

# Raport științific

Cod depunere: PN-III-P1-1.1-TE-2019-04233

Proiect: 2DTMD

Contract: TE98

Etapa 3

## Cuprins

Rezumatul etapei.....	2
Obiectiv 2.....	2
Act 3.1 și 3.2.....	2
Modele efective TMD + CDW + supraconductibilitate.....	2
O impuritate magnetică.....	3
Lanțuri de impurități magnetice.....	5
Extensii.....	7
Obiectiv 3.....	10
Act 3.3.....	10
Model teoretic.....	10
Metode numerice.....	11
Rezultate.....	12
Extensii.....	14
Act. 3.4. Diseminare.....	16
Publicații.....	16
Prezentări orale.....	16
Postere.....	16
Concluzii generale la proiectul 2DTMD.....	16
Bibliografie.....	17

## Rezumatul etapei

În această etapă am tratat obiectivele 2 și 3 din proiect. La obiectivul 2 am considerat modele efective pentru banda de conducție NbSe<sub>2</sub> incluzând un potențial CDW care modifică local potențialul chimic în sistem. Am considerat modelul în faza supraconductoare și am introdus impurități magnetice în sistem. Am calculat stările de impuritate Yu-Shiba-Rusinov (YSR sau Shiba) induse în banda interzisă supraconductoare. Am studiat modul în care potențialul CDW influențează evoluția acestor stărilor Shiba. Am considerat apoi structuri liniare de impurități pentru a vedea dacă stări Majorana sunt induse în sistem. În final am considerat o extensie a problemei la situația în care impuritățile sunt nehermitice.

La obiectivul 3, am considerat modele efective dublu strat pentru materiale bidimensionale de tip dicalcogenuri de metale și am estimat efectul variației unghiului de rotație asupra curentului critic din model. Am construit două tipuri de rețele efective pentru o joncțiune Josephson din TMD și am calculat curentului critic în model. Am obținut periodicitatea curentului critic în funcție de unghiul de rotație. Am demonstrat existența de oscilații periodice la unghiuri mici, în contrast cu un curent aproape constant la unghiuri mari. În final am lucrat la extensii unde am elaborat teoria și inițiat calcule pentru a vedea dacă este posibilă formarea de vortexuri de fază supraconductoare la unghiuri mici, unde funcțiile de undă Bloch depind slab de poziție.

## Obiectiv 2

Determinare efectelor de undă de densitate de sarcină în joncțiuni Josephson din NbSe<sub>2</sub>.

### Act 3.1 și 3.2

3.1. Adăugarea de impurități magnetice în NbSe<sub>2</sub> ca spini clasici. Determinarea efectului undei de densitate de sarcina asupra stării induse de o singura impuritate. Determinarea structurii electronice a benzii YSR datorata cuplajului la mai multe impurități.

3.2. Determinarea diagramei de faza topologice a sistemului. Dacă apar moduri legate Majorana în sistem ele vor fi determinate fie prin diagonalizare exacta, fie prin integrarea integrarea zonei Brillouin în limita în care stările YSR se formeaza aproape de energia Fermi.

Primul pas este de a reconsidera substratul de TMD pe care adaugăm impurități magnetice.

#### *Modele efective TMD + CDW + supraconductibilitate*

Pentru a simula efectele densității de sarcină folosim un Hamiltonian de tip [vezi Raport 2021]

$$H = H_{\text{TMD}} + H_{\text{CDW}}, \quad H_{\text{CDW}} = \sum_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}}^{\dagger} V(\mathbf{r}) c_{\mathbf{r}},$$

unde  $H_{\text{TMD}}$  este hamiltonianul ce modelează benzile electronice pentru TMD [1], iar  $H_{\text{CDW}}$  modelează efectul interacțiunii cu fononii, care generează distorsiuni de tip CDW. Potențialul efectiv datorat fononilor este [2,3]

$$V(\mathbf{r}) = V_0 \left[ 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}q}{2}(x - x_0)\right) \cos\left(\frac{q}{2}\right) + \cos(q(y - y_0) + \phi_3) \right],$$

Pozițiile atomilor sunt descrise de coordonatele  $(x, y)$ , cu  $(x_0, y_0)$  o deviație de la comensurabilitate indusă de CDW,  $\phi_3$  o fază totală și  $qa = 4\pi/3\sqrt{3}$  distanța de la centrul zonei Brillouin la unul din punctele  $K$ . Luăm în simulări  $(x_0, y_0) = (0.5, 0.5)a$ ,  $\phi_3 = 0.5$ , cu  $a = 0.334$  nm. Deoarece modelul NbSe<sub>2</sub> fără efecte CDW este invariant la translație, am scris Hamiltonianul în spațiul impulsului  $\mathbf{k}$ , unde avem operatori de creație și anihilare,  $c_{\mathbf{k}}^\dagger$  și  $c_{\mathbf{k}}$  cu structură spinorială și care acționează în spațiul matricilor Pauli  $\sigma$ . Energia cinetică a electronilor  $\xi_{\mathbf{k}}$  și termenul de cuplaj spin-orbită Ising  $g_{\mathbf{k}}$  au fost listate în trecut Raportul trecut.

Acum considerăm adițional efectul supraconductibilității în aproximația câmpului mediu. Din experimente, considerăm o bandă interzisă  $\Delta$  supraconductoare uniformă în spațiu de aproximativ 1 meV. Hamiltonianul total are forma Bogoliubov-de Gennes pentru un semiconductor de undă  $s$ . O impuritate magnetică se va cupla cu orbitali de tip  $d$  care provin de la atomul de Nb și care domină la energia Fermi. Astfel putem simplifica modelul electronilor legați puternic prin a modela doar rețeaua triunghiulară de Nb.

### O impuritate magnetică

Pentru început considerăm o singură impuritate magnetică de spin  $S$  cu spin pe direcția  $z$ . Pentru o singură impuritate, am verificat că doar amplitudinea spinului este importantă și nu proiecția lui (cum era de așteptat din simetria problemei). Impuritatea magnetică este poziționată între oricare 3 atomi de calcogen de la suprafața TMD, deci deasupra atomilor de Nb. Hamiltonianul este astfel complementat cu un termen  $-JS c_{j\alpha}^\dagger \sigma_z^{\alpha\beta} c_{j\beta}$ , unde  $j$  denotă poziția impurității.  $JS$  este o energie de schimb în problemă și va fi luată ca un parametru unic care poate fi variat până la fracțiuni de eV. Impuritatea magnetică distruge local simetria de inversie temporală astfel încât este un centru de împrăștiere care poate distruge perechile Cooper. Excitațiile de cvasiparticulă pot ocupa astfel stări localizate în banda interzisă supraconductoare [4,5]. Subiectul central în cele ce urmează este determinarea energiei acestor stări Shiba cu variația poziției lor, a cuplajului dintre impuritate și substrat, și potențialului CDW.

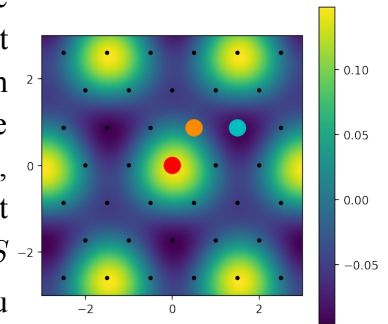


Fig. 1. Trei poziții caracteristice pentru o singură impuritate (roșu) [0,0], (portocaliu) [0,1] și (cian) [1,1].

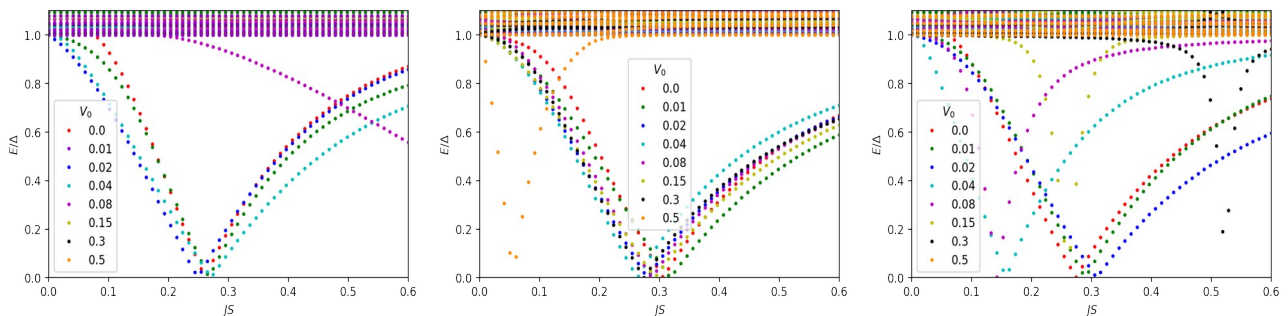


Fig. 2. Energia stării Shiba pentru o singură impuritate magnetică pentru diferite amplitudini  $V_0$  și 3 poziții ale impurității: (dreapta) [0,0], (centru) [0,1], (stânga) [1,1] exprimate în baza vectorilor primitivi ai rețelei. [ $V_0$  și  $JS$  în eV].

