

Povzetek

Skripta iz predavanj za nanofiziko

Nanofizika

Jernej Mravlje

10. maj 2024

Kazalo

1 Preden začnemo	5
2 Uvod	7
3 Kvantni transport	9
3.1 Kvantizacija prevodnosti	9
3.1.1 Kvantni točkovni stik	11
3.1.2 2d elektronski plin	11
3.1.3 Kvantni točkovni stik	13
3.1.4 Elektronska stanja v idealnem vodniku	13
3.1.5 Balistični transport v idealnem vodniku	14
3.1.6 Vpliv sipalca v idealnem vodniku. Landaurjeva formula	16
3.1.7 Adiabatski opis kvantnega točkovnega stika	16
3.1.8 Sipalne matrike	18
3.1.9 Landauerjeva formula za več priključkov	20
3.2 Kvantna interferenca in njen vpliv v nanoskopskih sistemih .	21
3.2.1 Dinamična in magnetna faza	22
3.2.2 Primer: dvojni sipalec	23
3.2.3 Aharonov-Bohmov pojav v obroču	24
3.2.4 Šibka in močna lokalizacija	26
3.2.5 Vaje	26
4 Kvantni Hallov pojav	28
4.1 Običajni Hallov pojav	28

4.2	Celoštevilski Kvantni Hallov pojav	29
4.3	Kvantni problem elektrona v magnetnem polju	31
4.4	Landauovi nivoji in njihova degeneracija	32
4.5	Od kod torej kvantizacija Hallove prevodnosti?	32
4.6	Zakaj je $T = 1$? Kiralna robna stanja	33
4.7	Formula za več kanalov	34
4.8	Kaj pa spin?	34
4.9	Vloga nereda	35
4.10	Topološki argument	35
4.11	Robna stanja kršijo Nielsen-Ninomiya teorem	37
4.12	Landauerjeva analiza elektronskega transporta	37
5	Topološka pasovna teorija	39
5.1	Model SSH	39
5.1.1	Kiralna simetrija	42
5.1.2	Korespondenca med robovi in robnimi stanji	43
5.1.3	Robustnost na vključitev dodatnih orbital in nered	45
5.2	Drugi topološki sistemi	45
5.2.1	Chernov izolator	45
5.2.2	Z_2 izolator	48
6	Ulomljeni kvantni Hallov pojav	50
6.1	Bozoni, Fermioni, Anyoni	51
6.2	Kompozitni fermioni	52
6.3	Ulomljen naboj	52
6.4	Diskusija Laughlinove valovne funkcije	53
6.5	Vzbuditve Laughlinove valovne funkcije	54
6.5.1	Spektralni tok v obroču	55
6.5.2	Valovna funkcija za vrzel	55
6.6	Ulomljena kvantizacija Hallove prevodnosti v Corbinovi geometriji	57

7 Grafen	59
7.1 Klein-Gordonova in Diracova enačba	59
7.1.1 Masivni mirujoč delec	61
7.1.2 Splošna rešitev v nerelativistični limiti	61
7.1.3 Brezmasni delec	62
7.2 Elektronska disperzija v grafenu pri nizkih energijah	62
7.3 Landauovi nivoji	65
7.4 Kvantni Hallov pojav v grafenu	66
8 Kvantne pike in Coulombska blokada	68
8.1 Eno-elektronska škatla	69
8.2 Več kvantnih pik	71
8.3 Zgled: diagram stabilnosti za dvojno kvantno piko	72
8.4 Končna napetost med izviro in ponorom, enoelektronski tranzistor in Coulombski diamanti	74
8.5 Obravnava transporta z master enačbo	75
8.5.1ocene Γ za kovinsko kvantno piko	77
8.6 Enoelektronski transistor	79
8.7 Enoelektronska črpalka	79
8.8 Kotuneliranje in Kondov pojav	79
9 Coulombska blokada in superprevodnost	82
9.1 Bogoliubov-de Gennesova enačba	83
9.2 Andreevo tuneliranje	85
9.3 Prevodnost Andreeva	88
9.4 Andreeva vezana stanja	90
9.5 Josephsonov stik in Josephsonov efekt	91
9.6 SQUID	93
9.7 Makroskopska kvantna mehanika	94
9.8 Naboj in faza sta konjugirani količini; Schroedingerjeva enačba za superprevodnik	95
9.9 Enačbe gibanja	96
9.10 Josephsonovi kubit	97

9.11 Parity effect	98
10 Kvantno računalništvo	99
10.1 Kompleksnost kvantne informacije	99
10.2 Kubit	100
10.3 Izrek o nekloniranju	101
10.4 Kvantna vezja	101
10.5 Operacije na kubitih	102
10.6 Kvantni algoritmi	103
10.7 Kvantna strojna oprema	105
A Topologija v trdni snovi	108
B Dodatek	111
B.1 Spisek Nobelovih nagrad povezanih z vsebino predmeta . . .	111

Poglavje 1

Preden začnemo

Skripta je povzetek gradiva, ki se ga obravnava pri predmetu Nanofizika. Predmet pokriva več sklopov tematik iz širšega področja kvantnega transporta, kvantnega Hallovega pojava, inženirskih snovi kot so heterostrukture in grafen, osnov topološke pasovne teorije in pa kvantne informatike. Obravnavana snov namerava študentu omogočiti solidne osnove in ga hkrati seznaniti z aktualnimi raziskavami na teh področjih.

V kurzu se pojem “nanofizika” interpretira predvsem v ožjem kontekstu kvantnih pojavov v trdni snovi. Vsebin, kot so funkcionalizacija snovi z nanostrukturiranjem se kurz izogne. Primeri teh vsebin so : npr. remanentna magnetizacija v “nanodelcih” t.j. majhnih koščkih trdne snovi se lahko poveča, če je velikost delcev primerljiva z velikostjo domen). Nanostrukturiranje se uporablja za izboljšanje lastnosti katalitičnih lastnosti snovi, za izboljšanje termoelektričnih lastnosti snovi – prek zmanjšanja toplotne prevodnosti ob nespremenjeni vrednosti Seebeckovega koeficienta se poveča t.i. “figure of merit”.)

Predmet predpostavi dobro znanje kvantne mehanike in fizike trdne snovi. Pri manjšem delu vsebin se uporabi zapis z drugo kvantizacijo zato je osnovno poznavanje druge kvantizacije dobrodošlo.

Za študenta, ki išče globlje razumevanje, za dodatno branje predlagam

- Kvantni transport: S. Datta *Mesoscopic physics*, 1.,2.,del 3. poglavja, Nazarov-Blanter *Quantum Transport* 1. poglavje, del 2., 3., 5. in 6.

poglavja. Ihn, *Semiconductor Nanostructures*

- Grafen: Pregledni članek A.H. Castro Neto et al, RMP 81 109 (2009).
- Kvantni Hallov pojav, Datta 4. poglavje
- Osnove topologije, Asboth *A Short Course on Topological Insulators*
- Kvantno računalništvo : online zapiski Johna Preskilla, Nielsen-Chuang *Quantum Computation and Quantum Information*

Poglavje 2

Uvod

Computing machines are very large; they fill rooms. Why can't we make them very small, make them of little wires, little elements- and by little, I mean little. For instance, the wires should be 10 or 100 atoms in diameter, and the circuits should be a few thousand angstroms across.

Richard Feynmann, 1959

Fizika nanoskopskih (gr. nano – palček) sistemov. Kako se klasični elektronski elementi obnašajo, ko njihove dimenzije zmanjšamo. Ohmov zakon $U = RI$, $I = GU$. $G = \sigma S/l$. Kaj se dogaja s prevodnostjo, ko dimenzije prevodnika postanejo primerljive z značilnimi dožinami, prosto potjo, Fermijevo valovno dolžino, torej denimo nekaj 10-100 medatomskih razdalj. Na kakšen način pridejo do izraza kvantni pojavi?

Pravimo tudi fizika mezoskopskih sistemov, gr. mesos – sredina, vmes; torej, da so po velikosti vmes. So večji kot je velikost atoma, a dovolj majhni, da kvantnomehanski pojavi pridejo do izraza.

Motivacija je dvojna. Po eni strani so mezoskopski sistemi zanimivi s

stališča bazične znanosti

- razumevanje kvantne mehanike in prehoda med klasičnim in kvantnim.
- Eksotična stanja snovi, ki nimajo klasičnega analoga.

po drugi strani pa je boljše razumevanje mezoskopskih sistemov pomembno tudi s stališča uporabnosti:

- Računalniški elementi (tranzistorji) postajajo tako majhni, da postaja pomembno kvantnomehansko tuneliranje. Tranzistorska tehnologija v času pisanja (leto 2021, 2022) uporablja litografijo z ločljivostjo do 7nm, pojavlja se prehod v 5nm (Apple M1), in celo 2nm (IBM) (fotolitografija z 193nm se nadomešča s 13.5nm ekstremno ultravijolično svetlobo. Vrata so lahko dolga do 5nm, preden pride do tuneliranja med source in drain elektrodo. Molibdenove nanocevke, 1nm □

Poglavje 3

Kvantni transport

Can a length of perfect
conductor have a resistance?

R. Landauer, 1981

3.1 Kvantizacija prevodnosti

Po izumu tranzistorja se je začel proces miniaturizacije računalniških elementov. Zelo zgodaj so se pojavila vprašanja, kaj se zgodi z mehanizmom prevajanja, ko elementi postanejo zelo majhni. Za makroskopski vodnik velja Ohmov zakon $I = GU$ (kjer je I tok, U padec napetosti na vodniku in smo vpeljali prevodnost $G = 1/R$, kjer je R upor vodnika). Prevodnost makroskopskega vodnika narašča s presekom S in pada z dožino L in zato velja

$$G = \sigma S/L, \tag{3.1}$$

kjer je σ specifična prevodnost (v angleškem jeziku uporabljamo za slednjo izraz “conductivity” in jo je potrebno razlikovati od količine G , ki je “conductance”), ki je odvisna od snovi in pa zunanjih pogojev (temperatura T , magnetno polje B).

Za običajne kovine lahko specifično prevodnost izrazimo s t.i. Drudejevo

formulo (*glej predmeta Fizika trdne snovi in Fizika kondenzirane snovi*)

$$\sigma = ne^2\tau/m, \quad (3.2)$$

kjer je n gostota elektronov, e naboj elektrona, m efektivna masa, τ pa sipalni čas. (Le-ta je v običajnih kovinah obratno sorazmeren s temperaturo, kar je povezano z aktivacijo vibracij atomov v rešetki, ki sipljejo elektrone.) Sipalni čas lahko povežemo tudi s povprečno prosto potjo $l = v_F\tau$, kjer je v_F Fermijeva hitrost.

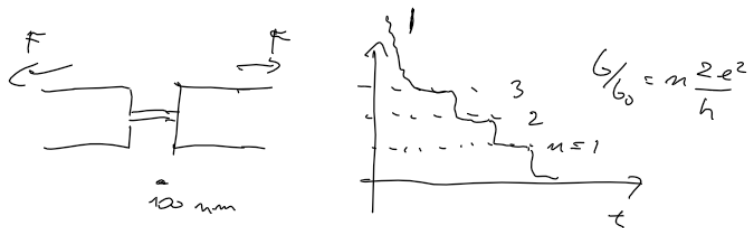
Očitno je, da ko vodnik postane dovolj majhna (npr. v primerjavi z velikostjo atoma ali, manj restriktivno, sipalno dolžino) zveza Eq. (3.1) preneha veljati. Manj očitno pa je, kakšno obnašanje pričakujemo takrat. En možen scenarij se zdi, da prevajanje za dovolj tanke vodnike ni več mogoše (torej limita $S \rightarrow 0$). Enako smiselen pa se zdi tudi obraten premislek, da ko dolžina vodnika postane krajša od sipalne dolžine, sipalnih procesov ni več in $G \rightarrow \infty$.

Eksperimentalno lahko mehanizem transporta majhnih vodnikov opazujemo na več načinov. Primer, ki najbolj sledi manjšanju dimenzij običajnega makroskopskega vodnika, je udejanjen v t.i. “break-junctions”, ko tanko žico vlečemo narazen in opazujemo upornost v njej kot funkcijo časa preden se strga. Izkaže se, da tok pada, ko se vodnik tanjša, zanimivo pa je, da se pojavijo skoki. Prevodnost ne pada zvezno pač pač pa na diskretni način. Preden se vodnik popolnoma strga njegova prevodnost ni niti neskončna niti nična pač pa zavzame neko vmesno končno vrednost.

Eksperiment se da bolj kontrolirano izvesti z zruževanjem vodnika skupaj. Rezultat je prikazan na sliki Fig..

Na tej sliki vidimo, da so skoki velikosti enotah $2e^2/h$, kjer je h Planckova konstanta. Zanimivo je opaziti, da ima to razmerje res enote prevodnosti in da njegova vrednost znaša $e^2/h = 1/25.8k\Omega$. Z enostavno kombinacijo dveh osnovnih konstant dobimo količino, ki po enotah ustreza prevodnosti in še več, njena vrednost pa ustreza vrednosti popolnoma običajnih upornikov iz makroskopskega sveta!

Pravimo, da pride do *kvantizacije prevodnosti*, vodnikom v katerih do teh



Slika 3.1: Časovna odvisnost upornosti v "lomitvenem stiku" (breakjunction). Tanek kovinski mostiček (100nm širine). Preden prevodnost pade na nič je v toku opaziti skokovito (kvantizirano obnašanje).

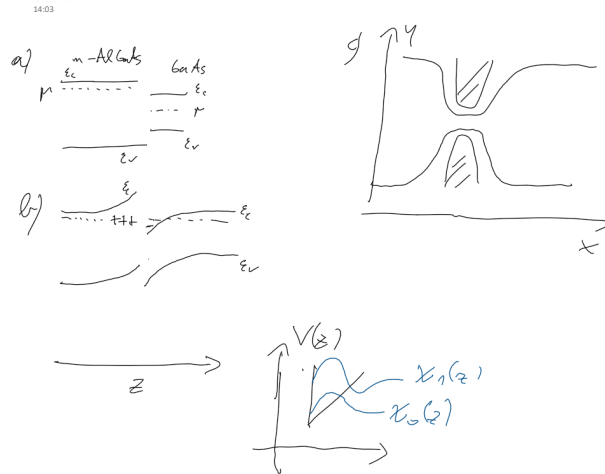
pojavov (običajno pri nizkih temperaturah $\lesssim 1\text{K}$ pride pa pravimo kvantni vodniki.

3.1.1 Kvantni točkovni stik

Eksperimente se da bolj kontrolirano izvesti v točkovnih stikih v dvodimenzionalnem elektronskem plinu, kjer lahko presek vodnika sistematično in reverzibilno manjšamo z uporabo zunanjih elektrod (Slika!). Prvi eksperiment je opravil B van Wees (1988) in opazil kvantizacijo prevodnosti v korakih $2e^2/h$.

3.1.2 2d elektronski plin

(Ponovitev iz Fizike trdne snovi). Do pojava 2d elektronskega plina (v literaturi se uporablja izraz 2DEG, 2d electron gas) pride v heterostrukturah sestavljenih iz dveh različnih polprevodnikov. Na sliki je denimo prikazan primer, ko sklopimo n-dopiran AlGaAs z nedopiranim GaAs. V AlGaAs je kemijski potencial višji, zato se del elektronov preseli v GaAs. S tem



Slika 3.2: 2d elektronski plin se formira v heterostrukturi čistega GaAs v stiku z n-tipom AlGaAs. Zaradi višjega kemijskega potenciala se elektroni prenesejo iz AlGaAs. Pride do upogiba pasov. Valovna funkcija elektrona v smeri z je podana z rešitvijo Schroedingerjeve enačbe v trikotnem potencialu. V prečnih smereh se elektroni prosto gibljejo. Pride do pojava 2DEG. Ggibanje elektronov v prečnih smereh lahko dodoatno omejimo z zunanjimi elektrodami in s tem ustvarimo kvantni točkovni stik.

postane skupni naboj blizu stika neničelen, kar po Poissonovi enačbi vodi do električnega potenciala

$$\nabla^2\phi = -\rho/\epsilon_0 \tag{3.3}$$

kjer je ρ gostota naboja. Ker imamo prostorsko odvisnost zgolj v smeri prečno na stik (denimo v smeri z), to enačbo reši $\phi = -\rho/\epsilon_0 z^2/2$. Po tej spremembi imajo energijski nivoji elektronov energijo $\epsilon_c = \epsilon_c^0 + e\phi(z)$. Energijski nivo ima pozitivno ukrivljenost za $z < 0$, kjer ima celotna gostota pozitivni predznak (kjer pride do primanjklaja elektronov) in obratno na drugi strani meje. V ravnovesju je kemijski potencial povsod po snovi enak. Na intrinzični ($z > 0$) strani pride do akumulacije prostih elektronov blizu meje.

V bližini meje moramo tako reševati Schroedingerjevo enačbo v trikotni potencialni jami, kar se tiče gibanja elektronov v z smeri (in pa prostega problema, kar se tiče gibanja v drugih dveh smereh). Za dovolj nizke vrednosti

kemijskega potenciala je valovna funkcija zasedenih elektronskih stanj oblike

$$\psi(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_y y)} \chi_0(z), \quad (3.4)$$

kjer je $\chi_0(z)$ osnovno stanje problema v z -smeri. Elektroni so v z smeri torej vsi omejeni na osnovno stanje, v drugih dveh smereh pa se prosto gibljejo. Pojavi se torej 2DEG.

3.1.3 Kvantni točkovni stik

2DEG lahko dodatno oblikujemo z uporabo napetostih na kovinskih elektrodah. Le-te preko kapacitivne sklopitve določajo vrednost elektronskega potenciala na položaju 2DEG. Problemu torej prištejemo nek zunanji potencial $V(x, y)$. Ko te elektrode odščipnejo elektronski plin na dva skoraj ločena dela govorimo o kvantnem točkovnem stiku (quantum point contact, QPC). Na razširjenem področju stran od QPC se elektronski plin sklaplja na zunanje kovinske priključke prek katerih potem merimo transportne lastnosti QPC.

3.1.4 Elektronska stanja v idealnem vodniku

Oglejmo si idealiziran primer, ko je elektronski potencial podan s potencialno jamo, (valovne funkcije in potenciala v z smeri ne bomo eksplicitno pisali)

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{če } |y| < b/2, \\ \infty & \text{sicer} \end{cases} \quad (3.5)$$

Rešitev Schroedingerjeve enačbe je

$$\psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \chi_n(y), \quad (3.6)$$

kjer je

$$\chi_n(y) = \sqrt{2/b} \sin(\pi(y - b/2)n/b) \quad (3.7)$$

in pripadajoča energija

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (k_x^2 + \frac{\pi^2}{b^2} n^2) \quad (3.8)$$

3.1.5 Balistični transport v idealnem vodniku

Obravnavajmo meritev električne prevodnosti v takem vodniku! Privzemimo najprej, da je aktualen zgolj osnovni valovni način v y -smeri, t.j. $n = 1$. Meritev transporta pomeni, da vodnik sklopimo na izvir in ponor, ki sta makroskopska kovinska priključka. Elektronska stanja v teh priključkih so zasedena do ustreznih kemijskih potencialov, ki jih lahko kontroliramo z zunanji napetostmi.

Znotraj idealnega vodnika je celotni tok podan

$$I = \sum_{ksn} \int d\mathbf{r} j_k n_k \quad (3.9)$$

kjer so členi v vsoti podani s produktom med pričakovano vrednostjo kvantnomehanskega izraza za tok v posamičnih rešitvah pomnožen z njihovo zasedenostjo v vodniku n_k . V vsoti smo zapisali tudi vsoto po n in spinu s . Dokler nimamo zunanjega magnetnega polja oba spina prispevata enako, kar bo vodilo do prefaktorja 2. V tem izrazu je

$$\mathbf{j}_k = \frac{e\hbar}{2mi} \psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*, \quad (3.10)$$

kar za komponentno toka vzdolž vodnika (v x smeri) pomeni

$$j_k = \frac{e\hbar k}{mL} |\chi(y)|^2 \quad (3.11)$$

Za celoten tok torej dobimo

$$I = 2 \sum_k \int dy \frac{e\hbar k}{mL} |\chi(y)|^2 n_k = 2 \sum_k \frac{e\hbar k}{mL} n_k = 2 \int dk \frac{e\hbar k}{m2\pi} n_k, \quad (3.12)$$

kjer smo ob zadnjem enačaju uporabili, da je vodnik v x smeri dolg in zato lahko uporabimo namesto vsote po k integral (uporabimo standardni predpis

$$\sum_k = L \int dk / (2\pi).$$

Kaj pa zasedbena števila n_k ? Za njih predpostavimo, da so njihove vrednosti podane z zasedbenimi števili tiste elektrode, iz katerih ustrezni elektroni prihajajo (torej s Fermijevo funkcijo $f_{s,d} = 1/(\exp(\beta\epsilon - \mu) + 1)$ kjer $\mu \rightarrow \mu_s$ za $k > 0$ in $\mu \rightarrow \mu_d$ za $k < 0$).

Dobimo torej

$$I = \frac{2e\hbar}{m2\pi} \int_0^\infty dk k f_s(\epsilon_k) + \int_{-\infty}^0 dk k f_d(\epsilon_k) \quad (3.13)$$

Predpostavimo, da je temperatura nizka $T \rightarrow 0$ in uporabimo $d\epsilon = \hbar^2 k dk / m$.

Dobimo

$$I = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_0^\infty d\epsilon [f_s(\epsilon) - f_d(\epsilon)] \quad (3.14)$$

in s tem

$$I = \frac{2e}{h} (\mu_s - \mu_d) = \frac{2e^2}{h} (V_s - V_d) = 2G_0 (V_s - V_d) \quad (3.15)$$

V kolikor bi k transportu prispevalo več kanalov bi morali ta rezultat pomnožiti z njihovim številom M . Prevodnost idealnega kvantnega vodnika je torej podana s celim večkratnikom kvanta prevodnosti.

Ta rezultat ni odvisen od dolžine prevodnika L . Temu režimu transporta pravimo balistični transport, zanimivo pa je, da kljub temu, da sipalnih procesov ni, prevodnost ni neskončna. K temu rezultatu se bomo še vrnili.

Komentarji:

- V kvantnem vodniku imamo močno neravnovesno situacijo. Elektroni, ki se gibljejo v smeri stran od izvira imajo drugačeno zasedenost (drug kemijski potencial) kot elektroni, ki se gibljejo v drugo smer.
- Idealni vodnik pravilno opiše skoke v eksperimentu in jih poveže z aktivacijo prečnih valovnih načinov
- Če imamo v kvantnem vodniku statični sipalec, se zveza posploši

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n, \quad (3.16)$$

kjer je T_n prepustnost (transmisivnost) kvantnomehanskega sipalnega problema. Tej zvezi pravimo Landauerjeva formula.

3.1.6 Vpliv sipalca v idealnem vodniku. Landaurjeva formula

V kolikor imamo v idealnem vodniku statični sipalec (sicer pa transport ostaja koherenten – več o tem kasneje) dobimo za valovno funkcijo elektrona, ki prihaja z leve (pišemo zgolj odvisnost od x)

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx} & x < 0 \\ te^{ikx} & x > 0 \end{cases} \quad (3.17)$$

in pa

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{-ikx} + re^{ikx} & x > 0 \\ te^{-ikx} & x < 0 \end{cases}, \quad (3.18)$$

za elektron, ki prihaja z desne (vzeli smo $k > 0$). Ko to vstavimo v izraz za tok, ki ga lahko izvednotimo npr. levo od sipalca, dobimo izraz

$$I = \frac{2e\hbar}{2\pi m} \int_0^\infty dk k (1 - R_k) f_s(\epsilon_k) + \int_{-\infty}^0 dk T_k k f_d(\epsilon_k) \quad (3.19)$$

Velja $(1 - R) = T$ in v kolikor prepustnost ni odvisna od k (kar lahko vedno predpostavimo za dovolj majhne napetostne razlike, ko prispevajo k transportu zgolj elektronska stanja v ozkem intervalu momentov) in tako dobimo Landaurjevo formulo, kot smo jo zapisali zgoraj.

3.1.7 Adiabatski opis kvantnega točkovnega stika

Zakaj moramo med obravnavo sploh upoštevati sipanje, če velja, da so mobilnosti v 2DEG izredno visoke in dimenzije naprav manjše od sipalne dolžine v 2DEG? Izkaže se, da efektivno do sipanja pride tudi zaradi oblike točkovnega stika. Oziroma, v praksi opis kvantnega točkovnega stika kot neskončne potencialne jame z ravnimi stenami ni ustrezen. Kako obravnavamo točkovni stik z realno obliko?

Potencial realnega točkovega stika lahko opišemo s funkcijo

$$V(x, y) = \begin{cases} \infty & |y| > \frac{b(x)}{2} \\ 0 & \text{sicer} \end{cases}. \quad (3.20)$$

Schroedingerjeva enačba s prostorsko odvisnim potencialom te oblike v 2d v splošnem ni rešljiva, lahko pa jo rešimo približno ob predpostavki, da se potencial kot funkcija koordinate x le počasi spreminja, t.j. $b'(x) \ll 1$. Vzemimo

$$\chi_{n;b}(y), \quad (3.21)$$

ki naj reši 1d Schroedingerjevo enačbo za neskončno potencialno jamo širine b , se pravi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{y^2} \chi_{n;b}(y) + V_b(y) \chi_{n;b}(y) = E_{n;b} \chi_{n;b}(y). \quad (3.22)$$

Potem valovno enačbo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{x^2} + \frac{\partial^2}{y^2} \right) \psi(x, y) + V(x, y) \psi(x, y) = E \psi(x, y) \quad (3.23)$$

približno reši nastavek $\psi(x, y) = \phi(x) \chi_{n;b(x)}$, kjer je približek v tem, da v enačbi zgoraj zanemarimo $\partial \chi_{n;b(x)} / \partial x$.

Enačbo z uporabo nastavka prepisemo v

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{x^2} + V_{\text{eff}}(x) \right] \phi(x) \chi_{n;b(x)}(y) = E \phi(x) \chi_{n;b(x)}(y). \quad (3.24)$$

Valovno funkcijo $\phi(x)$ torej ustreza rešitvi 1d problema v efektivnem potencialu $V_{\text{eff}}(x) = E_{n;b(x)}$.

Zožitev v točkovem stiku je torej ekvivalentna pojavu zunanjega potenciala. Četudi zunanjih nečistoč ni, omejitev elektronov na prostor s spremenljivim presekom $b(x) \neq \text{const}$ vodi do sipanja.

3.1.8 Sipalne matrike

Problem, ko elektron pride iz razsežnega priključka v zožitev, ustreza sipalnemu problemu. Spomnimo se npr. problema potencialnega skoka

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x > 0 \\ 0 & \text{sicer} \end{cases} \quad (3.25)$$

V območju, kjer je potencial konstanten, so rešitev Schroedingerjeve enačbe ravni valovi in v celoti lahko valovno funkcijo zapišemo v obliki

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{a_L}{\sqrt{k}} e^{ikx} + \frac{b_L}{\sqrt{k}} e^{-ikx} & x < 0 \\ \frac{a_R}{\sqrt{k'}} e^{-ik'x} + \frac{b_R}{\sqrt{k'}} e^{ik'x} & x > 0 \end{cases} \quad (3.26)$$

ob koeficientih za ravne valove smo dodali faktorje \sqrt{k} , ki ustrezajo normalizaciji ravnih valov na tok.

