ЖЭТФ, 2022, том 162, вып. 4 (10), стр. 541–554

ОСОБЕННОСТИ ФИЗИЧЕСКИХ НАБЛЮДАЕМЫХ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННОЙ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ НАНОПРОВОЛОКИ СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ РАШБА

М. С. Шустин [*], ***С. В. Аксенов*** [**]

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

Поступила в редакцию 04 декабря 2021 г.,
после переработки 28 января 2022 г.
Принята к публикации 28 января 2022 г.

Исследовано поведение калорических характеристик и электронной компоненты спиновой поляризации возбуждений в режиме сильных электронных корреляций нанопроволоки, которая характеризуется наведенной сверхпроводимостью расширенного s-типа симметрии, спин-орбитальным взаимодействием Рашба и зеемановским расщеплением одноузельных уровней. Проблема анализировалась на основе метода ренормгруппы для матрицы плотности. Показано, что для однозначной идентификации различных фаз системы — топологически тривиальной с краевыми возбуждениями или без них, а также топологически нетривиальных фаз с одной или несколькими парами майорановских мод — недостаточно анализировать по отдельности каждую из упомянутых характеристик, а необходимо рассматривать их особенности совместно.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Э. И. Рашба

DOI: 10.31857/S0044451022100108
EDN: JTNPAF

1. ВВЕДЕНИЕ

Майорановские моды (ММ) в низкоразмерных сверхпроводниках были предсказаны около 20 лет назад для моделей двумерных [1] и одномерных [2] невзаимодействующих электронных систем с нетривиальным сверхпроводящим спариванием. Такие моды характеризуются нулевой энергией возбуждения и пространственной нелокальностью: одно майорановское связанное состояние (МСС), которое представляет собой фермиевское возбуждение, можно условно представить в виде двух ММ с неперекрывающимися волновыми функциями. В низкоразмерных системах ММ могут быть локализованы на краях или неоднородностях квантовых проволок [3, 4], неоднородностях (вихрях) сверхпроводящего параметра порядка или углах двумерных систем [4, 5]. Было показано, что фазы с отсутствием или наличием ММ могут быть классифицированы топологическими методами (топологические фазы — ТФ), а потому сверхпроводящие материалы, в которых реализуются состояния с нулевой энергией и пространственной нелокальностью называются топологическими сверхпроводниками. При этом нелокальная структура майорановских квазичастиц является причиной их устойчивости к локальным внешним возмущениям и обуславливает топологическую защищенность этих состояний. Более того, изменение пространственного положения ММ в двумерных системах может приводить к изменениям волновой функции основного состояния системы, не сводящимся к умножению её на глобальный фазовый множитель [6]. Отмеченные особенности обуславливают значительный интерес к твердотельным системам с ММ как к материалам перспективным для реализации квантовых вычислений.

В настоящее время исследование топологических сверхпроводников превратилось в обширное и активно развиваемое направление физики конденсированного состояния (см., например, работы [7–10] и цитируемую в них литературу). Начиная с модели

[*] E-mail: mshustin@yandex.ru
[**] E-mail: asv86@iph.krasn.ru

Китаева, было известно, что для реализации нетривиальных фаз и ММ важную роль играет сверхпроводящее спаривание электронов с одинаковыми проекциями спинового момента, т. е. триплетное спаривание [2]. Поскольку имеется ограниченное количество кандидатов в триплетные сверхпроводники (Sr2RuO4, UGe2, UCoGe, URhGe [11–16]), важным оказался поиск условий, при которых такой механизм спаривания может эффективно реализовываться в более распространенных синглетных сверхпроводниках.

В работах [17, 18] впервые было показано, что для возникновения спаривания p-типа и ММ в одномерных системах необходимо одновременное присутствие спин-орбитальной связи Рашба и магнитного поля. Эти результаты послужили триггером для синтеза и экспериментального исследования гибридных структур типа традиционный сверхпроводник/полупроводник с сильным спин-орбитальным взаимодействием [19, 20]. В частности, изучены транспортные свойства полупроводниковых нанопроволок InAs или InSb, на поверхность которых эпитаксиальным образом напылялся слой Al [21–23]. В отмеченных гетероструктурах наблюдался квантованный пик дифференциальной проводимости при нулевом напряжении, сохраняющийся в некотором диапазоне магнитных полей и электростатических полей электродов затвора. В дополнение к этому были синтезированы и экспериментально исследованы гибридные структуры Al-EuS-InAs с тонким слоем ферромагнетика EuS [24]. Наличие контакта ферромагнетика со сверхпроводящей нанопроволокой позволило индуцировать в последней ближний магнитный порядок и наблюдать квантованный пик дифференциальной проводимости в отсутствие внешнего магнитного поля, которое оказывает негативное воздействие на сверхпроводимость и соответствующий эффект близости.

Возникновение стабильного квантованного пика кондактанса связывалось с реализацией в системе МСС, хотя относительно верности данной трактовки до настоящего времени ведутся дискуссии (см., например, [25–27]). Интерпретацию экспериментальных данных может усложнить также и то, что для нанопроволок InAs были проведены экспериментальные исследования, указывающие на возможную реализацию в них режима сильных электронных корреляций (СЭК) [28].

Таким образом, в настоящее время приобрел актуальность поиск наблюдаемых характеристик сверхпроводящих нанопроволок, позволяющий идентифицировать топологические фазовые переходы и МСС в том числе в режиме СЭК. Данный вопрос рассматривался в работах [29–34] в рамках модели цепочки Китаева с использованием метода ренормгруппы для матрицы плотности (density matrix renormalization group — DMRG) [35–38]. Обсуждались два типа критериев. Первый из них основывался на использовании характеристик спектра и собственных состояний многочастичной системы: вырождение многочастичной энергии основного состояния (для секторов гильбертова пространства с различной фермионной четностью), вырождение спектра редуцированной многочастичной матрицы плотности и асимптотическое поведение свойств одночастичной матрицы плотности на больших расстояниях [30–34]. Формулировка второго типа критериев связывалась с наблюдаемыми характеристиками: возникновением максимума спектральной функции (которая определяет поведение дифференциальной проводимости) на нулевой частоте [29], аномальным поведением сжимаемости и восприимчивости [30, 31].

Исследования возможностей детектирования ТФ проводились также в рамках модели сверхпроводящей нанопроволоки (СП) со спин-орбитальным взаимодействием Рашба и зеемановским расщеплением (см. разд. 2), которая активно используется при интерпретации экспериментальных данных для гибридных структур Al-InAs и Al-EuS-InAs. Так, были предсказаны особенности поведения калорическими функций [39] и свойств резонансов Фано [40], позволяющие предсказывать условия реализации ТФ в коротких нанопроволах. Также рассматривались перспективы детектирования МСС на основе анализа их спиновой поляризации [41–45]. Однако отмеченные исследования проводились либо при учете слабых электрон-электронных взаимодействий [39, 40], либо в пренебрежении ими [41–45].

В настоящей работе в рамках модели СП со спин-орбитальным взаимодействием Рашба и зеемановским расщеплением анализируется возможность экспериментального детектирования ТФ в условиях сильного хаббардовского отталкивания. Первые результаты анализа данной проблемы, полученные на основе метода DMRG, обсуждались в работе [46]. В частности, отмечалось, что одних только особенностей поведения магнито- и электрокалорических эффектов недостаточно для определения типа ТФ. В данной статье демонстрируется, что для решения этой проблемы необходимо совместно анализировать особенности калорических функций и спиновой поляризации возбуждений.

2. МОДЕЛЬ ГИБРИДНОЙ НАНОПРОВОЛОКИ

Полупроводниковую нанопроволоку InAs, на поверхность которой эпитаксиальным образом напылены тонкие слои (3-5 нм) Al и EuS, ответственные за индуцирование наведенной сверхпроводимости и ближнего магнитного порядка (в последнем случае, как указывалось в разд. 1, аналогичный эффект может быть достигнут действием внешнего магнитного поля), будем моделировать в рамках следующего гамильтониана в приближении сильной связи [46, 47]:

$$\begin{aligned}\widehat{H}_W = \sum_{f\sigma}\xi_\sigma \hat{a}^\dagger_{f\sigma}\hat{a}_{f\sigma} + U\sum_f \hat{n}_{f\uparrow}\hat{n}_{f\downarrow} - \\ - \sum_{f\sigma}\Big(\frac{t}{2}\,\hat{a}^\dagger_{f\sigma}\hat{a}_{f+1\sigma} + \frac{\alpha}{2}\,\eta_\sigma\hat{a}^\dagger_{f\sigma}\hat{a}_{f+1\bar{\sigma}} + \text{H. c.}\Big) + \\ + \sum_f\big[\Delta\hat{a}_{f\uparrow}\hat{a}_{f\downarrow} + \Delta_1(\hat{a}_{f\uparrow}\hat{a}_{f+1\downarrow} + \hat{a}_{f+1\uparrow}\hat{a}_{f\downarrow}) + \\ + \text{H. c.}\big]. \quad (1)\end{aligned}$$

Здесь слагаемые первых двух строк описывают одномерную систему фермионов с интегралом перескока t; параметром спин-орбитального взаимодействия Рашба α; а также зависящую от проекции спина энергию фермиона на одном узле (отсчитанную от химического потенциала μ),

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

где g — фактор Ланде, μ_B — магнетон Бора, H — эффективное магнитное поле, сформированное внешним магнитным полем и/или наведенным магнетизмом от слоя EuS. Оператор $\hat{a}_{f\sigma}(\hat{a}^\dagger_{f\sigma})$ описывает уничтожение (рождение) фермиона на узле с номером f и проекцией спина $\sigma =\uparrow,\ \downarrow$, $\eta_\uparrow = 1$, $\eta_\downarrow = -1$. Второе слагаемое гамильтониана соответствует учету одноузельного (хаббардовского) кулоновского взаимодействия фермионов с амплитудой U. Оператор числа электронов на узле $\hat{n}_{f\sigma} = \hat{a}^\dagger_{f\sigma}\hat{a}_{f\sigma}$. В четвертом слагаемом гамильтониана представлены слагаемые, связанные с наличием (за счет эффекта близости) потенциала сверхпроводящего спаривания расширенного s-типа симметрии с амплитудами Δ и Δ_1. В настоящей работе все параметры модели (1) считаются действительными и принимается, что $h > 0$. Также учет электрон-электронных взаимодействий будет проводиться как в режиме слабых $U < t/2$, так и сильных $U \gg t/2$ электронных корреляций (СЭК). При этом под слабыми электронными корреляциями мы понимаем режим, при котором система может быть с хорошей точностью описана в приближении самосогласованного среднего поля (ССП, см. [39, 40]).

