

Raport științific și tehnic. PN-III-P1-1.1-TE-2019-0423

Obiective

Obiectiv 1. Modelarea transportului cuantic în joncțiuni Josephson sub efectul câmpului magnetic. Studiul curentului critic într-o joncțiune Josephson din dicalcogenuri de metale de tranziție (TMD).

Rezumatul etapei

În această etapă am tratat primul obiectiv din proiect. Am modelat o joncțiune Josephson bidimensională alcătuită din secțiuni normale și supraconductoare de MoS₂. Joncțiunea a fost supusă unui câmp magnetic aplicat perpendicular pe puntea joncțiunii. Am calculat curentul Josephson precum și curentul critic în funcție de câmpul magnetic. Am obținut un semnal distinctiv care bruiază variația obișnuită de tip SQUID a curentului. Am interpretat acest semnal ca fiind datorat structurii de bandă specifice stărilor de margine localizate pe puntea Josephson. Aceste rezultate pot servi în detecția stărilor de margine cu dispersie neparabolică în astfel de joncțiuni.

Activități

Am realizat punct cu punct cele 4 activități ale etapei care sunt notate în contract:

Act. 1.1 – Achiziție de aparatură de calcul. 2 Laptop-uri HP ProBook 450 G7 și o unitate centrală HP Z6 G4 WKS.

Activități: Instalarea de sistem de operare Linux pe unitatea centrală de calcul. Interfațarea unității de calcul cu clusterul Echidna din cadrul INCDTIM. Instalarea de distribuție *conda* pe clusterul Echidna și pe unitatea centrală. Setarea sistemului cu *ipyparallel* pentru efectuarea de calcule de transport cuantic în paralel.

Act. 1.2 – Calcul de curent critic într-o joncțiune Josephson din dicalcogenuri de metale de tranziție cu ajutorul metodelor de legături electronice tari (TB, „tight-binding”)

Am studiat o clasă de TMD-uri semiconductoare care devin supraconductoare în formă monostrat la temperaturi de ordinul 1K (MoS₂, MoSe₂, WS₂, WSe₂) și care au structuri de bandă electronică asemănătoare [1]. Ne-am concentrat pe MoS₂, care este cea mai răspândită și utilizată dintre TMD-uri. În studiul nostru am investigat transportul cuantic printr-o joncțiune de tip supraconductor-metal normal-supraconductor (SNS) alcătuită din MoS₂.

Această etapă constă în două mari sub-activități: **1.** modelarea sistemului și **2.** calcul și interpretare de transport cuantic în joncțiune.

Act. 1.2.1 – Modelare

Etapă de modelare constă în 3 subetape: **A.** elaborare de model de legături electronice tari pentru MoS₂ în starea normală, **B.** introducerea supraconductibilității și **C.** modelarea geometriei joncțiunii supraconductoare.

A. În starea normală considerăm orbitali activi pentru MoS₂ aproape de nivelul Fermi. Am considerat un model care cuprinde orbitalii *d* de Mo și orbitalii *p* de S. Aceste modelări se bazează pe studii DFT anterioare, care au obținut descompunerea orbită a densității de stări în jurul benzii interzise pentru semiconductorului MoS₂, pentru a decela contribuțiile dominante [2,3]. În particular utilizăm orbitalii ($d_{3z^2-r^2}, d_{x^2-y^2}, d_{xy}, p_x^S, p_y^S, p_z^A$), unde *S* și *A* denotă combinații simetrice și antisimetrice de orbitali *p* din cele două rețele triunghiulare (sus și jos) de atomi S.

Dinamica electronilor în sistem este descrisă de un Hamiltonian care cuprinde energii pe fiecare atom din rețea, precum și termeni cinetici de salt între atomi. Diagonalizarea Hamiltonianului produce structura electronică de bandă, care este în acord cu rezultatele experimentale și cu calculele *ab initio* într-o fereastră de energie apropiată de nivelul Fermi în semiconductor. Crucială este considerarea efectului spin-orbită la baza benzii de conducție care produce o separație de spin pentru benzile de la punctele de minim *K* și *K'* din zona Brillouin. Fitarea cu punctele de încrucișare lângă minimumul benzii de conducție ne-a ajutat să obținem cuplajele spin-orbită pentru cei doi atomi $\lambda_{Mo} = -0.086$ eV și $\lambda_S = 0.013$ eV.