Definiramo lahko sipalno matriko, ki povezuje koeficiente vpadnih valov a_L, a_R s koeficienti izhodnih valov b_L, b_R

$$\begin{pmatrix} b_L \\ b_R \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_L \\ a_R \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Denimo, da z leve pošljemo ravni val z amplitudo $a_L = 1$. Potem verjetnostno amplitudo za odboj (torej koeficient b_L) običajno označimo z r (reflektivnost), verjetnostno amplitudo za prehod na desno (prepustnost, transmissivnost) pa s t . Ustrezne koeficiente za vpadni val z desne pa označimo z r' in t' . Sipalna matrika je potemtakem

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

Sipalna matrika je unitarna $S^\dagger S = I$, kar je povezano z ohranitvijo toka delcev. Prav tako velja $S^T = S$ za primer, ko magnetnega polja ni, kar sledi iz kompleksne konjugacije Schroedingerjeve enačbe (t.i. simetrije na obrat časa, vaja!) Za probleme z magnetnim poljem pa velja $S^T(-B) = S(B)$.

Definiramo lahko tudi verjetnost za prehod $T = |t|^2$ in pa verjetnost za odboj $R = |r|^2$.

Za naš primer bo zanimiva posplošitev sipalne obravnave, ko elektroni lahko na sipalno območje pridejo iz več priključkov, ki jih bomo označevali z grškimi črkami. Poleg tega so v vsakem priključku elektroni lahko v več različnih prečnih valovnih načinih n . Valovna funkcija je torej

$$\psi = \begin{cases} \sum_n a_{\alpha n} \chi_n(y) \frac{e^{ik_n^{(\alpha)} x^{(\alpha)}}}{\sqrt{k^{(\alpha)}} + b_{\alpha n} \chi_n(y) \frac{e^{-ik_n^{(\alpha)} x^{(\alpha)}}}{\sqrt{k^{(\alpha)}}} & \text{v priključku } \alpha \\ \dots & \text{v naslednjem priključku} \\ \dots & \dots \end{cases} \quad (3.29)$$

Število členov v vsoti n je podano s številom odprtih kanalov pri dani energiji. Tudi v tem posplošenem primeru lahko zapišemo sipalno matriko, ki podaja zvezo med koeficienti

$$\begin{pmatrix} b_{11} \\ b_{12} \\ \vdots \\ b_{N_\alpha n_{\max}; \alpha} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{12} \\ \vdots \\ a_{N_\alpha n_{\max}; \alpha} \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

Za valovno funkcijo zgoraj si je za kasnejše potrebe koristno ogledati še vrednost toka delcev skozi presek v območju α . Izvrednotiti moramo

$$I_{k^{(\alpha)}} = \int dy \frac{\hbar}{2mi} k^{(\alpha)} (\psi^* \frac{d}{dx} \psi - \psi \frac{d}{dx} \psi^*), \quad (3.31)$$

kjer smo morali zaradi normalizacije valovnih funkcij standardni izraz dodatno pomnožiti s $k^{(\alpha)}$. Zaradi ortogonalnosti med prečnimi valovnimi funkcijami χ_n za različne vrednosti n dobimo zgolj diagonalne prispevke in dobimo

$$I_{k^{(\alpha)}} = \frac{\hbar k^{(\alpha)}}{m} \sum_n (|a_{\alpha n}|^2 - |b_{\alpha n}|^2) \quad (3.32)$$

3.1.9 Landauerjeva formula za več priključkov

Zanima nas izraz za tok za primer z večimi priključki in večimi sipalnimi kanali. V vodniku α se nahajajo elektroni z $k_x > 0$, ki so prišli iz elektrode α in so podani z zasedbenim številom f_α (ki ga podaja Fermijeva funkcija s kemijskim potencialom elektrode α). Kar pa se tiče elektronov z $k_x < 0$ pa lahko izvirajo iz priključka α in so odbiti nazaj (v tem primeru njihovo zasedbeno število podaja f_α), ali pa so prepuščeni iz kakega drugega priključka β . Dobimo torej izraz

$$I_\alpha = 2e \sum_n \left[\int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m} f_\alpha(E) + \int_{-\infty}^0 \frac{dk}{2\pi} \sum_{m\beta} \frac{\hbar k}{m} |S_{\alpha n, \beta m}|^2 f_\beta(E) \right] \quad (3.33)$$

V drugem členu lahko zamenjamo $k \rightarrow -k$ in pa vpeljemo integracijo po energiji in dobimo

$$I_\alpha = \frac{2e}{h} \sum_{nm\beta} \left[\int_0^\infty dE (\delta_{\alpha\beta} \delta_{mn} - |S_{\alpha n, \beta m}|^2) \right] f_\beta(E). \quad (3.34)$$

Oglejmo si nekaj lastnosti zgornjega izraza! V primeru, da je kemijski potencial na vseh elektrod enak $f_\beta \rightarrow f_0$ sledi, da je $I_\alpha = 0$. Izraz zgoraj je namreč vsota členov, ki so vsi sorazmerni z

$$\sum_{\beta m} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{mn} - |S_{\alpha n, \beta m}|^2) = 1 - \sum_{\beta m} |S_{\alpha n, \beta m}|^2 = 0 \quad (3.35)$$

zaradi unitarnosti sipalne matrike S . Zaradi te lastnosti velja

$$I_\alpha = \frac{2e}{h} \sum_{nm\beta} \left[\int_0^\infty dE (\delta_{\alpha\beta} \delta_{mn} - |S_{\alpha n, \beta m}|^2) \right] (f_\beta(E) - f_0(E)). \quad (3.36)$$

Vzemimo, da so si kemijski potenciali na kontaktih dovolj blizu, da lahko energijsko odvisnost sipalne matrike na intervalu med njimi zanemarimo. Potem lahko izvednotimo integracijo prek energij, $\int_0^\infty (f_\beta(E) - f_0(E)) =$

$e(V_\beta - V_0)dE$ in dobimo zvezo

$$I_\alpha = \sum_\beta G_{\alpha\beta}V_\beta, \quad (3.37)$$

kjer smo definirali *matriko prevodnosti*

$$G_{\alpha\beta} = \frac{2e^2}{h} \sum_{nm} \left[\int_0^\infty dE (\delta_{\alpha\beta}\delta_{mn} - |S_{\alpha n, \beta m}|^2) \right]. \quad (3.38)$$

Kot smo že povedali zgoraj, za vse enake napetosti velja, da je $I_\alpha = 0$, se pravi $\sum_\beta G_{\alpha\beta} = 0$. Podobno lahko preverimo, da za poljubne napetosti V_β velja $\sum_\alpha I_\alpha = 0$, kar ustreza $\sum_\alpha G_{\alpha\beta} = 0$. Velja tudi lastnost $G_{\alpha\beta}(B) = G_{\beta\alpha}(-B)$, kar sledi iz obnašanja sipalne matrike ob obratu časa. V primeru, da magnetnega polja ni, velja da je matrika napetosti simetrična $G_{\alpha\beta} = G_{\beta\alpha}$

3.2 Kvantna interferenca in njen vpliv v nanoskopskih sistemih

Klasični primer kvantne interference je prehod elektrona (ali fotona) skozi zaslon z dvema režama. Valovna funkcija na zaslonu je koherentna superpozicija valov, ki preidejo skozi posamične reže

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x) \quad (3.39)$$

in verjetnostna gostota na zaslonu je, če zapišemo $\psi_i(x) = \sqrt{P_i(x)}e^{i\phi_i(x)}$

$$|\psi(x)|^2 = P_1 + P_2 + 2\sqrt{P_1P_2}\cos(\phi_1 - \phi_2) \quad (3.40)$$

vsota verjetnostnih gostot za prehod skozi obe vrzeli in pa interferenčnega člena, ki je odvisen od razlike faz valovnih funkcij. V odvisnosti od faz valovne funkcije lahko dobimo konstruktivno in destruktivno interferenco. Če pa na časovni skali v kateri intenziteto merimo faza fluktuirata, interferenčni člen izgine.

3.2.1 Dinamična in magnetna faza

Denimo, da opazujemo gibanje elektrona v določenem valovnem kanalu v nanostrukturi pri pogoju, da se potencial dovolj počasi spreminja s krajem, da lahko sipalne procese zanemarimo

Zapišemo lahko

$$\psi(x) = e^{i \int_0^x k(x) dx} = e^{i\phi(x)} \rightarrow_{\text{za } V(x) = \text{const}} e^{ikx}, \quad (3.41)$$

kjer je $k(x) = (1/\hbar)\sqrt{2m(E - V(x))}$. Količini $\phi(x) = \int_0^x k(x) dx$ pravimo dinamična faza, saj je podana z gibanjem elektrona po vodniku. Dinamično fazo lahko spreminjamo s spreminjanjem potenciala v vodniku.

Pomembna lastnost dinamične faze je, da se njen predznak ne spremeni za gibanje elektronov v obratni smeri. Če opazujemo gibanje elektrona po vodniku od točke A do B z valovnim vektorjem k bo akumulirana faza enaka tisti, ki jo elektron pridobi z gibanjem z valovnim vektorjem $-k$ v obratni smeri: $\int_A^B k(x) dx = \int_B^A (-k(x)) dx$. Jasno: če se val širi od A do B in se od tam odbije, je celotna akumulirana faza dvakratnik tiste, ki jo pridobi na poti zgolj v eno smer.

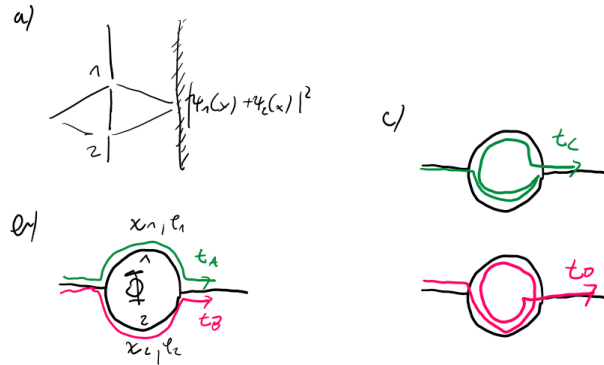
Na fazo elektronov pa vpliva tudi vektorski potencial, ki se pojavi zaradi magnetnega polja. Akumulirana *magnetna* faza je podana

$$\phi_m = \frac{e}{\hbar} \int_A^B \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}. \quad (3.42)$$

Za razliko od dinamične faze se predznak magnetne faze za gibanje elektrona v obratni smeri spremeni, $\phi_m(A \rightarrow B) = -\phi_m(B \rightarrow A)$. Valovni paket, ki se na barieri odbije in se po isti poti vrne nazaj zaradi gibanja v magnetnem polju ne nabere nobene fazne razlike.

Vrednost vektorskega potenciala lahko spreminjamo z izbiro umeritve, $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi$, kar spremeni tudi vrednost magnetne faze. Fizikalno opazljiva pa je samo faza, ki jo delec nabere po sklenjeni poti

$$\phi_m = \frac{e}{\hbar} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \frac{e}{\hbar} \phi = 2\pi \frac{\phi}{h/e}, \quad (3.43)$$



Slika 3.3: (a) Interferenčni pojav pri prehajanju elektronov skozi dve reži. (b) Aharonov-Bohmov pojav v prevodnosti skozi mezoskopski vodnik izhaja iz interference med trajektorijama A in B skozi obroč. (c) Altshuler-Aronov-Spivakijeve oscilacije pa nastanejo zaradi interference med trajektorijama C in D.

Ko magnetni pretok spremenimo za h/e se faza spremeni za 2π . Količini h/e (pogosto pa tudi količini $h/(2e)$ – vzrok je, da se poizkusi pogosto opravljajo v superprevodnikih kjer je naboj Cooperjevih parov $2e$) pravimo kvant magnetnega pretoka.

3.2.2 Primer: dvojni sipalec

Obravnavajmo amplitudo za prehod skozi dva območje z dvema zaporednima sipalcema ločena za dolžino l_0 (dinamična faza $\chi = kl_0$) je celotna amplituda za prehod enaka

$$t = \frac{t_L t_R e^{i\chi}}{1 - r'_L r_R e^{2i\chi}}, \quad (3.44)$$

kjer razvoj imenovalca ustreza vsem procesom, ko elektron potem, ko je vstopil v sistem mimo prvega sipalca (t_L) napravi med sipalcema 0, 1, 2,

... odbojev dokler ne zapusti sistem v desno mimo drugega sipalca (t_R).

Verjetnost za prehod je podana z

$$T = |t|^2 = \frac{T_L T_R}{1 + R_L R_R - 2\sqrt{R_L R_R} \cos 2\chi} \quad (3.45)$$

in je močno odvisna od dinamične faze. Za več diskusije glej vaje!

3.2.3 Aharonov-Bohmov pojav v obroču

Zanima nas kako se tok skozi obroč na sliki spreminja z magnetnim poljem. Iz obravnave do sedaj vemo, da velja

$$I = GU = \frac{2e^2}{h} |t|^2 U, \quad (3.46)$$

kjer je U napetost med izviro in ponorom. Zanima nas torej velikost prepustnosti $T = |t|^2$.

Obroč je sestavljen iz dveh T-stikov, ki ju opišemo z matrikami oblike

$$S_T = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -1/2 & 1/2 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix}. \quad (3.47)$$

Sipalno matriko smo izbrali tako, da se, ko elektron pride iz zunanosti do obroča z enako amplitudo razdeli v zgornji in spodnji kontakt, ostale elemente pa smo izbrali čimbolj simetrično (ob omejitvah, ki nastopijo zaradi unitarnosti).

Amplitudo za prehod skozi obroč dobimo tako, da seštejemo po vseh možnih poteh [glej izpeljavo na spletni strani]. Za razumevanje eksperimenta pa si je pomembno pogledati interferenco med najkrajšimi možnimi potmi (saj se za zelo dolge poti informacija o fazi zaradi sipanja na dinamičnih prostostnih fazah izgubi).

Oglejmo si najprej osnovni primer. Če gre elektron po zgornji poti, dobimo

$$t_A = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\chi_1} e^{i\phi_1} \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (3.48)$$

Če pa gre elektron po spodnji poti, dobimo

$$t_B = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\chi_2} e^{i\phi_2} \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2} e^{i\phi_1} e^{i\phi_2} e^{i(\chi_2 - \chi_1)} e^{i(\phi_2 - \phi_1)}. \quad (3.49)$$

Celotna prepustnost je potem enaka

$$|t_{03}|^2 = |t_A + t_B|^2 = \frac{1}{4} (1 + 1 + 2 \cos(\phi_2 - \phi_1 + \chi_2 - \chi_1)) = \frac{1}{2} \left[1 + \cos\left(\Delta\chi + \frac{2\pi\Phi}{h/e}\right) \right] \quad (3.50)$$

Za interferenco med tema dvema potema je značilno, da je odvisna od dinamične faze in da se periodično spreminja s periodo fluksa h/e . Ker je ta interferenca odvisna od dinamične faze je zelo občutljiva na spremembe k in geometrijske dolžine poti. Opazimo jo samo v pazljivo izdelanih tankih obročih.

Prvi eksperimenti pa so bili napravljeni s kovinskimi cilindri, kjer je k transportu prispevalo več kanalov z različnimi dolžinami poti, kar pomeni povprečenje po dinamični fazni razliki in zato interferenčne odvisnosti ne pričakujemo. Kljub temu pa so v eksperimentu odvisnost toka skozi obroč opazili, le da je bila perioda krajša, $h/2e$. Kako razložimo pojav interference v tem primeru?

V tem primeru si je potrebno ogledati trajektorije višjega reda, ko elektron, predno zapusti obroč v obroču napravi dodatni cel obhod. Oglejmo si amplitudo za prehod v tem primeru! Če gre elektron po poti C, dobimo

$$t_C = -\frac{1}{8} e^{i\chi_1} e^{i2\chi_2} e^{i\phi_1} \quad (3.51)$$

in po poti D

$$t_D = -\frac{1}{8} e^{i\chi_1} e^{i2\chi_2} e^{-i\phi_1} e^{i2\phi_2} = t_C e^{i2\phi_2 - i2\phi_1} \quad (3.52)$$

Velja torej

$$|t_C + t_D|^2 \propto \left(1 + \cos 2\frac{\Phi}{h/e}\right). \quad (3.53)$$

Interferenča med trajektorijama C in D ni odvisna od dinamične faze in

perioda je enaka $h/(2e)$. Tem oscilacijam (izmerjenih v letu '81) pravimo Altshuler-Aronov-Spivakijeve oscilacije (za razliko od zgoraj omenjenih Aharonov-Bohmovih oscilacij, prvič izmerjenih v letu 1985).

3.2.4 Šibka in močna lokalizacija

Kvantna interferenca je pomembna tudi za razumevanje elektronskega transporta v "umazani" limiti, ko je povprečna razdalja med statičnimi sipalci l (nečistočami) mnogo krajša od dekoherenčne dolžine $l_p h v$ (značilne dolžine, ko pride do sipanja na dinamični prostostni stopnji, to je drugemu elektronu ali fononu). V odvisnosti od velikosti l nadalje ločimo dva primera

- Šibko lokalizacijo, ki je značilna za sisteme z več hkrati odprtimi kanali s prevodnostjo, ki je bistveno večja od e^2/h . Za ta režim je značilno naraščanje prevodnosti za e^2/h ob povečanju magnetnega polja.
- Močno lokalizacijo, ki je značilna za sisteme z manjšimi vrednostmi prevodnosti. V tem primeru pride do lokaliziranega transporta $G \propto e^{-L/L_0}$, torej režima, ko prevodnost eksponentno pada z dolžino prevodnika. Prehodu v to nekovinsko obnašanje pravimo prehod v Andersonov izolator. Za širšo obravnavo te zanimive tematike naj si bralec ogleda literaturo.

3.2.5 Vaje

1. Ponovi klasično izpeljavo Drudejeve formule!
2. V literaturi poišči kolikšna je mobilnost 2dEG? Primerjaj jo s tisto v običajnih kovinah!
3. Ponovi problem sipanja v 1d v kvantni mehaniki! Obravnavaj problem elektrona na potencialni stopnici

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x > 0 \\ 0 & \text{sicer} \end{cases}. \quad (3.54)$$

Pokaži, da je rešitev Schroedingerjeve enačbe za tak potencial takšna, da se tok ohranja.

4. Ponovitev implikacij simetrije na obrat časa na obliko sipalne matrike. Zapišimo zvezo med koeficienti izhodnih valov \mathbf{b} in koeficienti vpadnih valov \mathbf{a} : $\mathbf{b} = S\mathbf{a}$. Zapiši Schroedingerjevo enačbo za delec v zunanjem potencialu v odsotnosti magnetnega polja. Kompleksno konjugiraj Schroedingerjevo enačbo $H\psi = E\psi$ in s tem pokaži, da če $\psi(x)$ reši Schroedingerjevo enačbo, jo reši tudi $\psi^*(x)$. Ker pa kompleksna konjugacija spremeni vlogo vpadnih in izhodnih valov, to pomeni, da velja $\mathbf{a}^* = S\mathbf{b}^*$. Pokaži, da iz tega sledi $S^T = S$!

Poglavje 4

Kvantni Hallov pojav

Hallov pojav je pojav napetosti prečno na smer električnega toka v prisotnosti magnetnega polja. Kvantni Hallov pojav je pojav kvantizirane Hallove prevodnosti v enotah $G_0 = e^2/h$ (v celoštevilskih mnogokratnikih $2 G_0$ – celoštevilski kvantni Hallov pojav, ter v vrednostih m/nG_0 , kjer sta m in n celi števili – ulomljeni kvantni Hallov pojav). Celoštevilski kvantni Hallov pojav je bil prvič izmerjen leta 1980 (von Klitzing, Nobelova nagrada 1985) v 2DEG (2-dimensional electron gas, 2-d elektronski plin) v silicijevi heterostrukturi.

4.1 Običajni Hallov pojav

Obravnavajmo najprej običajni (klasični) Hallov pojav v katerem bomo tok elektronov v 2DEG opisali v Drudejevem približku. Na elektrone deluje Lorentzova sila $\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}$. Poleg tega pa se zaradi sipalnih procesov moment elektronov relaksira s sipalnim časom τ . Newtonov zakon je tako

$$m\dot{\mathbf{v}} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - m\mathbf{v}/\tau. \quad (4.1)$$

Obravnavajmo gibanje elektronov v dveh dimenzijah (x, y) in magnetno polje usmerimo prečno na 2DEG v smeri z , $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Poleg tega se

zanimajmo za stacionarno rešitev $\dot{\mathbf{v}} = 0$. Newtonov zakon zavzame obliko

$$\frac{m}{\tau} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} - eB \begin{pmatrix} v_y \\ -v_x \end{pmatrix} = e \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Zanima nas zveza med tokom elektronov in električnimi polji, $\mathbf{E} = \underline{\rho}\mathbf{j}$. Gostota toka $\mathbf{j} = nev$, kjer je n gostota elektronov. Zgornjo enačbo prepisemo v

$$\frac{m}{ne^2\tau} \begin{pmatrix} j_x \\ j_y \end{pmatrix} - \frac{B}{ne} \begin{pmatrix} j_y \\ -j_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

in v tenzorsko obliko

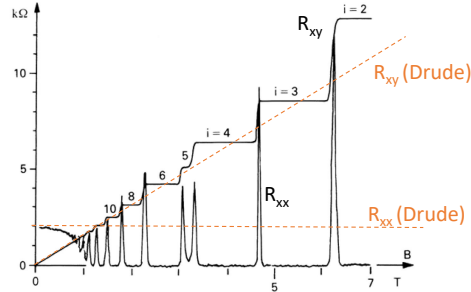
$$\begin{pmatrix} \rho_{xx} & -\rho_{xy} \\ \rho_{xy} & \rho_{xx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_x \\ j_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

kjer je $\rho_{xx} = m/ne^2\tau$ običajna upornost (ki bi jo izmerili v odsotnosti magnetnega polja), $\rho_{xy} = B/ne$ pa Hallova upornost. Denimo, da tok teče v smeri x . V prisotnosti magnetnega polja tak tok teče v prisotnosti električnega polja s komponento v smeri toka $E_x = \rho_{xx}j_x$ in pa komponento v prečni smeri $E_y = \rho_{xy}j_x$. Hallova upornost linearno narašča z gostoto magnetnega polja.

V eksperimentu je težko meriti lokalno gostoto polja in gostoto električnega toka. Običajno merimo celotni tok skozi vzorec $I_x = L_y j_x$ in pa napetost prečno na vzorec $U_y = E_y L_y$. Vidimo, da je Hallov upor, to je $R_H = U_y/I_x$ kar enak Hallovi upornosti (v treh dimenzijah bi se v zvezi med njima pojavil še geometrijski faktor L_z).

4.2 Celoštevilski Kvantni Hallov pojav

Ob meritvah Hallovega pojava v 2DEG v silicijevih heterostrukturah je von Klitzing opazil obnašanje, ki je skladno z Drudejevimi napovedmi le za majhne vrednosti magnetnega polja, pri večjih vrednostih pa od njih močno odstopa. Namesto linearno z magnetnim poljem Hallov upor narašča v skokih in tako izkazuje platoje, longitudinalni upor R_{xx} pa v območjih platojev



Slika 4.1: Izmerjen običajni R_{xx} in Hallov upor R_{xy} v primerjavi z Drudejevimi napovedmi (črtkano).

pade na 0. Analiza vrednosti Hallove upora pokaže, da gre za kvantizacijo prevodnosti, $R_{xy}^{-1} = G_0 i$, kjer je i celo število. Presenetljivo je, da vrednost Hallove upornosti na platoju ni odvisna od detajlne geometrije vzorca, natančne kontrole nad nečistočami (kasneje bomo videli, da nečistoče pravzaprav pomagajo k kvantizaciji), natančne vrednosti magnetnega polja. Vse to postane še bolj presenetljivo, ko se zavemo, da so naprave na katerih se Hallov pojav meri, tako imenovani Hallovi mostički so skoraj milimetrskih dimenzij!

Kvantizirana Hallova upornost je opažena do velike natančnosti, relativni odmiki od G_0 so manjši od 10^{-8} . Meritev Hallove upornosti se tako uporablja za neodvisno določitev konstante fine sklopitve ($e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c = e^2 c/4\pi\mu_0\hbar$) in s tem dopolnjujejo meritve anomalnega magnetnega momenta elektrona ($g - 2$), ki dosežejo še red velikosti boljše natančnost. V teh meritvah primerjajo ciklotronsko frekvenco s frekvenco spinske precesije v magnetnem polju, za določitev konstante fine sklopitve pa je potrebno rezultat primerjati še z natančnimi računi kvantne elektrodinamike. (V najnovejših standardih je von-Klitzingova konstanta h/e^2 definirana na fiksno vrednost, vrednosti μ_0 pa so popravljeni od $4\pi \times 10^{-7} \text{N}$ na deveti decimaliki.)

Od kod takšno obnašanje? Da to obnašanje razumemo, moramo najprej rešiti kvantni problem gibanja elektronov v magnetnem polju.

4.3 Kvantni problem elektrona v magnetnem polju

Izberimo umeritev za vektorski potencial $\mathbf{A} = B(-y, 0, 0)$, ki da $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ (kasneje bomo geometrijo vzorca izbrali tako, da bo ta umeritev posebej ugodna). Schroedingerjeva enačba je $p^2/2m\psi = E\psi$, torej

$$\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})^2\psi(x, y) = E\psi(x, y) \quad (4.5)$$

oziroma, če razpišemo

$$\frac{1}{2m}[(-i\hbar\partial_x + eBy)^2 + (-i\hbar\partial_y)^2]\psi(x, y) = E\psi(x, y). \quad (4.6)$$

Ker se v enačbi koordinata x pojavi le v obliki odvoda, ∂_x^2 , uporabimo nastavek $\psi(x, y) = \exp(ikx)\chi_k(y)$. Ko nastavek vstavimo v Schroedingerjevo enačbo dobimo

$$\frac{1}{2m}[(\hbar k + eBy)^2 + (-i\hbar\partial_y)^2]\chi_k(y) = E\chi_k(y). \quad (4.7)$$

Enačbo nadalje prepisemo v obliko

$$\frac{e^2B^2}{2m}[(y - y_k)^2 + \frac{1}{e^2B^2}(-i\hbar\partial_y)^2]\chi_k(y) = E\chi_k(y), \quad (4.8)$$

kjer je $y_k = -\hbar k/eB$. Koristno je vpeljati še magnetno dolžino

$$l_B = \sqrt{\hbar/|eB|} \quad (4.9)$$

in pa ciklotronsko frekvenco $\omega_c = |eB|/\hbar$. Z uporabo teh količin se enačba prepíše v

$$\frac{\hbar\omega_c}{2} [(y - y_k)^2/l_B^2 + l_B^2\partial_y^2]\chi_k(y) = E\chi_k(y), \quad (4.10)$$

kar je enačba za premaknjeni harmonski oscilator. Rešitev harmonskega oscilatorja so valovne funkcije $\mathcal{H}_n(y/l_B)\exp(-y^2/2l_B^2)$, kjer je $\mathcal{H}_n(y)$ n -ti Hermitov polinom, $(1, x, 2x^2 - 1, \dots)$. Pripadajoče lastne energije so $\hbar\omega_c(n + 1/2)$.

Vidimo torej da so v prisotnosti magnetnega polja lastne vrednosti neodvisne od momenta k , kar pomeni, da je vsaka rešitev mnogokrat degenerirana. Gostota stanj v prisotnosti B postane predstavljena z δ funkcijami, ki so razmaknjene za $\hbar\omega_c$.