3. РОЛЬ СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РАШБА В РЕАЛИЗАЦИИ МАЙОРАНОВСКИХ КВАЗИЧАСТИЦ

Остановимся подробнее на роли, которую играет спин-орбитальная связь Рашба в формировании МСС. Наиболее общим обоснованием важности такого взаимодействия является симметрийный аргумент. Так, строгая одномерность модели и сверхпроводящие спаривания приводят к реализации эффективной симметрии по отношению к инверсии времени, а также электрон-дырочной симметрии, соответственно. Если бы в системе не было спин-орбитального взаимодействия Рашба, то такой набор симметрий соответствовал бы классу C в классификации Алтланда–Цирнбауэра неупорядоченных гамильтонианов без взаимодействия [48–50]. При этом, согласно топологической классификации таких гамильтонианов [51–53], 1D-ансамбль фермионов класса C не может реализовывать топологически нетривиальные фазы. Наличие в модели (1) спин-орбитального взаимодействия Рашба нарушает в системе вращательную инвариантность в спиновом пространстве и понижает симметрию гамильтониана до класса BDI. Последний допускает реализацию топологически нетривиальных фазовых состояний и классифицируется посредством целочисленного инварианта $N_{BDI} \in \mathbb{Z}$ (см. разд. 4). Ранее нами было показано [46], что в системе (1) могут реализовываться ТФ с $-2 \leqslant N_{BDI} \leqslant 2$, причем такие фазы реализуются как в режиме слабых, так и сильных электронных корреляций. При этом $|N_{BDI}|$ соответствует количеству МСС, имеющихся в нанопроволоке в данной фазе.

Второй аргумент связан с количеством ферми-точек в одномерных моделях в интервале квазиимпульсов $k \in [0; \pi]$. В работе [2] было продемонстрировано, что топологически нетривиальная фаза в одномерном бесспиновом сверхпроводнике реализуется, если в нормальном состоянии система имеет нечетное число ферми-точек на половине зоны Бриллюэна. Учет спиновых степеней свободы в общем случае означает двукратное вырождение состояний, усложняя тем самым наблюдение таких фаз. Однако, как было показано в статьях [17, 18], совместное действие зеемановского расщепления и спин-орбитального взаимодействия

Рашба в отсутствие сверхпроводящего спаривания приводит к двухзонному спектру со щелью при $k = 0$. В результате, если μ находится внутри этой щели, то имеет место желаемая картина с одной ферми-точкой для $k \in [0; \pi]$. Более того, ниже мы покажем, что без учета хаббардовского отталкивания в режиме сильного зеемановского расщепления СП со спариваниями s-типа фактически ведет себя как p-волновой сверхпроводник в ансамбле бесспиновых фермионов, а гамильтониан(1) сводится к обобщенной модели Китаева [54]. Это позволит не только подчеркнуть важность спин-орбитального взаимодействия Рашба в формировании МСС, но и обосновать ограничение $-2 \leqslant N_{BDI} \leqslant 2$ на значения топологического инварианта модели(1).

Запишем гамильтониан (1) при $U = 0$ в квазиимпульсном представлении:

$$\widehat{H}_W = \sum_{k\sigma} \xi_{k\sigma} \hat{a}^\dagger_{k\sigma} \hat{a}_{k\sigma} + \\ + \sum_k \left\{ i\alpha_k \hat{a}^\dagger_{k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow} + \Delta_k \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{-k\downarrow} + \text{H. c.} \right\}, \quad (2)$$

где $\xi_{k\sigma} = \xi_k - \eta_\sigma h$, $\xi_k = -t\cos k - \mu$, $\alpha_k = \alpha \sin k$, $\Delta_k = \Delta + 2\Delta_1 \cos k$. Введем новые операторы, которые соответствуют фермионам в упомянутых в предыдущем абзаце зонах:

$$\begin{aligned} &\hat{\mathrm{d}}_k = \cos\phi_k \cdot \hat{a}_{k\uparrow} + i\,\mathrm{sign}(\alpha_k) \sin\phi_k \cdot \hat{a}_{k\downarrow}, \\ &\hat{\mathrm{p}}_k = \sin\phi_k \cdot \hat{a}_{k\uparrow} - i\,\mathrm{sign}(\alpha_k) \cos\phi_k \cdot \hat{a}_{k\downarrow}, \\ &\cos\phi_k = \sqrt{(1 + r_k)/2}, \\ &\sin\phi_k = \sqrt{(1 - r_k)/2}, \\ &r_k = h/\sqrt{h^2 + \alpha_k^2}, \end{aligned} \quad (3)$$

и выразим через них $\widehat{H}_W$, записав последний в форме Боголюбова–де Жена:

$$\begin{aligned} &\widehat{H}_W = \sum_k \Big(\xi_k + \frac{1}{2} \hat{\mathrm{R}}^\dagger_k \cdot H_{BG}(k) \hat{\mathrm{R}}_k \Big), \\ &\hat{\mathrm{R}}^\dagger_k = (\hat{\mathrm{d}}^\dagger_k, \hat{\mathrm{d}}_{-k}, \hat{\mathrm{p}}^\dagger_k, \hat{\mathrm{p}}_{-k}), \\ &H_{BG}(k) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{k-} & iA_k & 0 & -iB_k \\ -iA_k & -\varepsilon_{k-} & iB_k & 0 \\ 0 & -iB_k & \varepsilon_{k+} & -iA_k \\ iB_k & 0 & iA_k & -\varepsilon_{k+} \end{pmatrix}, \\ &\varepsilon_{k\mp} = \xi_k \mp \sqrt{h^2 + \alpha_k^2}, \\ &A_k = \Delta_k \alpha_k / \sqrt{h^2 + \alpha_k^2}, \\ &B_k = P_k \Delta_k h / \sqrt{h^2 + \alpha_k^2}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $P_k = \mathrm{sign}(\alpha_k)$. Видно, что в новых переменных гамильтониан СП описывает две фермиевские подсистемы, взаимодействие между которыми определяется параметром B_k. Внутри каждой из них реализуются сверхпроводящие спаривания с симметрией p-типа параметра порядка A_k. Видно, что в спин-поляризованном режиме, когда $h \gg t, \alpha, \Delta_k$, взаимодействие между d- и p-подсистемами по амплитуде превышает взаимодействие внутри подсистем, так как $|A_k| \sim \Delta_k \alpha_k / h$, а $|B_k| \sim |\Delta_k|$. Поэтому целесообразно, вводя новые операторы $\hat{d}_k$ и $\hat{p}_k$, изменить соотношения интенсивностей взаимодействия внутри и между подсистемами.

Переход к новым квазичастицам проведем посредством унитарного преобразования для матрицы Боголюбова–де Жена $H_{BG}(k)$:

$$H_{BG}(k) \to \tilde{H}_{BG}(k) = e^{-S_k} H_{BG}(k) e^{S_k} = H_{BG}(k) + \\ + \big[H_{BG}(k), S_k \big] + \frac{1}{2} \Big[\big[H_{BG}(k), S_k \big], S_k \Big] + \ldots \quad (5)$$

Выберем матрицу оператора инфинитезимельного преобразования S_k в виде

$$S_k = \frac{iB_k}{2\xi_k} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Такой выбор совместно с требованием на унитарность матрицы $\exp(S_k)$ приводит к необходимости рассматривать только режимы низкой или высокой электронной концентрации, $|\mu| \gg t, \alpha_k, \Delta_k$. Действительно, в пренебрежении слагаемыми порядка $O(1/\mu^2)$ получаем, что

$$\frac{B_k}{2\xi_k} = -\frac{\Delta_k}{2\mu} P_k \Big(1 + \frac{t\cos k}{\mu} \Big)^{-1} \Big(1 + \frac{\alpha_k^2}{h^2} \Big)^{-1/2} \simeq \\ \simeq -\frac{\Delta_k}{2\mu} P_k \Big(1 - \frac{t\cos k}{\mu} \Big) \Big(1 - \frac{\alpha_k^2}{2h^2} \Big) \simeq -\frac{\Delta_k}{2\mu} P_k, \quad (7)$$