Nu orice poziție este echivalentă datorită potențialului efectiv  $V$ . Pentru calcule am considerat rețele de dimensiuni diferite pentru a ne asigura că efecte de margine nu influențează

spectrul stărilor Shiba. Pentru rezultatele finale am folosit o rețea pătrată cu 4105 atomi de Nb cu o impuritate de spin în zona centrală. Figura 1 reprezintă un zoom la centrul rețelei unde considerăm trei poziții relevante pentru impuritate: aproape de un maxim de  $V$  (roșu), de un minim de  $V$  (cian) și la  $V$  aproape 0 (portocaliu). Pozițiile impurităților pot fi exprimate în funcție de vectorii primitivi rețelei subiacente:  $\mathbf{a}_1 = (1, 0)a$  și  $\mathbf{a}_2 = (1, \sqrt{3})a/2$ . Astfel  $[m, n] \equiv m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$ .

În Fig. 2 am obținut cu algoritmul Lanczos spectrul pentru cele mai joase 16 excitații de la energia Fermi a stării nesupraconductoare pentru trei poziții caracteristice ale impurității magnetice [vezi Fig. 1]. Am calculat 60 de valori pentru  $JS$  până la 0.6 eV pentru 8 valori posibile de  $V_0$  până la 0.5 eV. Este de notat că aceste scări energetice sunt de aproximativ 100 de ori mai mari ca  $\Delta$  și cu toate acestea stările Shiba sunt aproximativ robuste. Observăm că în absența potențialului CDW, tranziția cuantică are loc aproape de  $JS$  la 0.25 – 0.3 eV. Variația pentru cele trei poziții este datorată doar efectelor de rețea finită. La potențiale  $V_0$  de doar 10 ori mai mari ca  $\Delta$ , nu se modifică mult tranziția cuantică. Surprinzător, la  $V_0$  foarte mare este posibil ca starea Shiba să revină în gap după cum vedem în Fig. 2(centru și dreapta). Aceasta însă produce stări Shiba într-un interval mic de energie de schimb  $JS$ .

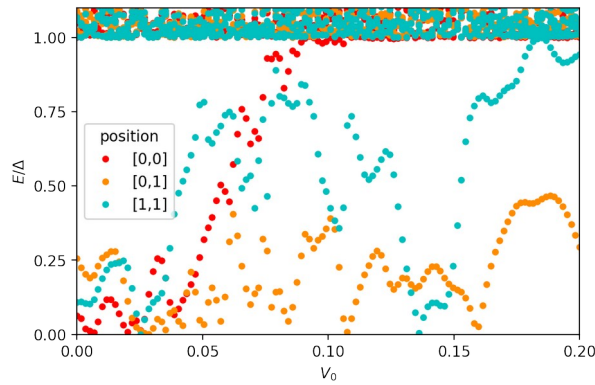


Fig. 3. Evoluția stărilor Shiba la  $JS = 0.25$  eV în funcție de potențialul CDW  $V_0$  (în eV) pentru 3 poziții ale impurității date în baza vectorilor primitivi  $\mathbf{a}_1$  și  $\mathbf{a}_2$ .

Pentru a urmări mai îndeaproape evoluția stărilor Shiba ne concentrăm pe o singură valoare a energiei de schimb  $JS = 0.25$  eV, care în mod normal induce o stare profundă de impuritate, aproape de mijlocul benzii interzise, în absența potențialului CDW. Apoi variem lent  $V_0$  și urmărim pentru 3 poziții de impuritate spectrul energetic. Rezultatele sunt prezente în Fig. 3.

Am obținut că potențialul efectiv CDW  $V$  are efecte detrimental pentru stările Shiba și poate împinge energia stărilor în continuul de cvasiparticule dinafara benzii interzise în funcție de poziția impurității pe substrat. În Fig. 3 vedem cum un potențial de aproximativ  $V_0 \simeq 0.08$  eV este suficient pentru a elimina din banda interzisă starea Shiba pentru o impuritate la  $[0,0]$ . Aceasta deoarece impuritatea la poziția  $[0,0]$  este apropiată de un maxim de potențial. În contrast, o impuritate la  $[0,1]$  este aproape de un nod de zero al potențialului, astfel încât este influențată slab de el. În consecință starea Shiba este robustă și rămâne în banda interzisă pentru valori mari  $V_0$ . Impuritatea de la  $[1,1]$  este aproape de un minim al potențialului, dar cum este totuși în amplitudine la o energie mai mică ca cea din  $[0,0]$ , starea rămâne mai mult timp în banda interzisă.

Aceste rezultate anunță că realizarea stărilor de tip Majorana va fi puternic influențată de potențialul CDW. Pentru un potențial ce oscilează pe lungimi de undă comparabile cu pasul de rețea, este de așteptat că un lanț de impurități va trece statistic prin mai multe maxime sau minime de potențial. Astfel potențialul ridică de la energia zero nivelele de impuritate și va bloca cuplajul dintre impurități necesar pentru stabilizarea stărilor Majorana la margine de lanț.

## Lanțuri de impurități magnetice

Pentru a verifica explicit această ipoteză, includem acum mai multe impurități în model și

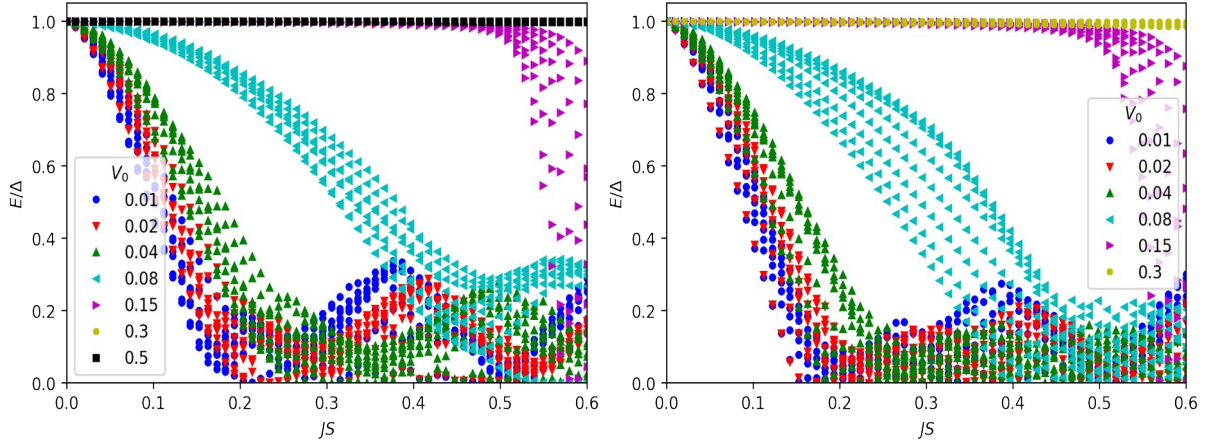


Fig. 4. Spectrul primelor 16 energii pentru un lanț de 40 impurități magnetice polarizate în  $\sigma_x$  (dreapta) și  $\sigma_z$  (dreapta) la diferite valori de potențial  $V_0$ . [ $V_0$  și  $JS$  în eV].

urmărim modul în care potențialul CDW afectează formarea stărilor Majorana. Pentru aceasta alegem un lanț de impurități feromagnetice așezate pe axa  $x$ , dar cu polarizarea considerată un parametru liber în simulare. Impuritățile sunt depuse la o distanță de  $3a$  unele de altele. Totodată mărim artificial banda interzisă la 10 meV, astfel încât lungimea de coerență supraconductoare este redusă de la  $\xi \simeq 700a$  la  $70a$ . Astfel funcțiile de undă pentru stările legate au un suport compact pe suprafața care poate fi simulată, încât sunt diminuate unele efecte de margine care ridică energia stărilor de lângă energie zero. În practică folosim o rețea de  $140 \times 70$  situri cu 40 de impurități pe axa  $x$ , ceea ce este suficientă pentru a stabili stări Majorana la capete de lanț la  $V_0 = 0$ .