4.4 Landauovi nivoji in njihova degeneracija

Tem stanjem pravimo Landauovi nivoji. Preštejmo degeneracijo (torej, koliko stanj ima isto energijo). Upoštevamo, da se elektroni nahajajo na vzorcu dimenzij $L_x \times L_y$ (= površina S). Zato velja, $\delta_k = 2\pi/L_x$. Ker vsakemu k ustreza določen položaj y_k , velja $\delta y = \hbar\delta_k/eB = \hbar 2\pi/L_x eB$. Vsa stanja pokrivajo del prostora s širino L_y , zato lahko preštejemo $N = L_y/\delta_y = L_y eBL_x/(2\pi\hbar) = \omega_c S m/2\pi\hbar$. Ko ta rezultat pomnožimo še z 2 zaradi spinske degeneracije, dobimo $N/S = \hbar\omega_c \frac{m}{\pi\hbar^2}$.

Ta rezultat je konsistenten z ugotovitvijo, da se stanja v δ funkcije pre-razporedijo iz gostote stanj, ki je v odsotnosti magnetnega polja izvirno škatlaste oblike $\rho(\epsilon) = \left\{ \frac{m}{\pi\hbar^2}; \epsilon > 0 \text{ in } 0; \text{sicer} \right\}$.

Degeneracija N je enaka tudi celotnemu magnetnemu pretoku skozi vzorec v enotah kvanta magnetnega pretoka $\Phi_0 = h/e$,

$$N = 2 \frac{BS}{\Phi_0} \quad (4.11)$$

4.5 Od kod torej kvantizacija Hallove prevodnosti?

Vrnimo se na vprašanje kvantizacije Hallove prevodnosti. Ker zgoraj zapisane lastne energije niso funkcije momenta, bi utegnili skleniti, da je grupna hitrost $dE/dk = 0$ in da sistem torej ne prevaja električnega toka. To je povezano s tem, da elektroni krožijo in v povprečju ne nosijo nobenega električnega toka. Ta rezultat zaenkrat ni videti prav uporaben za razumevanje kaj se v eksperimentu dogaja.

Da bomo elektronski transport in kvantizacijo R_{xy} razumeli, je potrebno v obravnavo vrniti osnovno informacijo o geometriji vzorca. Elektronski plin

je omejen na trak širine L_y . To lahko predstavimo s potencialom, ki naglo naraste na robovih vzorca. Kako potencial vpliva na elektronske energije E_{nk} ? Energijo lahko iz vrednotimo perturbativno

$$E_{nk} = \hbar\omega_c(n + 1/2) + \langle \psi | V(y) | \psi \rangle \approx \hbar\omega_c(n + 1/2) + V(y_k), \quad (4.12)$$

kjer zadnja približna enakost sledi iz tega, da valovna funkcija eksponentno pada z oddaljenostjo od y_k , z značilno dolžino l_B . (Za občutek, pri $B = 10T$, $\sqrt{(\hbar/|eB|)} = (10^{-34}/(10^{-19} * 10)) = 10$ nm. Naprave na katerih merimo kvantni Hallov pojav pa so tipično velikosti skoraj mm.)

Sedaj lahko zopet iz vrednotimo grupno hitrost, ki je podana z $v = (1/\hbar)dV/dy/dy_k/dk$. Grupna hitrost elektronov je torej sorazmerna z dV/dy , iz vrednotenim pri položaju elektronov y_k . Zaradi povezave med položajem valovne funkcije in njenim momentom y_k lahko skiciramo grupne hitrosti elektronskih stanj v realnem prostoru.

V območju Hallovih platojev, ko je Fermijeva energija vmes med dvema Landauovima nivojema tok torej predvsem nosijo elektronska stanja na robu vzorca. Za celotni tok skozi vzorec pa lahko zapišemo zvezo (podobno kot pri izpeljavi Landauerjeve formule, le da je $T=1$).

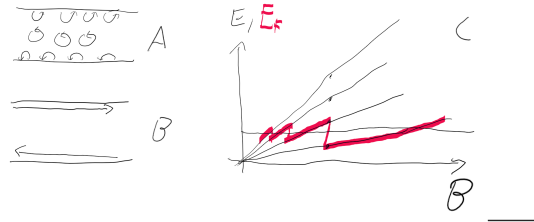
$$I = 2e \int_0^\infty \frac{d_k dE}{2\pi \hbar dk} (f_L(\epsilon_k) - f_D(\epsilon_k)), \quad (4.13)$$

pri čimer smo upoštevali, da so elektroni, ki se gibljejo v levo (desno) v stiku z desnim (levim) kontaktom. Dobimo torej popolnoma enak izraz, kot v Landauerjevi formuli za $T = 1$.

$$I = \frac{2e}{h} \int d\epsilon (f_L(\epsilon) - f_D(\epsilon)) \quad (4.14)$$

4.6 Zakaj je $T = 1$? Kiralna robna stanja

Bistvena konceptualna razlika meritve transporta pri kvantnem Hallovem pojavu je, da so elektroni, ki se gibljejo v različne smeri nahajajo na različnih straneh vzorca. Pravimo, da se pojavijo kiralna robna stanja. Da pride do sipanja v stanje pri enaki energiji, bi se morali stanja prekrivati čez cel



Slika 4.2: A semiklasická slika robnih stanj B. C odvisnost Fermijeve energije od magnetnega polja. Ko magnetno polje znižujemo se zaporedoma polnijo višji Landauovi nivoji.

vzorec, v katerem pa vlada energijska reža. Verjetnost takih procesov je zanemarljiva, zato je $T = 1$. Robna stanja si lahko predstavljamo tudi v semiklasíčni sliki. V njej se ciklotronske orbite na robu vzorca odbijejo, kot kaže slika 4.2 A.

4.7 Formula za več kanalov

Če je kemijski potencial priključkov tak, da k transportu prispeva več kanalov se izraz ustrezno posploši.

4.8 Kaj pa spin?

Na prvi pogled bi pomislili, da je Zeemanov razcep, ki je enak $g\mu_B B = g\hbar B/2m_e$, kjer je m_e masa elektrona, kar enak razmiku med Landauovimi nivoji $\hbar\omega_c = \hbar eB/m$, saj je $g = 2$ za prost elektron. Toda v resnici ni, npr. v GaAs velja, da je $g = -0.44$ in efektivna masa elektronov pa $m = 0.067m_e$, kar skupaj pomeni, da je Zeemanov razcep po velikosti enak $1/70$ ciklotronske frekvence in ga bomo za naše namene zanemarili (torej oba spina prispevata k toku). Razlika postane pomembna pri velikih magnetnih poljih in nekaterih tipih ulomljenega kvantnega Hallovega pojava.

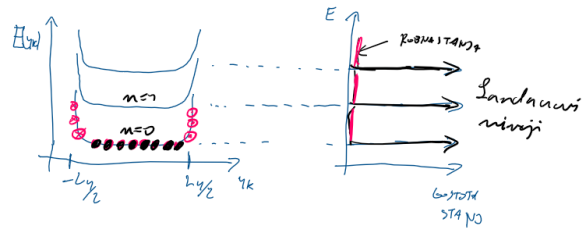
4.9 Vloga nereda

Diskusija kvantizacije Hallovega prevodnosti je do sedaj predpostavila, da ima Fermijev nivo vrednost, ki ustreza vrednosti med dvema Landauovima nivojema. Vzeli smo namreč, da so stanja na obeh robovih povsem razklopljena (in je zato $T = 1$), kar je smiselno, kadar njihova energija ustreza energiji pri kateri bulk stanj ni. Toda, to je mogoče le ob izredno natančni izbiri kemijskega potenciala, oziroma števila elektronov. Nekaj energijske gostote izven Landauovih nivojev sicer prispevajo robna stanja, Slika 4.3, toda njihov prispevek ne narašča z velikostjo sistema in je zanemarljiv v termodinamski limiti. Pri fiksni vrednosti števila elektronov v sistemu ima Fermijeva energija odvisnost, prikazano na sliki 4.2C. Razen za ostre vrednosti magnetnega polja je Fermijeva energija znotraj Landauovega nivoja. Še lažje pa si je predstavljati situacijo, ko pri fiksni vrednosti magnetnega polja v sistem dodajamo elektrone. Pričakujemo, da bo, razen ko ravno zapolnimo en cel Landauov nivo kemijski potencial ustrezal energiji Landauovega nivoja. Kako torej razumeti pojav širokih platojev pri katerih je Hallova prevodnost kvantizirana (v odvisnosti od magnetnega polja ali pa napetosti na vratih)?

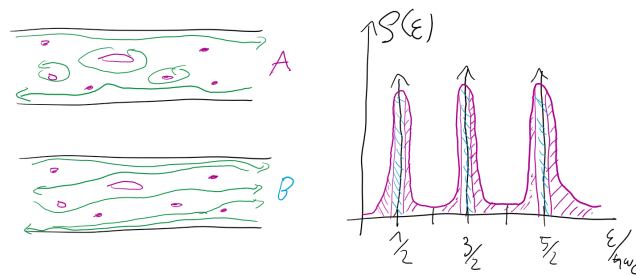
Izkaže se, da za to fiziko ključno vlogo igra nered. Le ta vodi do razširitve vrha v gostoti stanj, saj vpliva na energijske nivoje. Pomembno pri tem je tudi pojav perkolacije ("poplavljanja"). Elektronska stanja ostanejo lokalizirana razen za energije, ki je na sredini med Landauovima nivojema. Elektroni se namreč gibljejo po ekvipotencialnih črtah. Le te so lokalizirane ob dnu (vrhovih) potenciala za nizke (velike) energije, le vmes pa sežejo od ene strani na drugo. Glej Sliko 4.4. To si lahko predstavljamo s polnjenjem tekočine v neravni relief, kjer je tudi potrebna kritična vrednost tekočine, da je vodna gladina enotna.

4.10 Topološki argument

Izkaže se, da je kvantni-Hallov pojav v magnetnem polju samo poseben primer bolj splošnega obnašanja, ki je povezan s topologijo elektronskih stanj.



Slika 4.3: Levo: Energijski nivoji parametrizirani z y_k . Grupna hitrost stanj (enaka nič v notranjosti in pa različnih smeri za robna stanja na obeh robovih) je tudi označena. Desno: gostota stanj je skoraj v celoti podana z razsežno notranjostjo, torej z Landauovimi nivoji, manjši del pa odpade na robna stanja.



Slika 4.4: Lokalizirana energijska stanja v notranjosti (A), delokalizirana energijska stanja v notranjosti (B) in slika gostote stanj v prisotnosti nereda.

Elektronskim stanjem v vzorcu lahko pripišemo topološko invarianto (Chernovo število C), ki je različna od nič, elektronskim stanjem izven vzorca pa $C = 0$. Chernovo število ostane enako ob poljubni deformaciji Hamiltoniana, ki ne zapre energijske reže. Ker sta Chernovi števili znotraj in izven vzorca različni, topološki argument zagotavlja, da se mora energijska reža zapreti nekje vmes. To zagotavlja, da se na robu vzorca pojavijo prevodna robna stanja, čeprav sta notranjost vzorca (Landauovi nivoji) in pa zunanost vzorca izolativni. Do kvantnega-Hallovega pojava lahko nastane tudi v odsotnosti magnetnega polja, kar je prvi napovedal Haldane. V Haldaneovem modelu je simetrija na obrat časa eksplicitno zlomljena, saj so nekateri prekrivalni integrali imaginarni. Takim sistemom, za katere tudi velja, da imajo Chernovo število različno od 0 pravimo topološki izolatorji, ki so predmet obširnih aktualnih raziskav.

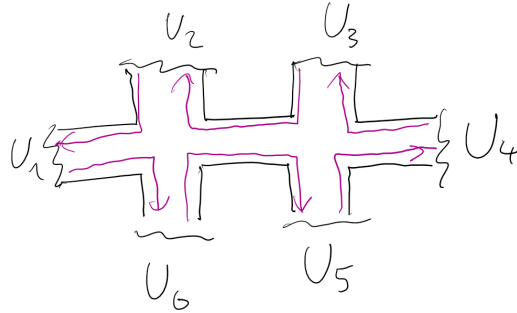
4.11 Robna stanja kršijo Nielsen-Ninomiya teorem

Nielsen-Ninomiya teorem pravi, da mora biti število levo gibajočih in desno gibajočih fermionov enako. To je povezano s tem, da je elektronska disperzija ϵ_k zvezna količina, če je pri nekaterih k hitrost $(1/\hbar)d\epsilon/dk$ pozitivna je za druge negativna. Za primer si predstavljajmo elektrone na obroču v približku tesne vezi. Če pa ta isti primer realiziramo kot robno stanje kvantnega Hallovega pojava, torej, če oblikujemo bazen elektronov v obliki kroga in ga prebudemo z magnetnim poljem, pa bodo elektroni na robu kiralni – gibali se bodo samo v eno smer, odvisno od smeri magnetnega polja.

4.12 Landauerjeva analiza elektronskega transporta

Režim kvantnega Hallovega transporta lahko obravnavamo v okviru Landauerjevega formalizma. Velja

$$I_\alpha = \sum_\alpha G_{\alpha\beta} U_\beta \quad (4.15)$$



Slika 4.5: Primer Hallovega mostička.

Elementi matrike \underline{G} so posebej enostavni. Vsi so enaki ali 1, -1, ali 0. Najbolje si je ogledati primer.

Dobimo

$$G = G_0 \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

Poglavje 5

Topološka pasovna teorija

Quantum mechanics, combined with the elegant mathematics of topology and the practicality of matter, can lead to "really cool things".

D. Haldane, Nobel prize speech

5.1 Model SSH

Pasovni strukturi lahko pripišemo globalne, topološke lastnosti (glej tudi dodatek A). Oglejmo si primer Su-Schrieffer-Heeger modela, ki je bil vpeljan za opis poliacitelenskih verig. Model SSH opisuje gibanje elektronov v 1d v periodični strukturi z dvema orbitalama v osnovni celici. Spin elektronov bomo zanemarili. Zapišemo lahko Hamiltonian

$$H = t_1 \sum_j (|j+1B\rangle\langle jA| + h.c.) + t_2 \sum_j (|j+1A\rangle\langle jB| + h.c.), \quad (5.1)$$

ki opisuje skakanje elektronov med orbitalama A in B v osnovni celici z amplitudo t_1 in pa skakanje z amplitudo t_2 med osnovnimi celicami. Zaradi periodičnosti je uporabno uporabiti opis v Fourierovem prostoru ravnih valov

$|k\rangle$. Med obema bazama pretvarjamo z relacijami $|j\rangle = (1/\sqrt{N}) \sum_k e^{-ikj} |k\rangle$, $|k\rangle = (1/\sqrt{N}) \sum_j e^{ikj} |j\rangle$. Vzeli smo, da je velikost osnovne celice $a = 1$, položaj tako merimo kar s celimi števili j , valovni vektor pa zavzame vrednosti $k = 2\pi/z$, kjer $z \in \mathbb{Z}$.

V k -prostoru je Hamiltonian

$$H = t_1 \sum_k (|kB\rangle\langle kA| + |kA\rangle\langle kB|) + t_2 \sum_k (e^{-ik} |kA\rangle\langle kB| + e^{ik} |kB\rangle\langle kA|). \quad (5.2)$$

Ker je prostor notranjih prostostnih stopenj (torej orbital) dvodimenzionalen, lahko vpeljemo spinorsko notacijo in delovanje operatorjev z ustreznimi Paulijeve matrikami. Zapišemo torej lahko

$$H = \sum_k [(t_1 + t_2 \cos k)\sigma_x + t_2 \sin k \sigma_y] = \sum_k \mathbf{d}(k) \cdot \sigma, \quad (5.3)$$

kjer je $\mathbf{d}(k) = (t_1 + t_2 \cos k, t_2 \sin k, 0)$ in smo definirali vektor Paulijeve matrik $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. Pri vsakem k Hamiltonian ustreza dvonivojskem sistemu in ustrezni lastni energiji sta $\epsilon_k = \pm |\mathbf{d}(k)|$.

Velja $|\mathbf{d}| = \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos k} = \sqrt{(t_1 - t_2)^2 + 2t_1 t_2 (\cos k + 1)}$ in vidimo, da ima Hamiltonian vseskozi, razen za $t_1 = t_2$ energijsko režo. Ker sistem napolnimo z enim elektronom na celico (oz. dvema, če bi upoštevali še spinske prostostne stopnje), imamo, razen za $t_1 = t_2$ opravka z izolatorjem.

Osnovnemu stanju SSH Hamiltoniana, ki ustreza zasedbi vseh energijskih stanj z negativno energijo (za kemijski potencial oziroma Fermijevo energijo izberemo kar 0), lahko pripišemo topološke lastnosti analogne tistim, ki jih opazimo ob študiju točkovnih defektov v feromagnetno urejeni snovi. "Konfiguracijo" sedaj predstavlja preslikava $\tilde{\mathbf{d}}(k)$ (kjer je $\tilde{\mathbf{d}} = \mathbf{d}/|\mathbf{d}|$), ki slika iz prostora valovnih vektorjev v prostor valovnih funkcij.

Opazimo lahko, da je prostor valovnih vektorjev (Brillouinova cona) kompakten (vektorju $-\pi = \pi$) in vsak k torej lahko predstavimo na enotski krožnici S^1 . Prav tako lahko valovni funkciji za naš Hamiltonian ($d_z=0$) pri vsakem k prav tako l pripišemo smer v ravnini, ki jo prav tako podaja točka na enotski krožnici.

Oglejmo si najprej dva ekstremna primera (dimerizirani limiti):

- $t_2 = 0$. Temu primeru pravimo “atomska” (bolj točno bi bilo “molekulska”) limita, saj so osnovne celice med sabo nesklapljene. V tem primeru imamo $\tilde{\mathbf{d}} = (1, 0, 0)$. Osnovno stanje je podano z valovnimi funkcijami, ki pri vsakem k kažejo v x -smeri. Velja $\epsilon = t_1$.
- $t_1 = 0$. V temu primeru (včasih mu rečemo topološka dimerizirana limita) imamo $\tilde{\mathbf{d}}(k) = (\cos k, \sin k, 0)$. Valovna funkcija osnovnega stanja je tako podana s psevdospini, ki opravijo cel krog. Velja $\epsilon = t_2$.

Oba omenjena primera sodita v dimerizirano limito, ko v celotni skakanj po verigi ni in zato energija ni odvisna od momenta. Kljub na videz podobnemu obnašanju v lastnih energijah pa se valovna funkcija obnaša zelo drugače!

Za osnovno stanje SSH modela lahko vpeljemo ovojno število, ki opiše kolikokrat valovna funkcija “obkroži” izhodišče, kar formalno izvednotimo z izrazom

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \int dk \frac{\partial}{\partial k} \tilde{\mathbf{d}} \times \tilde{\mathbf{d}}, \quad (5.4)$$

Za domačo nalogo preveri, da je to smiselna definicija za ovojno število.

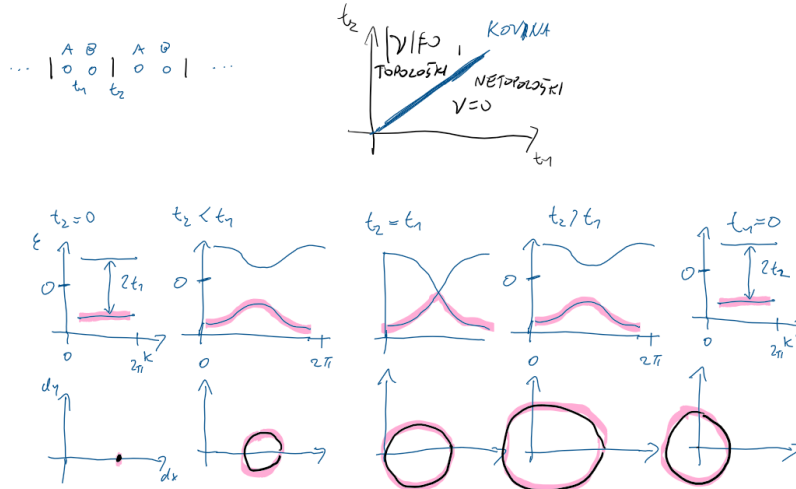
Ovojno število lahko ekvivalentno izvednotimo tudi iz

$$\nu = \frac{i}{2\pi} \text{Tr} [q^{-1} \partial_k q], \quad (5.5)$$

kjer je q blok matrike $Q = 1 - 2P(k)$, kjer je $P(k)$ projektor na osnovno stanje. Za kiralne Hamiltoniane namreč velja, da je Hamiltonian v bazi AB popolnoma izvendiagonalen in zato enako velja tudi

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & q \\ q^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

Za atomsko limito velja $\nu = 0$, za topološko limito pa $\nu = 1$. Kaj pa se zgodi kadar sta t_1 in t_2 oba hkrati končna? Za $t_2 < t_1$ je obnašanje podobno atomski limiti (velja $\nu = 0$), za $t_2 > t_1$ pa topološki limiti ($\nu = 1$). Iz enega obnašanja v drugo pa lahko preidemo le skozi točko, ko se energijska reža



Slika 5.1: Zgoraj: SSH model. V sredini: pasovne strukture. Spodaj $\mathbf{d}(k)$.

zapre ($t_1 = t_2$)! Obnašanje, ki ustreza tem primerom je prikazano tudi na sliki!

Prepoznali smo torej globalno lastnost, skrito v valovnih funkcijah, in ji pripisali t.i. *topološko invarianto*, ki se ob spremembah Hamiltoniana, ki ohranjajo energijsko režo odprto ne spremeni. Za pasovne izolatorje, ki jim pripišemo neničelne vrednosti topološke invariante pravimo, da so *topološki*.

5.1.1 Kiralna simetrija

Ovojno število je topološko ohranjena količina, dokler za Hamiltonian velja $\mathbf{d}(k) = d_x, d_y, 0$, torej $d_z=0$. Ta pogoj lahko povežemo s posebno simetrijsko lastnostjo Hamiltoniana, ki mu pravimo *kiralna simetrija*. Za razliko od standardnih unitarnih simetrij Hamiltoniana, ki jih opišemo z operatorjem transformacije U in za katere velja $U^\dagger H U = H$ (in $U^\dagger = U^{-1}$) kiralno simetrijo Hamiltoniana podaja zveza

$$\Gamma H \Gamma = -H. \quad (5.7)$$

kjer je operator kiralne transformacije Γ unitaren in hkrati tudi Hermitski, torej velja $\Gamma = \Gamma^{-1}$.

Če je $|\psi\rangle$ lastno stanje Hamiltoniana H za katerega velja zveza zgoraj z lastno energijo E , torej $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, potem je $\Gamma|\psi\rangle$ tudi lastno stanje Hamiltoniana H a z energijo $-E$. Preveri, da je temu res tako!

Za primer SSH modela, kot je zapisan zgoraj, je kiralna simetrija podana z operatorjem σ_z . Preveri, da ima σ_z res lastnosti operatorja kiralne transformacije in pa da SSH model ima kiralno simetrijo!

Kiralni simetriji pravimo tudi pod mrežna simetrija. Vpeljemo lahko projektorja $P_A = (\hat{1} + \Gamma)/2$ in pa $P_B = (\hat{1} - \Gamma)/2$, ki valovno funkcijo izprojicirata na pod mreži orbital A in B

Za kiralno simetrične Hamiltoniane velja $P_A H P_A = P_B H P_B = 0$, sistem ima torej kiralno simetrijo, kadar Hamiltonian iz stanj na pod mreži A ustvari izključno stanja na pod mreži B in obratno.

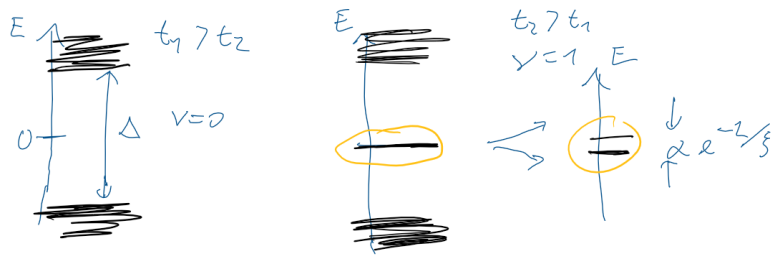
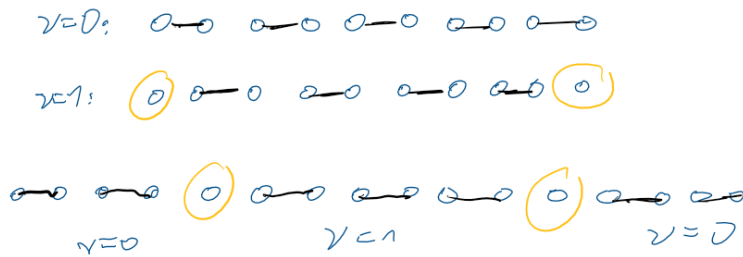
5.1.2 Korespondenca med robovi in robnimi stanji

Kadar obravnavamo topološke izolatorje končnih dimenzij z odprtimi robnimi pogoji, pride do pojava topološko zaščitene robnih stanj z nenavadnimi lastnostmi. Za primer SSH modela se le-ta pojavijo pri energiji 0, njihovo število pa je podano z razliko med ovojnim številom notranjosti in zunanosti. Pojav robnih stanj je najlažje razumeti v dimerizirani limiti.

Robna stanja preživijo tudi izven dimerizirane limite. V tem primeru valovna funkcija robnih stanj seže tudi v notranjost, ampak z amplitudami, ki naglo padajo, ko se premikamo v notranjost. $\psi_i \sim \exp(-i/\zeta)$, kjer je ζ lokalizacijska dolžina, ki pada z naraščanjem energijske reže.

Robna stanja se malenkost prekrivajo in njihova hibridizacija vodi do lastnih stanj ψ_{\pm} , ki sta od energije 0 ločeni z majhnim razcepom $E_{\pm} \sim \pm t_1 \exp(-L/\zeta)$, ki eksponentno pada z razmikom med robnimi stanji.

Robna stanja se ne pojavijo samo na robu med topološko notranjostjo in pa praznim prostorom, pač pa tudi v notranjosti sistema, če je sistem nehomogen in sestavljen iz delov, ki jim lahko pripišemo različne vrednosti topoloških invariant.



Slika 5.2: Robna stanja v SSH modelu. Zgoraj: v dimerizirani netopološki limiti robnih stanj ni, v dimerizirani topološki limiti pa se pojavijo (sredina). Prav tako se robna stanja pojavijo v notranjosti na mejah, ki ločujejo notranjost z različnimi vrednostmi topološke invariante (spodaj). Nižje: energijska razporeditev stanj za sistem z robom v netopološki limiti (levo) in topološki limiti (sredina). Na desni je povečava srednje slike in ilustrira energijski razcep med robnimi stanji, ki je majhnen a končen zaradi končne dolžine sistema.

Za primer SSH modela se na domenskih stenah tako pojavijo elektronska stanja. Zanimivo je, da elektronskim stanjem teh domenskih sten pripišemo polovični naboj. Elektronsko stanje je namreč delokalizirano na dve domenski steni, ki sta prostorsko daleč narazen. Če se domenska stena lahko giblje (kar se zgodi v poliacetilenu, kjer je položaj domenske stene podan z mrežno deformacijo poliacetilenske verige, potem imamo opravka z gibljivimi eksitacijami s polovičnim nabojem. Pojavu, da imajo eksitacije večdelčnih sistemov lahko naboj, ki ustreza delu osnovnega naboja, pravimo frakcionalizacija naboja.