а потому $e^{-S_k} \cdot e^{S_k} = 1 + O\left(1/\mu^2\right)$. Таким образом, мы будем работать фактически в параметрической области $h \approx |\mu| \gg t, \quad \alpha_k, \quad \Delta_k$, а при проведении вычислений пренебрегать слагаемыми порядка $O\left(1/\mu^2, \quad 1/h^2\right)$. Тогда, переходя в рассматриваемом приближении к новым операторам,

$$\hat{\mathrm{R}}^\dagger_k \to \hat{R}^\dagger_k = \hat{\mathrm{R}}_k e^{S_k} = (\hat{d}^\dagger_k, \hat{d}_{-k}, \hat{p}^\dagger_k, \hat{p}_{-k}), \quad (8)$$

получим гамильтониан нанопроволоки в представлении, позволяющим пренебречь взаимодействием между подсистемами d- и p-фермионов:

$$\widehat{H}_W = \frac{N\Delta^2}{2\mu} + \frac{N\Delta_1^2}{\mu} + \sum_k \big(\widehat{H}^{(d)}_k + \widehat{H}^{(p)}_k \big), \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned}
&\widehat{H}_k^{(d)} = (-\tilde{\mu} - \tilde{h} - t_d \cos k - t_{1d}\cos 2k)\hat{d}_k^\dagger \hat{d}_k - \\
&\quad - \frac{i}{2}\left(\widetilde{\Delta}_k \hat{d}_k \hat{d}_{-k} + \text{H. c.}\right), \\
&\widehat{H}_k^{(p)} = (-\tilde{\mu} + \tilde{h} - t_p \cos k - t_{1p}\cos 2k)\hat{p}_k^\dagger \hat{p}_k + \\
&\quad + \frac{i}{2}\left(\widetilde{\Delta}_k \hat{p}_k \hat{p}_{-k} + \text{H. c.}\right), \\
&\tilde{\mu} = \mu + \frac{\Delta^2}{2\mu} + \frac{\Delta_1^2}{\mu}, \\
&\tilde{h} = h + \frac{\alpha^2}{4h}, \\
&t_{d(p)} = t - \frac{2\Delta\Delta_1}{\mu}, \\
&t_{1d(p)} = \frac{\Delta_1^2}{\mu} \mp \frac{\alpha^2}{4h}, \\
&\widetilde{\Delta}_k = \frac{\alpha\Delta}{h}\sin k + \frac{\alpha\Delta_1}{h}\sin 2k.
\end{aligned} \tag{10}$$

Первые два слагаемых правой части (9) дают поправки к энергии основного состояния многочастичной системы, обусловленные виртуальными процессами рождения и уничтожения куперовских пар затравочных электронов. Операторы $\widehat{H}_k^{(d)}$ и $\widehat{H}_k^{(p)}$ характеризуют спектр одночастичных возбуждений системы над основным состоянием. При этом, если $\mu < 0$ ($\mu > 0$), низкоэнергетические фермиевские возбуждения, представляющие практический интерес, описываются оператором $\widehat{H}_k^{(d)}$ ($\widehat{H}_k^{(p)}$). Фактически такие гамильтонианы представляют собой обобщение гамильтониана цепочки Китаева [2], в котором учитываются дальние перескоки и сверхпроводящие спаривания p-типа. Видно, что амплитуда такого спаривания $\widetilde{\Delta}_k$ проворциональна константе спин-орбитального взаимодействия Рашба α. Более того, поскольку в конечной цепочке Китаева локализация ММ требует наличия достаточно большой сверхпроводящей щели (по сравнению с характерной энергией гибридизации ММ $\varepsilon \sim \exp(-L)$), то реализация МСС в рамках эффективной модели (10) подразумевает необходимость достаточно сильного спин-орбитального взаимодействия Рашба.

Модель (9), (10), как и исходный гамильтониан (1), относится к классу BDI и также допускает существование нескольких пар ММ за счет присутствия дальних взаимодействий. При этом в области применимости теории возмущений число пар ММ для исходной и эффективной моделей должно совпадать. Отсюда можно сразу заключить, что количество пар ММ на противоположных концах нанопроволоки, описываемой эффективной моделью (9), не превышает двух (см. ниже расд. 7). Это легко видеть, если перейти к операторам Майорана в узельном представлении. Тогда в особых точках параметрического пространства на краях проволоки могут возникать до двух неспаренных майорановских фермиона [54]. Последнее качественно обосновывает ограничение $|N_{BDI}| \leqslant 2$ для исходной модели СП (1).

4. МЕТОД РЕНОРМГРУППЫ ДЛЯ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ

Исследование низкоэнергетических свойств гамильтониана (1) проводилось с использованием метода DMRG при сохранении 64 базисных состояний. В рамках такого подхода были аппроксимированы четыре наименьшие энергии $E_{1,2\pm}$ и соответствующие волновые функции $|\Psi_{1,2\pm}\rangle$ многочастичных состояний: по два для секторов гильбертова пространства с положительной ($P = +1$) и отрицательной ($P = -1$) фермионной четности. Здесь и далее собственные значения P оператора фермионной четности $\hat{P}$ многочастичного состояния считаются положительными (отрицательными), если это состояние описывается суперпозицией парциальных вкладов с четным (нечётным) числом фермионов. Спектр возбуждений системы отсчитывался от основного состояния с энергией $E_0 = \min\{E_{1+}, E_{1-}\}$, которое может характеризоваться как положительной, так и отрицательной фермионной четностью. Энергии первых двух возбуждений определяются как $\varepsilon_j = E_{j-} - E_0$, если $E_0 = E_{1+}$, и $\varepsilon_j = E_{j+} - E_0$, если $E_0 = E_{1-}$ ($j = 1, 2$). Аналогичное обозначение будет использоваться для многочастичной волновой функции основного состояния системы. По определению $\varepsilon_j \geqslant 0$ и обращение в нуль данных характеристик может свидетельствовать о реализации в системе квантового перехода. Также в рамках DMRG вычислялся многочастичный оператор плотности,

$$\hat{\rho} = \sum_{j=1,2}\left(p_{j+}|\Psi_{j+}\rangle\langle\Psi_{j+}| + p_{j-}|\Psi_{j-}\rangle\langle\Psi_{j-}|\right), \tag{11}$$

и редуцированная матрица плотности,

$$\tilde{\rho}_{s,s'} = \sum_e \langle s, e|\hat{\rho}|s', e\rangle, \tag{12}$$

где мы условно обозначили переменные окружения, по которым проводилось суммирование посредством «e». В качестве «системы» и «окружения» принимались соответственно левая и правая половины цепочки; $p_{1+} + p_{2+} + p_{1-} + p_{2-} = 1$. Знание $\hat{\rho}$ позволяет вычислять равновесные средние значения физических наблюдаемых системы $\widehat{A}$, в дальнейшем обозначаемые как $\langle\widehat{A}\rangle$.

Анализ топологических свойств модели (1) проводился на основе двух критериев. Первый критерий основывался на анализе кратности вырождения спектра квантовой запутанности [55]. А именно, мы анализировали кратность вырождения D_L собственных значений редуцированной матрицы плотности $\tilde{\rho}_{s,s'}$. Если $D_L = 2$ ($D_L = 4$), то в цепочке длины L реализуется одна (две) пары ММ. Если же собственные значения матрицы плотности $\tilde{\rho}_{s,s'}$ невырождены, то в системе реализуется топологически тривиальная фаза без МСС. Это позволило для системы симметрийного класса BDI (см. разд. 3) ввести топологический индекс $\widetilde{N}$ [56]:

$$\widetilde{N} = |N_{BDI}| = \left[(L_1 - L_0)\ln(2)\right]^{-1} \sum_{L'=L_0}^{L_1} \ln(D_{L'}). \quad (13)$$

Здесь посредством L_0 (L_1) обозначена нижняя (верхняя) граница интервала длин СП. Усреднение кратности вырождения по длинам цепочки проводится с целью учета возможности сильных флуктуаций $\widetilde{N}$. Такие флуктуации реализуются при подавлении наведенных сверхпроводящих спариваний локальными кулоновскими взаимодействиями и связаны с изменением топологического класса системы (см., например, [56]). С учетом сказанного из формулы (13) следует, что введенный инвариант описывает либо СП с $\widetilde{N}$ парами майорановских мод, в случае $\widetilde{N} \in \mathbb{Z}$, либо проволоку с подавленными сверхпроводящими спариваниями, если $\widetilde{N} \notin \mathbb{Z}$.

Второй критерий построения топологической фазовой диаграммы основывался на анализе спектра возбуждений системы. Так, в тривиальной топологической фазе в случае длинной нанопроволоки $\varepsilon_{1,2} \neq 0$, тогда как в фазе с $\widetilde{N} = 1$ ($\widetilde{N} = 2$) реализуется ситуация, когда $\varepsilon_1 \to 0$, $\varepsilon_2 \neq 0$ ($\varepsilon_{1,2} \to 0$). Практически вычисления D проводились в варианте бесконечного DMRG при $L_0 = 300$, $L_1 = 400$. Другие характеристики вычислялись в варианте конечного DMRG. Длина цепочки L измерялась в единицах постоянной решетки $a = 1$.

