

Исмаэль Элиас Эразо Веласко,

Аспирант,

Факультет теоретической физики,

Челябинский государственный университет,

ResearchGate: <https://www.researchgate.net/profile/Ismael-Erazo-Velasco>

Дмитрий Александрович Кузьмин*,

Доктор физико-математических наук, профессор,

Научный руководитель,

Челябинский государственный университет,

ResearchGate: <https://www.researchgate.net/profile/Dmitry-Kuzmin>

ТОПОЛОГИЧЕСКАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ, ИНДУЦИРОВАННАЯ ГЕОМЕТРИЕЙ, И МАЙОРАНОВСКИЕ НУЛЕВЫЕ МОДЫ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

Аннотация. В работе представлен теоретико-численный анализ механизмов возникновения майорановских нулевых мод в металлических углеродных нанотрубках типа (n,n) s -волновым сверхпроводником и помещённых в однородное аксиальное магнитное поле. Основная цель исследования заключается в построении эффективной одномерной низкоэнергетической модели, исходя из дираковского описания электронных состояний графена с учётом геометрии свёрнутой структуры.

Показано, что квантование поперечного движения, орбитальный вклад магнитного поля (эффект Ахаронова–Бома) и спин–орбитальное взаимодействие, индуцированное кривизной, совместно формируют топологически нетривиальное сверхпроводящее состояние. В этом режиме эффективный гамильтониан сводится к одномерной модели известного типа, причём все её параметры выражаются напрямую через геометрические характеристики нанотрубки и величину внешнего магнитного поля, без введения феноменологических допущений.

Появляющиеся на концах нанотрубки майорановские моды представляют собой нелокальные квантовые состояния, защищённые сверхпроводящей щелью, что делает их перспективными кандидатами для реализации топологических кубитов. Аналитические результаты подтверждаются численным моделированием в рамках гамильтониана Боголюбова–де Жена, демонстрирующим закрытие и переоткрытие энергетической щели и появление локализованных краевых состояний.

This work presents a theoretical and numerical analysis of the mechanisms leading to the emergence of Majorana zero modes in metallic carbon nanotubes of the (n,n) type, proximitized by an s -wave superconductor and subjected to a homogeneous axial magnetic field. The main objective is to construct an effective one-dimensional low-energy model, starting from the Dirac description of graphene electronic states and explicitly accounting for the geometry of the rolled structure.

It is shown that transverse mode quantization, the orbital contribution of the axial magnetic field associated with the Aharonov–Bohm effect, and curvature-induced spin–orbit coupling jointly give rise to a topologically nontrivial superconducting phase. In this regime, the effective Hamiltonian reduces to a well-known one-dimensional model, with all parameters expressed directly in terms of the geometric properties of the nanotube and the external magnetic field, without introducing phenomenological assumptions.

The resulting Majorana modes, localized at the ends of the nanotube, constitute nonlocal quantum states protected by the superconducting gap, making them promising candidates for topological qubits. The analytical predictions are supported by numerical simulations based on the Bogoliubov–de Gennes Hamiltonian, which reveal gap closing and reopening and the emergence of localized edge states.

Ключевые слова: майорановские нулевые моды; углеродные нанотрубки; топологическая сверхпроводимость; гамильтониан Боголюбова–де Жена; спин–орбитальное взаимодействие, индуцированное кривизной; топологические кубиты; топологический квантовый порядок

Keywords: Majorana zero modes; carbon nanotubes; topological superconductivity; Bogoliubov–de Gennes Hamiltonian; curvature-induced spin–orbit coupling; topological qubits; quantum topological order

Введение

Поиск майорановских нулевых мод в конденсированных средах в последние годы занял центральное место в современной физике твёрдого тела. Такой интерес обусловлен возможностью реализации топологически защищённых квантовых состояний, обладающих высокой устойчивостью к локальным возмущениям и шуму. Именно это свойство делает майорановские состояния особенно привлекательными для задач надёжного хранения и обработки квантовой информации, где проблема декогеренции остаётся одной из ключевых.[1],[2] С теоретической точки зрения майорановские нулевые моды возникают в сверхпроводящих системах с нетривиальной топологией спектра Боголюбова–де Жена и проявляются в виде связанных состояний нулевой энергии, локализованных на границах или дефектах системы. Экспериментальные исследования последних лет в основном были сосредоточены на гибридных структурах на основе полупроводниковых нанопроводов с сильным спин–орбитальным взаимодействием, находящихся вблизи s -волновых сверхпроводников и подвергнутых действию внешнего магнитного поля. Несмотря на значительный прогресс, такие системы часто характеризуются сложной параметрической зависимостью и ограниченной прозрачностью микроскопического механизма формирования топологической фазы[3].[4],[5]

В этом контексте углеродные нанотрубки представляют собой концептуально новую и физически более наглядную платформу. Их низкоэнергетическая электронная структура напрямую наследуется от графена и вблизи точек Дирака описывается эффективным дираковским гамильтонианом. В отличие

от традиционных полупроводниковых нанопроводов, решающую роль здесь играет геометрия системы: радиус и хиральность нанотрубки определяют квантование поперечных мод и, как следствие, спектр низкоэнергетических возбуждений.

При наличии аксиального магнитного поля существенным становится орбитальный эффект Ахаронова–Бома, связанный с магнитным потоком через поперечное сечение нанотрубки, а также спин–орбитальное взаимодействие, индуцированное кривизной. Совместное действие этих факторов может приводить к формированию топологически нетривиальных сверхпроводящих фаз и появлению майорановских мод, локализованных на концах нанотрубки. Строгое понимание того, как геометрия, магнитное поле и сверхпроводящая близость совместно формируют такие состояния, является необходимым шагом для установления прямой связи между микроскопической физикой системы и её потенциальным применением в топологических кубитах, что и составляет основную мотивацию настоящей работы[6],[7]