5.1.3 Robustnost na vključitev dodatnih orbital in nered

Zaradi enostavnosti smo našo obravnavo omejili na primer dveh orbital v osnovni celici in se ukvarjali s Hamiltoniani s translacijsko invarianco. Izkaže pa se, da lahko topološke invariante formuliramo na način, ki dovoljuje več orbital. Topološke invariante lahko formuliramo tudi z zapisom v realnem prostoru in njihova vrednost se ohranja tudi ko v Hamiltonianu dovolimo nered, dokler ta ni tako močan, da se energijska reža zapre.

5.2 Drugi topološki sistemi

Izkaže se, da imamo celo družino topoloških izolatorjev in topoloških invariant, v odvisnosti od dimenzionalnosti in pa neunitarnih simetrij sistema (poleg kiralne simetrije je za obstoj topoloških invariant pomemben še obstoj antiunitarne simetrije na obrat časa, ki je podana s $THT^{-1} = H^*$ in je T antiunitarni operator obrata časa $TiT = -i$ in pa obstoj antiunitarne simetrije na obrat naboja C , torej $CHC^{-1} = -H^*$; torej simetrija na obrat naboja je podobna kiralni, le da hkrati še opravimo kompleksno konjugacijo).

5.2.1 Chernov izolator

Omenili bomo primer Chernovega izolatorja, ki je topološki izolator v dveh dimenzijah v odsotnosti vseh simetrij (torej zlomljene so simetrije T, C in

Γ. Translacijsko invariantni Chernov izolator lahko opišemo s

$$H_{\mathbf{k}} = \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (5.8)$$

kjer je $\mathbf{k} = \{k_x, k_y\}$ in pa $\mathbf{d} = \{d_x, d_y, d_z\}$. Vektor $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ sedaj ustreza poljubni smeri v treh dimenzijah in prostor valovnih funkcij lahko torej predstavimo s točko na enotski sferi (Blochovi sferi). Iz klasifikacije topoloških defektov (dodatek) vemo, da je druga homotopska grupa $\pi_2(\mathcal{S}^2) = \mathbb{Z}$. Ta klasifikacija preživi, čeprav je topologija Brillouinove cone (torej prostora, iz katerega slika preslikava $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ torus in ustrezni topološki invarianti pravimo Chernovo število.

Podobno, kot je ovojno število podalo število ovojev *krivulje* \mathbf{d} okrog izhodišča, je Chernovo število podano s tem kolikokrat *ploskev*, ki jo podaja $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ objame točko $\mathbf{d} = 0$.

Matematično lahko Chernovo število za dvoorbitalni translacijsko invarianten izolator iz vrednotimo z izrazom

$$C = \frac{1}{4\pi} \int_{B.Z.} d\mathbf{k} \tilde{\mathbf{d}} \cdot (\partial_{k_x} \tilde{\mathbf{d}} \times \partial_{k_y} \tilde{\mathbf{d}}), \quad (5.9)$$

ali pa, ekvivalentno z

$$C = \frac{1}{2\pi} \int d\mathbf{k} (\partial_{k_x} A_y - \partial_{k_y} A_x), \quad (5.10)$$

kjer je $A_i = -\langle \psi(k_x, k_y) | \partial_{k_i} \psi(k_x, k_y) \rangle$ Berryjeva povezava zasedenega elektronskega stanja, integrand pa je Berryjeva povezava. Za praktične izračune pa je najbolj prikladna formulacija s projektorji:

$$C = \frac{1}{2\pi i} \int d\mathbf{k} \text{Tr} P(k) [\partial P / \partial k_x \partial P / \partial k_y - \partial P / \partial k_y \partial P / \partial k_x], \quad (5.11)$$

kjer je $P = |\psi(\mathbf{k})\rangle\langle\psi(\mathbf{k})|$ projektor na osnovno stanje.

Izkaže se, da se na 1d robu Chernovega izolatorja tudi pojavijo robna stanja. Njihovo število je podano z razliko vrednosti C v notranjosti in zunanosti. Vakuum ustreza netopološki vrednosti $C = 0$. Torej, število robnih stanj ustreza Chernovemu številu v notranjosti. Robna stanja Cher-

novega števila so *kiralna*, gibljejo se samo v eno smer. Celoštevilsko kvantno Hallovo stanje je poseben primer Chernovega izolatorja.

Prvi primer stanja, ki mu danes pravimo Chernov izolator v odsotnosti magnetnega polja je odkril Duncan Haldane leta 1988 (Nobelov nagrajenec 2016 skupaj s Thoulessom in Kosterlitzom. Haldane je slovenskega rodu, njegova mama je Slovenka) in sicer na primeru grafenske rešetke, v kateri je zlomil simetrijo na obrat časa z vpeljavo kompleksnih prekrivalnih integralov na način, ki ustreza nični vrednosti zunanega magnetnega polja.

Primer Chernovega izolatorja na kvadratni mreži je t.i. QWZ model, ki je podan z

$$\mathbf{d}(k_x, k_y) = \{\sin k_x, \sin k_y, u + \cos k_x + \cos k_y\}, \quad (5.12)$$

in v realnem prostoru ustreza skakanjem moduliranim z $\sigma_z + i\sigma_x$ v x smeri in z $\sigma_z + i\sigma_y$ v y smeri.

Še en primer Chernovega izolatorja je prikladen za ilustracijo pojava robnih stanj. Zapišimo najprej 1d Hamiltonian (mimogrede, ta Hamiltonian ustreza t.i. Kitaevi verigi)

$$H_1(k_x) = -(2t \cos k_x + \mu)\sigma_z + \Delta \sin k_x \sigma_y \quad (5.13)$$

Za $\mu = -2t$ in majhne k_x gre $H_1 \rightarrow \Delta k_x \sigma_y$, kar pomeni, da imamo tam par stanj z linearno in obratno disperzijo $\sigma_y \pm 1$. Sedaj v opis vpeljemo še y koordinato, kar bomo opisali z indeksom j .

$$H = \sum |j\rangle\langle j| H_1(k_x) |k_x\rangle\langle k_x| + H' \quad (5.14)$$

kjer člen H' sklaplja 1d verige. H' izberemo tako, da sklopimo levo gibajoči se elektron iz verige j z desnogibajočim se elektronom iz verige $j + 1$, torej

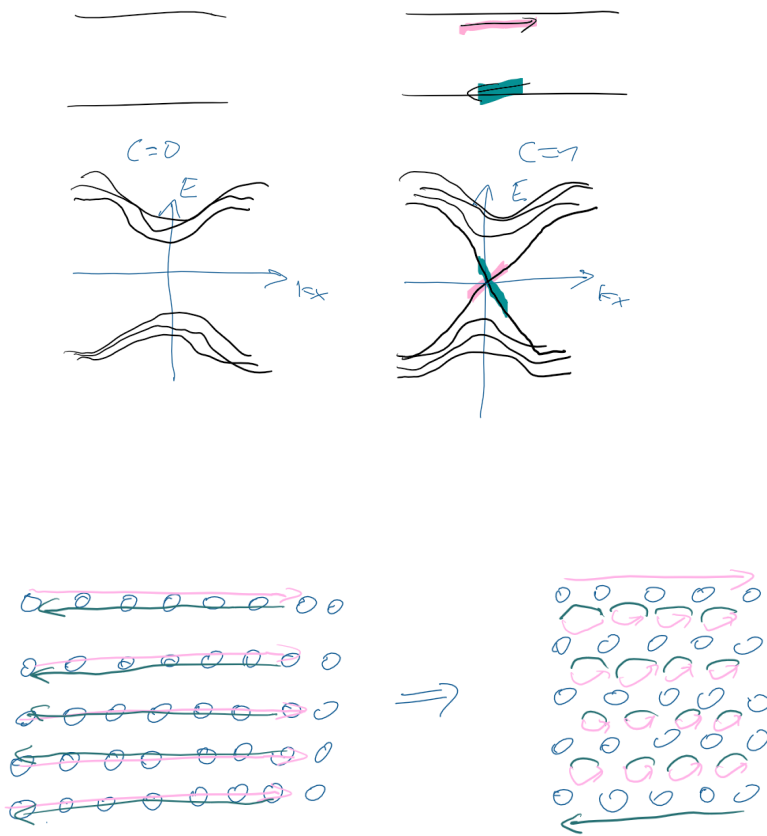
$$H' = t' \sum |j\rangle\langle j+1| \sigma^+ + h.c., \quad (5.15)$$

kjer je $\sigma^+ = \sigma_z + i\sigma_x$. Če si ta Hamiltonian zamislimo v geometriji traka, si ni težko predstavljati, da imamo na robovih kiralna robna stanja, glej

Slika 7.1.

5.2.2 Z_2 izolator

V primeru, ko imamo časovno invarianco pa je topološka invarianta podana s parnostjo. Prvi primer Z_2 izolatorja je bil teoretsko napovedan 2006 in eksperimentalno opažen (prek anomalnega spinskega Hallovega pojava) leta 2007.



Slika 5.3: Zgornja polovica slike: Energijska stanja v Chernovem izolatorju z robom. Za neničelne vrednosti Chernovega števila se znotraj energijske reže pojavijo kiralna robna stanja. Spodnja polovica slike: poseben primer Chernovega izolatorja, ki ga sestavimo s sklapanjem 1d verig pri čimer sklopimo vedno zgolj levo gibajoče se elektrone iz zgornje verige z desnogibajočimi se elektroni iz spodnje verige.

Poglavje 6

Ulomljeni kvantni Hallov pojav

Pri zelo čistih vzorcih dobimo platoje Hallove upornosti tudi pri drugih vrednostih

$$R_H^{-1} = \frac{n}{m} e^2/h, \quad (6.1)$$

kjer sta n in m celi števili. Temu pravimo ulomljeni kvantni Hallov pojav, opažen je bil leta 1982 zanj pa je bila podeljena Nobelova nagrada (leta 1998, Laughlin, Stoermer, Tsui). Za opis tega *ulomljenega* kvantega Hallovega pojava (angl fractional quantum Hall effect, FQHE) je potrebno upoštevati elektronske interakcije. V nekaterih primerih (za $n = 1$, m lih) je dober približek točne rešive Laughlinova valovna funkcija

$$\Psi(z_1, \dots, z_n) = \prod_{i>n} (z_i - z_n)^m \prod_i \exp\left(-\frac{z_i^2}{4l_B^2}\right) \quad (6.2)$$

Tu $z_i = x_i + iy_j$. Nizkoenergijske eksitacije tega osnovnega stanja so t.i. anyoni, ki imajo statistiko, ki ni niti fermionska, niti bozonska. Se pravi, ob izmenjavi dveh delcev dobimo fazo, ki ni enaka niti 1 niti -1.

6.1 Bozoni, Fermioni, Anyoni

Obnovimo najprej splošni argument. Oglejmo si valovno funkcijo dveh delcev $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, kjer sta $\mathbf{r}_i \in \mathbb{R}^d$ in d dimenzija. Ker so kvantni delci identični mora valovna funkcija, kjer sta delca izmenjana opisovati isto kvantno stanje, zato velja:

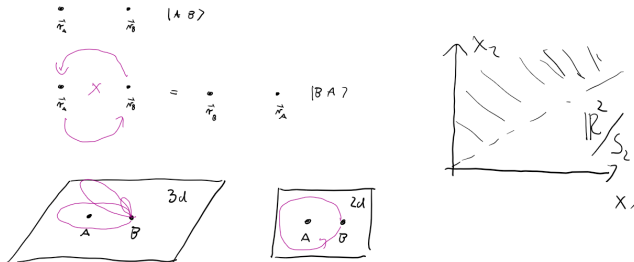
$$\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = e^{i\alpha} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (6.3)$$

Če izmenjavo ponovim dvakrat dobim

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i2\alpha} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (6.4)$$

iz česar sledi $2\alpha = n2\pi$, kar pomeni $\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \pm \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ kar ustreza bozonski in fermionski statistiki.

Izkaže se, da je enačba Eq. 6.4 velja za $d \geq 3$, v $d = 2, 1$ pa je α poljubno število. Bolj točna izpeljava, ki pravilno opiše ta različna obnašanja temelji na kvantizaciji, ki začne z opazko, da je konfiguracijski prostor N delcev v resnici $(\mathbb{R}^d)^N / S_N$, kjer je S_N grupa permutacij med N delci (za izpeljavo si oglej Ref. [LeinaasMyrheim]), osnovno razliko med dimenzionalnostmi pa lahko razumemo tudi iz topološkega argumenta, ki opisuje kaj delci delajo v običajnem konfiguracijskem prostoru $(\mathbb{R}^d)^N$. Operacijo izmenjave delcev s položaja $(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \rightarrow (\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A)$ lahko predstavimo s procesom, ko delca zavrtimo okrog središčne točke (ali pa, ekvivalentno en delec zavrtimo okrog drugega in potem oba premaknemo za razdaljo med njima), tako da vzpostavimo stanje $(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A)$. Če ta proces dvakrat ponovimo, se vrnemo v začetno stanje $(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B)$. V treh ali več dimenzijah je operacija topološko ekvivalentna identični operaciji, saj lahko pot delcev premaknemo iz ravnine in krivuljo zvezno skrčimo v točko, v dveh dimenzijah pa tega ne moremo napraviti (slika. Če v dveh dimenzijah en delec za cel krog zavrtimo okrog drugega, to topološko ni ekvivalentno temu, da nismo napravili nič. Grupa, ki opisuje izmenjave delcev v 2d je grupa kit ("braid group"). (Bolj točno je faza, ki jo delci pridobijo ob izmenjavi diskutirana v Ref. [Tong]. Faza, ki jo kvazi-delec pridobi ob izmenjavi je statistična faza in je na nek način analogna Aharonov-Bohmovi fazi.) V eni dimenziji pa proces izmenjave ni tako



Slika 6.1: Operacija izmenjave delcev spremeni valovno funkcijo z delcem pri A in delcem pri B v valovno funkcijo z delcem pri B in delcem pri A. Če to operacijo ponovimo, dobimo začetno konfiguracijo, pri operaciji pa drugi delec opiše cel krog okrog prvega. Ta operacija je v treh in več dimenzijah topološko ekvivalentna temu, da ne napravimo nič saj lahko pot delca zvezno spremenimo v točko. V dveh dimenzijah pa to n mogoče. Na desni strani pa je skiciran konfiguracijski prostor dveh identičnih delcev, ki se gibljeta v eni dimenziji.

zanimiv, saj ob izmenjavi delca nujno gresta eden skozi drugega in učinka izmenjave in interakcije med delcema ne moremo razlikovati.

6.2 Kompozitni fermioni

V splošnem lahko del fizike FQHE razumemo v okviru kompozitnih fermionov, to je kompozitnih delcev, ki nosijo poleg naboja tudi magnetni fluks.

6.3 Ulomljen naboj

Nizko-energijske eksitacije nimajo zgolj ulomljene statistike, pač pa je njihov naboj prav tako le del naboja elektrona (npr., v Laughlinovih stanjih $n = 1$ je naboj enak e/m).

Pojav, v katerem imajo lahko eksitacije v večdelčnih sistemih delni naboj si oglejmo na bolj enostavnem primeru dimeriziranih verig. Obravnavajmo enodimenzionalno dimerizirano verigo in pozabimo na spinske prostostne

stopnje. (Gre za t.i. Su-Schrieffer-Heeger model za poliacetilen. K njemu se bomo vrnili proti koncu kurza.) Elektroni zapolnijo vezno orbitalo in imamo situacijo z enim elektronom na osnovno celico. Pravzaprav ima sistem dve energijsko enaki možnost, kot kaže slika. Imenujmo ti fazi (povezani za premik za polovico osnovne celice 1 in 2) Oglejmo si eksitacijo sistema, ko en elektron iz sistema vzamemo. S pojavom te vrzeli se lahko elektroni na sosednjih mestih prerazporedijo in eksitacija je razpadla na dve domenski steni. Med njima opazimo fazo 2, izven tega območja pa izvirno fazo 1. Vrnimo se k naboju. Glede na to, da je izvirni naboj, glede na osnovno stanje enak e_0 ima vsaka od domenskih sten naboj $e_0/2!$

V primeru ulomljenega QHE je bil ulomljen naboj opažen z meritvami šuma (ang. shot-noise, glej npr. stran 47 v Nazarovu) zaradi diskretnega naboja nosilcev. Opazili so, da Hallov tok ob zožitvi pri kateri pride do sipanja robnih stanj fluktuirata tako, ko bi bil naboj ulomljen.

6.4 Diskusija Laughlinove valovne funkcije

Za razumevanje oblike Laughlinove valovne funkcije si je koristno najprej ogledati Landaouve nivoje v simetrični umeritvi $\mathbf{A} = (By/2, -Bx/2, 0)$. Lastne valovne funkcije za najnižji Landauov nivo so v tem primeru

$$\psi_j = z^j e^{-\frac{|z|^2}{4l_B^2}}, \quad (6.5)$$

kjer je $z = x + iy$. Elektronska gostota v ψ_j ima maksimum pri polmeru $R_j = \sqrt{2j}l_B$. Zanimivo si je pogledati število zasedenih stanj na področju oblike diska. Če predpostavimo, da so zasedene vse lastne funkcije z $j \leq N$, potem približno velja, da je zasedena površina $S = \pi R_N^2 = 2\pi l_B^2 N = 2\pi\hbar N/eB$ in velja $BS = N(\hbar/e)$, kar je konsistentno z rezultati, ki smo jih dobili v Landaouvi meritvi, torej, da je degeneracija nivoja podana z $BS/(\hbar/e)$.

Če vpeljemo kreacijski operator za valovno funkcijo $|\psi_m\rangle = c_m^\dagger|0\rangle$, kjer je $|0\rangle$ vakuumsko stanje, lahko večdelčno stanje, ki ustreza popolnoma zase-

denemu Landauovemu nivoju opišemo z

$$\Psi(z_1, \dots, z_N) = \prod_i c_i^\dagger |0\rangle = \left(\prod_{i<j} (z_i - z_j) \right) e^{-\sum_i \frac{|z_i|^2}{4l_B^2}}, \quad (6.6)$$

kjer je

$$\prod_{i<j} (z_i - z_j) = \begin{vmatrix} 1 & z_1 & z_1^2 & \cdots & z_1^{n-1} \\ 1 & z_2 & z_2^2 & \cdots & z_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & z_n & z_n^2 & \cdots & z_n^{n-1} \end{vmatrix} \quad (6.7)$$

Vandermondova determinanta.

Laughlinova valovna funkcija je torej generalizacija oblike za popolnoma zaseden Laughlinov nivo

$$\Psi(z_1, \dots, z_N) = \left(\prod_{i<j} (z_i - z_j)^m \right) e^{-\sum_i \frac{|z_i|^2}{4l_B^2}} \quad (6.8)$$

(ki je seveda ne moremo opisati kot produkt enodelčnih funkcij). Delci v valovni funkciji se en drugega ogibajo (imamo ničlo stopnje m za situacije, ko sta dva delca na istem mestu). Faktorji z_i se v Laughlinovi valovni funkciji pojavijo s potenco, ki je za faktor m večja od tiste, ki jo imamo v enodelčnih stanjih. Zato valovni funkciji za N delcev, kjer je maksimalna potenca z_i^{Nm} pripišemo radij $R_{Nm} = \sqrt{2Nm}l_B$. Površina diska, ki jo zasedejo elektroni v Laughlinovi valovni funkciji je tako za faktor m večja kot tista za popolnoma zaseden Laughlinov nivo z istim številom elektronov. Iz tega sklepamo, da je zapolnitveno razmerje $1/m$.

6.5 Vzbuđitve Laughlinove valovne funkcije

Valovno funkcijo vzbuđitev je Laughlin izdelal s konstrukcijo v katerem je v sistem vpeljal dodaten lokalni magnetni pretok. Da bomo to konstrukcijo razumeli, si je ugodno najprej ogledati enostavnejši primer.

6.5.1 Spektralni tok v obroču

Oglejmo si primer elektrona na obroču z radijem r . Skozi os obroča naj gre lokalizirano magnetno polje s celotnim pretokom Φ_1 . Magnetno polje lahko opišemo z $\mathbf{A} = \frac{\Phi_1}{2\pi r} \hat{e}_\phi$. Če dodatno definiramo $\Phi_1 = c_\Phi h/|e|$, kjer je c_Φ magnetni pretok v enotah kvanta magnetnega pretoka, potem lahko Schroedingerjevo enačbo (ohranimo zgolj kotno odvisnost valovne funkcije) zapišemo v obliki

$$H\psi = \frac{1}{2m} \left(p_\phi/r - e \frac{\Phi_1}{2\pi r} \right)^2 \psi = \frac{1}{2mr^2} (-i\hbar\partial_\phi + \hbar c_\Phi)^2 \psi \quad (6.9)$$

Rešitve Hamiltoniana so $\psi = e^{in\phi}$ (kjer je n celo število, da je valovna funkcija gladka) in ustrezajo lastnim energijam $E_n = (\hbar^2/2mr^2)(n + c_\Phi)^2$. Denimo, da magnetni pretok skozi obroč počasi spreminjamo z vrednosti $c_\Phi = 0$ na vrednost $c_\Phi = 1$. Energije valovnih funkcij se s Φ spreminjajo kot kaže slika, in ko smo dodali cel kvant magnetnega pretoka dosežejo enake vrednosti, kot so jih imele na začetku, vloga valovnih funkcij pa se med sabo izmenja. Npr. $\psi_0 = 1$ ima za magnetni pretok h/e energijo E_1 in tako naprej. Glej Sliko 6.2.

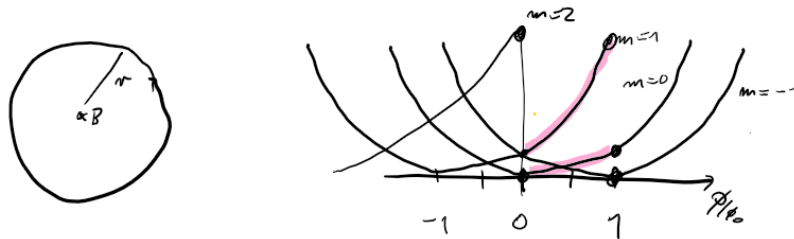
Rezultat lahko interpretiramo tudi tako, da smo z vpeljavo magnetnega pretoka sistemu predali sunek navora, ki je povečal vrednost vrtilne količine. Ker Hamiltonian ne vsebuje členov, ki bi različne vrednosti vrtilne količine mešali med seboj se v točkah, kjer sta dve stanji degenirani stanje sledi poti kot bi križanja ne bilo.

6.5.2 Valovna funkcija za vrzel

Valovna funkcija za vrzel na mestu z_0 je

$$\Psi_v(z_0; z_1, z_2, \dots, z_N) = \prod_{j=1}^N (z_j - z_0) \Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N). \quad (6.10)$$

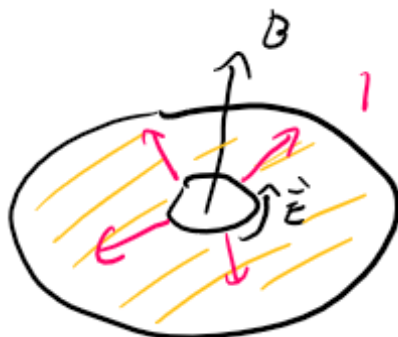
Tej vrzeli ustreza primanjkljaj naboja s celotno vrednostjo $-e/m$ v bližini točke z_0 . Če bi namreč ustvarili m vrzeli na istem mestu in z_0 promovirali



Slika 6.2: Kvantni problem elektrona na obroču z prisotnosti magnetnega pretoka skozi obroč. Spreminjanje lastnih energij z magnetnim pretokom. Stanje $e^{im\phi}$ za $m = 0$ v odsotnosti magnetnege pretoka dobi vrtilno količino, ki ustreza stanju z $m = 1$, če adiabatsko povečamo magnetni pretok za en kvant magnetnega pretoka.

v dinamično spremenljivko bi dobili izraz, ki ustreza Laughlinovi valovni funkciji za $N+1$ elektronov. Ker pa z_0 ni dinamična spremenljiva, ta valovna funkcija opisuje primanjklaj naboja v ustrezni vrednosti.

Valovno funkcijo za vrzel lahko ustvarimo tudi tako, da vzorec prebudemo z lokaliziranim magnetnim pretokom, ki ga adiabatsko povečamo iz vrednosti 0 na Φ_0 . Denimo, da tak fluks vpeljemo pri $z_0 = 0$. Vsa enodelčna lastna stanja ob tej operaciji preidejo sama vase na način, da se jim poveča vrtilna količina za \hbar , enako kot v primeru za obroč. To spremembo opišemo na Laughlinovi valovni funkciji s produktom $\prod_j z_j$, kar pa je ravno valovna funkcija vrzeli.



Slika 6.3: Corbinova geometrija z označeno smerjo električnega polja in tokom, ki teče iz notranjosti diska proti zunanosti.

6.6 Ulomljena kvantizacija Hallove prevodnosti v Corbinovi geometriji

Kvantizacijo Hallove prevodnosti lahko razumemo iz pojava kiralnih robnih stanj analogno situaciji v celoštevilskem Hallovem pojavu, le da sedaj delci, ki se gibljejo po kiralnih robnih stanjih nosijo ulomljeni naboj e/m . Kvantizacijo pa lahko razumemo tudi s konstrukcijo v Corbinovi geometriji.

Obravnavajmo najprej primer celoštevilskega Hallovega pojava na geometriji diska z vrzeljo na sredini. Denimo, da skozi disk pošljemo časovno spreminjajoč se magnetni pretok. Po elektrodinamski zvezi velja $\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{A}$. Izberimo tak vektorski potencial, da ustreza homogenemu električnemu polju, ki kaže v smeri oboda obroča. Ko magnetni pretok naraste za h/e (analogno diskusiji za obroč zgoraj) vsa enodelčna lastna stanja preidejo v lastna stanja z vrtilno količino, ki je za \hbar večja, torej $z^j \rightarrow z^{j+1}$. Stanja so se torej premaknila proti zunanosti obroča in natanko en elektron je stekel z obroča v vakuum, na notranjem robu pa se je ustvarila vrzel. Denimo, da je ta proces trajal čas t_0 . Imamo torej radialno gibajoč se tok $I = e/T$, ki

ga poganja napetost $V = \int \partial_t \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \Phi_0/T$ zato je razmerje med tokom in napetostjo $I/V = e^2/h$. Dobimo kvantizacijo Hallove upornosti!

Pomembno se je zavedati, da v teh razlagah tok elektronov teče skozi celotni vzorec in ne zgolj po robu. Gre torej za kvantizacijo *specifične Hallove prevodnosti*. Izkaže se, da je tudi za sistem brez robov Hallova prevodnost kvantizirana in enaka Chernovemu številu.

Ulomljeni kvantni Hallov pojav obravnavamo popolnoma analogno, le da se sedaj cel elektron premakne iz sistema šele ko v sistem dodamo m kvantov magnetnega pretoka.

