 035005 (2016).

11. L. Fidkowski and A. Yu. Kitaev, Phys. Rev. B **81**, 134509 (2010).
12. V. Gurarie, Phys. Rev. B **83**, 085426 (2011).
13. Y. J. BenTov, J. High Energy Phys. 2015:34 (2015).
14. D. Meidan, A. Romito, and P. W. Brouwer, Phys. Rev. Lett. **113**, 057003 (2014).
15. Yi-Z. You and C. Xu, Phys. Rev. B **90**, 245120 (2014).
16. T. Morimoto, A. Furusaki, and C. Mudry, Phys. Rev. B **92**, 125104 (2015).
17. L. Fidkowski and A. Yu. Kitaev, Phys. Rev. B **83**, 075103 (2011).
18. A. M. Turner, F. Pollmann, and E. Berg, Phys. Rev. B **83**, 075102 (2011).
19. F. Pollmann, A. M. Turner, E. Berg, and M. Oshikawa, Phys. Rev. B **81**, 064439 (2010).
20. X. Chen, Z.-C. Gu, and X.-G. Wen, Phys. Rev. B **83**, 035107 (2011).
21. N. Schuch, D. Perez-Garcia, and I. Cirac, Phys. Rev. B **84**, 165139 (2011).
22. F. Pollmann, E. Berg, A. M. Turner, and M. Oshikawa, Phys. Rev. B **85**, 075125 (2012).
23. N. Read and D. Green, Phys. Rev. B **61**, 10267 (2000).
24. A. Y. Kitaev, Phys. Usp. **44**, 131 (2001).
25. L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. Lett. **100**, 096407 (2008).
26. J. D. Sau, R. M. Lutchyn, S. Tewari, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **104**, 040502 (2010).
27. J. D. Sau, S. Tewari, R. M. Lutchyn et al., Phys. Rev. B **82**, 214509 (2010).
28. R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **105**, 077001 (2010).
29. A. Yu. Kitaev, Ann. Phys. **321**, 2 (2006).
30. I. Martin and A. F. Morpurgo, Phys. Rev. B **85**, 144505 (2012).
31. Y.-M. Lu and Z. Wang, Phys. Rev. Lett. **110**, 096403 (2013).
32. V. V. Val'kov, A. O. Zlotnikov, and M. S. Shustin, J. Magn. Magn. Mater. **459**, 112 (2018).
33. V. Aleshkin, V. Gavrilenko, A. Ikonnikov et al., Semiconductors **42**, 828 (2008).
34. H. A. Nilsson, P. Caroff, C. Thelander et al., Nano Lett. **9**, 3151 (2009).
35. M. T. Deng, S. Vaitiekenas, E. B. Hansen et al., Science **354**, 1557 (2016).
36. J. Alicea, Y. Oreg, G. Refael et al., Nature Phys. **7**, 412 (2011).
37. D. J. Clarke, J. D. Sau, and S. Tewari, Phys. Rev. B **84**, 035120 (2011).
38. B. van Heck, A. R. Akhmerov, F. Hassler et al., New J. Phys. **14**, 035019 (2012).
39. B. I. Halperin, Y. Oreg, A. Stern et al., Phys. Rev. B **85**, 144501 (2012).
40. S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, Phys. Rev. B **88**, 020407(R) (2013).
41. S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, J. Li et al., Science **346**, 602 (2014).
42. F. Zhang, C. L. Kane, and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **111**, 056402 (2013).
43. A. Keselman, L. Fu, A. Stern, and E. Berg, Phys. Rev. Lett. **111**, 164402 (2013).
44. V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov et al., Science **336**, 1003 (2012).
45. R. M. Lutchyn, E. P. A. Bakkers, L. P. Kouwenhoven et al., Nature Rev. Mater. **3**, 52 (2018).
46. S. R. Elliott and M. Franz, Rev. Mod. Phys. **87**, 137 (2015).
47. C. Moore, C. Zeng, T. D. Stanescu, and S. Tewari, Phys. Rev. B **98**, 155314 (2018).
48. C. Zeng, C. Moore, A. M. Rao et al., arXiv:1808.02495 (2018).
49. C. Reeg, D. Loss, and J. Klinovaja, Phys. Rev. B **96**, 125426 (2017).
50. G. W. Winkler, D. Varjas, R. Skolasinski et al., Phys. Rev. Lett. **119**, 037701 (2017).
51. E. M. Stoudenmire, J. Alicea, O. A. Starykh, and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **84**, 014503 (2011).
52. S. Gangadharaiah, B. Braunecker, P. Simon, and D. Loss, Phys. Rev. Lett. **107**, 036801 (2011).
53. O. Motrunich, K. Damle, and D. A. Huse, Phys. Rev. B **63**, 224204 (2001).
54. P. W. Brouwer, M. Duckheim, A. Romito, and F. von Oppen, Phys. Rev. B **84**, 144526 (2011).

- 55.** D. Rainis, L. Trifunovic, J. Klinovaja, and D. Loss, Phys. Rev. B **87**, 024515 (2013).
- 56.** F. Crepin, G. Zarand, and P. Simon, Phys. Rev. B **90**, 121407(R) (2014).
- 57.** N. Sedlmayr and C. Bena, Phys. Rev. B **92**, 115115 (2015).
- 58.** N. Sedlmayr, J. M. Aguiar-Hualde, and C. Bena, Phys. Rev. B **93**, 155425 (2016).
- 59.** O. Dmytruk and J. Klenovaja, arXiv:1710.01671v1 (2017).
- 60.** F. Pientka, A. Romito, M. Duckheim et al., New J. Phys. **15**, 025001 (2013).
- 61.** A. A. Zvyagin, Low Temp. Phys. **41**, 806 (2015).
- 62.** S. Hegde and S. Vishveshwara, Phys. Rev. B **94**, 115166 (2016).
- 63.** N. M. Gergs, L. Fritz, and D. Schuricht, Phys. Rev. B **93**, 075129 (2016).
- 64.** H. Katsura, D. Schuricht, and M. Takahashi, Phys. Rev. B **92**, 115137 (2015).
- 65.** J.-J. Miao, H.-K. Jin, F.-C. Zhang, and Y. Zhou, Phys. Rev. Lett. **118**, 267706 (2017).
- 66.** В. В. Вальков, В. А. Мицкан, М. С. Шустин, Письма в ЖЭТФ **106**, 762 (2017).
- 67.** J. C. Budich and E. Ardonne, Phys. Rev. B **88**, 075419 (2013).
- 68.** А. Д. Федосеев, ЖЭТФ **155**, 138 (2019).
- 69.** L. Zhu, M. Garst, A. Rosch, and Q. Si, Phys. Rev. Lett. **91**, 066404 (2003).
- 70.** M. Garst and A. Rosch, Phys. Rev. B **72**, 205129 (2005).
- 71.** V. V. Val'kov, M. Yu. Kagan, and S. V. Aksenov, arXiv:1809.09222.
- 72.** H. Lehmann, Nuovo Cim. **11**, 342 (1954).
- 73.** Б. Г. Кухаренко, ЖЭТФ **69**, 632 (1975).
- 74.** В. В. Вальков, Т. А. Валькова, ЖЭТФ **99**, 1881 (1991).