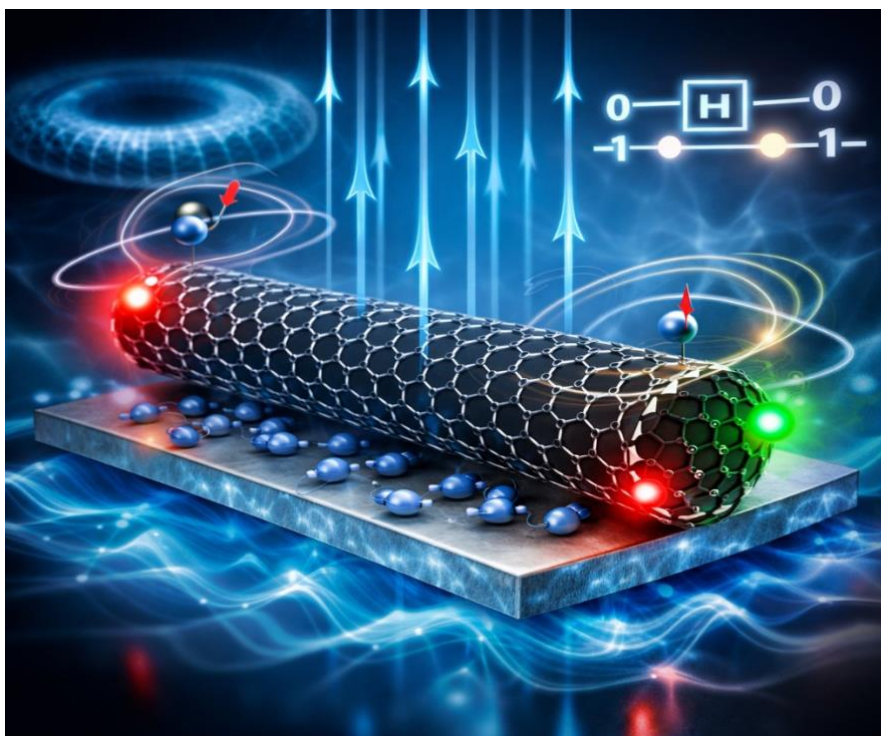


Рис 1 Углеродные нанотрубки как платформа для возникновения майорановских мод и топологических кубитов

Постановка проблемы

Реализация топологической сверхпроводимости и связанных с ней майорановских нулевых мод является одной из ключевых задач современной физики твёрдого тела, в том числе из-за их перспективного применения в топологических кубитах. Углеродные нанотрубки металлического типа armchair (n,n) рассматриваются как многообещающая платформа, однако в большинстве существующих работ эффективные одномерные модели вводятся феноменологически, без строгого вывода из электронной структуры графена и без явной связи с геометрическими параметрами системы. Это затрудняет понимание физических механизмов возникновения топологической фазы и снижает предсказуемость экспериментальной реализации. В частности, остаётся неясным, как радиус нанотрубки, аксиальное магнитное поле и химический потенциал совместно определяют условия перехода в топологическую сверхпроводящую фазу без необходимости тонкой подстройки параметров.

Вопрос исследования:

При каких геометрических условиях и значениях аксиального магнитного поля металлическая углеродная нанотрубка (n,n) , находящаяся в контакте с s-волновым сверхпроводником, переходит в топологическую сверхпроводящую фазу, и как эти условия можно выразить количественно в рамках строгого теоретического подхода?

Теоретическая основа и математическая модель

Фермионы Майораны: определение и фундаментальные свойства

Удивительно думать, что еще в 1937 году Этторе Майорана осмелился предложить нечто столь революционное, как существование фермиона, который является своей собственной античастицей. До этого момента релятивистская физика удобно делила частицы и античастицы на две чётко

различимые категории, и он, с глубокой интуицией, предложил нам задуматься: а что, если эта граница не абсолютно точна[8]

Это привело к так называемому уравнению Майораны, которое можно компактно записать так:

$$(i \gamma^\mu \partial_\mu - m) \Psi_M = 0 \quad (1)$$

Где

i — мнимая единица, фундаментальная в квантовой формализации

γ^μ — матрицы Дирака, удовлетворяющие алгебре Клиффорда и действующие на спиноры.

∂_μ — $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$ оператор дифференцирования по координатам пространства-времени

m — масса фермиона, описываемого уравнением.

ψ_M — спинор Майораны, обладающий свойством быть своей собственной античастицей, то есть

с дополнительным условием, что поле удовлетворяет так называемому условию реальности Майораны:

$$\psi_M = \psi_M^c = C \overline{\psi_M}^T \quad (2)$$

Где C - матрица сопряжения зарядов $\overline{\psi_M}^T = \gamma^0 \psi_M$ Это условие требует, чтобы частица была идентична своей античастице, устраняя дополнительные степени свободы, связанные с различием между ними

Иными словами, частица и античастица неразличимы. Это имеет непосредственные последствия: любое взаимодействие, зависящее от различия между частицей и античастицей, требует переосмысления.

Квантование и разложение на моды

Интересный и важный момент заключается в том, что для поля Майораны не требуется вводить отдельные операторы для частиц и античастиц, поскольку, по сути, они одинаковы и неразличимы. Это фундаментальное свойство

отражает самую суть фермиона Майораны: частица является своей собственной античастицей. Благодаря этому поле можно разложить на моды следующим образом

$$\psi_M(x) = \sum_k \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\sqrt{2E_p}} c_k(p) u_k(p) e^{-ipx} + \sum_k \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\sqrt{2E_p}} c_k^\dagger(p) u_k^*(p) e^{ipx} \quad (5)$$

Где

$c_k(p), c_k^\dagger(p)$ — операторы создания/уничтожения того же фермиона Маджораны

$u_k(p)$ — описывает частицу

$u_k^*(p)$ — описывает ту же частицу как её собственную античастицу

Антикоммутаторы и алгебра Клиффорда

Поскольку фермионы Майораны следуют фермионной статистике, их операторы удовлетворяют антикоммутаторам:

$$\{ c_k(p), c_j(p) \} = (2\pi)^3 \delta^3(p - q) \delta_{kj} \quad (6)$$

Что здесь важно заметить:

1. Каждый оператор самосопряжённый: $c_k(p) = c_k(p)^\dagger$
2. Операторы разных мод антикоммутируют, а для одного и того же мода квадрат оператора не равен нулю, что гарантирует физическую состоятельность гамильтониана.
3. Более того, структура этих антикоммутаторов соответствует определению алгебры Клиффорда, и это действительно впечатляет, потому что позволяет комбинировать два оператора Майораны для построения стандартного фермиона Дирака:

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{2j-1} + i c_{2j}) \quad , a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{2j-1} - i c_{2j}) \quad (7)$$

Определение углеродного нанотрубки (ННТ):

Когда речь заходит о нанотехнологиях в строгом смысле, существует одна отправная точка, которую невозможно обойти: 1991 год. Именно тогда японский физик Сумио Иидзума в статье, опубликованной в журнале Nature, впервые сообщил о существовании особых углеродных структур в трубчатой форме, которые он назвал гелиоидальными микротрубками графитного углерода. Это открытие оказалось не просто структурной любопытной находкой, а настоящим прорывом, открывшим совершенно новое направление исследований, которое сегодня стало одним из краеугольных камней нанонауки[8]. Углеродные нанотрубки (УНТ) представляют собой цилиндрические структуры, образованные слоями графена, свернутыми в спираль, с диаметрами в нанометровом диапазоне и длинами, достигающими нескольких микрометров. Первоначально полученные методом дугового разряда, эти нанотрубки обладают уникальными механическими, электрическими и тепловыми свойствами, которые напрямую связаны со стабильной гексагональной решёткой атомов углерода. В зависимости от числа слоёв различают однослойные нанотрубки (SWCNT) и многослойные нанотрубки (MWCNT).