Poglavje 7

Grafen

7.1 Klein-Gordonova in Diracova enačba

Poiskati želimo ekvivalent Schroedingerjeve enačbe, ko postanejo hitrosti velike in moramo upoštevati relativistične efekte. Schroedingerjeva enačba sledi iz kvantizacije zveze $E = p^2/2m$ z uporabo

$$E \rightarrow i\hbar\partial_t, p \rightarrow -i\hbar\nabla. \quad (7.1)$$

Klein-Gordonovo enačbo, ki je najbolj enostavna relativistična posplošitev Schroedingerjeve enačbe izpeljemo na enak način, le da začnemo iz relativistične zveze med energijo in momentom

$$E^2 = m^2c^4 + c^2p^2. \quad (7.2)$$

Uporabimo zvezo Eq. 7.1. Dobimo

$$(-\hbar^2\partial_t^2 + \hbar^2\nabla^2c^2 = m^2c^4)\psi, \quad (7.3)$$

kjer delujemo na ψ z levo in desno stranjo enačbe. Če vstavimo nastavek za ravni val $\psi = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - iEt/\hbar)$, dobimo nazaj zvezo Eq. 7.1 z $p = \hbar k$. Klein-Gordonova enačba ima nekaj lastnosti, ki jih ni enostavno interpretirati: predznak energije je poljuben $E = \pm\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$, gostota verjetnosti je

sorazmerna z $\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*$, kar ni nujno pozitivna količina. Te lastnosti se razreši v kvantni teoriji polja. V tem kontekstu Klein-Gordonova enačba pravilno opiše delce brez spina, npr. mezone.

Relativistična enačba za fermione pa je Diracova enačba. Dirac je svojo enačbo našel tako, da je iskal koren Eq. 7.3, torej diferencialni operator linearne reda oblike

$$i\hbar A \partial_t - i\hbar c B_i \partial_i, \quad (7.4)$$

ki bi ob dvojnem delovanju vrnil zvezo Eq. 7.3 (tu in v preostanku te sekcije bomo uporabljali Einsteinovo konvencijo za sumacijo po ponovljenih indeksih, indeksa i, j bosta označevala prostorske komponente x, y, z , gr{s}ki indeksi pa komponente četvercev). Izkaže se, da temu lahko zadostimo, če so A in B_i matrike. Po kvadriranju dobimo

$$-A^2 \hbar^2 \partial_t^2 - c^2 \hbar^2 (1/2) (B_i B_j + B_j B_i) \partial_i \partial_j - \hbar^2 c (A B_i + B_i A) \partial_t \partial_i, \quad (7.5)$$

kjer smo člen $B_i B_j \partial_i \partial_j$ razširili v obliko zgoraj (odvoda komutirata, in preimenujemo indeks sumacije). Operator zgoraj je Klein-Gordonove oblike, če velja $A^2 = 1$, in antikomutatorji $\{A_i, B\} = 0, \{B_i, B_j\} = -2\delta_{ij}$. Uporablja se notacija $A = \gamma^0, B_i = \gamma^i$. Potem mora veljati $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}$, kjer je η metrika Minkovskega. Pogojem lahko zadostimo, če so γ^μ matrike 4×4 . Obstaja več možnih izbir (upodobitev) za matrike γ . Mi bomo diskutirali dve izbiri. Diracova upodobitev je

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}; \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}; \beta^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.6)$$

kjer so σ_i Paulijeve matrike in smo definirali še $\beta^i = \gamma^0 \gamma^i$. Weylova upodobitev pa je

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix}; \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}; \beta^i = \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & -\sigma_i \end{pmatrix}; \quad (7.7)$$

$$\gamma^5 = \gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (7.8)$$

Če v relativistični notaciji definiramo še $\partial_0 = \partial_t/c$ in $p_0 = i\hbar\partial_0$, potem lahko zapišemo Diracovo enačbo

$$(\gamma^\mu p_\mu = mc)\Psi, \quad (7.9)$$

kjer je Ψ 4-komponentni stolpec valovnih funkcij.

7.1.1 Masivni mirujoč delec

Pomnožimo Diracovo enačbo z γ^0 .

Uporabimo nastavek za ravni val, $\Psi = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - iEt/\hbar)\Psi_0$. Postavimo $\mathbf{k} = 0$.

$$E\Psi_0 = \gamma^0 mc^2 \Psi_0 = mc^2 \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \Psi_0 \quad (7.10)$$

Dobimo 2 rešitvi s pozitivno energijo $E = mc^2$ $\Psi_0 = (1, 0, 0, 0), (0, 1, 0, 0)$ in 2 rešitvi z negativno energijo $E = -mc^2$ $\Psi_0 = (0, 0, 1, 0), (0, 0, 0, -1)$ (le te ustrezajo antidelcu: bolj natančno, vzame se, da so stanja z negativno energijo zasedena, vrzel v teh stanjih pa se interpretira kot antidelec). Ostala prostostna stopnja ustreza spinu.

7.1.2 Splošna rešitev v nerelativistični limiti

Skicirajmo glavne poteze splošne rešitve v nerelativistični limiti.

Tudi za gibajoče delce rešitev za majhne vrednosti momenta ostane podobna (dve komponenti valovne funkcije sta mnogo večji od drugih dveh). V tej limiti valovno funkcijo teh dveh komponent opišemo (brez dokaza) z rešitvijo Schroedingerjeve enačbe s Hamiltonianom

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) + mc^2 - \frac{e\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{E} \times (\mathbf{p} - e\mathbf{A})] + \dots \quad (7.11)$$

Poleg mirovne energije se pojavi še Zeemanov člen in pa člen, ki je povezan z energijo spin-tir. Za električno polje okrog ionov vzamemo $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -(dV/dr)\mathbf{r}/r$ in dobimo $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}$, kjer je $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Sklopitev spin-tir narašča s hitrostjo spreminjanja $V(r)$ in zato narašča z vrstnim številom jeder in

postane znatna za težje atome.

7.1.3 Brezmasni delec

V nadaljevanju se bomo zlasti zanimali za brezmasni delec, se pravi fermion v ultrarelativistični limiti. V tem primeru je ugodno uporabiti Weylovo umeritev. Zopet Diracovo enačbo pomnožimo z γ_0 in uporabimo nastavek za ravni val, a pri neničelni vrednosti k . Dobimo

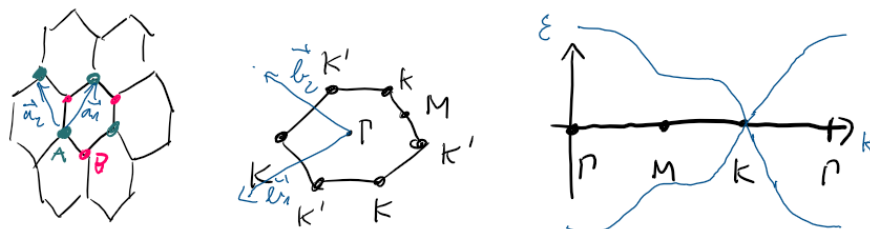
$$E\Psi_0 = c \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \end{pmatrix} \Psi_0 \quad (7.12)$$

Zopet Diracova enačba razpade na dva bloka. Energijo podaja sučnost, to je projekcija spina na moment, $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$, predznak energije pa je dodatno odvisen od tega ali smo v zgornjem ali spodnjem bloku (kar podaja tudi lastna vrednost operatorja γ^5 , ki mu pravimo ročnost).

7.2 Elektronska disperzija v grafenu pri nizkih energijah

Grafen je polkovina, se pravi je polprevodnik v katerem se valenčni in prevodni pas dotikata, tako da energijske reže ni. Grafen je sestavljen iz ogljikovih atomov na mreži v obliki satovja, kar je trikotna mreža z dvema ogljikovima atomoma v osnovni celici. Za vektorja Bravaisove mreže lahko izberemo $\mathbf{a}_{1,2} = a(\pm 1/2, \sqrt{3}/2)$. Ustrezna vektorja recipročne mreže sta $\mathbf{b}_{1,2} = (2\pi/a)(\pm 1, 1/\sqrt{3})$. Brillouinova cona ima obliko šestkotnika. Ogljišča Brillouinove cone podajata vektorja $\mathbf{K} = (1/3)\mathbf{b}_2 - (1/3)\mathbf{b}_1$ in $\mathbf{K}' = (-1/3)\mathbf{b}_2 + (1/3)\mathbf{b}_1$ ter njune rotacije za $2\pi/3$ okrog osi z .

Elektronska stanja blizu Fermijevega nivoja opisujejo pasovi, ki jih pretežno napenja p_z ogljikova orbitala (za močno strukturno trdnost pa so pomembni elektroni v veznih ravninskih sp^2 hibridiziranih p_x , p_y in s orbitalah).



Slika 7.1: Grafenska mreža je satovje v dveh dimenzijah. Brillouinova cona je v obliki šestkotnika. Elektronska disperzija v grafenu. V bližini K je elektronska disperzija linearna.

V približku tesne vezi za p_z orbitalo hamiltonian dobi obliko

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & e(\mathbf{k}) \\ e^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.13)$$

kjer je $e(\mathbf{k}) = t_0(1 + e^{ia_1 \cdot \mathbf{k}} + e^{ia_2 \cdot \mathbf{k}} + e^{ia_3 \cdot \mathbf{k}})$. Enostavno je preveriti, da velja $e(K) = e(K') = 0$ in da torej v v ogljiščih Brillouinove cone pride do stitišča valenčnega in prevodnega pasu. Če zapišemo $\mathbf{k} = K + \mathbf{q}$ in si oglehamo Hamiltonian za majhne \mathbf{q} , torej $qa \ll 1$ najdemo obliko

$$H(\mathbf{q}) = c\hbar\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\sigma} = c\boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (7.14)$$

kjer je $c = t\sqrt{3}a/(2\hbar) \approx 10^{-6}\text{m/s}$ Fermijeva hitrost v grafenu (t je matrični element skakanja med najbližjimi sosedi, a pa konstanta strukture), $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ pa sta Paulijevi matriki. Hamiltonian je matrika 2×2 , valovna funkcija stolpec z dvema komponentama: zgornja komponenta ustreza amplitudi na podmreži A, spodnja komponenta amplitudi na podmreži B (imamo namreč dva atoma v osnovni celici).

Lastni energiji sta $\pm c\hbar|\mathbf{q}|$, nizkoenergijske eksitacije imajo torej ultrarelativistično disperzijo, značilno za brezmasne fermione.

Valovno funkcijo lahko zapišemo tudi takole

$$|\mathbf{q}\rangle = \sum_{\mathbf{R}} [\psi_A e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}A\rangle + \psi_B e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}B\rangle] \quad (7.15)$$

oziroma v realnem prostoru

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{q} \rangle = \sum_{\mathbf{R}} [\psi_A e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{r}_A) + \psi_B e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{r}_B)] \quad (7.16)$$

Ker je valovni vektor \mathbf{q} majhen, in p_z orbitale $\phi(\mathbf{r})$ dobro lokalizirane na okolico danega ogljikovega atoma, lahko nadomestimo $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} \rightarrow e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ in definiramo $\psi_{A,B}(\mathbf{r}) = \psi_{A,B} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$. S to definicijo lahko valovno funkcijo zapišemo kot vsoto dveh komponent

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{q} \rangle = \psi_A(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{r}_A) + \psi_B(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{r}_B), \quad (7.17)$$

kjer je vsaka od komponent produkt s krajem počasi spreminjajoče se funkcije $\psi_{A,B}(\mathbf{r})$ in pa po prostoru hitro spreminjajočega se preostanka. Paru $(\psi_A(\mathbf{r}), \psi_B(\mathbf{r}))$ pravimo *ovojna funkcija*. Ovojna funkcija zadošča enačbi

$$(\sigma \cdot -i\hbar\nabla) \begin{pmatrix} \psi_A(\mathbf{r}) \\ \psi_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A(\mathbf{r}) \\ \psi_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (7.18)$$

, kar je Diracova enačba za brezmasni delec v dveh dimenzijah saj je $\mathbf{r} = (x, y)$. Elektronska stanja v grafenu torej realizirajo brezmasne Diracove fermione v 2d. (Termin Weylovi fermioni se uporablja za brezmasna stanja, ki jih realiziramo v 3d v t.i. Weylovih polkovinah).

V okolici \mathbf{K}' nizkoenergijski Hamiltonian dobi podobno obliko

$$H(\mathbf{q}) = c\hbar\mathbf{q} \cdot \sigma = c\mathbf{p} \cdot (-\sigma^*) = c\mathbf{p} \cdot (-\sigma), \quad (7.19)$$

kjer smo v zadnjem enačaju obrnili koordinatno os $y \rightarrow -y$.

Celotne nizkoenergijske eksitacije lahko opišemo z 4x4 matrično enačbo,

$$c \begin{pmatrix} \sigma \cdot \mathbf{p} & 0 \\ 0 & -\sigma \cdot \mathbf{p} \end{pmatrix} \Psi = E\Psi, \quad (7.20)$$

kjer je Ψ 4-komponentni spinor, kar ustreza Diracovi enačbi za brezmasne delce. Zgornji in spodnji blok za brezmasne delce nista sklopljena, levo in desno-sučna komponenta sta neodvisni.

7.3 Landauovi nivoji

Oglejmo si sedaj problem relativističnih brezmasnih fermionov v magnetnem polju,

$$H = c(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \cdot \sigma \quad (7.21)$$

kjer je $\mathbf{p} = -i\hbar(\partial_x, \partial_y)$. Sledimo analizi, ki smo jo delali zgoraj pri obravnavi običajnih Landauovih nivojev in za vektorski potencial izberemo umeritev $\mathbf{A} = B(-y, 0)$, ki ustreza magnetnemu polju v smeri osi z . Zapišemo $\Psi = \exp(ikx)\chi(y)$. Dobimo

$$H = c\hbar(-e_0)B[(y - y_k)\sigma_x + (-i\hbar/e_0B)\partial_y\sigma_y] \quad (7.22)$$

z $y_k = kl_B^2$, $l_B^2 = \hbar/e_0B$. Nadaljujmo

$$H = \epsilon_B [(y - y_k)/l_B\sigma_x + il_B\partial_y\sigma_y] \quad (7.23)$$

Kjer je $\epsilon_B = cl_B\sqrt{2}/(-e_0B)$. Izrazimo $\sigma_x = \sigma^+ + \sigma^-$, $\sigma_y = -i(\sigma^+ - \sigma^-)$ in vpeljemo kreacijske, anihilacijske operatorje $a = (1/\sqrt{2})(y/l_B + l_B\partial_y)$, $a^\dagger = (1/\sqrt{2})(y/l_B - l_B\partial_y)$. S temi definicijami Hamiltonian prepisemo v obliko

$$H = \epsilon_B\sqrt{2}(\sigma^+a + \sigma^-a^\dagger), \quad (7.24)$$

oziroma v matrični obliki problem lastnih energij postane

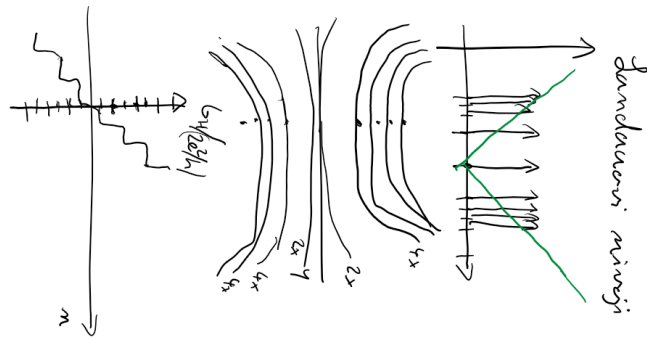
$$\begin{pmatrix} 0 & a \\ a^\dagger & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad (7.25)$$

Rešitev tega problema z najnižjo energijo je $\Psi_0 = (0, 1)\mathcal{H}_0$, kjer je \mathcal{H}_0 osnovno stanje harmonskega oscilatorja pri $\mathcal{H}(y) = \exp(-(y - y_k)/l_B^2)$, z lastno energijo 0, ostale rešitve pa so $(\mathcal{H}_{N-1}, \mathcal{H}_N)$ z lastnimi energijami $\epsilon_B\sqrt{N}$ in $(\mathcal{H}_{N-1}, -\mathcal{H}_N)$ z lastnimi energijami $-\epsilon_B\sqrt{N}$ za $N \geq 1$. Lastne energije so v splošnem $E_N = \pm\epsilon_B\sqrt{N}$, kjer je $N \geq 0$. Gostota stanj se torej v prisotnosti magnetnega polja preoblikuje v δ funkcije, pri energijah E_N . Degeneracijo Landauovih nivojev se izpelje z enakim argumentom kot za običajni problem, le da imamo dodatno degeneracijo zaradi neekvivalentnih točk K, K' , (analiza okrog K' da identični rezultat kot smo ga dobili tu).

Degeneracija vsakega Landauovega nivoja je tako enaka $4\phi/\phi_0$. Ključne razlike s primerom 2DEG so še pojav stanj z negativno energijo, stanje pri energiji 0, razmiki, ki grejo korensko.

7.4 Kvantni Hallov pojav v grafenu

Meritev kvantnega Hallovega pojava poteka podobno kot v primeru 2DEG, le da so sedaj robovi določeni z robom plasti grafena. (Vzorec grafena visi v zraku na elektrodah). Energija robnih stanj se na robovih (ko $y_k \rightarrow$ robu) ukrivi kot kaže slika. Tega ne bomo dokazovali, a lahko si mislimo, da ko grafen zaključimo tako, da sta pod mreži A in B obe na robu, nismo nikjer zlomili pod mrežne simetrije in se morajo zato valenčna in prevodna stanja obnašati (nasprotno) enako. Hallova prevodnost na platojih znaša $e^2/h(4n + 2)$. Druge posebnosti Hallovega pojava v grafenu so še veliki energijski razmik med Landauovimi nivoji ($\epsilon_B/\hbar\omega_c = \sqrt{mc^2/\hbar_0 m e g a_c} \approx 1000$) in pa to, da je gostoto elektronov v grafenu zelo enostavno elektrostatsko kontrolirati (zato je meritev pogosto napravljena tako, da se spreminja gostota elektronov in ne magnetno polje).



Slika 7.2: Landauovi nivoji v grafenu in grafenska gostota stanj v odsotnosti magnetnega polja. Robna stanja in njihova degeneracija. Meritev Hallovega pojava.

Poglavje 8

Kvantne pike in Coulombska blokada

V večini obravnave v tej skripti Coulombsko interakcijo zanemarimo. To lahko napravimo zaradi tega, ker je vpliv Coulombske interakcije na nizkoelektronske eksitacije v trdni snovi dokaj šibek (v kovinah blizu Fermijeve površine, v polprevodnikih blizu robov pasov) in ga lahko skladno z Landauovo teorijo Fermijevih tekočin upoštevamo v okviru renormiranih mas kvazidelcev glede na tiste, ki bi jih izmerili v hipotetičnem primeru, ko Coulombske interakcije ne bi bilo. Še en razlog zaradi katerega ima Coulombsko interakcija manjši vpliv, kot bi mislili na prvi pogled je elektronsko senčenje interakcije. Elektroni se v prisotnostih polj preuredijo tako, da zmanjšajo Coulombski odboj. Npr. par elektronov, ki ju stisnemo na velikost atoma terja premagovanje elektronskega odboja $e^2/4\pi\epsilon_0 r = 1/137 * 1240 \text{ eVnm}/(2\pi \times 0.1)\text{nm} = 10\text{eV}$. Senčenje interakcij to zmanjša za faktor reda 10.

V tem poglavju pa se bomo ukvarjali z delom fizike mezoskopskih sistemov v katerem Coulombska interakcija igra bistveno vlogo. To so kvantne pike.

Kvantne pike so majhni bazenčki v katere so ujeti elektroni. Obstaja več vrst kvantnih pik. Ena možnost so majhni koščki kovine (t.i.) kovinske kvantne pike, v njih je število elektronov dokaj veliko. Druga možnost so

polprevodniške kvantne pike kjer s kvantnimi točkovnimi stiki elektrostat-
sko definiramo bazenčke v katere se ujamejo elektroni. V kvantnih pikah
senčenje Coulombske interakcije ni učinkovito, zato je potrebno rešiti kvan-
tno mehanski problem v prisotnosti močnega elektronsko-elektronskega od-
boja. To je zelo zahtevno, a izkaže se, da se da precej bistveno fiziko opisati
z mešanim pristopom, v katerem se enoelektronska stanja izračuna v okviru
enodelčne kvantne mehanike, Coulombski odboj pa se upošteva prek enačb
klasične elektrostatike.

Coulombska energija je v taki obravnavi kar enaka

$$E = q^2/4\pi\epsilon_0 r = q^2/2C = e_0^2 N^2/2C = E_c N^2 \quad (8.1)$$

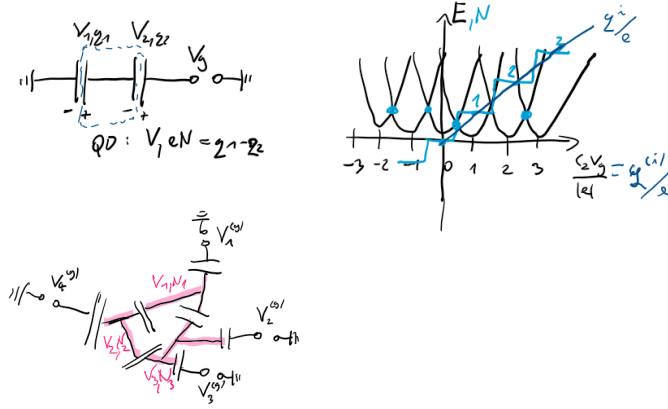
Kjer je C kapacitivnost. Energija dodanih elektronov narašča z N , $E(N + 1) - E(N) = (2N + 1)E_c$ česar ne moremo opisati v približku nesklopljenih elektronov. V limiti, ko bazenček postaja velik (r velik) Coulombska interakcija (v taki obravnavi) postaja manj pomembna. Za disk velikosti reda 100 nm je $E_c \sim 1\text{mV}$. (GaAs $\epsilon = 13$).

Poleg Coulombske energije je pomemben parameter razmik med enoelektronskimi stanji. Ta je podan z $\hbar^2 c^2 \pi^2 / L^2 m c^2 \approx 1\text{eV nm}^2 / L^2$. Ta pada s kvadratom razdalje. Pri velikih kvantnih pikah je razmik med nivoji zanemarljiv Coulombska energija pa ni zanemarljiva. Takim sistemom pravimo kovinske kvantne pike. Pri majhnih kvantnih pikah razmika med nivoji ne moremo zanemariti. Slednjim pravimo tudi umetni atomi, saj so za njih značilna diskretna energijska stanja, ki jih lahko kontroliramo z geometrijo pik.

Najprej bomo obravnavali kovinske kvantne pike.

8.1 Eno-elektronska škatla

Najenostavnejši zanimivi problem je kvantna pika sklopljena na vrata ("gate" elektrodo), ki je na piko sklopljena kapacitivno in pa na izvir elektronov, ki je na piko tudi sklopljen kapacitivno, poleg tega pa lahko elektroni iz izvira na piko tunelirajo. Izkaže se, da je za različne vrednosti napetostih na vratih na



Slika 8.1: Levo: Vezje za kvantno piko. Desno: Z napetostjo na vratih kontroliramo energijske nivoje kvantne pike in s tem naboj, ki se zaradi diskretnosti naboja elektrona spreminja v skokih. Spodaj: Vezje za tri kvantne pike sklopljene na štiri zunanje elektrode.

kvantni piki različno celo število elektronov. To število bomo izračunali iz premisleka o energijsko najbolj ugodnih stanjih.

Ker je napetost na elektrodah fiksna, je količina, ki določa najbolj ugodna stanja "entalpija" (t.j. energija - delo, ki ga opravijo elektrode; $\mathcal{H} = E - \sum_i q_i V_i$, kjer so q_i naboji, ki se pretečejo skozi elektrode, saj elektrode delo opravijo - kar se tiče nabojev na opazovanem sistemu, kvantni piki - žastonj"). Na izviri izberemo $V_s = 0$, napetost na vratih pa izberemo z V_g .

$$\mathcal{H} = \frac{q_1^2}{2C_1} + \frac{q_2^2}{2C_2} - q_2 V_g \quad (8.2)$$

Če definiramo potencial na piki V in uporabimo $q_2 = C_2(V_g - V)$ lahko zgornji izraz prepisemo v obliko

$$\mathcal{H} = \frac{C_1 + C_2}{2} V^2 - \frac{C_2 V_g^2}{2} \quad (8.3)$$

Sedaj uporabimo $eN = q_1 - q_2$ in izrazimo $V = \frac{eN - q^{(i)}}{C_1 + C_2}$, kjer je $q^{(i)} = -C_2 V_g$.

Dobimo

$$\mathcal{H} = \frac{(eN - q^{(i)})^2}{2(C_1 + C_2)}, \quad (8.4)$$

kjer smo iz \mathcal{H} izpustili $-\frac{V_g^2}{2C_g}$, ki ni odvisen od N in ne spreminja energijske bilance med energijskimi stanji z različnimi N in ga iz obravnave stabilnosti različnih nabojnih stanj lahko zanemarimo..

Če naboj ne bi bil kvantiziran (t.j. limiti, ko bi velikost naboja elektrona poslali proti 0) bi bila minimalna vrednost entalpije dosežena pri vrednosti $eN = q^{(i)} = -C_2V_g$, zato količini $q^{(i)}$ pravimo inducirani naboj, ki nastane kot posledica delovanja napetosti na elektrodi V_g .

Za našo obravnavo pa je pomembna kvantizacija naboja. Vidimo, da je odvisnost entalpije od $q^{(i)}$ (ki je sorazmeren V_g) kvadratična. Vsakemu N ustreza svoja parabola. Temena parabol so pri $q^{(i)} = eN$. V točkah, kjer se dve paraboli sekata lahko pride do prenosa naboja, drugje pa je zaradi Coulombske interakcije stabilno območje z določenim N . Pravi naboj na piki je tisti celoštevilski večkratnik osnovnega naboja, ki je najbližji q . V klasični limiti, ko diskretizacije naboja ni, je naboj na piki kar enak $q^{(i)}$. To lahko razumemo tudi iz energijskega argumenta: v tem primeru na kondenzatorju C_1 ni naboja, saj je potencial na piki kar enak tistemu na izvihu, se pravi enak 0, na kondenzatorju 2 pa je naboj q . Tako konfiguracijo lahko vzpostavimo tako, da naboj brez cene tunelira na piko in se nabira na kondenzatorju 2, nastalo električno polje pa kompenzira elektroda V_g .

8.2 Več kvantnih pik

V primeru večih kvantnih pik je razmislek podoben. Entalpija je:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i>j} C_{ij}(V_i - V_j)^2 - \frac{1}{2} \sum_{ik} C_{ik}^g (V_i - V_k^g)^2 - \sum_{ik} q_{ik} V_k^g, \quad (8.5)$$

kjer je V_i potencial na i -ti kvantni piki, C_{ij} je kapacitivna sklopitev med piko i in j , C_{ik} je kapacitivna sklopitev med zunanji vrati k s piko i , V_k^g pa je napetost na k -tih zunanjih vratih. Z vpeljavo matrike C_{ij} , ki ima di-

agonalne člene enake $C_{ii} = \sum_k C_k^g + \sum_j C_{ij}^c$ (velja $C_{ii}^c = 0$), izvendiagonalne pa $C_{ij} = -C_{ij}^c$, lahko zapišemo entalpijo v matrični obliki

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}(e\underline{N} - \underline{q}^{(i)})^T \underline{\underline{C}}^{-1} (e\underline{N} - \underline{q}^{(i)}) \quad (8.6)$$

ali pa z uporabo napetosti $\underline{e} - \underline{q} = \underline{\underline{C}}\underline{V}$,

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}(\underline{V})^T \underline{\underline{C}}\underline{V} \quad (8.7)$$

8.3 Zgled: diagram stabilnosti za dvojno kvantno piko

Dvojna kvantna pika, source, drain elektrodi (pri napetosti $V_s = V_d = 0$, kapacitivnosti C_s, C_d). Gate elektrodi V_1, V_2 , $C_1^g = C_2^g$. Kapaciteta med pikama C_{12} . Matrika kapacitivnosti

$$\underline{\underline{C}} = \begin{pmatrix} C_1 & -C_{12} \\ -C_{12} & C_2 \end{pmatrix} \quad (8.8)$$

kjer $C_1 = C_1^g + C_s + C_{12} = C_{12}(1 + \alpha_1)$, $C_2 = C_2^g + C_d + C_{12} = C_{12}(1 + \alpha_2)$, kjer smo vpeljali $\alpha_{1,2} \geq 0$.