Pentru a manipula în perspectivă curentul prin joncțiune, considerăm un câmp magnetic aplicat perpendicular pe monostrat. Câmpul induce două efecte importante în material: efectul Zeeman și efectul magnetic orbital. Efectul Zeeman este simulat ca un câmp omogen care duce la o ridicare generală a degenerării de spin pentru orice stare electronică. Efectul magnetic orbital tinde să inducă o mișcare circulară pentru electronii în planul monostratului. Acesta efect îl simulăm prin metoda cuplajului minimal care modifică impulsul particulelor cu potențialul vector magnetic \mathbf{A} , $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}$. Am ales $\mathbf{A} = (-yB, 0, 0)$, pentru un câmp magnetic de amplitudine *B*, perpendicular pe monostratul plasat în planul (*x, y*). În cazul metodei TB, efectul magnetic orbital este simulat ca o fază care se aplică pe termenii cinetici (de salt) din model și care depinde de integrala de linie a potențialului vector pe direcția mișcării electronului. Modelul electronic este codat cu ajutorul pachetului Python KWANT [4] pentru tratarea transport cuantic.

B. După obținerea modelului de *semiconductor* pentru MoS₂, vom considera un regim de temperatură extrem de joasă $T \sim 1-2$ K, unde sistemul devine *supraconductor* [5,6]. Vom considera cazul în care supraconductibilitatea este indusă prin efect de proximitate cu supraconductori de undă *s*, Al sau Nb. Supraconductorul MoS₂ este tratat de noi la

nivel de câmp mediu în formalismul Bogoliubov-de Gennes. În acest caz, parametrul de ordine supraconductor Δ poate fi considerat omogen și cu o valoare luată din experimente, de aproximativ 0.2 meV.

C. Acum simulăm fizic joncțiunea Josephson. Aceasta este alcătuită din trei segmente: supraconductor-semiconductor-supraconductor. Considerăm un nanofir de grosimea unui monostrat de MoS₂ și cu dimensiune transversală de 10.8 nm. Puntea joncțiunii are o lungime de 200 nm. Orientarea firului este astfel încât acesta are o structură de margine de tip zigzag, unde pe o latură sau alta a monostratului vor exista atomi diferiți. E.g., în structura reprezentată în Fig. 1, atomii de S sunt localizați pe latura de sus a punții (*t*) și cei de Mo, pe partea de jos (*b*).

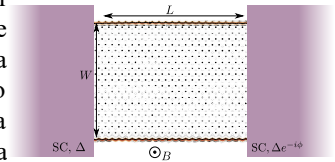


Fig. 1: Geometria schematică a joncțiunii Josephson, cu electrozi supraconductori (roz), câmp magnetic aplicat perpendicular pe puntea joncțiunii, și cu o densitate finită de curent (maro) la marginea punții.

La capete firului, sistemul este în proximitate cu supraconductori de undă *s* care induc supraconductibilitate în nanofir. Astfel capetele firului devin electrozi supraconductori (teoretic semi-infiniți). Puntea joncțiunii MoS₂ rămâne într-o stare nesupraconductoare (normală). Câmpul magnetic acționează doar asupra punții, și, datorită efectului Meissner, este exclus din electrozi. Schema joncțiunii este prezentată în Fig. 1.

Act 1.2.2 – Calcul de curent Josephson

În această etapă investigăm transportul cuantic în joncțiunea Josephson și calculăm *supracurentul* din sistem. Mecanismul fizic care face posibil transportul de perechi de electroni în joncțiune este *reflexia Andreev* la interfața supra/semiconductor și care se manifesta ca o conversie electron-gol. După reflexie, în puntea normală are loc transport coerent de electroni și goluri. Repetiția acestor procese în joncțiune duce la transport de perechi Cooper între electrozi, mediat de stări (numite stări legate Andreev, ABS) în puntea normală. Supracurentul care este înregistrat este sinusoidal și este denumit curent Josephson. El depinde de diferența de fază dintre funcțiile de undă pentru cei doi electrozi supraconductori. Deoarece diferența de fază variază în timp, el se comportă ca un curent alternativ.