5. ТИПЫ КВАЗИЧАСТИЧНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

В режиме слабых электронных корреляций, когда описание системы (1) может быть с хорошей точностью проведено в рамках ССП, боголюбовский оператор МСС, $\hat{\alpha}_0$, можно представить в виде суперпозиции пары операторов ММ, $\hat{\alpha}_0 = \hat{b}' + i\hat{b}''$, для которых справедливы разложения

$$\hat{b}' = \sum_{f=1,\sigma}^{L} w_{f\sigma}\hat{\gamma}_{Af\sigma}, \quad \hat{b}'' = \sum_{f=1,\sigma}^{L} z_{f\sigma}\hat{\gamma}_{Bf\sigma}, \qquad (14)$$

где $\hat{\gamma}_{Af\sigma} = \hat{a}_{f\sigma} + \hat{a}^\dagger_{f\sigma}$; $\hat{\gamma}_{Bf\sigma} = i(\hat{a}_{f\sigma} - \hat{a}^\dagger_{f\sigma})$ — майорановские операторы в узельном представлении. Действительные коэффициенты разложения $w_{f\sigma}$, $z_{f\sigma}$ имеют смысл волновых функций ММ, ассоциированных соответственно с операторами $\hat{b}'$ и $\hat{b}''$. В случае МСС волновые функции ММ имеют тенденцию к локализации на противоположных краях проволоки и степень их перекрытия экспоненциально уменьшается при увеличении длины цепочки, приводя к экспоненциальному уменьшению энергии МСС. При этом гибридизация ММ приводит к осцилляционному поведению энергии ММ при изменении параметров системы.

При учете многочастичных эффектов, обусловленных электронными корреляциями, структура квазичастичных возбуждений усложняется. В частности, в разложениях операторов ММ $\hat{b}'$ и $\hat{b}''$ в энергетическом представлении (14) кроме линейных слагаемых по операторам $\gamma_{i\sigma}$ будут содержаться слагаемые с тремя, пятью и т. д. узельными майорановскими операторами [33, 34, 57]:

$$\begin{aligned} \hat{b}' &= \sum_{i;\sigma} w_{i\sigma}\hat{\gamma}_{i\sigma} + \sum_{ijk;\sigma\eta\lambda} B'_{i\sigma;j\eta;k\lambda}\hat{\gamma}_{i\sigma}\hat{\gamma}_{j\eta}\hat{\gamma}_{k\lambda} + \ldots; \\ \hat{b}'' &= \sum_{i;\sigma} z_{i\sigma}\hat{\gamma}_{i\sigma} + \sum_{ijk;\sigma\eta\lambda} B''_{i\sigma;j\eta;k\lambda}\hat{\gamma}_{i\sigma}\hat{\gamma}_{j\eta}\hat{\gamma}_{k\lambda} + \ldots, \end{aligned} \qquad (15)$$

где $i, j, k = 1, \ldots, 2L$; $\sigma, \eta, \lambda = \uparrow, \downarrow$; $\hat{\gamma}_{2f-1,\sigma} = \hat{a}^\dagger_{f\sigma} + \hat{a}_{f\sigma}$, $\hat{\gamma}_{2f,\sigma} = i(\hat{a}^\dagger_{f\sigma} - \hat{a}_{f\sigma})$. В этом случае определение многочастичных операторов ММ сводится к требованиям [33, 34, 57]

$$\hat{b}^2 = 1, \quad [\hat{b}, \widehat{H}] = 0, \quad \{\hat{b}, \widehat{P}\} = 0, \quad \{\hat{b}', \hat{b}''\} = 0, \quad (16)$$

где $\hat{b} = \hat{b}'$ или $\hat{b} = \hat{b}''$. Тогда фермиевское возбуждение $\hat{\alpha}_0 = \hat{b}' + i\hat{b}''$, реализуемое на подпространстве вырожденных многочастичных состояний с различной фермионной четностью, представляет собой суперпозицию ММ.

С точки зрения многочастичных состояний, возникновение одной (двух) пар ММ в длинных нанопроволоках соответствует двукратному (трехкратному) вырождению основного состояния. При этом вырожденными являются состояния $|\Psi_0\rangle$, $|\Psi_1\rangle$ при реализации одного МСС; $|\Psi_0\rangle$, $|\Psi_{1,2}\rangle$ в случае двух МСС. В случае коротких СП вырождение снимается и изменение параметров системы, таких как μ, h

и L, может приводить к реализации квантовых переходов либо в полном многочастичном гильбертовом пространстве, либо в подпространствах с фиксированной фермионной четностью.

Кроме МСС в двух нетривиальных фазах в модели СП (1) также существуют краевые состояния, которые возникают в континуальной области параметров с $\widetilde{N}=0$. Энергия таких возбуждений отлична от нуля. Состояния такого типа были найдены нами в СП в режиме слабых электронных корреляций. Они аналогичны краевым состояниями, предсказанным в работе [58].

Дополнительно, в режиме СЭК при $\widetilde{N}=0$ могут возникать состояния, для которых характерна существенная гибридизация волновых функций ММ и осциллирующее в зависимости от параметров модели поведение энергий возбуждения. При этом ε_1 может периодически обращаться в нуль, а амплитуда осцилляций существенно превышать таковые в случае с истинными МСС в нетривиальных фазах. Отмеченные особенности связаны с локальным подавлением сверхпроводимости в СП. Таким образом, для различных параметров модели (1) могут реализовываться следующие квазичастичные возбуждения (см. рис. 1):

i) тривиальные возбуждения в фазе с $\widetilde{N}=0$. Характеризуются существенной гибридизацией ММ и делокализованным характером возбуждения;

ii) краевые возбуждения в фазе с $\widetilde{N}=0$. Характеризуются существенной гибридизацией ММ, но краевым характером возбуждения;

iii) МСС при $\widetilde{N}=1$. Первое возбуждение характеризуется слабой гибридизацией ММ, уменьшающейся экспоненциально с увеличением L;

iv) МСС при $\widetilde{N}=2$. Первые два возбуждения характеризуются слабой гибридизацией ММ, уменьшающейся экспоненциально с увеличением L;

v) псевдомайорановские возбуждения в фазе с $\widetilde{N}=0$. Для достаточно коротких цепочек их структура аналогична МСС типа iii) или iv), однако при увеличении длины цепочки возбуждения становятся делокализованными.

vi) быстро осциллирующие делокализованные возбуждения в фазе с $\widetilde{N}=0$. В отличие от возбуждений типа i) их пространственная структура характеризуется быстрыми осцилляциями волновых функций ММ с медленной модуляцией.

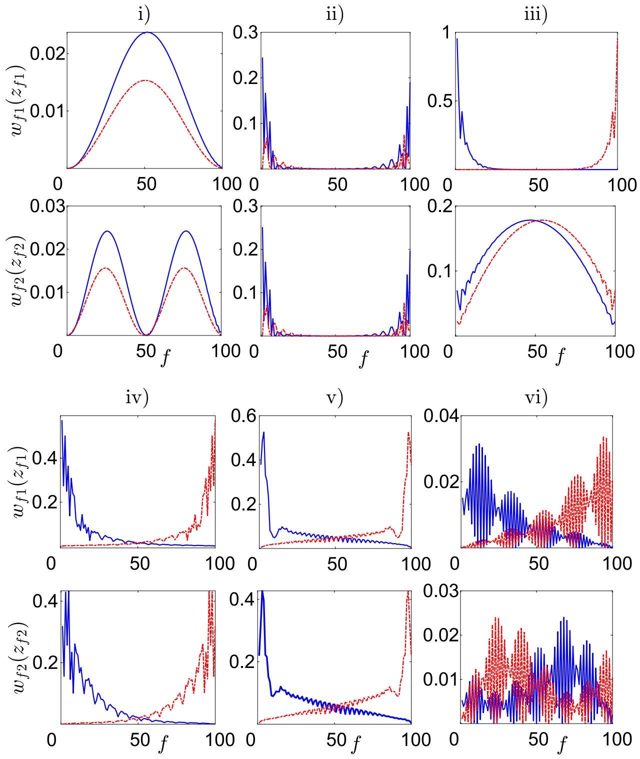

Рис. 1. Пространственные зависимости волновых функций майорановских мод первых двух квазичастичных возбуждений для состояний типа i)–vi). Сплошная кривая отвечает коэффициентам w_{fj}; пунктир — z_{fj}. Параметры в единицах $t>0$ принимались следующие: $\alpha=1.5$, $\Delta=-0.5$, $\Delta_1=0.1$; $U=0.5$, $\mu=0.5$, $h=1.3$ и $h=0.65$ для построений типа i) и ii) соответственно; $\Delta_1=0.2$, $U=3$, $h=0.2$, μ =-0.1 и 1.1 для построений типа iii) и iv) соответственно; $\Delta_1=0.2$, $U=8$, $h=0.2$, $\mu=-1.64$ для состояний типа v); $\Delta_1=0.2$, $U=8$, $h=0.4$, $\mu=-0.8$ для состояний типа vi)

На рис. 1 возбуждения типа i)–vi) представлены путем построения пространственной зависимости действительных коэффициентов

$$w_{fj}=\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\left|\langle\Psi_j|(\hat{a}_{f\sigma}+\hat{a}^{\dagger}_{f\sigma})|\Psi_0\rangle\right|,$$

$$z_{fj}=\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\left|\langle\Psi_j|(\hat{a}_{f\sigma}-\hat{a}^{\dagger}_{f\sigma})|\Psi_0\rangle\right|,\quad j=1,2,$$