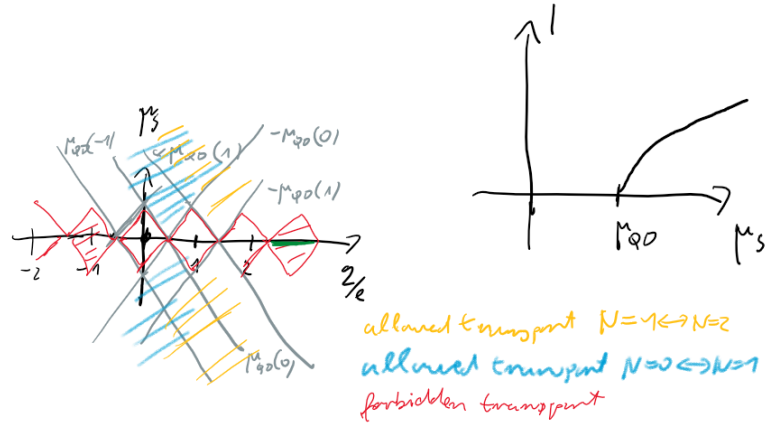
$$\underline{\underline{C}}^{-1} \propto \begin{pmatrix} (1 + \alpha_2) & 1 \\ 1 & (1 + \alpha_1) \end{pmatrix} \quad (8.9)$$

Konstanta sorazmernosti na ravnovesje med različnimi nabojnimi stanji ne vpliva. Entalpijo lahko prepišemo v

$$\mathcal{H} = \alpha_2(eN_1 - q_1)^2 + \alpha_1(eN_2 - q_2)^2 + (eN_1 - q_1 + eN_2 - q_2)^2. \quad (8.10)$$

Iz entalpije lahko izrazimo obočja stabilnosti, npr.

$$\mathcal{H}(0, 0) < \mathcal{H}(0, \pm 1), \quad (8.11)$$



Slika 8.2: Območja, kjer je transport dovoljen v ravnini $q/e = C_g V_g / |e|$, $\mu_s = eU_{sd}/2$. Kemijski potencial na kvantni piki za različne vrednosti N je označen sivo. Desno zgoraj: Tok kot funkcija μ_s .

lahko prepisemo v

$$-e/2 > q_1 + \frac{q_2}{1 + \alpha_2} > e/2 \quad (8.12)$$

in podobno

$$\mathcal{H}(0, 0) < \mathcal{H}(\pm 1, 0), \quad (8.13)$$

lahko prepisemo v

$$-e/2 > q_2 + \frac{q_1}{1 + \alpha_1} > e/2. \quad (8.14)$$

Neenakosti določata paralelogram v ravnini q_1, q_2 . Zaradi periodičnosti v premiku v smeri q_1 in/ali q_2 za večkratnik osnovnega naboja paralelogram ni dobra osnovna celice (pride do prekrivanja). Prava osnovna celica je šestkotnik. Paralelogram odrežeta še pogoja $\mathcal{H}(0, 0) < \mathcal{H}(1, -1)$ in $\mathcal{H}(0, 0) < \mathcal{H}(-1, 1)$.

8.4 Končna napetost med izviro in ponorom, eno-elektronski tranzistor in Coulombski diamanti

Vrnimo se na eno kvantno piko in obravnavajmo transport naboja skozi njo pod vplivom končne napetosti med izviro in ponorom U_{sd} . V odvisnosti od napetosti na vratih in velikosti U_{sd} lahko transport poteka lahko pa je prepovedan, slednjemu režimu pravimo Coulombska blokada. Denimo, da imamo na kvantni piki N elektronov. En možni transportni proces je, da bo iz leve elektrode na kvantno piko skočil dodatni elektron in potem v naslednjem koraku skočil na desno elektrodo. Takemu transportu pravimo sekvenčni transport in bo potekal kadar je energija končnega stanja na vsakem koraku večja ali enaka energiji začetnega stanja. Med posameznimi koraki se predpostavi, da pride do termalizacije in se lahko del energije izgubi. Za opisani proces torej velja (entalpijo bomo označevali kar z E)

1. Imamo 1 elektron na izviro in N elektronov na kvantni piki; $E_1 = \mu_s + E(N)$.
2. Imamo 0 elektronov na izviro in $N + 1$ elektronov na kvantni piki; $E_2 = E(N + 1)$.
3. Imamo N elektronov na kvantni piki in 1 elektron na ponoru; $E_3 = E(N) + \mu_d$.

Če definiramo $\mu(N) = E(N + 1) - E(N)$ lahko zapišemo, da bo sekvenca 1.2.3. potekala, če velja $\mu_s > \mu(N) > \mu_d$. (Enak pogoj dobimo ne glede na to, s katerim korakom začnemo sekvenco.) Za transport elektronov v levo (se pravi, električni tok v desno) pa samo obrnemo predznake.

Oglejmo si konkretni primer: Izberemo $\mu_s = eV_s = eU_{sd}/2$, $\mu_d = eV_d = -eU_{sd}/2$, $C_s = C_d$ (v tem primeru source in gate elektrodi ne inducirata naboja na piki). Vpeljemo kemijski potencial na piki iz energijskih razlik (vzamemo nizko temperaturo, tako da termični/entropični prispevki niso

pomembni). Če elektron dodamo

$$\mu = \mathcal{H}(N+1) - \mathcal{H}(N) = \frac{e^2}{C_\Sigma}(N+1/2 - q/e) = E_c(N+1/2 - q/e) = E_c(N+1/2 + C_g V_g/e), \quad (8.15)$$

kjer je $E_c = e^2/C_\Sigma$.

Kemijski potencial na piki je odvisen od števila elektronov. To je značilno za sisteme z močnim Coulombskim odbojem. Ko elektrone odvezujemo, sta relevantni entalpiji tisti za $N - 1$ in N elektronov. Transport s prenosom elektronov iz leve na desno je mogoč kadar $\mu_s > \mu > \mu_d$. Prvi pogoj je torej

$$\mu_s > \mu_{qd} = E_c(N + 1/2 - q/e), \quad (8.16)$$

drugi pogoj pa za našo simetrično izbiro napetosti na kontaktih $\mu_d = -\mu_s$ ustreza $\mu_s > -\mu_{qd}$. Grafično je območje kemijskih potencialov in napetosti na vratih $q/e = C_g V_g/|e|$ predstavljeno na sliki 8.2.

Pogoj za transport elektronov v levo je podan z obrnjenimi neenakostmi. Opazimo območja, kjer transport ni dovoljen. Le-ta so oblike kare. To so Coulombski diamanti.

8.5 Obravnava transporta z master enačbo

Radi bi izračunali tok pri končni vrednosti U_{sd} . Za obravnavo toka je v opis nujno vključiti fluktuacije med stanji z različnim številom nabojev na piki, saj če fluktuacij naboja ni tudi tok ne more teči. Stanja z različnimi vrednostmi naboja na piki eN so zasedena z verjetnostmi p_N . Za verjetnosti zapišemo (klasično) master enačbo

$$\frac{dp_N}{dt} = \Gamma_{N-1}^{\rightarrow qd} p_{N-1} + \Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow} p_{N+1} - \Gamma_N^{\rightarrow qd} p_N - \Gamma_N^{qd \rightarrow} p_N, \quad (8.17)$$

kjer Γ označujejo število procesov na enoto časa, npr. $\Gamma_N^{qd \rightarrow}$ število procesov na enoto časa, kjer je na piki na začetku N elektronov, potem pa en od-tunelira v okolico. Dogajanje bomo opisovali v približku t.i. sekvenčnega tuneliranja, ko se po vsakem preskoku elektrona iz okolice na sistem stanje

relaksira in vmesna faza izgubi. Zato je dovolj, da stanje sistema opišemo z verjetnostmi p_N in ne gostotno matriko ρ , ki vsebuje popolno informacijo o kvantnem stanju na kvantni piki. V splošnem bi v master enačbo lahko vključili prispevke, ko se število elektronov spremeni več kot za 1. Posplošen problem lahko zapišemo v obliki

$$\frac{dp}{dt} = \underline{\underline{\Gamma}}p. \quad (8.18)$$

Zanimamo se za stacionarne rešitve, $dp_N/dt = 0$. To v matrični obliki ustreza $\underline{\underline{\Gamma}} \cdot \underline{p} = 0$. Obravnavajmo kvantno piko za V_g blizu degeneracije, torej blizu $V_{g0} = (N+1/2)e/C$, kjer sta energiji stanj z N in $N+1$ elektroni najnižji, in sta zato le verjetnosti p_N in p_{N+1} nezanemarljivi. Iz pogoja za stacionarnost in iz $p_N + p_{N+1} = 1$ izpeljemo

$$p_N = \frac{\Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow}}{\Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow} + \Gamma_N^{\rightarrow qd}}; \quad p_{N+1} = \frac{\Gamma_N^{\rightarrow qd}}{\Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow} + \Gamma_N^{\rightarrow qd}} \quad (8.19)$$

Izrazimo še $\Gamma_N^{\rightarrow qd} = \Gamma_N^{s \rightarrow qd} + \Gamma_N^{d \rightarrow qd}$ in $\Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow} = \Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow s} + \Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow d}$

Tok, ki teče skozi kvantno piko je enak

$$I = e\Gamma_N^{s \rightarrow qd}p_N - \Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow s}p_{N+1} \quad (8.20)$$

$$= e \frac{\Gamma_N^{s \rightarrow qd}\Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow d} - \Gamma_N^{d \rightarrow qd}\Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow s}}{\Gamma_N^{\rightarrow qd} + \Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow}} \quad (8.21)$$

Zgled: $\mu_s > \mu_d$ Elektroni potem tečejo na desno. V tem primeru so $\Gamma_N^{d \rightarrow qd} = \Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow s} = 0$. Tok pa je enak

$$I = e \frac{\Gamma_N^{s \rightarrow qd}\Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow d}}{\Gamma_N^{\rightarrow qd} + \Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow}} \quad (8.22)$$

če sta Γ -i v izrazu zgoraj enaki, dobimo $I = e\Gamma/2$, da transport poteka, moramo namreč opraviti dva koraka, elektron mora skočiti noter, in potem ven, da se cikel ponovi. Druga limita je, da je samo en proces zelo počasen, potem ta v celoti določa tok, $I = e\Gamma$.

8.5.1 Ocene Γ za kovinsko kvantno piko

Konstante Γ je potrebno oceniti iz mikroskopskega kvantnega opisa. V celoti tega ne bomo napravili, poučno pa si je ogledati nekaj osnovnih korakov.

$$H = H_s + H_d + H_{qd} + H' \quad (8.23)$$

H' opisuje tuneliranje s kvantne pike na okolico in nazaj. Vzamemo, da je H' majhen v primerjavi z drugimi členi v Hamiltonianu. Število prehodov na časovno enoto iz nekega začetnega stanja celega sistema $|\psi_0\rangle$, ki opisuje Slaterjevi determinanti za izvir in ponor, ter piko v stanju z N elektroni (celotna energija E_0) v končno stanje z $N + 1$ elektroni na piki podaja Fermijevo zlato pravilo

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |\langle f|H'|\psi_0\rangle|^2 \delta(E_f - E_0), \quad (8.24)$$

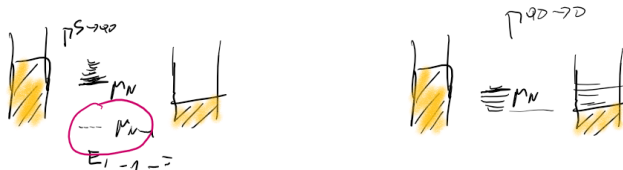
kjer so $|f\rangle, E_f$ končna stanja in njihova energija. Obravnavajmo kovinsko kvantno piko! V kovinski kvantni piki lahko razmik med enoelektronskimi kvantnimi nivoji lahko zanemarimo in jo lahko opišemo s kontinuumom. Vpeljimo še Hamiltonian tuneliranja $H' = \sum_{pq} t_{pq} c_p^\dagger c_q = \sum_{pq} t_{pq} |p\rangle\langle q|$ (zapisan v drugi in prvi kvantizaciji, t_{pq} so prekrivalni integrali med enoelektronskimi stanji v kvantni piki in kontakti)

$$\Gamma_N^{s \rightarrow qd} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \rho(\epsilon) f_s(\epsilon) (1 - f_{qd}(\epsilon)) \quad (8.25)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |t|^2 (\mu_s - \mu_{qd}) \rho_s \rho_{qd} \Theta(\mu_s - \mu_{qd}), \quad (8.26)$$

kjer je Θ Heavisideova funkcija. Za mikroskopski matrični element t smo zanemarili energijsko odvisnost. Grafično je dogajanje prikazano na sliki. Podobno velja

$$\Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow d} = \frac{2\pi}{\hbar} |t|^2 (\mu_{qd} - \mu_d) \rho_d \rho_{qd} \Theta(\mu_{qd} - \mu_d). \quad (8.27)$$



Slika 8.3: K $\Gamma^{s \rightarrow qd}$ prispevajo vsa stanja pike in izvira, ki so taka, da je energija ohranjena. Po procesu je pika v vzbujenem stanju (v višjih enoelektronskih nivojih, ki so gosto razporejeni, če je pika kovinska). Enako velja za proces ob tuneliranju iz kvantne pike (desno).

Če predpostavimo, da so matrični elementi in gostota stanj enaki za tuneliranje v izvir in ponor, lahko zapišemo $\Gamma = g\delta\mu$, kjer je g sorazmernostna konstanta z enoto $1/\hbar$.

Količino g lahko povežemo z makroskopsko količino, ki jo že poznamo: s prevodnostjo. Obravnavajmo konkretni primer tunelskega stika med dvema kovinama (brez pike, interakcije lahko zanemarimo). Potem velja $I = e\Gamma$, po drugi strani pa velja linearni odziv, $I = G\delta\mu/e$. Velja torej

$$\Gamma = G\delta\mu/e^2, \quad (8.28)$$

torej velja $g = G/e^2$, kjer bi bila G prevodnost direktnega tunelskega stika.

Sedaj lahko izračunamo tok skozi kvantno piko. Vseskozi imamo opravka s sekvenčnim tuneliranjem, elektron skoči in se potem relaksira v osnovno stanje (prek sklopitve na prostostne stopnje, ki jih eksplicitno ne obravnavamo, predvsem fonone). Vpeljimo simetrično napetost med izvirom in ponorom $\mu_{s,d} = \pm eU_{sd}/2$ in torej $\mu_d = -\mu_s$.

Z uporabo izraza zgoraj lahko zapišemo

$$I = e \frac{\Gamma_N^{s \rightarrow qd} \Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow d}}{\Gamma_N^{s \rightarrow qd} + \Gamma_{N+1}^{qd \rightarrow d}} = eg \frac{(\mu_s - \mu_{qd})(\mu_{qd} + \mu_s)}{2\mu_s} \quad (8.29)$$

se pravi

$$I = eg \frac{\mu_s^2 - \mu_{qd}^2}{2\mu_s}. \quad (8.30)$$

Odvisnost toka od napetosti med izviro in ponorom je prikazana na sliki 8.2.

8.6 Enoelektronski transistor

Napravico lahko uporabljamo za transistor, ki ne prevaja, ko V_g premaknemo v območje Coulombske blokade. Problem je temperatura. Večje temperaturne skale se dobi v transportu skozi posamične atome, molekule, ki jih ujamejo med kontakte s prelomnimi stiki. Tam pa je problem kontrolirana izdelava in kombinacija večih elementov med sabo.

8.7 Enoelektronska črpalka

Malce drugačna naprava omogoča transport skozi sistem v osnovnem stanju. Dvojna kvantna pika, ki jo upravljamo skozi cikel $(0,0) \rightarrow (0,1) \rightarrow (1,0) \rightarrow (0,0)$. V principu se na vsak krog prenese en elektron. Frekvenca mora biti manjša $\hbar\omega < e^2/C \approx 1\text{meV}$, torej 1 THz. To omogoča toke $e\omega = e^2mV/\hbar = G_0mV = 0.1\mu A$.

8.8 Kotuneliranje in Kondov pojav

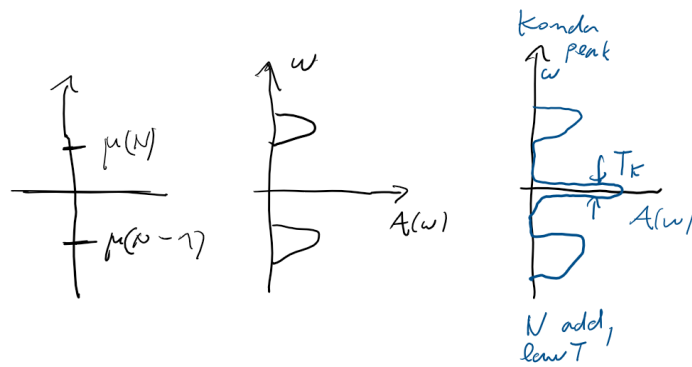
Delovanje naprav zgoraj omejujejo tudi procesi višjih redov, ko hkrati na kvantno piko tunelira več elektronov. Npr., ko je na piki $N+1$ elektronov, da takrat skoči še en. To energijsko ni dovoljeno, a za zelo kratek čas $\tau = \hbar/E$ se to lahko zgodi. Če do tega pride, potem se bo Γ_R elektronov preneslo naprej. Skupaj torej $\Gamma_{\text{kotunel.}} = \Gamma_L \tau \Gamma_R$. Razmerje $\Gamma_{\text{kotunel.}}/\Gamma = G/G_0$ podaja kako pomembno je kotuneliranje. Ko je prevodnost majhna (na priključke šibko

sklopljene pike) je tudi kotuneliranje manj pomembno. Kotuneliranje in višji redi pa vodijo do kvalitativno pomembnega efekta pri nizkih temperaturah. V polprevodniških kvantnih pikah namreč ko imamo liho število elektronov na kvantni piki pride do ojačanja prevodnosti do G_0 prav v centru območja, kjer bi moral biti transport prepovedan zaradi Coulombske blokade. Tu gre za Kondov pojav, ki je posledica pojava resonance v gostoti stanj pri nizkih temperaturah, glej sliko 8.4. Minimalni modelski opis Kondovega pojava začne s Hamiltonianom Andersonove nečistoče

$$H = Un_{\uparrow}n_{\downarrow} + \epsilon_d(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + \sum_{k\sigma} \left(V_k c_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + h.c. \right) + \sum_{k\sigma} \epsilon_k n_{k\sigma}, \quad (8.31)$$

kjer elektronska stanja na kvantni piki opišemo z enim kvantnim stanjem d , operatorji $n_{\sigma} = d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}$ štejejo število elektronov na tem stanju s spinom σ , U je energijska cena, ki jo plačamo, če sta na kvantni piki dva elektrona (ustreza kapacitivni energiji $U \sim e^2/C$). Zasedenost kvantne pike podaja ϵ_d , ki ga spreminjamo z napetostjo na vratih. Amplitude V_k pa določajo tuneliranje elektronov s kvantne pike v kovinske priključke. Za vajo za $V_k = 0$ določi, pri katerih vrednostih ϵ_d bo na piki 0, 1 oz. 2 elektrona!

Za končne vrednosti V_k se pri nizkih temperaturah ($T < T_K$) pojavi v gostoti stanj resonanca s širino $T_K = \sqrt{\Gamma U} \exp(-\pi U/(8\Gamma))$, kjer je $\Gamma = \sum_k V_k^2 \delta(\epsilon_F - \epsilon_k)$. Iz oblike izraza za Kondovo temperaturo, ki ni analitična funkcija Γ se vidi, da Kondovega pojava ne moremo opisati v okviru perturbacije po V_k .



Slika 8.4: Energijska cena za dodajanje elektrona na kvantno piko $\mu(N) = E(N + 1) - E(N)$ in ustrezna relevantna energija, ko elektron odvezemo $\mu(N - 1) = E(N) - E(N - 1)$. Vse možnosti za dodajanje (odvzem) elektronov podaja $\omega > (<)0$ del spektralne funkcije $A(\omega)$ (glej literaturo iz večdelčne fizike, npr. Bruus-Flensberg). Pri nizkih temperaturah se za liho število elektronov znotraj pojavi Kondova resonanca, ki omogoča transport znotraj zaradi Coulombske blokade prepovedanega območja.

Poglavje 9

Coulombska blokada in superprevodnost

Pri nizkih temperaturah lahko elektroni v nekaterih kovinah preidejo v superprevodno stanje (svinec, 9K, aluminij 1.2K, živo srebro 4K, ne pa tudi baker, zlato,...). V superprevodnem stanju se električni tok prenaša brez izgub. Superprevodniki so popolni diamagneti, popolnoma izrinejo magnetno polje, kar lahko izpeljemo iz enačbe Londona $\mathbf{j} = -n_s e^2 \mathbf{A}/m$, ki velja v superprevodnikih. Če v superprevodniku merimo specifično toploto, opazimo odvisnost (slika). Eksponentno odvisnost specifične toplote $C \propto \exp(-\Delta/T)$ lahko razumemo s pojavom energijske reže v gostoti stanj. Mikroskopsko se superprevodnost razume iz privlačne interakcije med elektroni, ki vodijo do nestabilnosti Fermijeve površine in pojava novega osnovnega stanja. Elektroni se povežejo v pare, t.i. Cooperjeve pare in superprevodnost lahko razumemo tudi kot supertekočnost Cooperjevih parov, ki so bozoni. Značilno za superprevodnike je makroskopska koherenca, superprevodniki so karakterizirani s superprevodno fazo, ki se ne spreminja na makroskopskih razdaljah.

Manifestacije superprevodnosti v mezoskopski fiziki so : spremenjena fizika Coulombske blokade, ki izkazuje sodo periodičnost stabilnostnih diagramov in meritev toka kot funkcija napetosti na vratih kvantnih pik (torej ponovljeno obliko ob dodatku para elektronov); Andreevo tuneliranje; Josephsonovi stiki.

Splošen Hamiltonian z interakcijo lahko zapišemo kot (spinski indeksi so v tej enačbi izpuščeni)

$$H = \sum_k \epsilon_k n_k + \sum_{kk'q} U_{kk'q} c_{k+q}^\dagger c_{k'-q}^\dagger c_k c_{k'}. \quad (9.1)$$

Pomembni členi za superprevodnost so tisti, ki sklapljajo enoelektronska stanja $|k \uparrow\rangle, |-k \downarrow\rangle$. Osnovno stanje Hamiltoniana (približno, a dobro) podaja BCS (Bardeen, Cooper, Schrieffer '57, Nobelova nagrada '72) valovna funkcija

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_k (u_k + v_k e^{i\phi} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle \quad (9.2)$$

kjer sta $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$. u_k, v_k se lahko vzame oba realna, toda izkaže se, da je pomembna tudi fazna razlika med njima, torej, npr. u_k se vzame realen, $v_k = (1 - u_k^2)^{1/2} e^{i\phi}$. Faza ϕ ni odvisna od k in ustreza fazi superprevodnega kondenzata. Superprevodno stanje je torej koherentna superpozicija stanj v katerih sta stanji $k \uparrow$ in $-k \downarrow$ hkrati zasedeni ali prazni.

Zapišimo poenostavljeni Hamiltonian, ki ohrani samo ključne člene, ki sklapljajo Cooperjeve pare.

$$H = \sum_k \epsilon_k n_k + \sum_{kl} U_{kl} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-l\downarrow} c_{l\uparrow}. \quad (9.3)$$

V približku povprečnega polja je pojav superprevodnosti povezan s končno pričakovano vrednostjo $\langle c_{k\sigma}^\dagger c_{-k-\sigma}^\dagger \rangle$ in enako za hermitsko konjugirano. Definiramo lahko $\Delta_k = \sum_l \langle U_{kl} c_{-l\downarrow} c_{l\uparrow} \rangle$. Pojav končne vrednosti Δ_k ustreza pojavu superprevodnosti. Efektivni Hamiltonian ne ohranja števila nabojev in je enak

$$H_{\text{eff}} = \sum_k \epsilon_k n_k + \sum_{kl} (\Delta_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger + h.c.) \quad (9.4)$$

9.1 Bogoliubov-de Gennesova enačba

Kljub temu, da H_{eff} ne ohranja števila nabojev, ga lahko diagonaliziramo z vpeljavo novih operatorjev, ki mešajo kreacijske in anihilacijske operatorje

$\gamma_k = v_k^* c_{k\uparrow}^\dagger + u_k c_{-k\downarrow}$. Ključni aspekt superprevodnosti je torej mešanje med kreacijskimi in anihilacijskimi operatorji, se pravi, sklopitev med elektroni in vrzelmi. To fiziko lahko opišemo tudi v okviru enoelektronskega opisa v prvi kvantizaciji s t.i. Bogoliubov-de Gennesovim enačbo, ki je posplošitev Schroedingerjeve enačbe za primer, ko imamo superprevodnost. BdG enačba je

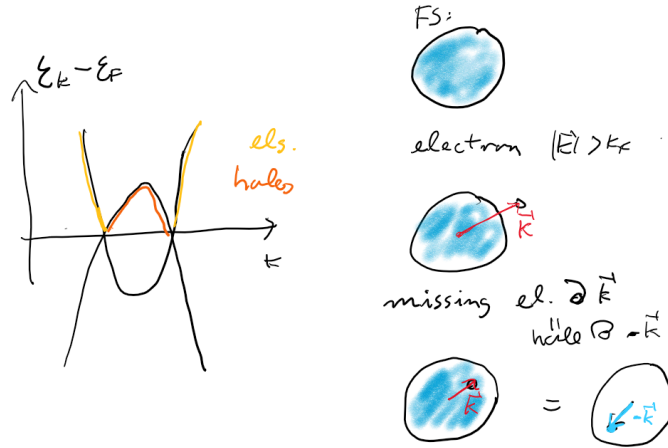
$$\begin{pmatrix} \hat{H} & \Delta \\ \Delta^* & -\hat{H}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_e(\mathbf{r}) \\ \psi_h(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_e(\mathbf{r}) \\ \psi_h(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (9.5)$$

kjer je $\hat{H} = -\hbar^2 \nabla^2 / (2m) + V(r) - E_F$ običajni Schroedingerjev Hamiltonian za elektrone v odsotnosti superprevodnosti, ničla energije pa je premaknjena na Fermijevo energijo E_F .