Pentru a studia efectele CDW considerăm un set de potențiale  $V_0$  pentru care scanăm energii

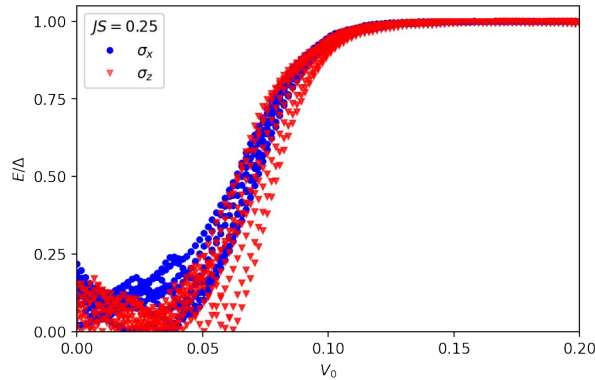


Fig. 5. Evoluția spectrului cu  $V_0$  pentru primele stări energetice de lângă energie zero, pentru două polarizări a lanțului de impurități.

de schimb  $JS$  mari până al 0.6 eV. Observăm rezultate marcante în Fig. 4 pentru două polarizări de spin ale lanțului magnetic, pe  $\sigma_x$  sau  $x$  și  $\sigma_z$  sau  $z$ . Pentru polarizare pe axa  $z$ , banda interzisă este închisă de stările Shiba, și în absența lui  $V_0$ . Aceasta deoarece spinul acestor stări este paralel cu spinul Ising  $z$  impus de termenul spin-orbită. Din considerente de simetrie și o polarizare pe  $y$  va fi caracterizată de închiderea benzii supraconductoare datorită faptului că termenul spin orbită este zero pe  $y$  și pe rotații ale axei  $y$  cu  $2\pi/3$ . În Fig. 4(dreapta) vedem cum cele mai joase stări Shiba

coboară în energie în funcție de  $JS$  și închid banda interzisă la o energie  $JS$  cu atât mai mare cu cât potențialul  $V_0$  este mai mare. Această evoluție este generică, cu potențialul  $V_0$  având astfel o influență detrimentală în formarea stărilor Majorana. În contrast, o polarizare pe  $\sigma_x$  a impurităților dă faze topologice robuste la  $V_0 = 0$  cu o tranziție în faza cu stări Majorana în jur de  $0.25$  eV. Separația maximă față de restul stărilor este de aproximativ  $0.2\Delta$ . Inclusiv pentru această polarizare  $V_0$  este extrem de detrimental formării stărilor Majorana [vezi Fig. 4(stânga)]. Efectul principal este de a muta punctul de tranziție la valori nefizic de mari pentru energia de schimb  $JS$ . Deja pentru un potențial de  $V_0 = 0.15$  eV tranziția este mutată la  $JS \simeq 0.6$  eV.

O altă măsură a efectelor detrimentale ale  $V_0$  este de a urmări evoluția stărilor de energie cu variația  $V_0$ . Pentru asta fixăm cuplajul de schimb la  $JS = 0.25$  eV, aproape de tranziție, unde stările sunt la energie joasă. Un potențial  $V_0$  moderat ridicată rapid stările de la energie 0 [vezi Fig. 5]. Indiferent dacă stările de energie sunt de tip Majorana pentru polarizare  $\sigma_x$  sau stări Andreev pentru polarizare  $\sigma_z$ , ele sunt împinse rapid în continuul de cvasiparticule deasupra lui  $\Delta$  în pentru  $V_0 \simeq 0.1$  eV.

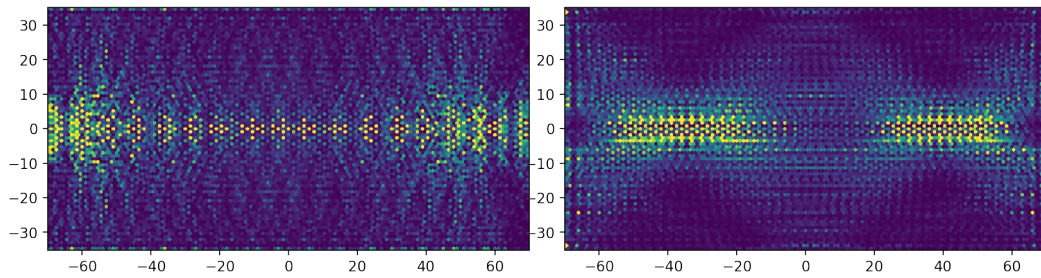


Fig. 6. Amplitudinea funcției de undă la pătrat pentru starea cea mai joasă în energie la  $JS = 0.25$  eV. (Stânga)  $V_0 = 0$  eV și (dreapta)  $V_0 = 0.05$  eV. 40 de impurități polarizate în  $\sigma_x$  sunt dispuse orizontal pe axa  $x$ . Axele sunt în unități de constantă de rețea.

Distrugearea stărilor Majorana poate fi observată și în densitatea de stări (DOS). De exemplu considerăm în figura 6 amplitudinea funcției de undă la pătrat (proporțională cu DOS) reprezentată spațial în sistemul simulat de noi. Impuritățile sunt polarizate în  $\sigma_x$ , care este configurația cea mai favorabilă pentru realizarea de stări Majorana. Pentru o energie de schimb fixată  $JS = 0.25$  eV, aproape de tranziția cuantică în faza topologică, observăm în absența CDW în Fig. 6(stânga) acumularea densității de stări la capetele firului de impurități, caracteristic stărilor Majorana. Energia stării este aproape zero, și, datorită apropierii de tranziție, are totuși o extensie de-a lungul lanțului de impurități. Situația este extrem de diferită la introducerea unui potențial CDW mic  $V_0 = 0.05$  eV în Fig. 6(dreapta). Energia stării este ridicată de la 0, dar rămâne profundă în banda interzisă la aproximativ  $0.1\Delta$ . Cu toate acestea se poate observa clar cum amplitudinea devine distribuită pe 2/3 din lanțul de impurități, devenind astfel delocalizată. Stările Majorana au fost astfel complet hibridizate și distruse de potențialul CDW.

Concluziile finale ale studiului sunt astfel negative privitor la formarea stărilor Majorana. Potențialul CDW distruge simetria de translație pe direcția lanțului de impurități și diminuează cuplajul între stările Shiba. Stările induse la capăt de lanț în absența potențialului CDW, sunt ridicate în energie în prezența lui. Doar pentru valori extrem de mici ale potențialului putem considera că are un efect perturbativ asupra rezultatelor din obținute în [1], astfel încât să putem vorbi de persistența stărilor Majorana la energii rezonabile de schimb  $JS$ .

## Extensii

Prezența stărilor Shiba este un rezultat general al prezenței impurităților magnetice într-un supraconductor. Una dintre direcțiile în care putem extinde prezenta problemă este cea a sistemelor deschise unde funcțiile de undă au o evoluție neunitară sub un Hamiltonian nehermitic. Echipa de TE a lucrat și în această direcție cu rezultate raportate la articole. În aceste condiții, o idee naturală este de a extinde studiul despre TMD-uri supraconductoare cu impurități magnetice, la cazul în care ori supraconductorul, ori impuritatea este nehermitică. Acesta poate fi cazul când sistemul evoluează conform unei ecuații de tip Lindblad [6] sub condiția de monitorizare continuă a stării sistemului [7]. Deoarece o structură electronică de tip TMD este destul de complicată, am început prin a considera modele efective unidimensionale pentru a vedea, pe cât posibil analitic, modul în care nehermiticitatea afectează energiile și stările sistemului.

Pentru început considerăm un Hamiltonian de tip Kondo pentru sistemul în starea metalică normală

$$H_N = \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{k}' \\ \alpha\beta}} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger (\varepsilon_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\alpha\beta} + \frac{V}{N} \delta_{\alpha\beta} - \frac{J}{N} \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{S}) c_{\mathbf{k}'\beta},$$

unde avem operatori  $c$  de anihilare de electroni cu impuls  $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$  și proiecție de spin  $\alpha, \beta = \pm$ . Am considerat impurități puternic localizate, modelate cu funcția Dirac delta. Impuritățile induc un potențial scalar  $V$  și un cuplaj spin-spin între spinul  $\mathbf{S}$  al impurității și spinul  $\boldsymbol{\sigma}$  al electronilor de conducție. Împrăștierea de două particule pe impuritate poate genera atât pentru  $V$  și pentru  $J$  o parte imaginară [8],  $V = V_1 + iV_2$  și  $J = J_1 + iJ_2$ . Sistemul este răcit până când intră într-o fază supraconductoare caracterizată de un parametru de ordine de undă  $s$ . La nivel de câmp mediu avem o bandă interzisă supraconductoare uniformă  $\Delta$ , care caracterizează energia necesară ruperii unei perechi Cooper.