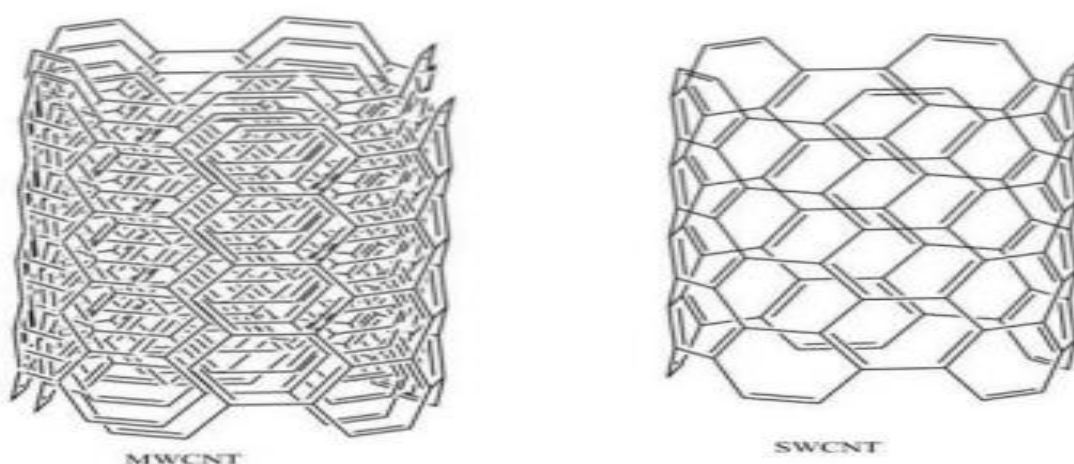


Рис 2 Рисунок однослойных (SWCNT) и многослойных нанотрубок

Математическая модель

В графене, в окрестности точек Дирака K и K' гамильтониан tight-binding с учётом только ближайших соседей линеаризуется и принимает

$$H_{Dirac}(k) = \hbar v_F (\tau \sigma_x k_x + \sigma_y k_y)$$

Где:

v_F — Ферми-скорость в графене,

σ_x, σ_y — матрицы Паули, действующие в пространстве подрешёток (A, B)

$\tau = +1$ соответствует долине K а $\tau = -1$ соответствует долине K'

Этот гамильтониан описывает безмассовые фермионы Дирака, энергетические конусы которых соприкасаются в точках K, K' С физической точки зрения псевдоспин σ кодирует амплитуду волновой функции на подрешётках, а долинный индекс τ различает два неэквивалентных узла в зоне Бриллюэна.[9],[10],[11]

От плоскости к цилиндру: геометрическая конструкция нанотрубки (n, m)

Углеродная нанотрубка получается при «свёртывании» графенового листа путём отождествления точек, отличающихся на хиральный вектор

$$r \sim r + C_h \quad C_h = n a_1 + m a_2 \quad (8)$$

где a_1 и a_2 — примитивные векторы графена а $a = 0,246$ нм — постоянная решётки

Длина хирального вектора задаёт периметр нанотрубки:

$$|C_h| = 2\pi R(n, m) \Rightarrow R(n, m) = \frac{a}{2\pi} \sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (9)$$

Соответствующий хиральный угол:

$$\theta(n, m) = \arctan\left(\frac{\sqrt{3} m}{2n+m}\right) \quad (10)$$

Для нанотрубок типа «зигзаг» ($n, 0$) выполняется $\theta = 0$ что значительно упрощает аналитические выражения и усиливает термины, пропорциональные $\cos(3\theta)$ особенно важные в кривизновом спин-орбитальном взаимодействии[8],[12]

Граничное условие и квантование поперечного импульса

Цилиндрическая структура нанотрубки накладывает периодическое граничное условие:

$$\psi(r + C_h) = e^{i2\pi\phi} \psi(r) \quad \phi = \frac{\pi R(n,m)^2}{\phi_0} B_{\parallel} \quad (11)$$

Где ϕ — магнитный поток вдоль оси а $\phi_0 = h/e$ — квант потока. Этот фазовый множитель учитывает аксиальный эффект Ахаронова–Бома. Из условия периодичности следует квантование поперечного импульса

$$k_{\perp} = \frac{2\pi}{|C_h|} (\ell + \phi) \quad \ell \in \mathbb{Z} \quad (12)$$

Следовательно:

k_{\parallel} Принимает дискретные значения (поперечные моды),

k_{\perp} Импульс вдоль оси нанотрубки, остаётся непрерывным.