связанных с волновыми функциями квазичастиц $\hat{\alpha}_j=\hat{b}'_j+i\hat{b}''_j$, описывающих переход из основного многочастичного состояния $|\Psi_0\rangle$ в одно из возбужденных состояний $|\Psi_j\rangle=\hat{\alpha}^{\dagger}_j|\Psi_0\rangle$. При этом коэффициенты w_{fj} и z_{fj} относятся к майорановским операторам соответственно $\hat{b}'_j$ и $\hat{b}''_j$. Видно, что для возбуждений типа i) и ii) волновые функции ММ существенно перекрываются между собой, формируя состояния с конечной энергий $\varepsilon_j > 0$. При этом первые имеют объемный характер, а вторые — краевой. Для майорановских возбуждений типа iii) и iv) перекрытие волновых функций ММ экспоненциально убывает с увеличением длины цепочки, что приводит к возникновению бесщелевых возбуждений. Так, для случая iii) $\varepsilon_1 \sim \exp(-L)$, $\varepsilon_2 > 0$, тогда как для случая iv) $\varepsilon_{1,2} \sim \exp(-L)$. При этом слабая гибридизация волновых функций ММ приводит к тому, что при изменении параметров модели (1) реализуется серия квантовых переходов между состояниями $|\Psi_0\rangle$ и $|\Psi_1\rangle$ с изменением фермионной четности основного состояния для возбуждений типа iii); серия переходов между состояниями $|\Psi_1\rangle$ и $|\Psi_2\rangle$ без изменения P для возбуждений типа iv). Также на рис. 1 приведены тривиальные и делокализованные возбуждения типа vi), возникающие в режиме СЭК, пространственная структурах которых (в отличии от возбуждений типа i)) характеризуется быстрыми осцилляциями волновых функций ММ, модулированными в пространстве (так называемая волна плотности). Такое поведение приводит к пилообразной зависимости энергий возбуждений $\varepsilon_{1,2}$ от параметров системы и сопутствующей серии квантовых переходов с изменением P. Существование таких переходов может проявлять себя в калорических характеристиках системы.

Существенно, что в режиме СЭК реализуются также псевдомайорановские возбуждения типа v), которые имеют сходства с МСС типа iii) или iv). Так, на рис. 1 приведены возбуждения типа v), имеющие сходства с состояниями типа iv): для относительно коротких цепочек волновые функции квазичастиц $\hat{\alpha}_j$ локализованы вблизи краев цепочки, а гибридизация волновых функций ММ приводит к каскаду квантовых переходов между состояниями $|\Psi_1\rangle$ и $|\Psi_2\rangle$ при изменении параметров системы. Однако в отличие от возбуждений типа iv) у возбуждений типа v) гибридизация волновых функций ММ сохраняется с ростом L. В пределе длинных цепочек $L \to \infty$ такие возбуждения становятся делокализованными вследствие сохраняющейся гибридизации волновых функций ММ с конечной нормировкой. Возбуждения типа v) отвечают тривиальному значению топологического инварианта $\widetilde{N} = 0$, но при определенных условиях они могут мимикрировать под топологически нетривиальные возбуждения типа iii) или iv).

Из рассмотрения квазичастичных возбуждений приведенных типов следует, что для их однозначной идентификации в физических экспериментах необходимо и достаточно исследовать две их особенности: характер локализации возбуждений (краевой или объемный) и тенденцию к реализации квантовых переходов при изменении параметров системы. В разд. 6 мы рассмотрим две наблюдаемые характеристики, позволяющие идентифицировать отмеченные особенности при учете электрон-электронных взаимодействий.

6. СПИНОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ И КАЛОРИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ

Естественными кандидатами для детектирования характера пространственного распределения возбуждений являются пространственные профили зарядовой плотности и спиновой поляризации нанопроволоки. Однако корректное введение таких наблюдаемых требует учета особенностей топологически нетривиальных возбуждений, связанных с неперекрываемостью волновых функций ММ, формирующих одно МСС. В приближении ССП эта особенность может быть выражена в виде условия $w_{f\sigma}z_{f\sigma} = 0$ для любого узла f. Такая ситуация определяет электрическую и спиновую нейтральность МСС, поскольку зарядовая и спиновая плотности боголюбовских квазичастиц определяются выражениями

$$\delta n_{f,j} = \sum_{\sigma} w_{f\sigma;j} z_{f\sigma;j},$$
$$\delta s^z_{f,j} = \frac{1}{2}\sum_{\sigma} \eta_\sigma w_{f\sigma;j} z_{f\bar{\sigma};j},$$
$$\delta s^x_{f,j} = \frac{1}{2}\sum_{\sigma} w_{f\sigma;j} z_{f\bar{\sigma};j}.$$

В работах [43–45, 59, 60] было показано, что при $U = 0$, рассматривая только электронную или только дырочную компоненты изменений $\delta n_{f\sigma,j}$ и $\delta s^{x,z}_{f\sigma,j}$, можно различать квазичастичные возбуждения в тривиальной и нетривиальной ТФ. В частности, пространственное распределение электронной компоненты $s^{x,z}_{f\sigma}, j$ для МСС имеет краевой характер. Для выделения электронной компоненты зарядовой (спиновой) плотности в режиме слабых электронных корреляций необходимо к характеристикам $\delta n_{f,j}$ $(\delta s^z_{f,j})$ добавить одночастичные вклады, связанные с дырочным фоном $\sum_\sigma |v_{f\sigma;j}|^2$ $(\sum_\sigma \eta_\sigma |v_{f\sigma;j}|^2)$.

В режиме СЭК актуальной является переформулировка изменения спиновых и зарядовых профилей системы в терминах многочастичних состояний:

$$\begin{aligned}
&\delta s^z_{f,j} = \\
&= \frac{1}{2}\sum_\sigma \eta_\sigma \big[\langle\Psi_j|\hat a^\dagger_{f\sigma}\hat a_{f\sigma}|\Psi_j\rangle - \langle\Psi_0|\hat a^\dagger_{f\sigma}\hat a_{f\sigma}|\Psi_0\rangle\big], \\
&\delta n_{f,j} = \sum_\sigma \big[\langle\Psi_j|\hat a^\dagger_{f\sigma}\hat a_{f\sigma}|\Psi_j\rangle - \langle\Psi_0|\hat a^\dagger_{f\sigma}\hat a_{f\sigma}|\Psi_0\rangle\big].
\end{aligned} \tag{17}$$

Аналогично сказанному выше $\delta n_{f,j}$, $\delta s^z_{f,j} \sim \exp(-L)$, если $\widetilde{N} \neq 0$. Для нахождения ненулевых электронных компонент мы предлагаем по аналогии учесть вклады от одночастичного дырочного фона в виде

$$\begin{aligned}
n_{f,j} &= \delta n_{f,j} + \sum_\sigma \langle\Psi_j|\hat a_{f\sigma}|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|\hat a^\dagger_{f\sigma}|\Psi_j\rangle, \\
s^z_{f,j} &= \delta s^z_{f,j} + \sum_\sigma \langle\Psi_j|\hat a_{f\sigma}|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0\,|\hat a^\dagger_{f\sigma}|\Psi_j\rangle.
\end{aligned} \tag{18}$$

В приближении ССП величины $n_{f,j}$ и $s^z_{f,j}$ сводятся к определениям электронной компоненты изменения заряда и спиновой поляризации j-го элементарного возбуждения

$$n^0_{f,j} = \sum_\sigma |u_{f\sigma;j}|^2, \quad s^{0z}_{f,j} = \sum_\sigma \eta_\sigma |u_{f\sigma;j}|^2,$$

введенным в [43–45, 59, 60]. Здесь и ранее коэффициенты Боголюбова

$$u_{f\sigma;j} = \langle\Psi_j\,|\hat a^\dagger_{f\sigma}\,|\Psi_0\rangle \quad (v_{f\sigma;j} = \langle\Psi_j\,|\hat a_{f\sigma}\,|\Psi_0\rangle)$$

описывают электронную (дырочную) компоненту волновой функции соответствующего возбуждения. В режиме СЭК отмеченное строгое равенство нарушается, однако с хорошей точностью реализуется приближенные равенства $n_{f,j} \approx n^0_{f,j}$, $s^z_{f,j} \approx s^{0z}_{f,j}$ (в частности, см. ниже рис. 6).

Анализ пространственного поведения $n_{f,j}$ и $s^z_{f,j}$ позволяет идентифицировать состояния разных типов, описанных в разд. 5. Однако на данном этапе нет оснований утверждать, что взаимодействие квантовой системы с измерительным прибором при измерении $s^z_{f,j}$ $(n_{f,j})$ позволит однозначно определить каждую из отмеченных фаз по отдельности. В частности, видится проблематичным экспериментально отделить фазы типа ii), iv) и v). В работах [43–45, 59, 60] предлагалось решать данную проблему посредством изучения спин-поляризованного транспорта, что позволяло одновременно с поведением спиновой поляризации $s^z_{f,j}$ наблюдать особенности спектра возбуждений системы. Однако такое рассмотрение проводилось в режиме слабых электронных корреляций, когда возбуждения СП являются с высокой точностью одночастичными. В режиме сильных электронных корреляций подобный анализ требует развития теории электронного транспорта (например, спин-поляризованной туннельной микроскопии) при корректном учете многочастичных эффектов. Такая задача выходит за пределы настоящего исследования.