Problema pe care o avem de rezolvat este de a defini efectul impurității asupra densității de stări cu metodele obișnuite. Un calcul naiv, perturbativ de tip matrice  $T$  are nevoie de funcțiile Green, care acum devin neanalitice, neholomorifice, și pot avea poli împrăștiați în tot planul complex. Pentru a rezolva problema pornim de la densitatea de stări  $\rho$  în plan complex [9]

$$\rho(z) = \frac{1}{N} \sum_j \delta(x - x_j) \delta(y - y_j) = \frac{1}{\pi N} \bar{\partial} \text{tr} G(z), \quad G(z) = \frac{1}{z - H}.$$

Am descompus orice număr complex  $z_j = x_j + iy_j$ , unde  $j$  enumeră toate energiile din sistem. Această densitate se obține din derivata antiholomorfică a funcției Green  $G$ , care este determinată de Hamiltonianul total  $H$ . Pentru a face calculul mai transparent considerăm că spinul impurității este orientat pe axa  $z$  și potențialul scalar  $V = 0$ . Folosind Hamiltonianul  $H$  pentru sistemul total,

$$\rho(z) = \frac{1}{\pi} [G_0(z, \mathbf{0}) + \frac{1}{N} G_0(z, \mathbf{0}) \frac{1}{1 + JS\sigma_3 G_0(z, \mathbf{0})} JS\sigma_3],$$

unde avem funcția Green liberă aproximată:

$$G_0(z, \mathbf{0}) = -\pi\rho_0 \frac{z + \Delta\tau_1}{\sqrt{\Delta^2 - z^2}}, \quad |x| < \Delta,$$

în origine și în absența impurității, cu densitatea  $\rho_0$  la nivelul Fermi în metalul nesupraconductor. Acum putem obține din al doilea termen din densitatea de stări corecția la densitatea de stări  $\delta\rho$  datorată impurității magnetice:

$$\delta\rho(z) = \frac{1}{N\Delta^2} \left[ \delta\left(\frac{z}{\Delta} + \frac{1 - \alpha^2}{1 + \alpha^2}\right) + \delta\left(\frac{z}{\Delta} - \frac{1 - \alpha^2}{1 + \alpha^2}\right) \right].$$

Am notat cu  $\alpha = \pi\rho_0JS$  un parametru unic care caracterizează impuritatea cu spin  $S$  și cuplaj  $J$ . Din acest rezultat vedem imediat că există stări Shiba induse de impurități nehermitice, dar energiile stărilor Shiba date de  $z$  sunt în general complexe

$$\frac{z}{\Delta} = \pm \frac{1 - \alpha^2}{1 + \alpha^2}.$$

Ele vin în perechi și în funcție de  $JS$  migrează în planul complex. Pentru  $J$  real regăsim formula convențională a unui dublet de stări Shiba.

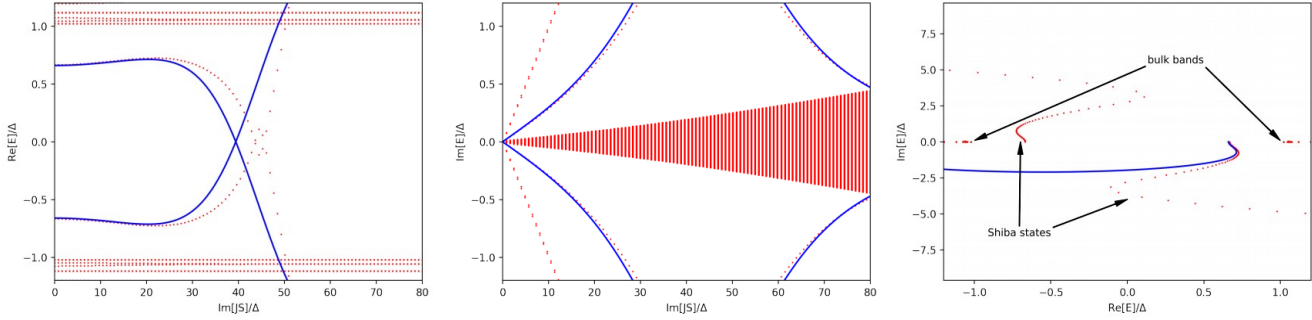


Fig. 7. Stări Shiba datorate unei impurități descrise de un constantă de cuplaj imaginară și spin  $S$  obținute analitic (linie albastră) sau numeric (puncte roșii). (Stânga) partea reală a spectrului la energii în banda interzisă, (centru) partea imaginară, și (dreapta) evoluția în plan complex a energiei cu creșterea  $\text{Im}[JS]$ . (Dreapta) Stările de volum sunt puțin influențate de  $J$  imaginară și rămân pe axa reală.

Verificăm numeric prin diagonalizare exactă a Hamiltonianului Bloch-Bogoliubov-de Gennes cu impuritate magnetică pentru a determina energia exactă a stărilor Shiba. Hamiltonianul model este

$$\mathcal{H}_{k,k'} = [(2t - \mu - 2t \cos(k))\tau_z + \Delta\tau_x]\delta_{kk'} + \frac{V}{N}\tau_z - \frac{JS}{N}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n},$$

unde am inclus explicit și matricile Pauli  $\boldsymbol{\tau}$  în spațiul Nambu. Absența unei matrici Pauli indică faptul că avem implicit identitate în spațiul spinului sau în spațiul Nambu. Diagonalizarea numerică permite acces la un regim în care calculul perturbativ analitic de mai sus nu este adecvat. Rezultatele numerice sunt expuse în Fig. 7. Am considerat o impuritate cu o constantă de cuplaj complexă cu o parte reală fixă  $J_1$ , și am variat partea imaginară  $J_2$ . Partea reală este suficient de mare pentru a avea la  $J_2 = 0$  stări Shiba Fig. 7(stânga).

Pentru valori mici ale constantei de cuplaj observăm cum energiile obținute numeric urmează îndeaproape calculul analitic. La valori mari, stările Shiba intră în continuul de stări de cvasiparticulă. Punctul în care cele două stări Shiba se intersectează la energie zero nu este precis bine de calculul analitic. Acest punct marchează o tranziție cuantică de fază în care starea fundamentală trece de la spin 0 la spin 1/2 [5].

În mod surprinzător, vedem cum la  $J$  imaginară puternică avem numeric două tranziții posibile în sistem, în loc de una prezisă analitic. Aceasta poate fi văzută în comportamentul energiilor Shiba în plan complex unde au un comportament nemonotonic [vezi Fig. 7(dreapta)]. Vedem cum partea imaginară a stărilor de impuritate devine mai mare decât banda interzisă supraconductoare, punct în care calculul analitic nu mai este valid. Partea lor reală se încrucișează la  $\text{Re}[E] = 0$ . Dar apoi în contrast cu predicția analitică, revin în aceeași parte a spectrului real, înainte de a se pierde în continuul de stări deasupra benzii interzise. Aceasta creează a doua tranziție  $\text{Re}[E] = 0$ . Acest comportament nemonotonic este un rezultat nou, care nu are încă o interpretare satisfăcătoare. Cu atât mai mult, lipsește pe moment un calcul analitic care să ilumineze această situație, astfel încât să fie clarificat tipul acestor duble tranziții de fază. O ipoteză ce rămâne de investigat este aceea că



comportamentul nemonotonic al stărilor Shiba este datorat unei energii imaginare care devine în amplitudine mai mare decât banda interzisă supraconductoare și nu mai poate fi considerată ca având un efect mic. Astfel influența ei nu este descrisă corect perturbativ în primele ordine cu matricea  $T$  (chiar dacă calculul a fost adaptat mai sus la modele nehermitice).