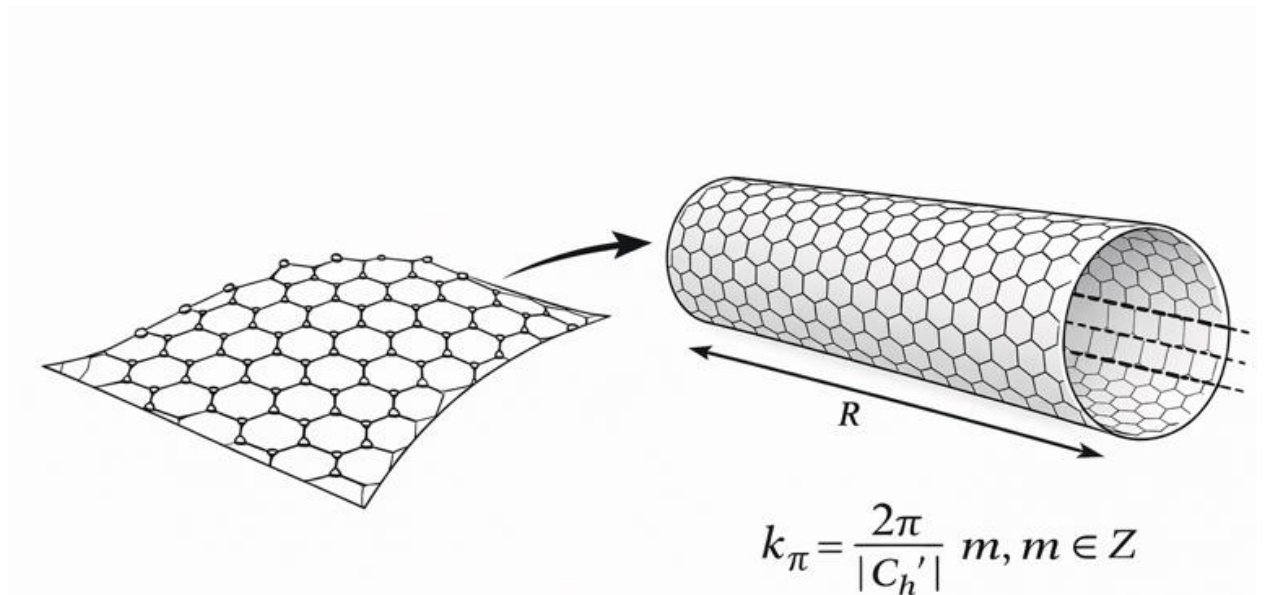


Рис 3 Схематическое представление формирования углеродной нанотрубки из графена и квантования поперечного импульса

Кривизна и спин–орбитальное взаимодействие: геометрическая масса и эффективный SOC

При изгибе графенового листа в цилиндрическую структуру появляются эффекты, отсутствующие в плоской геометрии

- Происходит смешивание орбиталей π и σ
- Нарушается зеркальная симметрия;

- Возникает эффективное спин–орбитальное взаимодействие, зависящее от радиуса и хиральности нанотрубки.

Эти эффекты модифицируют массовый термин $k_{\perp}\sigma_1$ и порождают новые связи между псевдоспином σ и настоящим спином s . Основные результаты Андо и Изумиды можно свести к следующему:

Геометрическая масса, Индуцированная кривизной

Квантование поперечного импульса уже порождало массу $k_{\perp}\sigma_1$. Кривизна даёт дополнительный сдвиг точки $k_{\perp} = 0$ который можно записать как:

$$M_o(n, m) = -\tau \frac{C_{ab}}{R^2} \cos(3\theta) \quad (13)$$

где:

- R - Радиус нанотрубки,
- θ - Хиральный угол
- C_{ab} – геометрический коэффициент
- τ – Различает две долины.

Этот член открывает щель даже при отсутствии магнитного поля. [13],[14]

Кривизновое спин–орбитальное взаимодействие

Смешивание π - σ -орбиталей вызывает эффективное SOC, масштабирующееся как $1/R$:

$$\Delta_{SO}(n, m) = \frac{C_{\alpha}}{R} \quad (14)$$

В подходящей базе этот вклад проявляется как:

$$(M_o + \Delta_{SO} s_z)\sigma_1 \quad (15)$$

Физическая интерпретация:

- M_o открывает геометрическую щель, усиливающуюся при уменьшении радиуса,
- Δ_{SO} Разрушает спиновое вырождение и вызывает спин-зависимое расщепление полос, ориентированное вдоль оси нанотрубки

Оба вклада существенно зависят от параметров (n, m) что объясняет разнообразие электронных свойств разных нанотрубок.[13],[15],[12]

Аксиальное магнитное поле: орбитальный эффект и полный Зеемановский вклад

Аксиальное магнитное поле вызывает дополнительный сдвиг поперечного импульса: $k_{\perp} \rightarrow k_{\perp} + \frac{e}{\hbar} A_{\perp}$ Отсюда следует линейный по В энергетический член:

$$E_{orb}(B) = \hbar v_F \frac{\pi R(n,m)}{\phi_0} B \quad (16)$$

который действует как дополнительный массовый термин вдоль σ_1 Иными словами, аксиальное поле может как закрывать, так и открывать щель, изменяя топологию системы.

Полный Зеемановский вклад (спин + орбитально-долинный)

Помимо орбитального эффекта, магнитное поле взаимодействует с магнитным моментом электрона. Существуют две составляющие:

$$H_Z^{spin} = \frac{1}{2} g_{eff} \mu_B B s_z \quad (17)$$

Орбитально-долинный Зееман (зависящий от хиральности)

$$H_Z^{spin, valle} = \tau \frac{c_{\beta}}{R} \cos(3\theta) s_z \quad (18)$$

Совокупный Зеемановский вклад принимает форму:

$$V_z(n, m, \theta) = \frac{1}{2} g_{eff} \mu_B B + \tau \frac{c_{\beta}}{R} \cos(3\theta) \quad (19)$$

Эффективный гамильтониан нанотрубки (4×4 в базисе подрешётка

⊗ спин

Объединяя все ранее выведенные элементы продольную кинетику, геометрическую «массу», сдвиг Ааронова–Бома, кривизное спин-орбитальное взаимодействие.

полный зеемановский вклад и химический потенциал можно построить эффективный гамильтониан углеродной нанотрубки в базисе $\sigma \otimes s$

Здесь σ_i — матрицы Паули в пространстве подрешёток (A,B) s_i — матрицы Паули для реального спина.[9]

Продольная кинетика описывается выражением:

$$\hbar v_F k_{\parallel} (\sigma_2 \otimes s_0) \quad (20)$$

тогда как «орбитальная масса», включающая вклад Ааронова–Бома и геометрическую массу кривизны, принимает вид

$$E_{orb}(B) + M_0 \quad (21)$$

Спин–орбитальное взаимодействие, обусловленное кривизной нанотрубки:

$$\Delta_{SO}(\sigma_1 \otimes s_z) \quad (22)$$

а полный зеемановский вклад (спин + долинно-орбитальный момент) выражается как:

$$V_z(n, m, \theta) (\sigma_0 \otimes s_z) \quad (23)$$

Химический потенциал создаёт стандартное сдвигающее пол

$$-\mu (\sigma_0 \otimes s_0)$$

Собирая всё вместе, получаем эффективный гамильтониан углеродной нанотрубки:

$$H_{CNT} = \hbar v_F k_{\parallel} (\sigma_2 \otimes s_0) + \hbar v_F (E_{orb}(B) + M_0) \sigma_1 \otimes s_0 + V_z \sigma_0 \otimes s_z + \Delta_{SO}(n, m) \sigma_1 \otimes s_z - \mu (\sigma_0 \otimes s_0)$$

Переход к уравнениям Боголюбова–де Женна (BdG) 8×8: учёт индуцированной сверхпроводимости

При контакте нанотрубки с s-wave сверхпроводником возникает индуцированная щель Δ_{ind} . Для корректного описания необходимо ввести пространство Намбу η после чего спиновая волновая функция принимает форму:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_e \\ \psi_h \end{pmatrix}, \quad \psi_e \in \mathbb{C}^4 \quad \psi_h \in \mathbb{C}^4 \quad (25)$$

Тогда гамильтониан BdG записывается как:

$$\mathcal{H}_{BdG}(k; n, m) = \eta_z \otimes H_{CNT}(k; n, m, \theta, B, \mu) + \Delta_{ind} \eta_x \otimes \sigma_0 \otimes s_0 \quad (26)$$

Физическое содержание:

η_x - Различает электронный и дырочный сектора, меняя знак нормального гамильтониана,

η_z вводит смешивание частиц и дырок через индуцированную сверхпроводящую щель.