Da razumemo pomen BdG Hamiltoniana si najprej oglejmo primer, ko ni superprevodnosti in je superprevodna amplituda $\Delta = 0$. Potem zgornji blok BdG enačbe ustreza običajni Schroedingerjevi enačbi, spodnji blok pa enako (kompleksna konjugacija na realni Hamiltonian nima vpliva -pomembna bi postala, ko bi vpeljali vektorski potencial oz. magnetno polje), le da je predznak Hamiltoniana in s tem energije zamenjan. Zgornja komponenta torej opisuje elektrone (pozitivne energije za $|k| > k_F$, spodnja pa vrzeli, pozitivne energije za $|k| < k_F$. Ker vsaka od komponent vsebuje celotno fiziko problema, je v končni rešitvi potrebno ohraniti le polovico rešitev. Tako bomo ohranili samo rešitve s pozitivno energijo, ki ustrezajo elektronskim eksitacijam (elektronu nad Fermijevo površino) in pa vrzelnim eksitacijam (odsotnost elektrona pod Fermijevo površino). Za k blizu k_F lahko disperzijsko zvezo $E = \pm(\hbar^2 k^2 / 2m - E_F)$ (\pm ustreza elektronom, vrzelim) lineariziramo, $E = \pm v_F \hbar (k - k_F)$. (tu gledamo v 1d, $k, k_F > 0$.) Glej sliko 9.1.

V superprevodni fazi postane vrednost Δ končna in meša elektronske in vrzelne eksitacije. Za $\tilde{E} = \hbar^2 k^2 / 2m - E_F = \hbar v_f (k - k_F)$ in $\psi_e = \psi_{e0} \exp(ikx)$, $\psi_h = \psi_{h0} \exp(ikx)$ dobimo

$$\begin{pmatrix} \tilde{E} & \Delta e^{i\phi} \\ \Delta e^{-i\phi} & -\tilde{E} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{e0} \\ \psi_{h0} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_{e0} \\ \psi_{h0} \end{pmatrix} \quad (9.6)$$



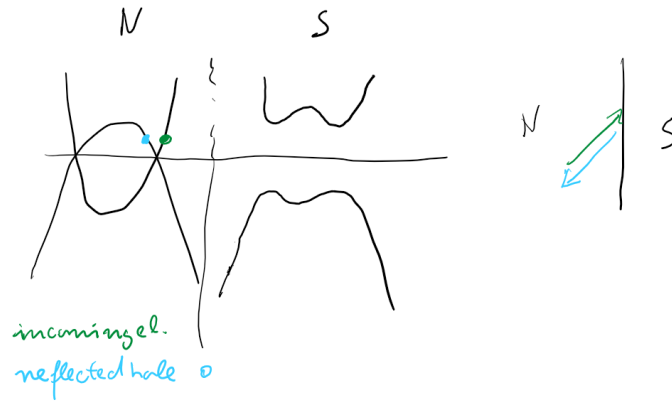
Slika 9.1: Elektroni in vrzeli.

in dobimo $E = \sqrt{\tilde{E}^2 + \Delta^2}$. Pojavi se energijska reža: najnižja energija eksitacij je Δ .

9.2 Andreevo tuneliranje

Oglejmo si stik med superprevodnikom in običajno kovino. Obravnavajmo kar 1d (v resnici bi imeli več prečnih valovnih načinov oz. kanalov, a ker se med sabo ne mešajo, lahko obravnavamo vsakega posebej. Pri $x < 0$ imamo tako kovino ($\Delta = 0$), za $x > 0$ pa superprevodnik $\Delta > 0$.

Pošljimo z leve ravni val z energijo blizu E_F ! Ker v superprevodniku ni eksitacij z $E < \Delta$ bi pričakovali, da se vpadni val popolnoma odbije, reflektivnost je enaka 1 in v meritvi transporta za majhne napetosti med izvirom in ponorom tak stik ne prevaja. Izkaže se, da je ta premislek napačen. V resnici elektron preide v superprevodnik tako, da iz kovine potegne še en elektron s (približno) obratnim momentom ($-k$) in obratnim spinom. Par elektronov z obratnima spinoma ni enodelčna eksitacija in je BdG enačba direktno ne opisuje, zato povejmo brez utemeljitve, da lahko superprevodnik sprejme tak Cooperjev par brez energijske cene. Na kovinski strani pa ab-



Slika 9.2: Na meji med normalno kovino in superprevodno kovino se vpadni elektron odbije kot vrzel.

sorpcija elektrona ustreza kreaciji vrzelne eksitacije, ki se premika v smeri stran od stika (saj je njena grupna hitrost negativna). Dogajanje si oglejmo na sliki!

Opišimo dogajanje še kvantitativno. Valovno funkcijo zapišemo v obliki nastavka $\psi_e(x) = \tilde{\psi}_e(x)e^{ik_F x}$, $\psi_h(x) = \tilde{\psi}_h(x)e^{ik_F x}$, kjer se $\tilde{\psi}$ počasi spreminja s krajem, hitro oscilirajoči del pa opisuje $e^{ik_F x}$. Valovna funkcija $\tilde{\psi}$ zadostuje linearizirani BdG enačbi [preveri, da se strinjaš!]

$$\begin{pmatrix} -i\hbar v_F d/dx & \Delta e^{i\phi} \\ \Delta e^{-i\phi} & i\hbar v_F d/dx \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_e \\ \tilde{\psi}_h \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_e \\ \tilde{\psi}_h \end{pmatrix} \quad (9.7)$$

V normalni kovini za rešitev vzamemo nastavek

$$\tilde{\psi} = \begin{pmatrix} e^{i\tilde{k}x} \\ r e^{-i\tilde{k}x} \end{pmatrix} \quad (9.8)$$

Obe komponenti enačbi imata energijo $\tilde{E} = \tilde{k}\hbar v_F$ (spodnja komponenta ima moment za \tilde{k} pod k_F a to ustreza pozitivni energiji za vrzelne eksitacije), se pravi $E = \tilde{E}$.

Na superprevodni strani za energije $E < \Delta$ ni propagirajočih (enodelčnih) rešitev. Kot vedno v takih primerih pa obstaja tudi eksponentno padajoča rešitev

$$\tilde{\psi} = C \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_e \\ \tilde{\psi}_h \end{pmatrix} e^{-x\kappa}. \quad (9.9)$$

s $\kappa = \sqrt{\Delta^2 - E^2}/(\hbar v_F)$. Koeficiente valovne funkcije dobimo tako, da nastavke vstavimo v linearizirano BdG enačbo zgoraj

$$\begin{pmatrix} i\sqrt{\Delta^2 - E^2} & \Delta e^{i\phi} \\ \Delta e^{-i\phi} & -i\sqrt{\Delta^2 - E^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_e \\ \tilde{\psi}_h \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_e \\ \tilde{\psi}_h \end{pmatrix} \quad (9.10)$$

Dobimo $\tilde{\psi}_h/\tilde{\psi}_e = e^{-i\phi}(E/\Delta - i\sqrt{1 - (E/\Delta)^2})$, kar lahko napišemo z $e^{-i\phi}e^{-i\alpha}$, kjer je $\cos(\alpha) = E/\Delta$.

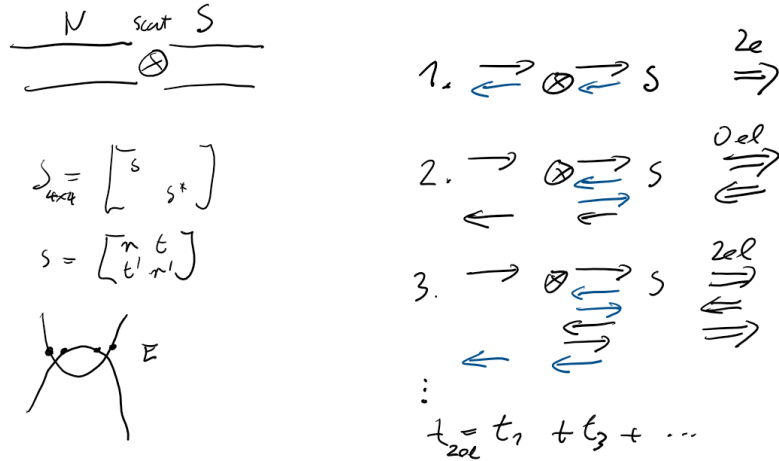
Sedaj rešitev na normalni strani in superprevodni strani povežemo z robnim pogojem $\psi(0^-) = \psi(0^+)$ (ker je diferencialna enačba, ki jo rešujemo prvega reda je dovolj, da enačimo vrednosti) in dobimo

$$r = (\tilde{\psi}_h/\tilde{\psi}_e)|_{x=0^+} = e^{-i\phi}e^{-i\alpha} := e^{i\chi}, \quad (9.11)$$

kjer smo definirali fazo za Andreev odboj elektrona χ .

Vidimo, da se elektroni z verjetnostjo $R = |r|^2 = 1$ odbijejo kot vrzeli, ki potujejo v smer stran od stika (z obratnim spinom - tega v zapisanih enačbah sicer eksplicitno ne vidimo). Vsakič, ko en elektron vpade na stik s superprevodnikom iz normalne strani (se pravi s $k > k_F$; $k_F > 0$)s sabo potegne še en elektron z obratne strani Fermijeve površine, se pravi $k > -k_F$, tako da ima nastala vrzelna eksitacija enako energijo). Ta par elektronov lahko prosto preide v superprevodnik kot Cooperjev par. Ob vsakem vpadlem elektronu tako preideta na superprevodno stran par elektronov. Transmisivnost je dvakratna (in, kot bomo videli, prevodnost 2 kvanta prevodnosti). Temu odboju pravimo odboj Andreeva. Glej sliko 9.2.

Domača naloga Če račun ponoviš za primer, ko na mejo vpadajo vrzeli (preveri, da lahko reproduciraš! - ne pozabi, da se moraš postaviti na ustrezno stran Fermijeve površine), dobiš $r = e^{i\phi}e^{-i\alpha} := e^{i\chi_h}$.



Slika 9.3: Tunelski stik med normalno kovino in superprevodnikom opišemo z idealnim vodnikom, sipalcem, in superprevodnikom. K prevodnosti prispevajo vsi procesi, ki vključujejo liho število Andreevskih odbojev.

Domača naloga 2 Obravnavaj stik med superprevodnikom in kovino v okviru BdG enačbe za primer elektronov, ki vpadajo pri $E > \Delta$. Zapiši rešitev na superprevodni strani in pokaži, da je reflektivnost za odboj Andreeva $r_A = e^{-i\phi}(E/\Delta - (\sqrt{E^2 - \Delta^2})/\Delta)$.

9.3 Prevodnost Andreeva

Zanima nas prevodnost. Obravnavali bomo bolj splošen primer, ko bomo med normalno kovino in superprevodnik postavili sipalec. Najprej moramo definirati sipalno matriko. Ker se v BdG enačbi pojavljajo tudi vrzeli bomo morali poiskati ustrezno sipalno matriko za vrzelne eksitacije, ki jo bomo morali povezati s sipalno matriko pri običajni obravnavi (S , ki je odvisna od momenta, se pravi energije).

Za elektrone z $E > 0$ je kar $S_e = S(E + E_F)$. Sipalna matriko za vrzeli pa je povezana s sipalno matriko za elektronska stanja pod Fermijevo površino. Velja $S_h = S^*(E_F - E)$, kar navajamo kar brez dokaza.

Elektron lahko pride z normalne strani v superprevodnik že v prvem

poizkusu (amplituda t_e), v superprevodnik preideta 2 elektrona, odbije se vrzel ($e^{i\chi_e}$), ki preide nazaj v kontakt na normalni strani (t'_h). Skupna amplituda za ta proces je $t_e t'_h e^{i\chi_e}$. Proces višjega reda je, da se vrzel na stiku odbije nazaj, ponovno Andreevo odbije in nastali elektron prepusti nazaj v izvorni kontakt (celotna amplituda $t_e e^{i\chi_e} r'_h e^{i\chi_h} t'_e$. Pri tem bi prišel par vrzeli na superprevodno stran, a to pomeni, da je celoten tok pri procesu drugega reda 0, saj se preneseta 2 el. ob prvem odboju in -2el. ob drugem odboju. Tako naslednji proces, ki prispeva k toku vključuje dodaten odboj in je celotna amplituda $t_e e^{i\chi_e} (r'_h e^{i\chi_h} r'_e e^{i\chi_e}) t'_h = t_e t'_h e^{i\chi_e} (e^{-i2\alpha} r'_h r'_e)$. Tok bodo prenesli vsi lihi procesi. Seštevek vseh amplitud je geometrijska vsota člena v oklepaju pomnoženo s $t_e t'_h e^{i\chi_e}$, kar pomeni, da je celotna verjetnostna amplituda za vse možne Andreeve odboje, ki prispevajo k toku

$$r_A = \frac{t_e t'_h e^{i\chi_e}}{1 - r'_h r'_e e^{-i2\alpha}}. \quad (9.12)$$

Za nizke energije E lahko energijsko odvisnost sipalne matrike S zanemarimo in velja $r_h = r_e^*$, $r'_h = (r'_e)^*$. Ni magnetnega polja, se pravi $t' = t$. Upoštevamo še $\alpha = \cos^{-1}(E/\Delta) \approx \pi/2$. Dobimo

$$r_A = \frac{|t_e|^2}{1 + |r_e|^2} = \frac{T}{2 - T}. \quad (9.13)$$

oz. za verjetnost za Andreev odboj

$$R_A = \frac{T^2}{(2 - T)^2}. \quad (9.14)$$

Vaja Izračunaj verjetnost za prehod še, če kvantne faze ne bi bile podobne in bi seštel verjetnosti. Ali dobiš enak rezultat?

Pri Andreevem odboju se preneseta 2 elektrona, zato je prevodnost po Landauerjevi formuli

$$G = 4e^2/h \frac{T^2}{(2 - T)^2}. \quad (9.15)$$

Če je sipanje šibko, je prevodnost večja kot v primeru običajnih elektrod. če pa je močno, $G = 4e^2/hT^2$ pa postane manjša (vsak Andreev prenos naboja

vključuje dve tuneliranji čez sipalec, zato T^2)

9.4 Andreeva vezana stanja

Med par superprevodnikov postavimo nanostrukturo. Elektroni se ob stiku s superprevodnikoma odbijejo kot vrzeli in obratno. Valovna funkcija v superprevodnikih je eksponentno padajoča. Dobimo vezano stanje. Če vpadne valove označimo z $A^{e,h}$ za elektrone in vrzeli, za nanostrukturo velja zveza

$$\begin{pmatrix} B_1^e \\ B_2^e \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_1^e \\ A_2^e \end{pmatrix}, \quad (9.16)$$

kjer je S sipalna matrika za elektrone in analogno za vrzeli, le da se bo pojavila S^* . To lahko zapišemo v obliki 4x4 matrične zveze

$$\begin{pmatrix} \underline{B}^e \\ \underline{B}^h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & S^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{A}^e \\ \underline{A}^h \end{pmatrix} \quad (9.17)$$

V superprevodna kontakta vpadejo elektroni z amplitudami \underline{B}^e ven pa po odboju Andreeva vrnejo vrzeli z amplitudami \underline{A}^h

$$\begin{pmatrix} A_1^h \\ A_2^h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\chi_L} & 0 \\ 0 & e^{i\chi_D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1^e \\ B_2^e \end{pmatrix} = S_S \begin{pmatrix} B_1^e \\ B_2^e \end{pmatrix} \quad (9.18)$$

(in podobno za vpadle vrzeli, le da se pojavijo faze $\tilde{\chi}$). Skupaj to napišemo v obliki 4x4 matrične zveze

$$\begin{pmatrix} \underline{A}^e \\ \underline{A}^h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{S}_S \\ S_S & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{B}^e \\ \underline{B}^h \end{pmatrix}. \quad (9.19)$$

Če zgornjo enačbo pomnožimo z leve s 4x4 sipalno matriko za nanostrukturo, dobimo

$$S^{4x4} S_S^{4x4} \underline{A} = \underline{A}. \quad (9.20)$$

Zadosten pogoj, da je ta enačba rešljiva je, da ima produkt matrik zgoraj lastno vrednost 1, oz. da je determinanta (produkta -1) enaka 0.

Iz tega pogoja se po premetavanju, ki ga ne bomo eksplicitno napravili, dobi

$$E = \Delta \sqrt{1 - T \sin^2(\phi_L - \phi_D)/2}, \quad (9.21)$$

kjer sta ϕ_L, ϕ_D superprevodni fazi v levem in desnem priključku. (Privzeli smo $\Delta_L = \Delta_D$.)

9.5 Josephsonov stik in Josephsonov efekt

Tunelski stik med dvema superprevodnikoma, ki smo ga ravno obravnavali, imenujemo Josephsonov stik. Kot bomo pokazali v nadaljevanju ima Josephsonov stik neobičajno povezavo med napetostjo in tokom, ki vodi do številnih uporabnih lastnosti, zlasti v kvantnih vezjih (realizacija kubitov, SQUID). Tok in napetost sta povezani s superprevodno fazo.

Povezavo med tokom, napetostjo in superprevodno fazo bomo izpeljali iz energije osnovnega stanja Josephsonovega stika.

V BdG formalizmu velja uporabna zveza med osnovnim stanjem superprevodnika in eksitacijami. Enodelčne eksitacije nad osnovnim stanjem so podane z rešitvami BdG Hamiltoniana $|\lambda\rangle$ z lastnimi energijami $E_\lambda > 0$. V osnovnem stanju (označimo ga s $|\psi_0\rangle$) je število teh eksitacij enako 0, velja torej $c_\lambda|\psi_0\rangle$ za vsak tak λ (kreacijski operator c_λ^\dagger ustvari stanje λ anihilacijski c_λ pa ga uniči).

Če vzamemo neko večdelčno stanje $|\tilde{\psi}_0\rangle$, potem lahko skonstruiramo osnovno stanje BdG Hamiltoniana tako, da nanj delujemo z vsemi anihilacijskimi operatorji za eksitacije λ . V kolikor ta operacija stanja ne uniči, po tej operaciji vsekakor eksitacije ne bodo prisotne. Zapišemo torej lahko $\psi_0\rangle \propto \prod_\lambda c_\lambda|\tilde{\psi}_0\rangle$. Odsotnost ekstitacij s pozitivno energijo pa je zaradi simetrije med delci in vrzelnimi ($c_\lambda = d_\lambda^\dagger$) povezana s prisotnostjo stanj z negativno energijo $-E_\lambda$. Osnovno stanje BdG Hamiltoniana je sestavljeno iz vseh zasedenih stanj z negativno energijo, se pravi

$$E_0 = \sum_{\lambda; E_\lambda < 0} E_\lambda = - \sum_{\lambda; E_\lambda > 0} E_\lambda \quad (9.22)$$

Energijo osnovnega stanja po zgornji enačbi tvorijo vse enodelčne ek-sitacije, propagirajoči kvazidelci kot tudi vezana stanja. Ključno vlogo v nadaljnem bo igral tisti del energije, ki je odvisen od fazne razlike med superprevodnikoma, le-ta pa je povezan z vezanimi stanji. Velja torej

$$E_0(\phi) = -\Delta \sum_n \sqrt{1 - T_n \sin^2(\phi/2)} \approx \frac{\Delta T}{4} (1 - \cos \phi) = E_j(-\cos \phi) + \text{const}, \quad (9.23)$$

kjer n označuje prečne valovne načine (kanale).

Tok skozi Josephsonov stik pa izpeljemo s pomočjo naslednjega trika. Moč, ki ju zunanji kontakti sproščajo na Josephsonovem stiku je $P = VI$. Ker imamo tu opravka s tokom v ravnovesju (disipacije v superprevodniku ni), je moč povezana s spremembo energije Josephsonovega stika

$$VI = dE/dt = \frac{dE}{d\phi} \dot{\phi} \quad (9.24)$$

Superprevodna faza se v prisotnosti (časovno neodvisnega) potenciala V povečuje s časom $\phi = (2eV/\hbar)t$ (se pravi, tako kot bi dobili za mirujoč delec z nabojem $2e$, ki bi ga opisovala Schroedingerjeva enačba $i\hbar\dot{\psi} = 2eV\psi$, oz. za $\psi = e^{i\phi}$, $\dot{\phi} = -2eV$. Obratni predznak zunaj oklepaja pa je, da pride iz tega, da je fazna razlika $\phi = \phi_D - \phi_L$, potencial, priklopljen na stik pa je $V_L - V_D$). Faktor 2 pride iz tega, da je superprevodna faza povezana s Cooperjevim parom (glej nastavek za BCS valovno funkcijo, podana je z dodatno fazo stanja, kjer dodamo dva elektrona). Velja torej

$$VI = \frac{dE}{d\phi} 2eV/\hbar \quad (9.25)$$

Iz tega dobimo

$$I = \frac{dE}{d\phi} 2e/\hbar = \frac{e\Delta}{\hbar} \sum_n \frac{T_n \sin \phi}{2\sqrt{1 - T_n \sin^2(\phi/2)}}. \quad (9.26)$$

Pogosto se izraz Josephsonov stik uporablja za šibko sklopitov $T_n \ll 1$. V

tej limiti se izraz poenostavi in dobimo

$$I = \frac{e\Delta}{2\hbar} \sum_n T_n \sin \phi = -\pi G_N \Delta / (2|e|) \sin(\phi) = -I_c \sin \phi, \quad (9.27)$$

kjer je G_N prevodnost stika v normalnem stanju. Maksimalen tok $I_c = E_J^0 2|e|/\hbar$, kjer je $E_J = E_J^0(-\cos \phi)$ energija Josephsonovega stika je torej podan z velikostjo energijske reže, torej kot bi med superprevodnikoma veljala napetostna razlika, podana z energijsko režo ($\ast\pi/2$). Tok je liha funkcija ϕ , in je ničen, ko imata superprevodnika enako fazo.

Vaja Pri kateri fazi je tok maksimalen v primeru kvantnega točkovnega stika $T = 1$? Reši nalogo tudi za splošno vrednost T .

Če imamo par superprevodnikov pri stalni napetostni razliki, faza linearno narašča s časom, tok pa oscilira, precej drugačne obnašanje kot za običajni upornik! Pojavu pravimo izmenični Josephsonov efekt. Po drugi strani pa stalni tok pomeni, da je faza konstantna, se pravi napetost enaka 0. Temu pravimo enosmerni (dc) Josephsonov efekt.

9.6 SQUID

SQUID (superconducting quantum interference device) je naprava, ki jo tvori par tunelsko sklopljenih superprevodnikov (slika). Tok skozi sistem je vsota tokov skozi zgornji rokav (fazna razlika na stiku ϕ_1) in spodnji rokav (ϕ_2). Fazna razlika je povezana z magnetnim pretokom. Velja

$$\int \nabla(\phi) \cdot d\mathbf{s} = \phi_2 - \phi_1 = \int (2e/\hbar) \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \int B dS (2e/\hbar) = 2(2\pi) \Phi / \Phi_0 = \Delta\phi, \quad (9.28)$$

kjer je $\Phi_0 = h/e \approx 4 \times 10^{-15} \text{Tm}^2$, B pa kaže prečno na ravnino zanke, ki jo oklepa zanka. Uporabili smo še, da se vsa fazna razlika zgodi na Josephsonovih stikih. Znotraj superprevodnikov gradienta faze ni. Za enaka stika (pol padca faze zaradi magnetnega pretoka $\Delta\phi$ pripišemo zgornjemu, polovico pa spodnjemu stiku, v superprevodnikih pa je faza konstantna se

za tok dobi

$$I = -I_c(\sin(\phi_1) + \sin(\phi_2)) = -2I_c \cos(2\pi\phi/\phi_0) \sin(\phi), \quad (9.29)$$

kjer je ϕ fazna razlika med superprevodnikoma v odsotnosti magnetnega polja. Maksimalen supertok skozi stik je odvisen od fazne razlike ϕ/ϕ_0 . Z Josephsonovimi stiki se lahko meri zelo majhna magnetna polja, do 10^{-18}T , Zemljino magnetno polje $50\mu\text{T}$. **Vaja** Izpelji rezultat zgoraj!

9.7 Makroskopska kvantna mehanika

V kvantnih pikah smo obravnavali bazenčke elektrone, kjer je bila ključna prostostna stopnja število elektronov. Tok smo obravnavali v okviru master enačb, cela slika pa je bila skoraj klasična (razen izračuna mikroskopskih parametrov, in dejstva, da je igralo pomembno vlogo, da je naboj na kvantni piki celoštevilski večkratnik osnovnega naboja). Sistem smo opisali kot klasično mešano stanje: o kvantni fazi in kvantnih superpozicijah stanj (npr. z različnimi števili elektronov) nismo potrebovali razmišljati.

Situacija se spremeni, ko priključki in kvantna pika preidejo v superprevodno stanje. V tem primeru tako stanje priključkov kot kvantne pike poleg naboja določa kvantna faza superprevodnega kondenzata. Kvantna faza neposredno vpliva tudi na energijsko bilanco: poleg Coulombske energije je potrebno upoštevati še Josephsonovo energijo, ki je podana s faznimi razlikami.

Obravnavajmo najprej minimalni sistem ('Cooperjevo škatlo', ang. Cooper pair box), ko kvantno piko priklopimo na elektrodo, ki je tunelsko sklopljena in pa na elektrodo, ki je zgolj kapacitivno sklopljena na sistem. Energija takega sistema je

$$E = \frac{1}{2C}(Ne - q)^2 + E_J = \frac{E_c}{2}(N - q/e)^2 + E_J(-\cos \phi), \quad (9.30)$$

kjer je, $q = C_g V_g$ (glej poglavje o kvantnih pikah), $E_c = e^2/(2(C + C_g))$, $E_J = I_c/(\hbar 2|e|)$. I_c kritična vrednost Josephsonovega toka. V nadaljnem bomo

izraz za energijo dodatno poenostavili ob predpostavki majhnih faz, in pa postavili napetost na vratih na 0. Potem imamo

$$E = \frac{1}{2(C + C_g)}(Ne - q)^2 + E_J = \frac{E_c}{2}N^2 + \frac{E_J}{2}\phi^2, \quad (9.31)$$

kjer je $E_c = e^2/(C + C_g)$.

9.8 Naboj in faza sta konjugirani količini; Schrodingerjeva enačba za superprevodnik

V obravnavi zgoraj smo naboj in fazo obravnavali kot neodvisni, klasični količini, ki sta obe hkrati lahko ostro določeni. Iz BCS valovne funkcije vemo, da temu ni tako. Stanje z dobrim številom nabojev dobimo kot vsoto stanj z različnimi fazami $\psi_{BCS} = \int \psi(\phi)e^{-iN/2\phi}d\phi$, stanje z dobro fazo pa ustreza stanjem z različnim številom nabojev. N in ϕ igrata vlogo konjugiranih količin, kot položaj in gibalna količina v običajni enodelčni kvantni mehaniki. Izkaže se, da

$$[\hat{N}, \hat{\phi}] = -2i \quad (9.32)$$

kjer sta \hat{N} in $\hat{\phi}$ operatorja naboja in faze (ta komutacijska zveza se v literaturi pojavi v večih variacijah, faktor 2 izgine, če N označuje število Cooperjevih parov; predznak, kot je zapisan, velja, če je faza $\phi = \phi_s - \phi_p$, kjer je ϕ_p faza superprevodnika na piki, $\phi_s = 0$ faza superprevodnika na izviri.)

Oglejmo si Josephsonov stik v tunelski limiti (T majhen in za majhno fazno razliko ϕ). V tej limiti lahko zapišemo

$$E = E_J\phi^2/2 \quad (9.33)$$

V tej limiti velja $I = -I_c\phi_p$ in $\dot{I} = -I_c\dot{\phi}_p = I_c(2eV/\hbar)$. Vidimo, da Josephsonov stik v tej limiti ustreza tuljavi (le da energija ni shranjena v magnetnem polju, pač pa v superprevodnih Andreevih vezanih stanjih). Za tuljavo namreč velja $\dot{I} = (1/L)V$, kjer je L induktivnost.