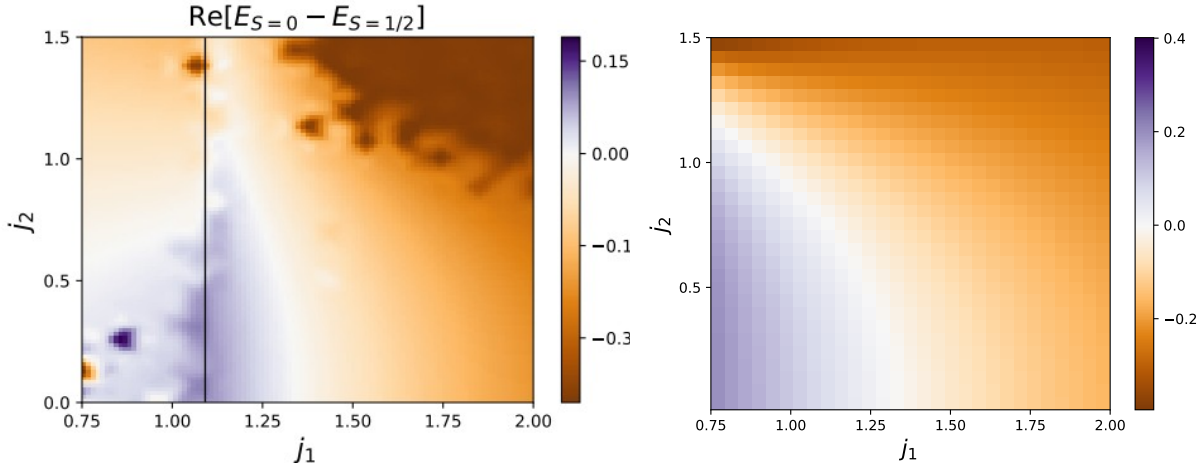


Fig. 8. Diagramă de fază pentru starea fundamentală obținută în TEBD (stânga) și din diagonalizare exactă în Hamiltonian BdG (dreapta) în planul cuplajului complex  $JS \propto j = j_1 + ij_2$ . Starea fundamentală de singlet domină la cuplaj  $|j_1 + ij_2|$  mic, iar cea de triplet la cuplaj mare cu o tranziție cuantică între ele.

Acest tip de calcul este acum extins pentru a obține o diagramă de fază în funcție de spinul stării fundamentale în sistem. La cuplaj  $J$  mic ne așteptăm ca starea fundamentală să aibă spin  $1/2$  datorită impurității magnetice. La cuplaj  $J$  mare, electronii de conducție ecranează impuritatea astfel că spinul devine  $0$ . Pentru a obține numeric starea fundamentală, efectuăm calcule de tip TEBD (Time Evolving Block Decimation) [10] în care determinăm energia stării fundamentale. Datorită sistemului nehermitic, stările au în general energii complexe, iar starea fundamentală o definim ca având parte imaginară negativă și partea reală cea mai mică dintre toate stările. În evoluția temporală în timp imaginar  $\tau = it$ , obținem de la orice stare inițială  $\psi$ , starea fundamentală a sistemului  $E_0$ ,

$$\langle E(t) \rangle = {}_L \langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle_R \simeq E_0 \frac{e^{-2i\text{Im}[E_0]\tau/\hbar}}{e^{-2i\text{Im}[E_0]\tau/\hbar}} = E_0,$$

unde  $L, R$ , denotă stări într-o bază biortogonală, stânga, respectiv dreapta. În mod similar după o evoluție lungă în timp determinăm starea fundamentală. În TEBD putem decide dacă starea de singlet sau dublet este starea fundamentală, luând partea reală a diferenței dintre energiile lor. Acest calcul este efectuat pentru diferite valori ale energie de schimb  $JS \propto j = j_1 + ij_2$ , unde  $j_1$  este partea reală și  $j_2$  partea imaginară, pentru a obține în Fig. 8(stânga) o diagramă de fază. Pentru comparație, diagrama de fază este obținută și din hamiltonianul BdG uniparticulă (Fig. 8 dreapta). La  $j$  real mic, calculele de TEBD necesită un timp extrem de lung pentru a converge corect, de aceea nu se observă acord între cele două diagrame de fază în acel regim, pentru calcule de durată relativ scurtă (de câteva zile) pe care le-am întreprins. În rest cele două diagrame de fază sunt calitativ asemănătoare. Ele sugerează continuare analitică corectă în plan complex a raționamentului obișnuit, cu starea de triplet determinând fizica la valori  $|j|$  mici, cu o tranziție cuantică la starea de dublet pentru valori mari de cuplaj, fie imaginar, fie real.

## Obiectiv 3.

Investigare de joncțiuni Josephson în dicalcogenuri dublu strat.

### Act 3.3

Introducerea superconductibilității în aproximația câmpului mediu. Caracterizarea joncțiunii Josephson în funcție de unghiul de torsiune. Determinare de curent critic în prezenta câmpului magnetic.

#### *Model teoretic*

În continuare vom obține un model semiclassical pentru tunelarea între două straturi de dicalcogenuri în funcție de unghiul de torsiune dintre cele două straturi. Modelarea ține seama de următoarele simplificări care fac modul adaptabil la o clasă largă de TMD-uri:

- considerăm dicalcogenuri cu distanță destul de mare între straturi astfel încât integralele de salt se efectuează generic doar între doi atomi plasați fiecare în straturi diferite.
- pentru fiecare atom putem considera o rază efectivă în jurul său în care poate exista tunelare de la un strat la altul.
- amplitudinea de tunelare este constantă în interiorul razei efective, și este neglijabilă în afara ei, conform unei amortizări exponențiale văzută experimental în integralele de salt. Această simplificare nu este esențială, deoarece se poate introduce ușor o variație a integralelor de salt în raza efectivă precum în [11]. Aceasta simplificare nu afectează decât cantitativ rezultatele noastre.
- neglijarea efectelor de interferență cuantică între salturi multiple de la același atom pentru raze efective de tunelare mari.

Acum discutăm în detaliu modelul. Pentru fiecare atom din rețea putem defini o rază efectivă  $r$  în care ar putea avea loc tunelarea. Această rază efectivă este determinată pentru fiecare structură în parte de către distanța dintre straturi și amplitudinea integralelor de salt între atomi din straturi diferite. Pentru diferite modele de TMD, integralele de salt trebuie calculate sau măsurate în parte. Datorită faptului că nu avem deocamdată acces date experimentale precise, vom considera în cele ce urmează că raza efectivă  $r$  este un parametru liber pe care îl variem liber ca să acoperim o plajă întreagă de valori posibile. Tunelarea dintre doi atomi în straturi diferite va fi proporțională cu secțiunea eficace în care poate avea loc tunelare  $A$ , dată de raza efectivă de tunelare  $r$  și distanța  $d$  dintre atomi în planul al materialului,  $A = 2r^2 \arccos(d/2r) - d\sqrt{r^2 - d^2/4}$ . Cu variația unghiului de torsiune  $\theta$  există variație a lui  $d$ .

Cele două straturi sunt într-o fază supraconductoare iar zona dintre straturi are rol de izolator, astfel încât putem vorbi de o joncțiune SIS. Supracurentul există datorită suprapunerilor funcțiilor de undă între cele două straturi [12]. Curentul critic în sistem depinde de densitatea de stări electronice accesibile, astfel încât e direct proporțională cu  $A$ . Astfel trebuie să calculăm teoretic curentul critic  $I_c$  proporțional cu secțiunea eficace totală de tunelare între straturi.

## Metode numerice

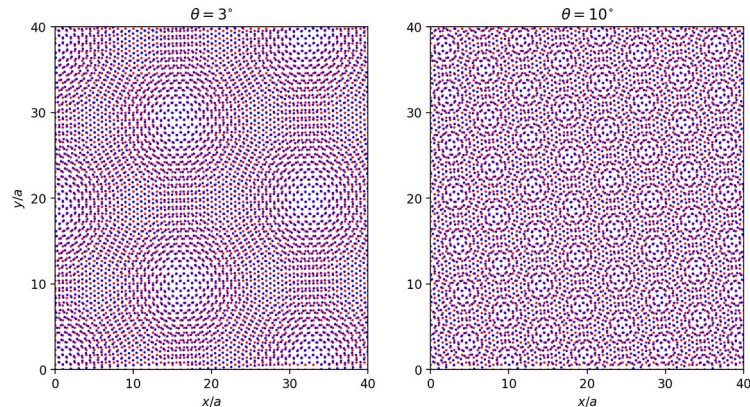


Fig. 9. Exemplu de rețele moiré formate la 2 unghiuri de rotație  $\theta$  între două rețele hexagonale desemnate cu puncte roșii, respectiv puncte albastre. Figurile conțin aproximativ 7500 de situri atomice, similar cu structura simulată.

Vrem să simulăm două straturi identice de dicalcogenuri la diferite unghiuri  $\theta$ . Deoarece integralele de salt sunt maxime între funcțiile de undă localizate pe atomi dintre cele două straturi, vom considera două tipuri de rețele pentru a modela moiré. În primul model vom considera rețele hexagonale formate din atomi de metal și atomii de calcogen aflați la interfață. Aceasta deoarece atomii de calcogen sunt spațial apropiați, iar atomii de metal domină conținutul orbital al stărilor de lângă banda interzisă semiconductor la  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$ ,  $\text{WS}_2$  etc. În al doilea model vom reține doar două rețele formate de atomi de metal dintre cele două straturi ținând cont de faptul că tunelarea va avea loc între orbitali  $d$  ai atomilor de metal. Această aproximație dă un model de două rețele triunghiulare.