Получается гамильтониан размерности 8×8 , который необходим для:

- Вычисления Pfaffian-инварианта,
- Классификации фаз по \mathbb{Z}_2
- Изучения закрытия/открытия спектральной щели,
- моделирования спектра CNT под сверхпроводящей проксимизацией.

Ни один строгий анализ майорановских мод в нанотрубках не может обойтись без полного гамильтониана BdG.[16],[17],[18]

Блокировка по спину и эффективная редукция к одномерному массивному гамильтониану Дирака

Чтобы упростить структуру гамильтониана и получить физически прозрачное описание, фиксируем собственное значение оператора s_z :

$$s = \pm 1$$

Так как s_z диагонален в спиновом базисе, каждая спиновая проекция образует независимый подсектор и $s_o \rightarrow 1$

В таком подсекторе исходный гамильтониан нанотрубки сводится к 2×2 гамильтониану в пространстве подрешёток:

$$H_{CNT}^s(\mathbf{k}) = \hbar v_F k \sigma_2 + (M_o + \mathbf{E}_{orb}(\mathbf{B})) \sigma_1 + \Delta_{soc} s \sigma_1 + V_Z s \sigma_o - \mu \sigma_o \quad (27)$$

Сгруппировав термины, получаем компактную форму

$$H_{CNT}^s(\mathbf{k}) = \hbar v_F k \sigma_2 + M_s \sigma_1 + \xi_s^o \sigma_o \quad (28)$$

где

$$M_s = \hbar v_F (E(B) + M_o) + s \Delta_{soc} \quad \xi_s^o = V_Z s - \mu \quad (30)$$

Этот гамильтониан — одномерная версия массивного гамильтониана Дирака, то есть выражение вида:

$$H = \vec{d}(\mathbf{k}) \cdot \vec{\sigma} + d_o \sigma_o \quad (31)$$

C

$$\vec{d}(k) = (M_s, \hbar v_F k, 0), \quad d_o = \xi_s^o \quad (32)$$

Спектр в каждом спиновом секторе:

$$E_{s\pm}(k) = \xi_s^o \pm \sqrt{M_s^2 + (\hbar v_F k)^2} \quad (33)$$

Это даёт:

- Щель величиной $2 |M_s|$
- По одной «валентной» и «кондукционной» полосе для каждого спина.

Приближение низких энергий: разложение около минимума

Рассматриваем область низких энергий, где интересующая нас полоса (+) пересекает уровень Ферми. [19],[20]

Предположим

$$|M_s| \gg |\hbar v_F k| \quad (34)$$

Тогда:

$$\sqrt{M_s^2 + (\hbar v_F k)^2} = |M_s| \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar v_F k}{M_s}\right)^2} \approx |M_s| \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar v_F k}{M_s}\right)^2 \right] \quad (35)$$

Следовательно:

$$E_{s\pm}(k) \approx \xi_s^o + |M_s| + \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 v_F^2}{|M_s|} k^2 \quad (36)$$

Введём обозначения:

$$E_{s,0} = \xi_s^o + |M_s| = V_z - \mu + |M_s| \quad (37)$$

а массу вводим из стандартного соответствия

$$\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 v_F^2}{|M_s|} = \frac{\hbar^2 v_F^2}{2 m^*} \Rightarrow m^* = \frac{|M_s|}{v_F^2} \quad (38)$$

Тогда дисперсия принимает форму:

$$E_{s\pm}(k) \approx E_{s,0} + \frac{\hbar^2}{2 m^*} k^2 \quad (40)$$

Переход к одномерному эффективному гамильтониану (нормальная часть)

Запишем полученный спектр в форме гамильтониана для двухкомпонентного спинорного состояния

$$\Psi(k) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(k) \\ \psi_{\downarrow}(k) \end{pmatrix}$$

Постоянный вклад $E_{s,0}$ разлагается на:

➤ Спин-независимый сдвиг:

$$\mu_{eff} = \mu - |M_s|$$

➤ спин-зависимый вклад:

$$V_Z \Rightarrow V_Z \sigma_z$$

Таким образом, нормальная часть гамильтониана принимает вид:

$$H_{1D}^{norm}(\mathbf{k}) = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 - \mu_{eff} \right) \sigma_0 + V_Z \sigma_z \quad (41)$$

Это базовый 1D гамильтониан с параболической дисперсией и зеемановским расщеплением.

Подключение сверхпроводимости: BdG 1D (4×4)

Переходим к пространству Намбу и вводим базис

$$\Psi(\mathbf{k}) = [\psi_{\uparrow}(\mathbf{k}), \psi_{\downarrow}(\mathbf{k}), \psi_{\uparrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}), \psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k})] \quad (42)$$

Индукцированная s-wave сверхпроводящая щель:

$$H_{\Delta} = \Delta_{ind} \tau_x \quad (43)$$

Тогда полный одномерный гамильтониан BdG

$$\mathcal{H}_{BdG}^{cont}(\mathbf{k}) = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 - \mu_{eff} \right) \tau_z + \alpha k \tau_z \sigma_y + V_Z s_z + \Delta_{ind} \tau_x \quad (43)$$

то точная форма гамильтониана Латчина–Орег (Lutchyn–Oreg), но со всеми параметрами

$$(m^*, \mu_{eff}, \alpha_{eff}, V_Z)$$

И формулировка топологического условия

$$V_Z^2 > \Delta_{ind}^2 + \mu_{eff}^2 \quad (44)$$

Методология

Методология, используемая в данной работе, носит количественный, квази-экспериментальный и вычислительный характер. Исследование основано на

численном моделировании, которое позволяет в контролируемых условиях воспроизводить поведение углеродной нанотрубки с индуцированной сверхпроводимостью при различных физических параметрах. Система описывается с помощью эффективного одномерного гамильтониана Боголюбова–де Женна (BdG), что позволяет напрямую связывать каждый численный результат с конкретным физическим механизмом, заложенным в модель.