A. Cu ajutorul modelului definit în Act. 1.2.1, obținem prin diagonalizare exactă spectrul punții joncțiunii în Fig. 2(a). La energii de 1eV și -1eV, regăsim spectrul de volum al sistemului sau spectrul monostratului infinit. Remarcabilă pentru cazul de față este prezența de stări adiționale în banda interzisă: 3 perechi de benzi electronice, două cu masă efectivă pozitivă și una, negativă. Fiecare pereche este compusă din două benzi pentru fiecare din cele două proiecții ale spinului electronic pe direcția normală monostratului. Aceste stări fac posibil transportul electronic în banda interzisă a semiconductorului și definesc un *metal unidimensional* localizat la marginea punții, datorită transportului prin atomii de tip Mo sau S în geometria zigzag. La mijlocul benzii interzise există 2 benzi convexe, datorate atomilor de S de pe marginea de sus (*t*) a punții, iar benzile concave, atomilor de Mo de pe marginea de jos (*b*) a punții. Aproape de banda de conducție a semiconductorului, începând la 0.5 eV, apare încă o pereche de benzi convexe, datorată atomilor de Mo (*b*). Această pereche manifestă o separație puternică a stărilor de spin \uparrow și \downarrow , precum și o deviație puternică de la parabolicitate datorită efectului de spin-orbită.

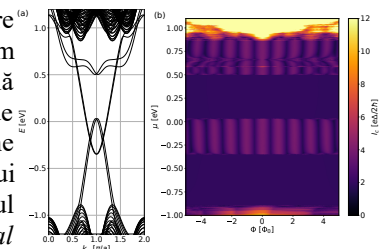


Fig. 2: (a) Structura electronică de bandă pentru un semiconductor monostrat MoS₂ cu margine zigzag. (b) Curentul critic prezintă o oscilație Fraunhofer în banzile de volum și SQUID în banda interzisă.

Pentru transportul electronic vorbim de două regimuri diferite: (a) transportul prin stările de volum ale monostratului și (b) transportul în banda interzisă a semiconductorului, unde conducția are loc doar la marginea punții electronice. În continuare vom investiga transportul în joncțiune cu accent pe cazul (b).

B. Calculul de supracurent în sistem se bazează pe formalismul matricilor de împrăștiere. Descompunem matricea de împrăștiere a sistemului ca produs de matrici de împrăștiere unitare pentru procesele de transport în punte S_N , plus procese de reflexie Andreev la interfață, S_A . Pentru o funcție incidentă pe o interfață putem defini o relație de consistență care ține seama de traiectoriile închise formate electroni și goluri $\psi_{in} = S_N S_A \psi_{in}$. Soluția la acest sistem de ecuații o formează stările ABS din sistem. În cazul sistemului simulat numeric cu metoda TB, obținem cu ajutorul pachetului KWANT, matricea pentru transportul în punte S_N , în timp ce matricea pentru reflexia Andreev este definită analitic. ABS sunt obținute apoi numeric prin soluția sistemului de ecuații. Pentru joncțiuni scurte, supracurentul îl obținem din derivata ABS în raport cu diferența de fază între electrozi. Pentru fiecare punct în spațiul parametrilor, înregistrăm curentul maxim prin punte, I_c . Rezultatele numerice sunt prezentate în Fig. 2(b). În transportul prin banda de conducție sau de valență de MoS₂ observăm transport în întreg volumul punții, ceea ce dă naștere la un semnal de tip Fraunhofer în curentul critic. Remarcabil este comportamentul curentului de la nivelul benzii interzise semiconductoră. Aici stările de margine conduc curentul (cf. Fig. 1) și produc un curent de tip SQUID datorat interferenței constructive între transportul exclusiv pe cele două laturi, *t* și *b*, ale punții.