Cele 2 straturi rotite formate din rețele de atomi sunt obținute cu un algoritm „flood and fill” (vezi Cod 1). Calculăm secțiunea eficace de tunelare între straturi calculând toate suprapunerile între ariile efective între atomii din cele două straturi, pentru diferite raze efective, și diferite rețele. La unghiuri foarte mici, celula unitate moiré are o constantă de rețea  $\sim a/\theta$ , unde  $a$  este constanta de rețea a unui singur strat. Astfel, la unghiuri extrem de mici, simularea prinde doar o fracțiune din celula unitate, și nu obținem informație suficientă. Exemple de supercelule moiré generate cu algoritmul numeric sunt prezentat în Fig. 9 pentru două unghiuri de rotație  $\theta$  și un model cu rețele hexagonale.

Simularea este efectuată pe un dublu strat de aproximativ  $1600a^2$ , care conține în cazul rețelelor hexagonale aproximativ 7500 de atomi. Pentru rețelele triunghiulare avem aproximativ 3800 atomi. Am obținut modele pentru 350 de unghiuri de rotație între 0 și  $\pi$ . Pentru a determina în detaliu fizica la unghiuri mici, majoritatea simulărilor sunt în acel regim, cu aproximativ 150 de geometrii pentru fiecare rețea pentru  $\theta \leq 0.17$  rad. Pentru fiecare geometrie calculăm curentul critic pentru 33 de raze efective de tunelare de la  $0.01a$  la  $1.5a$ . În practică reținem doar cazul razelor de tunelare mai mici de  $0.3a$ .

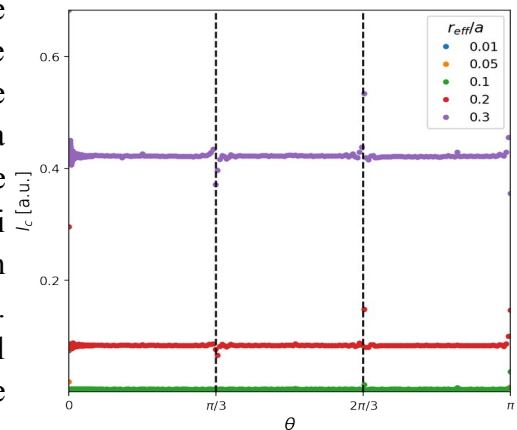


Fig. 10. Curent critic în unități arbitrare în funcție de unghiul de rotație variat între  $[0, \pi]$  în rețele hexagonale pentru 5 raze efective de tunelare.

```

function flood_fill(point0::Array{Float64}, rect::Array{Float64}, vecs::Matrix{Float64})::Array{Array{Float64}}
# algorithm to generate a hexagonal lattice starting from a point0 in a rectangular surface, with primitive vectors vecs
a1, a2 = vecs[:,1], vecs[:,2]
d = (2*a1-a2)/3 # location of the second atom in the unit cell
visited = Array{Float64}[]
Q = Array{Float64}[] # queue containing front of added atoms
push!(Q, point0)
while !isempty(Q)
    point = popfirst!(Q)
    if inside_area(point, rect) && !isin(point, visited) # introduce atom_A if is valid
        push!(visited, point)
        candidate_B = point+d
        if inside_area(candidate_B, rect)
            push!(visited, candidate_B)
        end
        # search for valid neighbors of atom_A
        for (n, m) in zip([1,1,0,-1,-1,0], [0,-1,-1,0,1,1])
            candidate_A = point + n*a1 + m*a2
            push!(Q, candidate_A)
        end
    end
end
return visited
end
function inside_area(point::Array{Float64}, rect::Array{Float64})::Bool
x, y = point
a, b, c, d = rect
return a <= x <= c && b <= y <= d
end
function isin(point::Array{Float64}, visited::Array{Array{Float64}})::Bool
for p in visited
    if isapprox(point, p, atol=.0001)
        return true
    end
end
false
end

point0 = [0., 0.]
rect = [0., 0., 40., 40.]
vecs = Float64[.5 1. ;.5*sqrt(3) 0.] # primitive vectors
atoms_1 = flood_fill(point0, rect, vecs)
layer1 = transpose(hcat(atoms_1...));
theta = deg2rad(3)
R = [cos(theta) -sin(theta); sin(theta) cos(theta)] # rotation matrix
vecs2 = R * vecs
atoms_2 = flood_fill(point0, rect, vecs2)
layer2 = transpose(hcat(atoms_2...));

```

Cod 1. Cod Julia dezvoltat pentru un algoritm „flood and fill” pentru generarea unei structurii moiré obținute din 2 rețele efective hexagonale pentru straturi de TMD (aici rotite la unghi de 3 grade).

## Rezultate

Pentru primul model considerăm rețele hexagonale. Investigăm raza efectivă de tunelare între atomi până la  $0.3a$ . Pentru unghiuri mari observăm divergențe așteptate la  $0$ ,  $\pi/3$ ,  $2\pi/3$  și  $\pi$ . Datorită simetriei rețelei hexagonale, pornind de la o suprapunere inițială a rețelelor, rețelele devin din nou perfect suprapuse la aceste unghiuri, care duce la o augmentare a curentului critic. O fizică similară este obținută pentru al doilea model din două rețele triangulare.

La unghiuri mari vedem cum  $I_c$  depinde slab de unghi, exceptând punctele de înaltă simetrie. Efectele interesante sunt căutate la unghiuri mici unde există celule moiré mari și unde au

fost raportate de exemplu supraconductibilitate în grafenă. În mod interesant observăm că spre diferență de grafenă un minim de curent se realizează la unghiul magic de  $1.1^\circ$  [11].

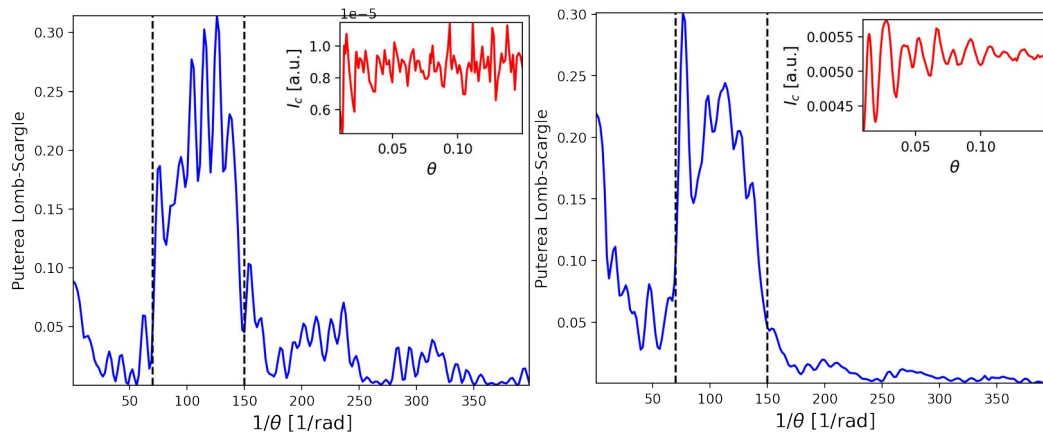


Fig. 11. Puterea spectrală Lomb-Scargle pentru curentul critic în foile rotite cu rază efectivă de tunelare (stânga)  $r = 0.02a$  și (dreapta)  $r = 0.1a$  pentru rețele hexagonale.

La unghiuri mici observăm un comportament aproape periodic cu oscilații în funcție de unghiul de rotație. Este de notat că unghiurile de rotație nu sunt prelevate uniform în simulări deoarece la unghiuri mici de interes au fost făcute măsurători adiționale. Deoarece avem o distribuție neuniformă a unghiurilor putem extrage perioada dominantă de oscilație cu ajutorul periodogramei Lomb-Scargle [13]. Analiza arată că majoritatea armonicilor care caracterizează perioada de oscilație pentru rețeaua hexagonală sunt determinate de o periodicitate în  $\theta$  între 0.38 și 0.82 grade. În Fig. 11 observăm două rezultate tipice la două raze efective despărțite de un ordin de magnitudine. În contrast, la unghiuri mari curentul este aproximativ constant ceea ce produce în periodogramă un maxim în origine (care corespunde unei perioade infinite în unghi).