Для задания физического режима задачи и обеспечения воспроизводимости расчётов фиксируется набор фундаментальных констант и характерных параметров углеродных нанотрубок и индуцированной сверхпроводимости. Эти параметры определяют энергетический, геометрический и магнитный масштаб системы и выбираются в пределах типичных значений, известных из литературы. Используемые параметры приведены в Таблице 1 и сохраняются постоянными во всех расчётах, если не указано иное.

Таблица 1 Физические параметры, используемые в модели

Параметр	Обозначение	Типичное Значение	Единицы
Постоянная Планка (редуцированная)	h	$1.0545718 \times 10^{-34}$	Дж·с
Скорость Ферми в CNT / графене	v_F	$(7.8 - 8.2) \times 10^5$	м/с
Квант магнитного потока	ϕ_0	4.135667×10^{-15}	Вб
SOC, индуцированный кривизной	$C\alpha$	(0.3–1.2)	meV
Параметр геометрической (орбитальной) кривизны	C_{ab}	(5–15)	meV·nm ²
Эффективный g-фактор (спин + орбиталь)	g_{eff}	(10–30)	безразмерный

Магнитон Бора	μ_B	57.88 $\mu\text{эВ/Т}$	эВ/Т
Индукцированная сверхпроводящая щель	Δ_{ind}	(0.1–0.25)	meV
SOC Рашбы (под затвором)	α_B	(0.05–0.5)	meV·nm

После фиксации данного базового режима анализ проводится в виде серии вычислительных экспериментов, в которых управляемые параметры системы изменяются по отдельности. Зеемановское поле используется в качестве основного управляющего параметра, поскольку оно отвечает за закрытие и последующее переоткрытие спектральной щели. Длина нанотрубки варьируется для учёта эффектов конечного размера и различия топологических и тривиальных состояний. Химический потенциал изменяется для исследования устойчивости топологической фазы при смещении уровня Ферми.

Идентификация топологического режима основывается не на одном критерии, а на согласованном анализе нескольких физических величин, что обеспечивает надёжное выявление майорановских нулевых мод.

Ожидаемые результаты

В результате численного анализа предполагается получить следующие наблюдаемые характеристики:

1. Объёмная спектральная щель Δ_{bulk}

Ожидается закрытие и последующее переоткрытие щели при изменении зеемановского поля, что служит основной сигнатурой топологического фазового перехода.

2. Минимальное собственное значение конечной системы E_0

В топологическом режиме должно появляться состояние с энергией, близкой к нулю, слабо зависящее от длины системы, что характерно для майорановских нулевых мод.

3 Пространственный профиль плотности вероятности $\rho(x)$

Состояния низкой энергии должны быть локализованы у концов нанотрубки, в отличие от протяжённых состояний тривиальной фазы.

4 Электронно–дырочная структура BdG-вектора (u,v)

Для майорановских состояний ожидается приближительная симметрия между электронными и дырочными компонентами.

5 Транспортная передача $T(E)$

В топологической фазе в передаче должны проявляться характерные особенности при энергиях, близких к нулю, что служит дополнительным подтверждением топологического режима.

Результаты

В данном разделе представлены и проанализированы результаты, полученные в рамках вычислительных экспериментов на основе эффективного одномерного гамильтониана Боголюбова–де Женна, описывающего углеродную нанотрубку с индуцированной сверхпроводимостью. Анализ организован вокруг ключевых физических величин, которые позволяют последовательно и надёжно идентифицировать появление топологической сверхпроводящей фазы и майорановских нулевых мод.

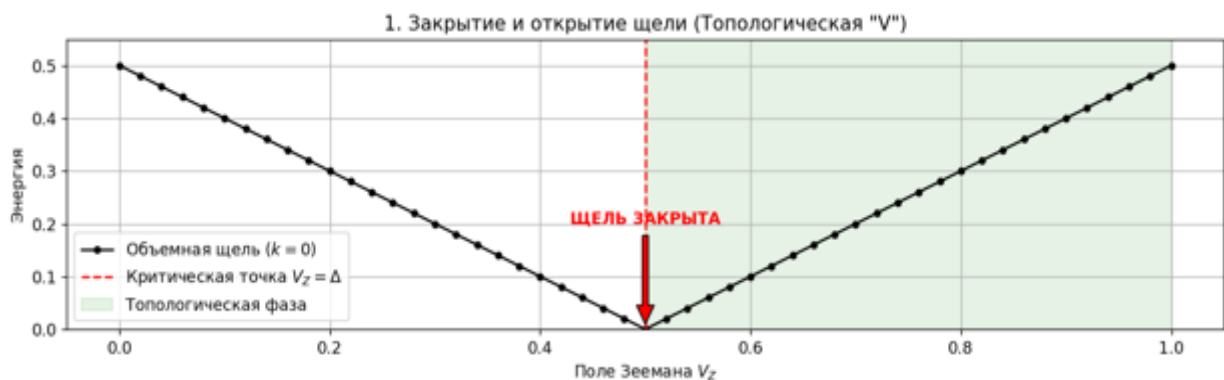


Рис 4 Закрытие и повторное открытие объёмной спектральной щели под действием зеемановского поля.

На рис. 4 представлена зависимость объёмной спектральной щели от зеемановского поля V_Z . При малых значениях V_Z система характеризуется конечной щелью, что соответствует тривиальной сверхпроводящей фазе. По мере увеличения магнитного поля наблюдается монотонное уменьшение щели, которая закрывается при критическом значении $V_Z = \Delta$. Момент закрытия щели указывает на топологический фазовый переход.

При дальнейшем увеличении V_Z спектральная щель переоткрывается, что свидетельствует о переходе системы в топологическую сверхпроводящую фазу. Переоткрытие щели является устойчивой сигнатурой топологического режима и определяет область параметров, в которой для системы конечной длины ожидается возникновение майорановских нулевых мод, локализованных на концах нанотрубки.

аблюдаемое закрытие и последующее переоткрытие объёмной щели находится в полном согласии с аналитическим критерием топологичности эффективной одномерной модели и служит основой для дальнейшего анализа низкоэнергетических состояний и граничных эффектов.