Astfel am realizat într-un *singur* nanofir fizica caracteristică pentru un sistem cu dublă joncțiune supusă unui câmp magnetic. Am explorat structura energetică a joncțiunii prin calculul de curent critic.

Act 1.3 – Model semiclassical pentru curentul Josephson în joncțiuni

În această activitate ne-am concentrat pe regimul în care curentul este transmis pe la marginea punții joncțiunii prin orbitalii localizați pe atomii de Mo și S. Transportul în volumul punții este blocat datorită faptului ca potențialul chimic este în banda interzisă. Modelul semiclassical descrie perfect transportul în mijlocul benzii interzise, însă el poate fi folosit mai departe și pentru a interpreta semnalul SQUID din apropierea benzii de conducție [vezi Fig. 2(b)].

Act 1.3.1 – Semnal SQUID în curent Josephson la mijlocul benzii interzise

Când potențialul chimic este aproape de mijlocul benzii interzise, există o suprapunere în spațiul energetic între benzile electronice datorate conducției prin orbitalii S (*t*) și orbitalii Mo (*b*). Dispersia are un caracter parabolic, ceea ce

permite un calcul analitic. Hamiltonianul efectiv pentru cele dinamice electronilor pe cele două laturi ale nanofirului (t și b) este:

$$H_{t,b} = \sigma_0 \left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{t,b}} - \mu_{t,b} \right) + \sigma_z \alpha_{t,b} k_x + \sigma_z E_Z.$$

El include efectele câmpului magnetic în energia Zeeman E_Z precum și în vectorul de undă k_x . În aproximația cuplajului minimal $k_x \rightarrow k_x - eBy/\hbar$. Efectul cuplajului spin-orbită este cuprins în parametrii α specifici pentru banda convexă și banda concavă. Masele efective ale celor două modele sunt diferite pentru cele două laturi, cu masă negativă pentru latura b . Spinul electronic este modelat de matricile Pauli σ . Spectrul este ajustat cu metoda celor mai mici pătrate pe spectrul TB, astfel încât toți parametrii din modelul efectiv sunt fixați cu valori fizice relevante. Supraconductibilitatea este introdusă la fel ca în modelul TB descris mai sus.

Soluția analitică se bazează pe o aproximație semiclassicală a modelului efectiv. În această metodă sunt neglijate oscilațiile rapide ale funcției de undă cu un vector de undă de mărimea impulsului Fermi. În acest caz putem rezolva problema SNS printr-o linearizare a ecuațiilor la nivelul Fermi [7]. Linearizarea face posibilă rezolvarea setului de ecuații obținut din condiția de consistență și produce un set de patru ABS:

$$E_{s\sigma} = \Delta \left| \cos \left(\frac{\phi}{2} - \frac{seBLW}{2\hbar} + \frac{\sigma E_Z L}{\hbar v_{s\sigma}} \right) \right|.$$

Indicele σ denotă proiecția spinului, iar s , latura (t sau b) populată de ABS. Acest rezultat indică contribuțiile diferite ale câmpului magnetic în transportul cuantic prin joncțiune. Efectul Zeeman (cuprins în termenul E_Z) ridică degenerarea de spin a stărilor Andreev. El depinde crucial de vitezele Fermi pozitive $v_{s\sigma}$ pentru dispersia energetică la cele două laturi ale nanofirului. Efectul depinde de lungimea canalului de transport L de la marginea punții. În contrast, efectele orbitale ale câmpului ($\sim BLW$) depind de aria totală a punții Josephson LW , și se dovedesc dominante în joncțiunea noastră. Această soluție analitică este comparată cu modelul TB efectiv.