В настоящей работе для экспериментальной идентификации особенностей спектра возбуждений мы предлагаем использовать величины магнито- и электрокалорических эффектов нанопроволоки (соответственно MCE и ECE). Важной особенностью таких характеристик является то, что их поведение определяется только наличием или отсутствием в системе квантовых переходов и не зависит от структуры многочастичных состояний [61, 62]. Соответственно, поведение MCE и ECE позволяет определить особенности спектра возбуждений системы при произвольных амплитудах межэлектронных взаимодействий. Ранее поведение MCE и ECE в СП рассматривалось в работах [39, 40, 46]. Для наглядности приведем здесь только выражения для электрокалорического эффекта, справедливое в приближении ССП:

$$\begin{aligned}
&\mathrm{ECE} = -\frac{1}{T}\Big(\frac{\partial T}{\partial \mu}\Big)_{S,h} = \Big(\frac{\partial\langle\widehat{N}\rangle/\partial T}{C(T)}\Big)_{\mu,h}, \\
&\frac{\partial\widehat{N}}{\partial T} = \frac{1}{2T^2}\sum_{m=1}^{2L} A_m\varepsilon_m f(\varepsilon_m)\big(1-f(\varepsilon_m)\big), \\
&C(T) = \frac{1}{T^2}\sum_{m=1}^{2L}\varepsilon_m^2 f(\varepsilon_m)\big(1-f(\varepsilon_m)\big), \\
&A_m = \sum_{f=1,\sigma}^{L} w_{f\sigma,m}z_{f\sigma,m}, \quad \hat N = \sum_{f=1,\sigma}^{L}\hat a^\dagger_{f\sigma}\hat a_{f\sigma}
\end{aligned} \tag{19}$$

где $\hat N$ — оператор полного числа электронов в проволоке, а $f(\varepsilon_m/T)$ — функция Ферми–Дирака. Из выражений (19) следует, что если в спектре возбуждений открытой системы имеется щель и рассматриваются низкие температуры, $\varepsilon_m \lesssim T \ll \varepsilon_{n>m}$, то ECE демонстрирует ряд особенностей. Так, при $m = 1$ электрокалорическая функция испытывает расходимость в квантовых критических точках и имеет разные знаки слева и справа от них. Поскольку в коротких нанопроволоках в топологически нетривиальной области параметров с $\widetilde{N} = 1$, а также в состоянии с $\Delta = \Delta_1 = 0$ осцилляции одного из элементарных возбуждений относительно нуля энергии соответствуют каскаду квантовых переходов, величина электрокалорического эффекта демонстрирует серию аномалий при низких температурах. В области с $\widetilde{N} = 2$ (т.е. $m = 2$) величины калорических эффектов при низких температурах демонстрируют осциллирующее поведение со сменой знака, но без аномалий, поскольку основное состояние не меняется, но реализуются квантовые переходы в дуальном к основному подпространстве с фиксированной фермионной четностью. В тривиальной ТФ с щелевым спектром и при температурах много меньших характерной величины энергетической щели величина ЕСЕ $\to 0$.

Аналогичные выводы справедливы для величин магнитокалорического эффекта, а также для поведения МСЕ и ЕСЕ в режиме сильных электронных корреляций. В последнем случае выражение для ЕСЕ представляется в форме (19), для которой

$$\frac{\partial\langle\hat{N}\rangle}{\partial T} = \frac{1}{T^2}\left(\langle\widehat{H}_W\,\hat{N}\rangle - \langle\widehat{H}_W\rangle\langle\hat{N}\rangle\right),$$
$$C(T) = \frac{1}{T^2}\left(\langle\widehat{H}_W^2\rangle - \langle\widehat{H}_W\rangle^2\right), \qquad (20)$$
$$\hat{N} = \sum_{f\sigma}\hat{a}^\dagger_{f\sigma}\hat{a}_{f\sigma}.$$

Здесь усреднение с оператором плотности (11) проводилось в предположении, что $p_{j\pm} = e^{-E_{j\pm}/T}/Z$, где $Z = \sum\limits_{j=1,2;\,\nu=\pm} e^{-E_{j\nu}/T}$. Поскольку для рассматриваемой модели имеется однозначное соответствие между поведением низкоэнергетических ветвей спектра возбуждений и низкотемпературным поведением ЕСЕ (МСЕ), в следующем разделе будем приводить более репрезентативные зависимости энергий возбуждений $\varepsilon_{1,2}$ от параметров модели. При этом зависимости $\varepsilon_{1,2}(\mu)$ будем рассматривать совместно с зависимостями $s^z_{f,j}(\mu)$ и подробно анализировать случай СЭК, слабо изученный к настоящему времени.

7. ОСОБЕННОСТИ НАБЛЮДАЕМЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОПРОВОЛОКИ В РЕЖИМЕ СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

Рассмотрим, как общие утверждения предыдущих разделов проявляют себя для нанопроволоки (1) в режиме СЭК с $U = 8$ (все величины измеряются в единицах $t > 0$). Зависимости энергий элементарных возбуждений $\varepsilon_{1,2}$ и топологического индекса $\widetilde{N}$ от химического потенциала приведены на рис. 2. Видно, что в системе могут реализовываться фазы с отсутствием, одним и двумя МСС. При этом критическими точками, при которых реализуются топологические переходы, являются значения химического потенциала: $\mu_1 \approx -1.65$, $\mu_2 \approx -1$, $\mu_3 \approx -0.57$, $\mu_4 \approx 1.14$. Отметим, что зависимости энергии возбуждения $\varepsilon_{1,2}$ от химического потениала в областях $\mu_2 < \mu < \mu_3$ и $\mu_3 < \mu < \mu_4$ выглядят аналогичными, несмотря на различные значения топологических индексов в этих областях. Такая схожесть является следствием конечности рассматриваемой цепочки. Так, при увеличении L в области с $\widetilde{N} = 1$ энергия возбуждений ε_1 экспоненциально стремится к нулю, тогда как в области с $\widetilde{N} = 0$ такого не происходит.

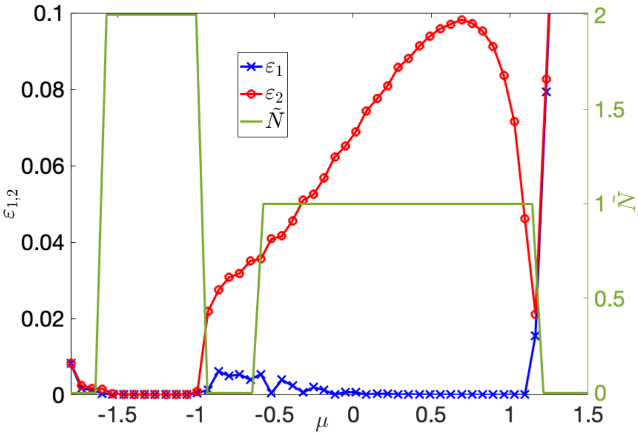

Рис. 2. Зависимость двух нижних энергий возбуждения $\varepsilon_{1,2}$ (левая ось ординат) и топологического инварианта $\widetilde{N}$ (правая ось ординат) от химического потенциала μ. Параметры: $\alpha = 1.5$, $\Delta = -0.5$, $\Delta_1 = 0.2$; $h = 0.4$, $U = 8$

Не зависит, однако, от длины цепочки характер поведения фермионной четности основного состояния, зависимость которого от химического потенциала приведена на рис. 3. Видно, что в областях с $\widetilde{N} = 2$ и $\widetilde{N} = 1$ зависимость $P(\mu)$ является соответственно постоянной и осциллирующей. С микроскопической точки зрения постоянная зависимость $P(\mu)$ в области $\widetilde{N} = 2$ означает, что фермионная четность основного состояния $|\Psi_0\rangle$ является положительной, тогда как состояния из сопряженного сектора гильбертова пространства, $|\Psi_1\rangle$ и $|\Psi_2\rangle$, сменяют друг друга в качестве первого возбужденного при изменении параметров системы. Осциллирующее поведение $P(\mu)$ означает то, что в качестве основного сменяют друг друга состояния $|\Psi_0\rangle$ и $|\Psi_1\rangle$, относящиеся к сопряженным секторам гильбертова пространства.

Таким образом, в области с $\widetilde{N} = 1$ в системе наблюдается серия квантовых переходов с изменением фермионной четности основного состояния. Соглас-

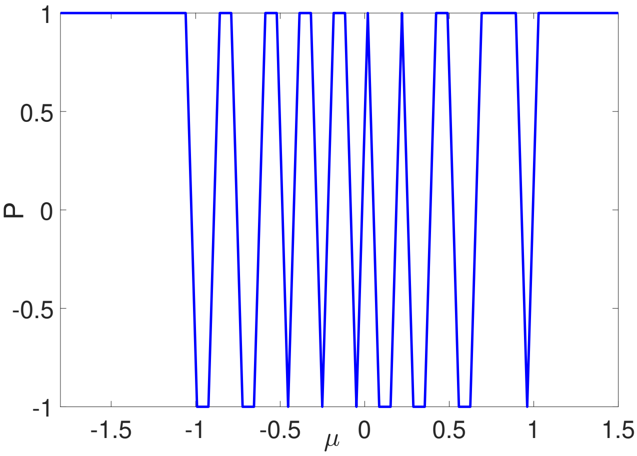

Рис. 3. Зависимость фермионной четности основного состояния от химического потенциала, $P(\mu)$, для параметров рис. 2

но общей теории [61, 62], в этой области при изменении параметров системы должна наблюдаться серия калорических аномалий, подобная той, что обсуждалась в разд. 6. Вычисления величины электрокалорического эффекта по формулам (19) и (20) под тверждают данные заключения. Поведение зависи мостей ECE(μ) аналогично поведению MCE(h) в ра боте [46]: в области с $\widetilde{N}=1$ величина электрокало рического эффекта демонстрирует серию аномалиі со сменой знака в точках смены P, тогда как в об ласти с $\widetilde{N}=2$ зависимость ECE(μ) осциллирует от носительно нуля с конечной амплитудой.