Opišimo tako poenostavljeno Cooperjevo škatlo (ki pravzaprav ustreza LC členu). Energija sistema (in, povezano Hamiltonian) je

$$H = E_C \hat{N}^2 / 2 + E_J \hat{\phi}^2 / 2 \quad (9.34)$$

V izrazu zgoraj smo ostre vrednosti naboja in faze nadomestili z operatorji. Ob obravnavi Cooperjeve škatle lahko pozabimo na vse mikroskopske detajle, relevantne količine so naboj in pa faza, to pa moramo opisati kvantno mehansko.

Da dobimo pravilne enačbe gibanja moramo za operatorja \hat{N} in $\hat{\phi}$ privzeti komutacijsko zvezo

$$[\hat{N}, \hat{\phi}] = -2i \quad (9.35)$$

9.9 Enačbe gibanja

Da pokažemo zgornjo zvezo, je najprej potrebno izvednotiti klasične enačbe gibanja, se pravi, povezati $\dot{\phi}, \dot{N}$ z vrednostmi N, ϕ . Najprej velja

$$\dot{\phi} = -\dot{\phi}_p = 2eV/\hbar. \quad (9.36)$$

Potencial na piki V je povezan z nabojem na piki $eN = V(C + C_g)$. Sledi torej

$$\dot{\phi} = \frac{2E_c}{\hbar} N, \quad (9.37)$$

Po drugi strani pa velja

$$e\dot{N} = I = -I_c \sin(\phi_p - \phi_s) = I_c \sin(\phi) \approx I_c \phi = \frac{E_J 2|e|}{\hbar} \phi, \quad (9.38)$$

se pravi

$$\dot{N} = -\frac{E_J 2e}{\hbar} \phi. \quad (9.39)$$

Opazimo analogijo enačb gibanja s tistimi za harmonski oscilator

$$\dot{x} = \frac{1}{m} p; \quad \dot{p} = -kx. \quad (9.40)$$

N se obnaša kot gibalna količina, ϕ pa kot koordinata. Enako velja po kvantizaciji: **Vaja** Izvrednoti Heisenbergove enačbe gibanja $i\hbar\dot{A} = [A, H]$ za operatorja \hat{N} in $\hat{\phi}$ in pokaži, da imajo pravilno klasično limito, če predpostaviš komutacijsko zvezo zgoraj.

Vidimo, da sta \hat{N} in $\hat{\phi}$ konjugirani količini. Uporabno je napraviti primerjavo s $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. Lahko bi vpeljali tudi $k = p/\hbar$ in dobili $[\hat{x}, \hat{k}] = i$, faktorja 2 pa bi se lahko znebili, če bi namesto elektronov šteli Cooperjeve pare.

S tem smo postavili analogijo med kvantnomehanskim opisom enega delca v 1d (bolj natančno, na obroču, saj je ϕ peridčna koordinata in (v harmonskem potencialu) in kvantnomehanskim opisom Cooperjeve škatle. Vidimo, da faza ϕ ustreza koordinati x , število nabojev pa valovnemu vektorju k . V stanju z dobrim številom nabojev $|N\rangle$ bi bila fazna reprezentacija "ravni val"

$$\langle\phi|N\rangle = e^{iN\phi/2}. \quad (9.41)$$

Koristno si je ogledati še Hamiltonian, ki je v fazni reprezentaciji

$$H = \frac{E_c}{2}(\partial_\phi)^2 + E_J(1 - \cos(\phi)) \quad (9.42)$$

(Josephsonovo energijo smo nazaj vrnil v izvorno obliko). Zanimivo si je ogledati še nabojno reprezentacijo. Vidimo, da Josephsonov potencial $\cos(\phi) = (e^{i\phi} + e^{-i\phi})/2$, ko deluje na $|N\rangle$ poveča in zmanjša naboj za 2. V nabojni reprezentaciji je torej

$$H = \frac{E_c}{2}N^2 + \frac{E_J}{2} \sum_N (|N+2\rangle\langle N| + |N-2\rangle\langle N|) \quad (9.43)$$

9.10 Josephsonovi kubiti

Ključna bo nelinearna povezava Josephsonove faze z energijo (neekvidistantni energijski nivoji).

9.11 Parity effect

Da dodamo dodatni elektron, moramo plačati energijo Δ . To pomeni, da so vsa liha stanja pri višjih energijah. Ne bomo diskutirali naprej, a to je vzrok za spremenjene Coulombske diamante.

Poglavje 10

Kvantno računalništvo

10.1 Kompleksnost kvantne informacije

Feynmann je v nekem predavanju 1981 razmišljal o tem, da mikroskopski opis sistema vsebuje ogromno informacije in da je kvantno mehaniko (sploh večdelčno) zato zelo težavno simulirati na običajnih računalnikih.

Oglejmo si npr. spinsko verigo dolžine N : klasično stanje opišemo z binarnim številom dolžine N . Količina spomina, ki ga potrebujemo za zapis informacije o stanju torej narašča linearno z N . (Za verigo dolgo 10 mest, potrebujemo 10 bitov, za verigo dolgo 20 mest, 20 bitov informacije)

Kvantno stanje pa je superpozicija

$$\psi = \sum_n \alpha_n |n\rangle \quad (10.1)$$

Število različnih baznih stanj je podano z 2^N . Denimo, da smo zadovoljni z zapisom α_n z 10-imi biti. Potem potrebujemo $2^N * 10$ bitov spomina za zapis stanja. (Ključna je superpozicija in obstoj prepletenih stanj, produktivnih stanj je precej manj, in jih določa N parov realnih konstant)

Feynmann pa se je v tem predavanju tudi vprašal, ali ne bi morebiti na situacijo pogledali z obratnega konca in uporabili časovno dinamiko kvantnega sistema za rešitev kompliciranih vprašanj. Kvantni sistem vsekakor nima nobene težave simulirati samega sebe! To je bilo rojstvo ideje kvantnega

računalništva. V poznih 80ih in zgodnjih 90ih se je potem ideja kvantnega računalništva razvijala. Pojavili so se kvantni algoritmi, ki klasične operacije napravijo hitreje kot običajni algoritmi, in prvi kvantni računalniki, ki algoritme izvajajo (dostopni tudi prek weba: npr. IBM quantum experience). Trenutno obstajajo kvantni računalniki, ki sestojijo iz 50 kubitov. Problem je dekoherenca.

10.2 Kubit

Enota kvantne informacije je kubit, to je kvantno stanje dvonivojskega sistema. Podano je z dvema neodvisnima realnima številoma in ga lahko predstavimo kot točko na Blochovi sferi.

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2)|\uparrow\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\phi}|\downarrow\rangle \quad (10.2)$$

za to stanje velja

$$\langle\psi|\sigma|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\phi)\sin(\theta) \\ \sin(\phi)\sin(\theta) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad (10.3)$$

kar lahko opišemo tudi z uporabo zaporednih operacij rotacij

$$e^{-i\hat{n}\cdot\sigma/2\alpha} = \cos\alpha/2\hat{1} - i\hat{n}\cdot\sigma\sin(\alpha/2) \quad (10.4)$$

(faktor $1/2$ pride zato, ker je spin $1/2$), kjer najprej spin \uparrow zarotiramo okrog osi y , tako da kaže delno v smeri x , potem pa to stanje zarotiramo še okrog osi z , in izpostavimo $e^{i\phi/2}$.

Vaja Pokaži, da z operacijo dveh rotacij zgoraj res dobiš stanje spina na Blochovi sferi, kot je podano zgoraj.

V vsakem kubitju je torej ogromno klasične informacije, toda z meritvijo je ne moremo izluščiti. Potrebovali bi namreč veliko kopij stanj $|\psi\rangle$, kar pa preprečuje izrek o nekloniranju (ang. no-cloning theorem).

10.3 Izrek o nekloniranju

Izrek o nekloniranju pravi, da iz neznanega stanja $|\psi\rangle$ ne moremo ustvariti njegove kopije, ne da bi stanje samo ob tem uničili.

Izrek bomo dokazali s protislovjem. Edina možnost, da bi ustvarili novo kopijo brez odpravljivega učinka na izvirno stanje je z unitarno transformacijo, ki jo imenujmo U . Imejmo poleg stanja $|\psi\rangle$ še znano 'prazno' stanje $|e\rangle$. Radi bi, da U deluje takole:

$$U|\psi\rangle|e\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle. \quad (10.5)$$

U torej stanje e prepiše v ψ . Uporabimo U na stanju $(a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle)|e\rangle$.

$$U(a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle)|e\rangle = (a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle)(a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle). \quad (10.6)$$

Zaenkrat izgleda kar dobro. Toda, ker je U unitarna (se pravi, tudi linearna) operacija, lahko U izvednotim tudi na vsakem od stanj posebej, se pravi

$$U(a|\uparrow\rangle|e\rangle + b|\downarrow\rangle|e\rangle) = aU|\uparrow\rangle|e\rangle + bU|\downarrow\rangle|e\rangle = a|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle|\downarrow\rangle, \quad (10.7)$$

kar pa ni enako rezultatu zgoraj razen, če je ali a ali pa b enak 0. Unitarna operacija U , ki bi opravil želeno operacijo kloniranja torej ne obstaja.

10.4 Kvantna vezja

Kvantna vezja so sestavljena iz seta kubitov na katerih opravljamo unitarne operacije. S tem opravimo procesiranje informacije. Na koncu na kubit/kubitih opravimo meritev. Glavna razlika glede na klasična vezja je, da so lahko vhodni biti v linearni superpoziciji. Tako lahko izvednotenje kvantnega vezja z enkratno vhodno kvantno informacijo v resnici preišče več analognih klasičnih vhodov. Kvantna superpozicija in interferenca so ključ do pohitritve kvantnih algoritmov. Druga razlika glede na klasična vezja je, da so operacije unitarne, torej obrnljive. Pri klasičnih vezjih temu ni tako, večina operacij iz dveh vhodnih bitov napravi enega izhodnega, npr.

OR,AND,NAND. operacije. Kvantne operacije pa so obrnljive.

10.5 Operacije na kubitih

Enokubitne operacije Oglejmo si konkretno realizacijo kubita, spin. Nanj lahko delujemo z magnetnim poljem in z vklopom električnega potenciala, kar omogoča poljubno transformacijo na kubitnu (spremembo iz nekega začetnega stanja v poljubno končno stanje). Npr., ena operacija, ki je uporabna je, NOT $|0\rangle \rightarrow |1\rangle, |1\rangle \rightarrow |0\rangle$, ki jo lahko realiziramo z zasukom okrog x .

$$\text{NOT} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (10.8)$$

Vaja Pokaži, da NOT operacijo realiziramo z $R_{\hat{x}}(\pi)e^{-i\pi/2}$.! Še ena kubitna operacija, ki je uporabna (se pogosto uporablja v kvantnih algoritmihih za ustvarjenje linearne superpozicije), so Hadamardova vrata.

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = e^{-i\pi} R_{(1,0,1)}(\pi) \quad (10.9)$$

Vaja Pokaži zgornjo zvezo!

Večkubitne operacije Z enokubitnimi operacijami lahko realiziramo le majhen del vseh možnih transformacij na večdelčni valovni funkciji, npr., če začnemo s produktnim stanjem bo poljubno zaporedje enokubitnih operacij na poljubnih kubitih š vedno dalo valovno funkcijo, ki bo produktna (operacija ima zgolj $2N$ parametrov). Procesiranje in obdelava kvantne informacije temelji na večkubitnih operacijah (enako kot običajno računalništvo, izračun vsote, npr., že vključuje večbitne operacije).

Izkaže se (tega ne bomo dokazali), da lahko poljubno večkubitno operacijo sestavimo iz dvokubitnih in enokubitnih operacij, še več, za univerzalno kvantno računanje je dovolj imeti na voljo le CNOT operacijo.

CNOT (controlled NOT) vrata predstavlja operacijo, ki obrne stanje

drugega kubita, če je stanje prvega kubita enako 1. Velja torej

$$\text{CNOT} = |00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01| + |11\rangle\langle 10| + |10\rangle\langle 11| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.10)$$

Operacijo lahko zapišemo tudi CNOT: $xy \rightarrow x(x+y)$ (+ označuje XOR operacijo) Še ena operacija, ki je zanimiva so Toffolijeva vrata. Ta so trokubitna (vhod xyz) in spremenita stanje tretjega bita, če sta prva dva enaka 1 (CCNOT). Lahko jih zapišemo kot Toffoli: $xyz \rightarrow xy(z + xy)$. Če postavimo $z = 1$, potem je to NAND operacija prvih dveh kubitov katere rezultat je shranjen v tretjega. S Toffolijevimi vrati pokažemo, da lahko kvantni računalnik simulira klasičnega, saj lahko z NAND vrati ustvarimo vsa klasična vezja.

Vaja Realizacija CNOT vrat z Isingovimi vrati.

Vaja Realizacija CNOT vrat s Heisenbergovo interakcijo.

Vaja Realizacija CNOT vrat z dvojno kvantno piko (ki realizira Heisenbergovo interakcijo)

Izkaže se, da lahko z enokubitnimi operacijami in vrati CNOT izvedemo vse dvo-kubitne operacije. S kombinacijo dvo-kubitnih operacij pa poljubno n -kubitno operacijo.

10.6 Kvantni algoritmi

Na kvantnih vezjih lahko izvedemo kvantne algoritme, ki pa rešijo klasične probleme. Za uvod si pogledjmo kar konkreten primer.

Deutschev algoritem Imejmo 'črno škatlo' z dvema priključkoma, enim vhodnim in enim izhodnim. Vhod je lahko 0,1 izhod je lahko 0,1. Imejmo najprej pred očmi kar klasično implementacijo tega. Gre torej za funkcijo enega bita, izhod je en bit. Imamo štiri možne operacije, ki jih črna škatla

udejani $f_1 : (0, 1) \rightarrow (0, 0)$, $f_2 : (0, 1) \rightarrow (0, 1)$, $f_3 : (0, 1) \rightarrow (1, 0)$, $f_4 : (0, 1) \rightarrow (1, 1)$. Denimo, da nas zanima le ena lastnost črne škatle: ali je izhod konstanten, torej enak 0 (ali 1) ne glede na vhod, ali pa je izhod uravnotežen, se pravi se spreminja z vhomom. Da odgovorimo na to vprašanje v klasičnem vezju moramo vezje iz vrednotiti 2-krat, v kvantnem vezju pa je dovolj le eno iz vrednotenje vezja. (Posplošen Deutsch-Jozsa algoritem to posploši na n -bitni vhod in eno-bitni izhod, vprašanje je zopet ali je črna škatla uravnotežena (tu se omejimo le na tiste funkcije, ki za pol vhodov dajo 1 in za pol vhodov 0) ali konstantna. Zopet je dovolj le eno iz vrednotenje vezja medtem ko mora klasični računalnik preizkusiti $n/2$ vhodov, če imamo smolo.)

Računska kompleksnost Kvantne računalniki so uporabni, če rešijo problem hitreje kot klasični. Nekateri problemi, ki so klasično težki (in npr. potrebujejo) veliko iz vrednotenij vezja so kvantno lahki. S težavnostjo se ukvarja teorija računske kompleksnosti. Ključno je, kako izvedba določene računske operacije skalira z velikostjo vhoda. Npr., seštevanje dveh števil velikosti N narašča linearno s številom bitov n , ki jih potrebujemo za zapis števila, torej kot $\log(N)$, če je N število. Množenje gre kot n^2 . Seštevanju in množenju pravimo, da sodita v kompleksnost P. To so problemi, ki terjajo število operacij, ki narašča kot polinom n . Težje probleme imenujemo NP. To so tisti, ki zahtevajo eksponentno mnogo operacij v n , posebnost NP problemov pa je, da lahko rezultat preizkusimo s številom operacij, ki je polinomska v n . Primer je npr. razcep števila na praštevilo, ki potrebuje preizkus \sqrt{N} deliteljev, se pravi reda 2^n operacij. Pravzaprav se za trdno ne ve, ali klasični algoritem, ki bi faktoriziranje opravil v polinomskem številu operacij ne obstaja. Ve pa se, da obstaja tak kvantni algoritem.

Groverjev algoritem Iskanje v neurejeni bazi (vemo telefonsko številko, ne vemo pa imena). V splošnem moramo preiskati cel imenik (N operacij), kvantno je dovolj le \sqrt{N} . Pohitritev je v tem primeru polinomska.

Shorov algoritem Gre za faktorizacijo. Ima velik pomen pri kodiranju na podlagi javnega ključa. Pri tem gre za to, da jaz nekomu pošljem javni ključ, ki temelji na velikem celem številu, ki je produkt dveh velikih praštevil. Odkodiranje je enostavno, če poznaš ti dve praštevili. Faktorizirati pa je težko.

10.7 Kvantna strojna oprema

Nielsen-Chuang, John Preskill. Citat iz Chuanga: "Računalniki v prihodnosti mogoče ne bodo tehtali več kot 1.5 tone". (citat iz Popular Mechanics, napoved neutrudnega napredka v znanosti leta 1949) "Pričakujem, da je svetovno tržišče dovolj veliko za morebiti pet računalnikov" (šef IBM Thomas Watson 1943)

Kvantni računalniki so trenutno v povojih, svetovni rekord so računalniki veliki okrog 53 Josephsonovih kubitov (tako Google kot IBM). Se pa z njimi ukvarjajo velika podjetja IBM, Google, Honeywell (kubiti na bazi ujetih ionov) in Microsoft (topološki kubiti). Jeseni 2019 je Google rešil problem v 5 minutah, ki bi na najmočnejšem trenutnem klasičnem računalniku vzel vsaj 3 dni. V tem razdelku si bomo ogledali nekaj različnih arhitektur za implementacijo kvantnih bitov. Najprej si pogledjmo nekaj lastnosti, ki jih mora dobra kvantna arhitektura imeti za uspešno ravnanje s kvantno informacijo. Osnovna lastnost je kvantna koherenca. Kvantni algoritmi temeljijo na unitarnih operacijah. Valovna funkcija vmes ne sme kolapsirati. Vsi kvantni sistemi pa so sklopljeni tudi na okolico, torej celotni Hamiltonian ima obliko

$$H = H_{\text{QC}} + H_{\text{okolica}} + H' \quad (10.11)$$

ki vsebuje člene H' , ki sklapljajo kvantni računalnik (QC) in okolico. Sklopitev z okolico povzroči, da se stanje kubita preplete z nepoznanimi prostostnimi stopnjami okolice, valovna funkcija, ki je v odsotnosti sklopiteve (zapisana za primer enega kubita)

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle|\chi\rangle = (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|\chi\rangle \quad (10.12)$$

produktna funkcija kubita (ψ) in okolice (χ), postane prepletena

$$|\psi\rangle = (\alpha'|0\chi_0\rangle + \beta'|1\chi_1\rangle) \quad (10.13)$$

Kar se tiče vedenja o kubitih, je vsa informacija vsebovana v gostotni matriki, ki je za čisto stanje $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$. Poljubna opazljivka $\langle A \rangle = \text{Tr}\rho A$. Da dobimo gostotno matriko ρ iz celotnega stanja sistema lahko napravimo sled po prostostnih stopnjah okolice

$$\rho = \text{Tr}_\chi |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (10.14)$$

Le-ta je enaka tisti za čisto stanje ψ samo v primeru produktnega stanja med sistemom in okolico, sicer pa dobimo mešano stanje: sistem je opravil meritev. Teorija o dekoherenci sicer še ni dokončno izdelana in prehod med klasičnim in kvantnim je predmet aktualnih raziskav.

di Vincezo-jevi kriteriji Fazna razlika med α' in β' postane podana s prostostnimi stopnjami, ki jih nimamo pod nadzorom. Informacija se prenese v okolico: pravimo, da je okolica opravila meritev. Rezultat je identičen kolapsu valovne funkcije ob meritvi.

Klučen izziv je nasprotujoča si zahteva, da mora uporabni kvantni računalnik vsebovati kubite, ki so po eni strani od okolice čimbolje izolirani, po drugi strani pa moramo biti sposobni na njih opravljati kontrolirane unitarne operacije in meritve.

Kriteriji:

- Robustnost. Kvantna informacija mora biti varna pred dekoherenco.
- Inicializacija. Zmožni moramo biti postaviti kubite na začetno vrednost.
- Manipulacija. Zmožni moramo biti opraviti eno in dvo-kubitne operacije, da lahko izvedemo poljubni algoritem.
- Meritev.

- Skalabilnost. Dobra arhitektura omogoča izvedbo s čimvečjim številom kubitov.

Kvantni volumen Merilo, ki ga je izumil IBM, ki je 2^k , kjer je k največje število za določeno vezje, da to vezje lahko opravi naključen set kvantnih operacij na k kubitih z globino k (se pravi k operacij), ki delujejo med poljubnimi pari kubitov in dobiš rezultat, ki je pravilen v 2/3 primerih. Ta kriterij združuje različne karakteristike, kot je Hirschev indeks za raziskovalce. Ker znajo sistemi, ki temeljijo na Josephsonovih kubitih, izvajati operacije le med sosednjimi kubitih, imajo dokaj majhen kvantni volumen, Honeywell, ki temelji na ujetih ionih pa bo imel večjega (naj bi imel 2^6). Seveda pa to lahko hkrati pomeni tako majhno število kubitov, da ne bo tak računalnik znal nujno napraviti nič, česar klasični računalnik ne bi znal.

Dodatek A

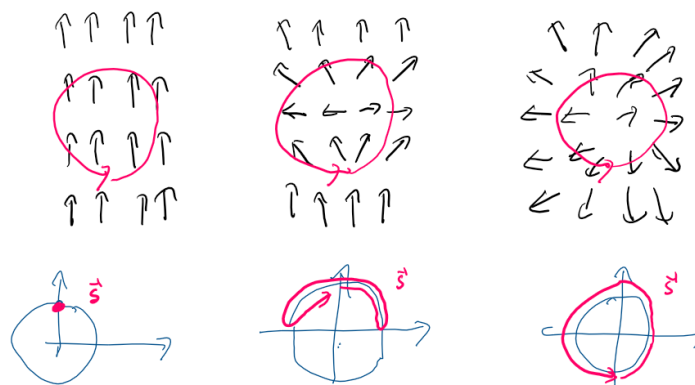
Topologija v trdni snovi

Topologija je veda, ki se ukvarja z globalnimi lastnosti celote, ki se ne spremenijo v ob zveznih majhnih lokalnih spremembah. Ameriški krof donut je tako topološko ekvivalenten šalici z ročko. Topologija je pomembna npr. za klasifikacijo stabilnosti defektov v urejenih stanjih. Predstavljajmo si npr. feromagnetno urejen sistem v 2d, kjer parameter urejenosti predstavimo z vektorjem $\mathbf{s}(\mathbf{r})$. Naj velja dodatni pogoj, da magnetni momenti nimajo komponente prečno na ravnino, $\mathbf{s} = (s_x, s_y, 0)$. Slika kaže primer dveh defektov: defekt na levi strani lahko z zveznimi majhnimi spremembami odpravimo. Pravimo, da je topološko ekvivalenten urejenemu stanju v katerem momenti vsi kažejo v isto smer, za defekt na desni strani pa to ni možno, zato mu pravimo topološki defekt.

Dober pregledni članek za uvod v topologijo je Mermin, Rev. Mod. Phys. 51 591 (1979).

Sledimo temu članku in napravimo diskusijo malenkost bolj formalno. Oglejmo si neko pot okrog defekta in jo parametriziramo a parametrom $a \in \mathcal{A}$. Definirajmo prostor parametra urejenosti $s \in \mathcal{S}$. Potem lahko definirajmo konfiguracijo, ki jo parameter urejenosti zavzame na poti kot preslikavo $f : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{S}$. Za dve konfiguraciji f, g pravimo, da sta homotopski, če obstaja zvezna preslikava ene v drugo, torej če obstaja tak h_t , ki je zvezen v $t \in [0, 1]$ in je tak, da za $h_{t=0} = f$ in $h_{t=1} = g$.

Tej preslikavi pravimo homotopija. Med konfiguracijami lahko defini-



Slika A.1: Levo. Urejena struktura. Parameter urejenosti iz vrednoten po sklenjeni poti ne spreminja vrednosti. Desno: Topološki defekt. Parameter urejenosti po poti opiše cel krog po konfiguracijskem prostoru. Takšne konfiguracije (ki ustreza ovojnemu številu 1) ne moremo odpraviti z lokalnimi deformacijami. Sredina: Netopološki defekt. Odmike parametra urejenosti od urejenega stanja lahko odpravimo z lokalnimi spremembami.

ramo ekvivalenčno relacijo \sim s predpisom

$$f \sim g, \text{ če } \exists \text{ homotopija } h_t \tag{A.1}$$

Homotopija razdeli prostor konfiguracij na ekvivalenčne razrede. Ti ekvivalenčni razredi imajo strukturo grupe, ki ji pravimo fundamentalna grupa. Struktura fundamentalne grupe je odvisna od prostora parametra urejenosti.

Primeri:

- $\pi_1(\mathcal{S}^1) = \mathbb{Z}$
- $\pi_1(\mathcal{S}^2) = \{0\}$

Obstajajo tudi višje fundamentalne grupe, ki ustrezajo ekvivalenčnim razredom homotopij preslikav, ki preslikajo prostor (hiper)-ploskev v prostor parametra urejenosti, velja npr. $\pi_2(\mathcal{S}^2) = \mathbb{Z}$. (Za parameter urejenosti enotskih spinov, ki kažejo kamorkoli in zato ustrezajo enotski sferi \mathcal{S}^2 lahko definiramo točkaste defekte v treh dimenzijah – primer momentov, ki kažejo radialno nazven).

Dodatek B

Dodatek

B.1 Spisek Nobelovih nagrad povezanih z vsebino predmeta

Spodaj se nahaja spisek Nobelovih nagrad, ki so povezane z vsebino kurza.

1. Nobel Prize in Physics 1972: John Bardeen, Leon Neil Cooper, and John Robert Schrieffer "for their jointly developed theory of superconductivity, usually called the BCS-theory."
2. Nobel Prize in Physics 1973: Brian D. Josephson "for his theoretical predictions of the properties of a supercurrent through a tunnel barrier, in particular those phenomena which are generally known as the Josephson effects."
3. Nobel Prize in Physics 1977: Philip W. Anderson, Sir Nevill Francis Mott, and John H. Van Vleck "for their fundamental theoretical investigations of the electronic structure of magnetic and disordered systems."
4. Nobel Prize in Physics 1985: Klaus von Klitzing "for the discovery of the quantized Hall effect."
5. Nobel Prize in Physics 1998: Robert B. Laughlin, Horst L. Störmer,

and Daniel C. Tsui ”for their discovery of a new form of quantum fluid with fractionally charged excitations.”

6. Nobel Prize in Physics 2010: Andre Geim and Konstantin Novoselov ”for groundbreaking experiments regarding the two-dimensional material graphene.”
7. Nobel Prize in Physics 2012: Serge Haroche and David J. Wineland ”for ground-breaking experimental methods that enable measuring and manipulation of individual quantum systems.”
8. Nobel Prize in Physics 2016: David J. Thouless, F. Duncan M. Haldane, and J. Michael Kosterlitz ”for theoretical discoveries of topological phase transitions and topological phases of matter.”
9. Nobel Prize in Physics 2022: Alain Aspect, John F. Clauser, and Anton Zeilinger ”for experiments with entangled photons, establishing the violation of Bell inequalities and pioneering quantum information science.”
10. Nobel Prize in Chemistry 2023: Moungi G. Bawendi, Louis E. Brus, and Aleksey Yekimov ”for the discovery and synthesis of quantum dots.”