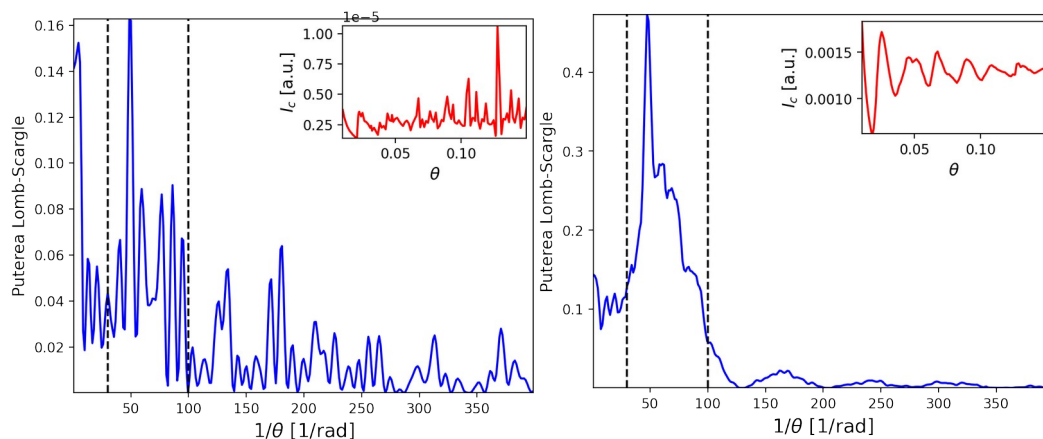


Fig. 12. Puterea spectrală Lomb-Scargle pentru curentul critic în foile rotite cu rază efectivă de tunelare (stânga)  $r = 0.02a$  și (dreapta)  $r = 0.1a$  pentru rețele triunghiulare.

Pentru rețele triunghiulare de atomi de metal avem rezultate similare, cu un curent critic aproximativ constant la unghiuri mari (modulo unghiurile corespunzătoare axelor de înaltă simetrie unde cele două rețele coincid), și oscilații caracteristice la unghiuri mici. Perioada de oscilație este mai mare ca în aproximația rețelelor hexagonale, cu periodicitate în unghi între aproximativ 0.55 și 1.9 grade, cum este evident din transferul de centrului de masă al puterii spectrale spre zero în Fig. 12, comparativ cu Fig. 11. Maximul este realizat pentru o periodicitate în unghi de aproximativ 1.14 grade.

În consecință, am analizat joncțiuni Josephson alcătuite din straturi suprapuse supraconductoare de TMD. Am formulat un model efectiv pentru tunelarea dintre cele două straturi care formează o joncțiune de tip SIS. Am prezis oscilații caracteristice la unghiuri mici de rotație în curentul critic în joncțiune. Acestea s-au dovedit universale pentru un model dat de rețea, independent de cât de efectivă este tunelarea între cele două straturi de TMD și independent de amplitudinea curentului critic.

## Extensii

Pentru superconductibilitate am considerat până acum că parametrul supraconductor este uniform și faza supraconductoare este unică în întreg sistemul. Însă sub influența modelului moiré ne întrebăm dacă este posibil să se formeze vortexuri de fază supraconductoare, în mod similar cum apar vortexuri în starea mixtă a supraconductorilor de tip II. Prezența acestor structuri va influența proprietățile joncțiunilor Josephson deoarece va fi modificată local diferența de fază între straturile TMD supraconductoare.

Pentru a trata această problemă, ideea noastră este de a trata cazul în care avem unghi mic între straturi astfel încât celula primitivă a modelului moiré este extrem de mare. Astfel spațial avem doar o dependență slabă a proprietăților sistemului față de poziție pe o scară care depășește cu mult distanța interatomică într-un strat. Deci se poate considera că funcțiile de undă Bloch în supercelula moiré depind perturbativ de poziție în interiorul ei. Aceasta sugerează posibilitatea de a trata semiclassical dinamica cvasiparticulelor din punct de vedere al fazelor Berry într-un spațiu mixt de impuls și poziție [14]. Acest tip de abordare a fost demonstrat în cazul texturilor magnetice netriviiale, de exemplu pentru skyrmioni, unde efectele de curbură Berry în energia liberă generează interacțiuni de tip Dzyaloshinskii-Moriya, care favorizează formarea lor [15].

În cazul nostru, vrem să calculăm cum depinde densitatea de energie liberă cu variația unghiului de rotație și dacă aceasta va favoriza formarea vortexurilor de fază. Pentru început va trebui să dezvoltăm formalismul care să permită răspunsul la această întrebare.

Vom începe cu un supraconductor uniform în care densitatea de stări de cvasiparticule depinde slab de gradient. Energia liberă  $\Omega$  este scrisă în funcție de densitatea de stări  $\rho(E)$ , la temperatura  $1/\beta$ ,  $\Omega = - \int dE \rho(E) \ln(1 + e^{-\beta E})/\beta$ . Densitatea de stări este determinată de partea imaginară a funcției Green retardate  $G$ . Funcția Green în reprezentarea Wigner va fi dezvoltată în serie în puteri de gradient, unde termenul inițial  $g$  este funcția Green liberă în care faza supraconductoare este constantă:

$$G = g + G_1 + G_2 + \mathcal{O}(\nabla^3).$$

Din relația de definiție  $G^{-1}G = 1$ , scrisă în reprezentarea Wigner, dezvoltăm termen cu termen în gradient pe  $G$  în funcție de un Hamiltonian  $h(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ , un Hamiltonian Bloch-Bogoliubov-de Gennes în care poziția și impulsul comută. Astfel putem determina primele corecții în gradient ale funcției Green. O reprezentare simplă diagramatică este accesibilă imediat. Găsim primele două corecții:

$$G_1 = \frac{i}{2} \eta_{mn} g h_m g h_n g \equiv \begin{array}{c} \times \\ \diagdown \quad \diagup \\ \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \end{array}$$

$$G_2 = \frac{1}{2} \times \begin{array}{c} \times \quad \times \quad \times \quad \times \quad \times \quad \times \\ \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \\ \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \\ + \\ \times \quad \times \quad \times \quad \times \quad \times \quad \times \\ \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \\ \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \end{array}$$

Fiecare săgeată plină corespunde funcției Green libere. Fiecare vertex corespunde aplicației Hamiltonianului Bloch  $h$ , iar fiecare  $x$  corespunde inserției lui  $\eta$ , care este un tensor complet antisimetric cu primul index în spațiul pozițiilor și al doilea index în spațiul impulsului. Astfel, în prima corecție, hamiltonianul este diferențiat cu  $m$ , un indice de poziție (deci  $G_1$  e liniară în gradient), și  $n$  un indice de impuls. În mod similar se poate citi și contribuția  $G_2$ .

Acum suntem interesați de prima corecție în gradient care marchează o instabilitate a sistemului spre ordine netrivială de fază. Considerăm un supraconductor unidimensional cu 4 benzi (cu grade de libertate de spin 1/2 și particulă-gol), cu spin-orbită de tip Rashba, cu o fază supraconductoare care depinde poziție  $\phi = 2qr$ . Benzile de cvasiparticule au energia

$$E_{ls} = -\frac{kq}{m} + s\alpha q + lE_s, \quad E_s = \sqrt{\left(\frac{k^2}{2m} + s\alpha k - \mu\right)^2 + \Delta^2},$$

cu  $l, s = \pm$ ,  $\alpha$ , amplitudinea cuplajului Rashba, impuls  $k$ , potențial chimic  $\mu$ , bandă interzisă  $\Delta$ , și masă  $m$ . Obținem după evaluarea diagramelor și a curburii Berry din fiecare bandă:

$$\Omega_1 = -\frac{1}{\beta} \sum_s \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\Delta^2}{E_s^3} [\ln(1 + e^{-\beta E_s}) + \beta E_s f(E_s)] \left(\frac{k}{m} - s\alpha\right) q,$$

cu  $f$ , funcția Fermi-Dirac. Datorită faptului că integrandul este impar la o schimbare de semn simultană în impuls  $k$  și  $s$ , rezultatul este zero. Acesta o putem arăta și pe un sistem cu fază  $\phi$  care este o funcție generală de poziție datorită proprietăților de paritate ale curburii Berry.