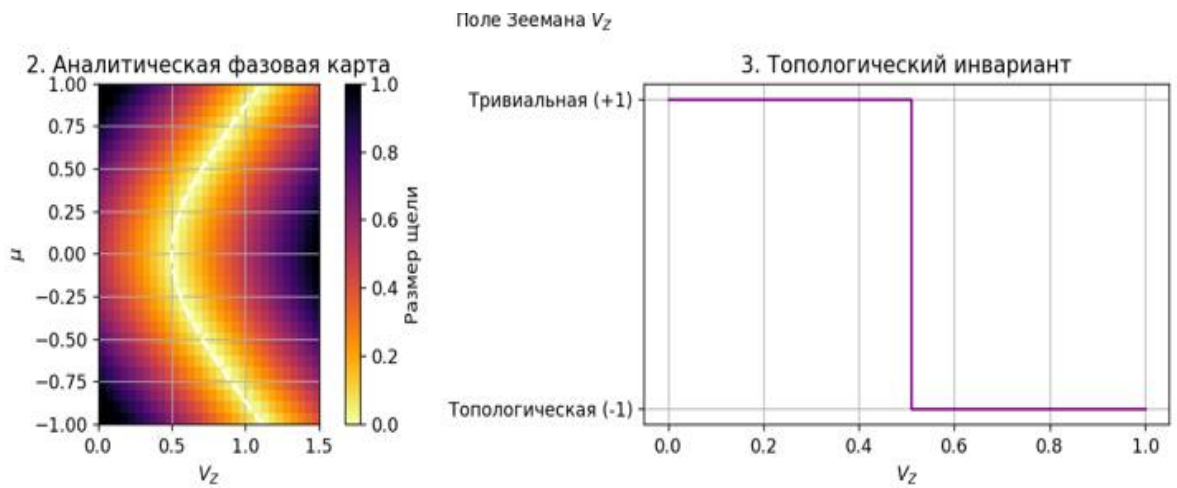


Рис 5 Топологическая фазовая карта в плоскости (V_Z, μ) и переход топологического инварианта.

Слева показана фазовая карта системы в зависимости от зеемановского поля V_Z и химического потенциала μ . Ограниченная область соответствует топологической сверхпроводящей фазе, тогда как вне её система находится в тривиальном режиме. Справа представлено поведение топологического инварианта, который при увеличении V_Z испытывает резкий переход, указывающий на топологический фазовый переход. Это подтверждает корректность идентификации топологического режима.

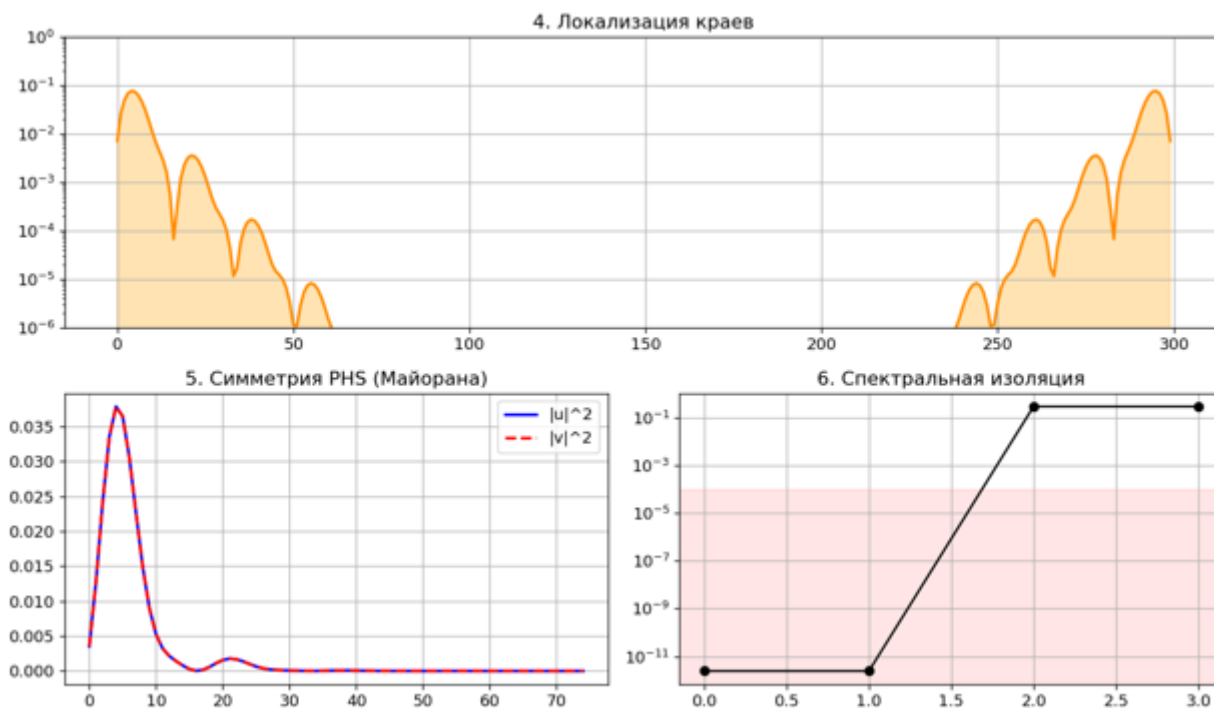


Рис 6 Локализация краевых состояний, электронно–дырочная симметрия и спектральная изоляция майорановских мод.

На рисунке представлены три ключевые характеристики, связанные с майорановскими нулевыми модами. Верхняя панель демонстрирует локализацию низкоэнергетических состояний на концах системы, что указывает на наличие краевых состояний. Левая нижняя панель показывает электронно–дырочную симметрию, характерную для майорановских мод. Правая нижняя панель иллюстрирует спектральную изоляцию этих состояний от остального спектра, что свидетельствует об их устойчивости в топологической фазе.

В совокупности данные признаки подтверждают майорановскую природу наблюдаемых состояний.

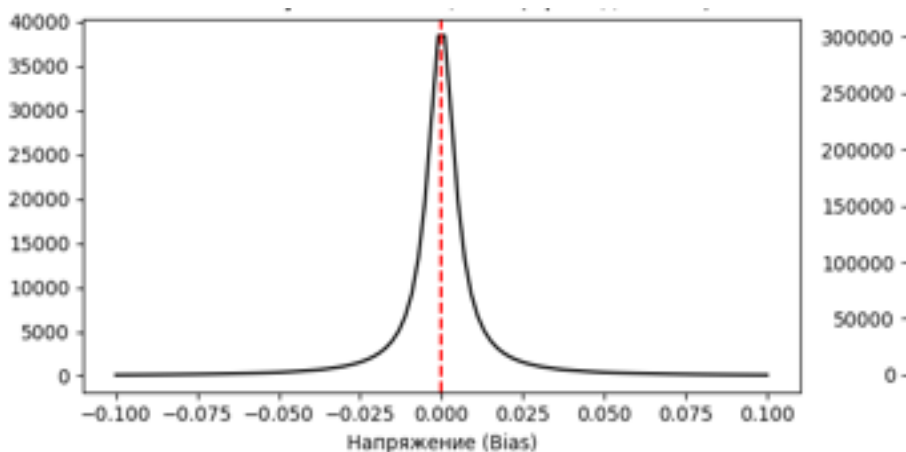


Рис 7 Пик нулевого смещения в дифференциальной проводимости.