Важно, что в режиме СЭК на фазовой диаграм ме системы индуцируется фаза с $\widetilde{N}=0$ (област: $\mu_2<\mu<\mu_3$ на рис. 2) и возбуждениями типа vi из разд. 5, в которой система демонстрирует серии квантовых переходов с осцилляциями индекса P При изменении параметров внутри данной област величина ECE(μ) демонстрирует серию аномалий которые аналогичны аномалиям в параметрической области с $\widetilde{N}=1$. Таким образом, в сильно коррелированной СП измерение электрокалорических функций, в общем случае, не позволяет различать тривиальные и нетривиальные фазы. Качественно отмеченный эффект объясняется тем, что в случае сильных электронных корреляций $U \gg 1$ в системе реализуются параметрические области с подавленной за счет электронных взаимодействий сверхпроводимостью. Для последней характерна реализация тривиальной ТФ с осциллирующим поведением минимальной энергии возбуждения и фермионной четности основного состояния.

Для преодоления отмеченной неопределенности в идентификации ТФ на основе наблюдаемых характеристик мы предлагаем использовать особенности поведения электронных компонент зарядовой и спиновой поляризации многочастичных возбуждений. DMRG-расчеты в режиме СЭК продемонстрировали, что распределения характеристик $n_{f,j}$ и $s^z_{f,j}$ по узлам цепочки имеют делокализованный характер, если $\widetilde{N}=0$, и краевой характер для $j=1$ ($j=1,2$), если $\widetilde{N}=1$ ($\widetilde{N}=2$). Так, примеры пространственных зависимостей $s^z_{f,j}$ для параметров, отвечающих различным фазам системы, приведены на рис. 4. Дополнительно, из сравнения второго и четвертого столбцов на рис. 4 следует, что распределения для тривиальных фаз имеют разных характер. При $\mu_2<\mu<\mu_3$ система далека от половинного заполнения. В результате за счет большой интенсивности хаббардовского отталкивания для обоих возбуждений наблюдаются волны спиновой плотности — модулированные в пространстве сильные осцилляции $s^z_{1,2}$. При $\mu>\mu_4$ средняя одноузельная концентрация равна единице, что, по сути, нивелирует эффект зарядовых корреляций.

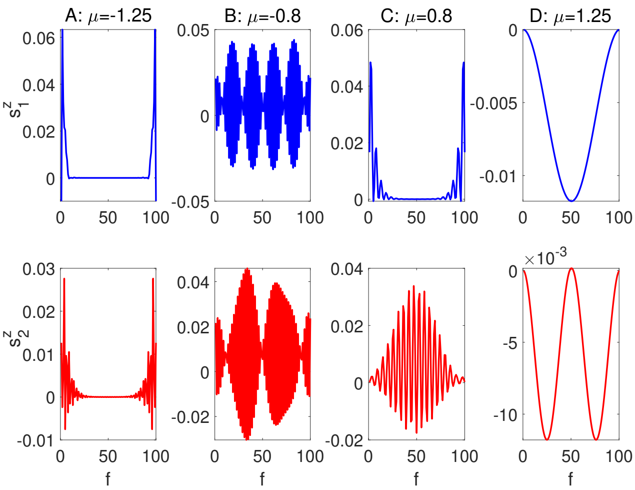

Рис. 4. Пространственные распределения спиновой поляризации первого (верхний ряд) и второго (нижний ряд) возбуждений в различных топологических фазах для параметров рис. 2

Для упрощения анализа эволюции такого рода распределений в параметрическом пространстве удобно использовать интегральную величину IPR (inverse participation ratio), которая активно применяется для характеризации одночастичных возбуждений в низкоразмерных системах с открытыми граничными условиями [63–66]. Например, обобщение

IPR на случай спиновой поляризации имеет вид

$$\mathrm{sIPR}_j = \frac{\sum_f |s^z_{f,j}|^2}{\left(\sum_f |s^z_{f,j}|\right)^2}, \quad j = 1, 2. \qquad (21)$$

Исходя из формулы (21), sIPR_j имеет порядок $1/L$ для делокализованного распределения $s^z_{f,j}$, и много больше чем $1/L$ для распределения, имеющего краевой характер ($\mathrm{sIPR}_j = 1$ в предельном случае распределений, локализованных строго на крайних узлах).

На рис. 5 приведена зависимость величины sIPR, определяемой выражением (21), от химического потенциала (см. левую ось ординат). Видно, что в области с $\widetilde{N} = 0$, реализуемой при значениях химического потенциала $\mu < \mu_1$, $\mu_2 < \mu < \mu_3$ и $\mu_4 < \mu$, значения $\mathrm{sIPR}_j(\mu) \ll 1$. В области с $\widetilde{N} = 1$ и $\widetilde{N} = 2$ заметно отличными от нуля являются соответственно зависимости $\mathrm{sIPR}_1(\mu)$ и $\mathrm{sIPR}_{1,2}(\mu)$. Отметим, что на рис. 5 значения величин sIPR_j различаются незначительно в левой и правой малой окрестности точек топологических фазовых переходов (в точках $\mu^{\pm}_{1,\ldots,4} = \mu_{1,\ldots,4} \pm \delta$, где $\delta \ll 1$). Такая плавность изменения значений sIPR_j связана с тем, что последняя характеристика рассчитывалась для конечной цепочки с $L = 100$. С ростом L резкость изменения IPR-характеристик при прохождении этих точек увеличивается. Таким образом, совместный анализ особенностей калорических функций и спиновой поляризации многочастичных возбуждений позволяет однозначно идентифицировать различные топологические фазовые состояния системы и соответствующие им виды низкоэнергетических возбуждений, описанные в разд. 5.

В заключении сравним $\mathrm{sIPR}_{1,2}$, полученные на основе формулы (18), с аналогичными величинами $sIPR^0_{1,2}$, когда спиновая поляризация определяется, исходя из обобщенных коэффициентов Боголюбова [39, 43]. Зависимости sIPR от интенсивности одноузельного кулоновского взаимодействия приведены на рис. 6. Как следует из графика, при заданных значениях химического потенциала и зеемановской энергии имеется одно МСС при $U < 4$. В этом диапазоне U наблюдается количественное согласие между двумя типами $sIPR$. В свою очередь, при $U > 4$, когда упомянутая топологическая фаза подавляется, согласие между $\mathrm{sIPR}_{1,2}$ и $\mathrm{sIPR}^0_{1,2}$ становится качественным.

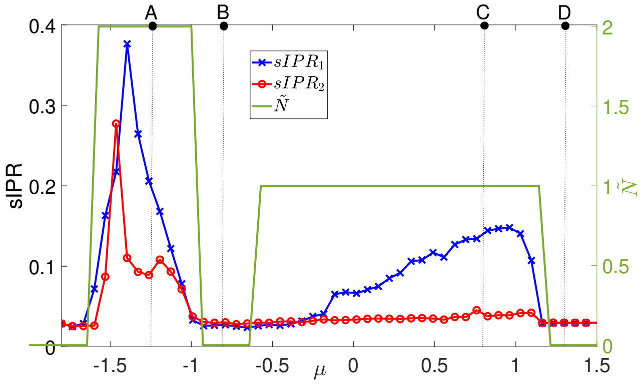

Рис. 5. Зависимость sIPR (левая ось y) и топологического инварианта $\widetilde{N}$ (правая ось y) от химического потенциала для параметров рис. 2. Буквами $A, \ldots, D$ обозначены величины μ, для которых на рис. 4 построены пространственные распределения спиновой поляризации первых двух возбуждений

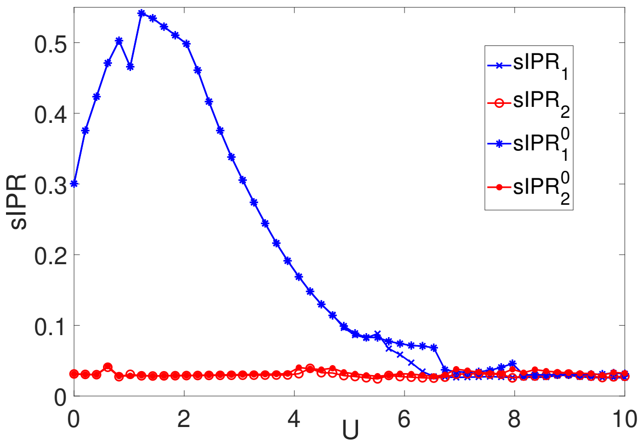

Рис. 6. Функция $\mathrm{sIPR}(U)$ для первых двух возбуждений, рассматриваемых как строго одночастичные процессы (см. кривые с маркерами-звездочками и маркерами-точками) и как переходы с учетом многочастичных вкладов (см. кривые с маркерами-крестиками и маркерами-кружками), для параметров рис. 2 и $\mu = -0.8$