Acum luăm un model bidimensional unde calculele sunt mai dificile. Considerăm în cazul bidimensional avem un hamiltonian

$$h = \left(\frac{\mathbf{k}^2}{2m} - \mu\right)\tau_z + \alpha\tau_z(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \Delta\tau_x \cos(2\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) + \Delta\tau_y \sin(2\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}).$$

Energia liberă liniară în gradient de fază este

$$\Omega_1 = \frac{1}{2} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \sum_{nij} \eta_{ij} \left[ f(E_n) \delta E_{ij,n} + \frac{\Omega_{ij}^{(n)}}{\beta} \ln(1 + e^{-\beta E_n}) \right],$$

cu o corecție la energia benzilor  $\delta E$  și curbură Berry  $\Omega_{ij}^{(n)}$  în spațiul poziție-impuls pentru banda  $n$ :

$$\delta E_{ij,n} = \sum_m \frac{\text{Im}[\langle n | \partial_i H | m \rangle \langle m | \partial_j H | n \rangle]}{E_m - E_n}, \quad \Omega_{ij}^{(n)} = -2 \sum_m \frac{\text{Im}[\langle n | \partial_i H | m \rangle \langle m | \partial_j H | n \rangle]}{(E_m - E_n)^2}.$$

Calculul cantităților de mai sus poate fi redus la calculul urmei a 4 proiectori pe benzile de cvasiparticulă ai Hamiltonianului. Proiectorii pot fi factorizați în spațiul de spin și spațiul Nambu

$$P_{ls} = Q_{ls} \otimes R_s = \frac{1 + l\mathbf{n}_s \cdot \boldsymbol{\tau}}{2} \otimes \frac{1 + s(\boldsymbol{\sigma} \times \hat{\mathbf{k}}) \cdot \hat{\mathbf{z}}}{2},$$

cu  $l, s = \pm 1$ ,  $\mathbf{n}_s = \epsilon_s^{-1}(\Delta \cos \phi, \Delta \sin \phi, \xi_k + s\alpha k)$ , și energie

$$\epsilon_s = \sqrt{\left(\frac{k^2}{2m} + s\alpha k - \mu\right)^2 + \Delta^2}.$$

În energia liberă vom avea următoarea urmă de calculat:

$$\begin{aligned} T &= \sum_{\substack{l_1 l_2 l_3 l_4 \\ s_1 s_2 s_3 s_4}} \sum_{i=1,2} [Q_{l_1 s_1} R_{s_1} \partial_i (Q_{l_2 s_2}) R_{s_2} Q_{l_3 s_3} R_{s_3} (\partial_{k_i} Q_{l_4 s_4} R_{s_4} + Q_{l_4 s_4} \partial_{k_i} R_{s_4}) \\ &\quad - Q_{l_1 s_1} R_{s_1} (\partial_{k_i} Q_{l_2 s_2} R_{s_2} + Q_{l_2 s_2} \partial_{k_i} R_{s_2}) Q_{l_3 s_3} R_{s_3} \partial_i (Q_{l_4 s_4}) R_{s_4}] u(\epsilon), \\ u(\epsilon) &= \frac{l_2 l_4 s_2 s_4}{(\epsilon - l_1 \epsilon_{s_1})^2 (\epsilon - l_3 \epsilon_{s_3})}. \end{aligned}$$

După câteva linii de algebră putem dovedi că urma este nulă, ceea ce indică că nu există instabilități care să ducă la formarea de vortexuri de fază. Cauza acestui rezultat stă în simplificarea posibilă

datorită factorizării proiectoarelor separat în cele două spații, Nambu și spin. În faza următoare trebuie considerați Hamiltonieni mai complicați proprii structurilor de tip moiré în care factorizarea nu este posibilă. Corecțiile de ordinul unu în gradient în energia liberă vor fi calculați numeric.

## Act. 3.4. Diseminare

### Publicații

1. D. Sticlet, B. Dóra, C.P. Moca, *Kubo formula for non-Hermitian systems and tachyon optical conductivity*, [Phys. Rev. Lett. \*\*128\*\*, 016802 \(2022\)](#) [acceptată în 2021, publicată în 2022].
2. B. Dóra, D. Sticlet, C.P. Moca, *Correlations at PT-Symmetric Quantum Critical Point*, [Phys. Rev. Lett. \*\*128\*\*, 146804 \(2022\)](#).
3. L. Máthé, D. Sticlet, L.P. Zârbo, *Quantum transport through a quantum dot side-coupled to a Majorana bound state pair in presence of electron-phonon interaction*, [Phys. Rev. B \*\*105\*\*, 155409 \(2022\)](#) [depusă în 2021, acceptată în 2022].

### Prezentări orale

1. Levente Máthé, Phonon-assisted transport in quantum dot-Majorana wire systems, School on Exotic Superconductivity (exosup2022), 13-25 Iunie, 2022, Cargèse, Corsica, Franța (student talk).
2. D. Sticlet, *Non-Hermitian linear response and applications*, 20th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science (IBWAP 2022), Constanța, România, 12-15 Iulie, 2022.

### Postere

1. Levente Máthé, Doru Sticlet, Liviu P. Zârbo, Phonon-assisted transport in quantum dot-Majorana wire systems, School on Exotic Superconductivity (exosup2022), 13-25 Iunie, 2022, Cargèse, Corsica, Franța.
2. Levente Máthé, Doru Sticlet, Liviu P. Zârbo, Majorana induced phonon-assisted transport in asymmetrically coupled quantum dot nanodevices, International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing (QCMC 2022), 11-15 Iulie, 2022, Lisabona, Portugalia.

## Concluzii generale la proiectul 2DTMD

- În cadrul prezentului proiect 2DTMD au fost respectate normele de desfășurare ale activității și au fost atinse toate obiectivele propuse în contractul inițial.
- Au fost publicate 6 articole în zona roșie din care 2 în jurnale de impact mare (Phys. Rev. Lett.). Mai sunt încă 3 articole în pregătire.
- Au fost facilitate colaborări cu grupuri de cercetare din Polonia și Ungaria.
- Au fost asigurate stagii de pregătire și școli de vară de durată extinsă pentru membrii tineri din echipă.



## Bibliografie

- [1] D. Sticlet and C. Morari, *Topological Superconductivity from Magnetic Impurities on Monolayer NbSe<sub>2</sub>*, Phys. Rev. B **100**, 075420 (2019).
- [2] C.-S. Lian, C. Si, and W. Duan, *Unveiling Charge-Density Wave, Superconductivity, and Their Competitive Nature in Two-Dimensional NbSe<sub>2</sub>*, Nano Lett. **18**, 2924 (2018).
- [3] E. Liebhaber, S. Acero González, R. Baba, G. Reecht, B. W. Heinrich, S. Rohlf, K. Rossnagel, F. von Oppen, and K. J. Franke, *Yu–Shiba–Rusinov States in the Charge-Density Modulated Superconductor NbSe<sub>2</sub>*, Nano Lett. **20**, 339 (2020).
- [4] A. V. Balatsky, I. Vekhter, and J.-X. Zhu, *Impurity-Induced States in Conventional and Unconventional Superconductors*, Rev. Mod. Phys. **78**, 373 (2006).
- [5] B. W. Heinrich, J. I. Pascual, and K. J. Franke, *Single Magnetic Adsorbates on S-Wave Superconductors*, Prog. Surf. Sci. **93**, 1 (2018).
- [6] G. Lindblad, *On the Generators of Quantum Dynamical Semigroups*, Commun. Math. Phys. **48**, 119 (1976).
- [7] A. J. Daley, *Quantum Trajectories and Open Many-Body Quantum Systems*, Adv. Phys. **63**, 77 (2014).
- [8] M. Nakagawa, N. Kawakami, and M. Ueda, *Non-Hermitian Kondo Effect in Ultracold Alkaline-Earth Atoms*, Phys. Rev. Lett. **121**, 203001 (2018).
- [9] J. Feinberg and A. Zee, *Non-Hermitian Random Matrix Theory: Method of Hermitian Reduction*, Nucl. Phys. B **504**, 579 (1997).
- [10] G. Vidal, *Efficient Classical Simulation of Slightly Entangled Quantum Computations*, Phys. Rev. Lett. **91**, 147902 (2003).
- [11] R. Bistritzer and A. H. MacDonald, *Moiré Bands in Twisted Double-Layer Graphene*, Proc. Natl. Acad. Sci. **108**, 12233 (2011).
- [12] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, *Feynman Lectures on Physics, Vol. III: The New Millennium Edition Quantum Mechanics: Quantum Mechanics* (Basic Books, 2011).
- [13] J. T. VanderPlas, *Understanding the Lomb–Scargle Periodogram*, Astrophys. J. Suppl. Ser. **236**, 16 (2018).
- [14] D. Xiao, J. Shi, and Q. Niu, *Berry Phase Correction to Electron Density of States in Solids*, Phys. Rev. Lett. **95**, 137204 (2005).
- [15] F. Freimuth, R. Bamler, Y. Mokrousov, and A. Rosch, *Phase-Space Berry Phases in Chiral Magnets: Dzyaloshinskii-Moriya Interaction and the Charge of Skyrmions*, Phys. Rev. B **88**, 214409 (2013).

Director de proiect  
Doru Sticlet