На рисунке показана зависимость дифференциальной проводимости от приложенного смещения (bias). В центре спектра наблюдается выраженный пик при нулевом напряжении, который является характерной сигнатурой майорановской нулевой моды.

Появление и устойчивость пика нулевого смещения указывают на наличие низкоэнергетического краевого состояния, связанного с топологической сверхпроводящей фазой. Отсутствие аналогичных пиков при ненулевых значениях напряжения подтверждает, что наблюдаемая особенность не связана с обычными андреевскими уровнями, а имеет топологическую природу.

Таким образом, данный результат дополняет спектральный и пространственный анализ и служит транспортным подтверждением существования майорановских нулевых мод в системе.

Численные результаты последовательно указывают на реализацию топологической сверхпроводящей фазы. Закрытие и повторное открытие объёмной щели при изменении зеемановского поля подтверждает наличие топологического фазового перехода.

В конечной системе появляются устойчивые низкоэнергетические состояния, локализованные на концах нанотрубки, с характерной электронно–дырочной симметрией и сигнатурами в транспортных свойствах. Совокупность этих признаков свидетельствует о формировании майорановских нулевых мод в рассматриваемом режиме параметров

Заключение

В этой работе с помощью численного моделирования было показано, что углеродная нанотрубка с индуцированной сверхпроводимостью может переходить в топологическую фазу при определённых значениях зеемановского поля и химического потенциала. Основным признаком такого перехода является закрытие и последующее открытие объёмной спектральной щели, что согласуется с теоретическими ожиданиями для одномерных топологических сверхпроводников.

В топологическом режиме в системе конечной длины появляются низкоэнергетические состояния, локализованные на концах нанотрубки. Их пространственная структура, электронно–дырочная симметрия и проявление в транспортных свойствах указывают на майорановскую природу этих состояний. Полученные результаты подтверждают, что углеродные нанотрубки являются удобной и перспективной платформой для изучения топологической сверхпроводимости и майорановских нулевых мод.

Литература

- [1] R. Saito, G. Dresselhaus, y M. S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. Imperial College Press, 1998.
- [2] R. Egger y K. Flensberg, «Majorana fermions in carbon nanotubes», *Phys. Rev. B*, vol. 85, p. 235462, 2012.
- [3] T. Ando, «Theory of electronic states and transport in carbon nanotubes», *J. Phys. Soc. Jpn.*, vol. 74, pp. 777-817, 2005.
- [4] W. Izumida, K. Sato, y others, «Spin-orbit interaction in single-wall carbon nanotubes: Symmetry-adapted tight-binding calculation and effective model analysis», *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 115330, 2009.
- [5] F. Kuemmeth y others, «Coupling of spin and orbital motion of electrons in carbon nanotubes», *Nature*, vol. 452, pp. 448-452, 2008.
- [6] H. Ajiki y T. Ando, «Electronic states of carbon nanotubes», *J. Phys. Soc. Jpn.*, vol. 62, pp. 1255-1266, 1993.
- [7] V. V. Deshpande y others, «Mapping the electronic structure of carbon nanotubes by scanning tunneling microscopy», *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, p. 206604, 2009.
- [8] S. Iijima, «Helical microtubules of graphitic carbon», *Nature*, vol. 354, n.º 6348, pp. 56-58, 1991, doi: 10.1038/354056a0.
- [9] J. Charoenpakdee y others, «Chirality Effects on Electron Transport in Single-Walled Carbon Nanotubes», *Sci. Rep.*, vol. 10, n.º 1, pp. 1-9, 2020, doi: 10.1038/s41598-020-76047-9.
- [10] J. D. Sau y others, «Majorana fermions in carbon nanotubes», *Phys Rev B*, vol. 88, n.º 5, p. 054503, ago. 2013, doi: 10.1103/PhysRevB.88.054503.
- [11] J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*. Addison-Wesley, 1964.
- [12] Z. A. Al Shadidi y others, «Electronic Properties of Armchair & Zigzag Single-Walled Carbon Nanotubes», *J. Sci. Technol.*, vol. 29, n.º 1, pp. 37-44, 2024, doi: 10.20428/jst.v29i1.2256.

- [13] J. Klinovaja y D. Loss, «Electric-field-induced Majorana fermions in armchair carbon nanotubes», *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, n.º 19, p. 196804, 2012, doi: 10.1103/PhysRevLett.108.196804.
- [14] J. Klinovaja, P. Stano, A. Yazdani, y D. Loss, «Topological Superconductivity and Majorana Fermions in RKKY Systems», *Phys. Rev. Lett.*, vol. 111, n.º 18, p. 186805, 2013, doi: 10.1103/PhysRevLett.111.186805.
- [15] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, y S. Das Sarma, «Majorana Fermions and a Topological Phase Transition in Semiconductor–Superconductor Heterostructures», *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, n.º 7, p. 077001, 2010, doi: 10.1103/PhysRevLett.105.077001.
- [16] O. Lesser, G. Shavit, y Y. Oreg, «Topological superconductivity in carbon nanotubes with a small magnetic flux», *Phys. Rev. Res.*, vol. 2, n.º 2, p. 023254, 2020, doi: 10.1103/PhysRevResearch.2.023254.
- [17] A. Y. Kitaev, «Unpaired Majorana Fermions in Quantum Wires», *Phys.-Uspekhi*, vol. 44, n.º 10S, pp. 131-136, 2001, doi: 10.1070/1063-7869/44/10S/S29.
- [18] D. M. Tang y others, «Semiconductor Nanochannels in Metallic Carbon Nanotubes», *Science*, vol. 371, n.º 6530, pp. 1396-1400, 2021, doi: 10.1126/science.abi8884.
- [19] S. Nadj-Perge *et al.*, «Observation of Majorana fermions in ferromagnetic atomic chains on a superconductor», *Science*, vol. 346, n.º 6209, pp. 602-607, 2014, doi: 10.1126/science.1259327.
- [20] C.-T. Liu, J. D. Sau, T. D. Stanescu, y S. Das Sarma, «Andreev bound states versus Majorana bound states in quantum dot–nanowire–superconductor hybrid structures: Trivial versus topological zero-bias conductance peaks», *Phys. Rev. B*, vol. 96, n.º 7, p. 075161, 2017, doi: 10.1103/PhysRevB.96.075161.