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрен вопрос об идентификации топологических фаз сильно коррелированной сверхпроводящей нанопроволоки со спин-орбитальным взаимодействием Рашба и зеемановским расщеплением одноузельных энергий частиц. Ранее было показано [39, 46], что для такой системы в качестве наблюдаемой характеристики могут выступать величины магнито- и электрокалорического эффектов. В настоящей работе демонстрируется, что в режиме сильных электронных корреляций для однозначного определения различных состояний системы измерений одних калорических функций недостаточно. В частности, в режиме СЭК индуцируется топологически тривиальная фаза, в которой поведение калорических функций аналогично поведению в фазе топологической сверхпроводимости с одним МСС. В качестве дополнительной наблюдаемой характеристики в работе предложено анализировать степень локализации электронной компоненты спиновой поляризации многочастичных возбуждений СП. В отсутствие электрон–электронных взаимодействий, а также в режиме слабых зарядовых корреляций данная характеристика сводится к определениям, предложенным ранее в работах [43–45, 59, 60]. Расчеты с помощью метода ренормгруппы для матрицы плотности показали, что даже при учете взаимодействий между фермионами электронная компонента спиновой поляризации низкоэнергетических возбуждений имеет тенденцию к локализации вблизи краев цепочки в топологической фазе. Однако обратное, вообще говоря, не верно. В частности, в нанопроволоке могут реализовываться краевые возбуждения нетопологического характера, которые нельзя однозначно идентифицировать с помощью анализа спиновой поляризации, но которые могут быть идентифицированы калорическими измерениями. В этой связи в работе делается вывод, что для однозначной идентификации фазовых состояний системы с различными типами краевых возбуждений (топологического и нетопологического характера) в нанопроволоке, в том числе сильно коррелированной, недостаточно изучать отдельно ее калорические характеристики и особенности спиновой поляризации, а необходимо анализировать их совместно.

Благодарности. Авторы благодарят А. Д. Федосеева за дискуссии.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 19-02-00348, № 20-02-00015), правительства Красноярского края и Краевого фонда науки (проекты № 20-42-243001, 20-42-243005), совета по грантам Президента РФ (проекты № МК-1641.2020.2, МК-4687.2022.1). Один из авторов, Ш. М. С., благодарит Фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

ЛИТЕРАТУРА

1. N. Read and D. Green, Phys. Rev. B **61**, 10267 (2000).
2. А. Ю. Китаев, УФН **44**, 131 (2001).
3. V. Kaladzhyan and C. Bena, Phys. Rev. B **100**, 081106 (2019).
4. Q. Wang, C.-C. Liu, Y.-M. Lu, et al., Phys. Rev. Lett. **121**, 186801 (2018).
5. X. Zhu, Phys. Rev. B. **91**, 205134 (2018).
6. C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern et al., Rev. Mod. Phys. **80**(3), 1083 (2008).
7. J. Alicea, Rep. Prog. Phys. **75**, 076501 (2012).
8. S. R. Elliot and M. Franz, Rev. Mod. Phys. **87**, 137 (2015).
9. M. Sato and Y. Ando, Rep. Prog. Phys. **80**, 076501 (2017).
10. В. В. Вальков, М. С. Шустин, С. В. Аксенов и др., УФН **192**, 3 (2022).
11. A. P. Mackenzie and Y. Maeno, Rev. Mod. Phys. **75**, 657 (2003).
12. S. Das Sarma, C. Nayak, and S. Tewari, Phys. Rev. B **73**, 220502(R) (2006).
13. A. Pustogow, Y. Luo, A. Chronister et al., Nature **574**, 72 (2019).
14. S.-I. Suzuki, M. Sato, and Y. Tanaka, Phys. Rev. B **101**, 054505 (2020).
15. J. D. Sau and S. Tewari, Phys. Rev. B **86**, 104509 (2012).
16. В. П. Минеев, УФН **187**, 129 (2017).
17. R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **105**, 077001 (2010).
18. Y. Oreg, G. Refael, and F. von Oppen, Phys. Rev. Lett. **105**, 177002 (2010).
19. V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov et al., Science **336**, 1003 (2012).
20. M. T. Deng, C. L. Yu, G. Y. Huang et al., Nano Lett. **12**, 6414 (2012).
21. F. Nichele, A. C. C. Drachmann, A. M. Whiticar et al., Phys. Rev. Lett. **119**, 136803 (2017).
22. H. Zhang, C.-X. Liu, S. Gazibegovic et al., Nature (London) **556**, 74 (2018).
23. P. Yu, J. Chen, M. Gomanko et al., Nat. Phys. **17**, 482 (2021).
24. S. Vaitiekenas, Y. Liu, P. Krogstrup et al., Nature Physics, 17 (2020).
25. C. Moore, T. D. Stanescu, and S. Tewari, Phys. Rev. B **97**, 165302 (2018).
26. C. Reeg, O. Dmytruk, D. Chevallier et al., Phys. Rev. B **98**, 245407 (2018).

27. H. Zhang, C.-X. Liu, S. Gazibegovic et al., Nature **581**, E4 (2020).

28. Y. Sato, S. Matsuo, C.-H. Hsu et al., Phys. Rev. B **99**, 155304 (2019).

29. R. Thomale, S. Rachel, and P. Schmitteckert, Phys. Rev. B **88**, 161103(R) (2013).

30. Y.-H. Chan, C.-K. Chiu, and K. Sun Phys. Rev. B **92**, 104514 (2015).

31. N. M. Gergs, L. Fritz, and D. Schurich, Phys. Rev. B **93**, 075129 (2016).

32. J.-J. Miao, H.-K. Jin, Y. Zhou, Sci. Rep. 8:488, 1 (2018).

33. G. Kells, Phys. Rev. B **92**, 081401(R) (2015).

34. G. Kells, Phys. Rev. B **92**, 155434 (2015).

35. S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).

36. S. R. White, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).

37. U. Schollwock, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005).

38. U. Schollwock, Ann. Phys. **326**, 96 (2011).

39. В. В. Вальков, В. А. Мицкан, М. С. Шустин, Письма в ЖЭТФ **12**, 762 (2017).

40. V. V. Val'kov, M. Yu. Kagan, and S. V. Aksenov, J. Phys.: Cond. Matt **31**, 225301 (2019).

41. В. В. Вальков, С. В. Аксенов, ФНТ **43**, 546 (2017).

42. V. V. Val'kov and S. V. Aksenov, J. Magn. Magn. Mat **440**, 112 (2017).

43. D. Sticlet, C. Bena, and P. Simon, Phys. Rev. Lett. **108**, 096802 (2012).

44. P. Szumniak, D. Chevallier, D. Loss et al., Phys. Rev. B **96**, 041401(R) (2017).

45. M. Serina, D. Loss, and J. Klinovaja, Phys. Rev. B **98**, 035419 (2018).

46. S. V. Aksenov, A. O. Zlotnikov, and M. S. Shustin, Phys. Rev. B **101**, 125431 (2020).

47. E. M. Stoudenmire, J. Alicea, O. A. Starykh et al., Phys. Rev. B **84**, 014503 (2011).

48. M. R. Zirnbauer, J. Math. Phys. **37**, 4986 (1996).

49. A. Altland and M. R. Zirnbauer, Phys. Rev. B **55**, 1142 (1997).

50. P. Heinzner, A. Huckleberry, and M. R. Zirnbauer, Commun. Math. Phys. **257**, 725 (2005)

51. A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki et al., Phys. Rev. B **78**, 195125 (2008).

52. A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, et al., AIP Conf. Proc. **1134**, 10 (2009).

53. A. Yu. Kitaev, AIP Conf. Proc. **1134**, 10 (2009).

54. W. DeGottardi, M. Thakurathi, S. Vishveshwara et al., Phys. Rev. B **88**, 165111 (2013).

55. A. M. Turner, F. Pollmann, and E. Berg, Phys. Rev. B. **83**, 075102 (2011).

56. М. С. Шустин, С. В. Аксенов, ФТТ **63**, 1758 (2021).

57. G. Goldstein and C. Chamon, Phys. Rev. B **86**, 115122 (2012).

58. А. Д. Федосеев, ЖЭТФ **155**, 138 (2019).

59. M. Leijnse and K. Flensberg, Phys. Rev. Lett. **107**, 210502 (2011).

60. Y. Nagai, H. Nakamura, and M. Machida, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 064703 (2014).

61. L. Zhu, M. Garst, A. Rosch et al., Phys. Rev. Lett. **91**, 066404 (2003).

62. M. Garst and A. Rosch, Phys. Rev. B **72**, 205129 (2005).

63. D. J. Thouless, Phys. Rep. **13**, 93 (1974).

64. N. C. Murphy, R. Wortis, and W. A. Atkinson, Phys. Rev. B **83**, 184206 (2011).

65. M. Malki and G. S. Uhrig, Eur. Phys. Lett. **127**, 27001 (2019).

66. А. Д. Федосеев, ЖЭТФ **160**, 88 (2021).