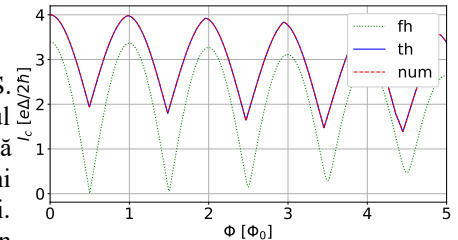


Fig. 3: Variația curentului critic în (th) modelul semiclassical comparată cu (num) modelul efectiv numeric la $T=0$, și (fh) la temperatură mare

Cu ajutorul ABS calculăm curentul Josephson și extragem valoare lui critică în funcție de fluxul magnetic. Am obținut atât curentul la temperatura zero, caracteristic pentru simulările TB, precum și curentul la temperatură mai mare decât banda interzisă supraconductoare. Am obținut dependența curentului critic în funcție de flux la orice valoare a potențialului chimic lângă $\mu = 0$. Pentru a exemplifica, prezentăm în Fig. 3, rezultatele la potențial chimic zero.

Rezultatele obținute explică variația de tip SQUID observată anterior în Fig. 2(b). Rezultatele indică că structura de tip SQUID este datorată în principal efectelor orbitale ale câmpului magnetic. Efectele Zeeman induc o variație cu o perioadă mai mare a semnalului. Sub efectul Zeeman, curentul critic descrește extrem de lent de la valoarea maximă la flux zero (cf. Fig. 3). La temperatură mare, obținem aceeași concluzie privitor la efectele magnetice, dar variația curentului este cantitativ diferită. Temperatura netezește discontinuitățile prezente în curentul de temperatură zero și tinde la o structură pur sinusoidală dată de prima armonică din descompunerea Fourier a curentului de temperatură zero.

Trebuie să notăm în final că efectele orbitale ale câmpului magnetic depind de vitezele Fermi, care nu depind de spin pentru modelul semiclassical efectiv. Independența de spin este un atribut strict al dispersiei energetice parabolice. Vom vedea că dependența de spin a vitezelor Fermi pentru stările de lângă banda de conducție va explica de bruiajul semnalului SQUID în acel regim de parametrii.

Act 1.3.1 – Semnal SQUID în curent Josephson în apropierea benzii de conducție

Acum vom explica rezultatele pentru oscilațiile de tip SQUID observate în Fig. 2(b) aproape de banda de conducție. În acest caz avem din nou un set de atomi S pe latura t și Mo pe latura b a punții. Spre diferență de cazul studiat anterior banda de Mo este convexă, cu masă efectivă pozitivă. Dispersia benzii deviază puternic de la parabolicitate. Datorită efectelor de spin-orbită benzile pentru spinii \uparrow și \downarrow sunt decalate puternic în zona Brillouin. Aproape de 0.6 eV, benzile de Mo au inflexiuni care duc la viteze Fermi apropiate de zero. Aceasta afectează duce la dominația efectului Zeeman ($\sim 1/v_{s\sigma}$) și bruiază semnalul SQUID la acele energii.

În concluzie curentul critic permite investigarea detaliilor ce țin de structura electronică fină a stărilor de margine din nanofire MoS₂ folosite în joncțiuni Josephson. În plus, am propus ca studii de interferență cuantică în dispozitive cu dublă joncțiune să fi realizate într-o singură joncțiune Josephson din TMD prin control asupra potențialului chimic în sistem.

[1] S. Manzeli, *et. al*, Nat. Rev. Mater. **2**, 17033 (2017); [2] E. Cappelluti, *et al*, Phys. Rev. B **88**, (2013); [3] J. Silva-Guillén, Appl. Sci. **6**, 284 (2016); [4] C.W. Groth, *et al*, New J. Phys. **16**, 063065 (2014); [5] Y. Saito, *et al*, Nat. Phys. **12**, 144 (2016); [6] D. Costanzo, *et al*, Nat. Nano. **11**, 339 (2016); [7] S.V. Mironov, *et al*, Phys. Rev. Lett. **114**, 227001 (2015).

Act 1.4 – Diseminare

- Articol: D. Sticlet, P. Wójcik, and M. P. Nowak, [Phys. Rev. B **102**, 165407 \(2020\)](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.165407).
- Elaborare de site pentru proiect: www.itim-cj.ro/pncdi/te98/

Director de proiect
Doru Sticlet