



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI  
FACULTATEA DE FIZICĂ  
ȘCOALA DOCTORALĂ DE FIZICĂ



## REZUMATUL TEZEI DE DOCTORAT

---

**Proprietățile fizice ale sistemelor de joasă dimensionalitate: Studiu teoretic asupra doturilor cuantice, nanofirelor și grafenei**

---

**Levente MÁTHÉ**

Conducător științific  
**Prof. dr. Ioan GROSU**

Cluj-Napoca  
2023

# Abstract

Scopul principal al tezei este de a investiga teoretic procesele de transport cuantic prezente în nanodispozitive bazate pe doturi cuantice și de a studia proprietățile optice ale doturilor cuantice sferice. Primul capitol al tezei introduce conceptele fundamentale care stau la baza ei. Al doilea capitol al tezei propune o nanojoncțiune fezabilă experimental în care un dot cuantic este integrat într-o heterostructură semiconductoare-supraconductoare, care găzduiește moduri zero Majorana în prezența unui mod de fonon optic. Se consideră că un flux magnetic controlează tunelarea cuantică asistată de fononi indusă de Majorana. Constatările noastre pot servi drept un ghid promițător în experimentele de detecție ale modurilor Majorana. În următorul capitol al tezei efectuăm un studiu teoretic detaliat al transportului cuantic într-o structură alcătuită din doi electrozi de grafenă între care este interpus un dot cuantic sub efectul câmpului magnetic. Sistemul propus poate oferi o platformă ideală pentru investigarea fenomenelor cuantice cu multe particule, precum efectul Kondo, și poate fi considerat o referință pentru dezvoltarea de dispozitive nanoelectronice pe bază de grafenă. Ultimul capitol al tezei se concentrează pe studiul teoretic al proprietăților optice liniare și neliniare ale unui dot cuantic semiconductor sferic în care confinarea cuantică este datorată unui potențial Hellmann invers pătratic în cadrul aproximației masei efective. Configurația propusă ar putea fi utilizată în continuare pentru a stimula dezvoltarea de dispozitive optoelectronice bazate pe doturi cuantice.

**Cuvinte cheie:** *transport cuantic, doturi cuantice, moduri zero Majorana, interacțiunea electron-fonon, fononi optici, grafenă, efect Kondo, coeficient de absorbție, modificări ale indicelui de refracție.*

# Cuprinsul tezei de doctorat

Dedication . . . . .	i
Acknowledgments . . . . .	ii
Abstract . . . . .	iv
Contents . . . . .	vi
List of Abbreviations . . . . .	viii
<b>1 Theoretical Background</b>	<b>1</b>
1.1 Introduction to the Quantum Transport in Low-Dimensional Systems . . . . .	1
1.1.1 Quantum Dots. The Coulomb Blockade . . . . .	2
1.1.2 The Kondo Effect in Quantum Dots . . . . .	4
1.2 Introduction to the Majorana Fermions and Majorana Bound States . . . . .	8
1.2.1 Majorana Fermions . . . . .	8
1.2.2 Majorana Bound States . . . . .	9
1.3 Graphene . . . . .	17
1.3.1 Band Structure of Graphene . . . . .	18
1.3.2 Graphene Nanoribbon Geometries . . . . .	22
1.4 Optical Properties of Two-Level Quantum Systems Realized in Quantum Dots .	23
1.4.1 Intersubband Optical Transition . . . . .	23
1.4.2 Electric Susceptibilities . . . . .	24
<b>2 Probing Majorana Bound States via Quantum Dots in the Presence of Electron-Phonon Interaction</b>	<b>26</b>
2.1 State-of-the-Art and Motivation . . . . .	26
2.2 Theoretical Model and Analytical Results . . . . .	29
2.2.1 Model Hamiltonian of the System . . . . .	29
2.2.2 Current Formulas . . . . .	32
2.2.3 Canonical Transformation . . . . .	35
2.3 Results and Discussion . . . . .	39
2.3.1 Results in absence of electron-phonon interaction . . . . .	40

2.3.2	Results in presence of electron-phonon interaction . . . . .	54
2.4	Summary . . . . .	77
<b>3</b>	<b>Nonequilibrium Kondo Physics of a Quantum Dot Connected to Graphene Leads in the Presence of Magnetic Fields</b>	<b>81</b>
3.1	State-of-the-Art and Motivation . . . . .	81
3.2	Theoretical Model and Analytical Results . . . . .	85
3.2.1	Model Hamiltonian of the System . . . . .	85
3.2.2	Current Formula . . . . .	87
3.2.3	Green's Function of the Quantum Dot . . . . .	88
3.2.4	Determination of a Kondo Temperature Formula . . . . .	90
3.3	Results and Discussion . . . . .	94
3.4	Summary . . . . .	102
<b>4</b>	<b>Optical Properties of Spherical Quantum Dots: Application of the Inversely Quadratic Hellmann Potential</b>	<b>104</b>
4.1	State-of-the-Art and Motivation . . . . .	104
4.2	Theoretical Model . . . . .	106
4.2.1	Model . . . . .	106
4.2.2	Optical Absorption Coefficient and Refractive Index Changes . . . . .	108
4.3	Results and Discussion . . . . .	110
4.4	Summary . . . . .	115
	<b>General Conclusions and Outlook</b>	<b>117</b>
	<b>Bibliography</b>	<b>121</b>
	<b>Dissemination of the Results</b>	<b>146</b>

# Cuprinsul rezumatului

<b>1</b>	<b>Fundamentul teoretic</b>	<b>1</b>
1.1	Introducere în sistemele de joasă dimensionalitate. Doturi cuantice și efectul Kondo . . . . .	1
1.2	Introducere în fermionii Majorana și modurile zero Majorana . . . . .	3
1.3	Grafena . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Sondarea modurilor zero Majorana prin doturi cuantice în prezența interacțiunii electron-fonon</b>	<b>6</b>
2.1	Motivație . . . . .	6
2.2	Modelul teoretic . . . . .	6
2.3	Rezultate și discuții . . . . .	9
2.3.1	Rezultate obținute în absența interacțiunii electron-fonon . . . . .	9
2.3.2	Rezultate obținute în prezența interacțiunii electron-fonon . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Fizica Kondo de neechilibru a unui dot cuantic conectat la electrozi de grafenă în prezența câmpurilor magnetice</b>	<b>14</b>
3.1	Motivație . . . . .	14
3.2	Modelul teoretic . . . . .	15
3.3	Rezultate și discuții . . . . .	17
<b>4</b>	<b>Proprietățile optice ale doturilor cuantice sferice: aplicarea potențialului Hellmann invers pătratic</b>	<b>19</b>
4.1	Motivație . . . . .	19
4.2	Modelul teoretic . . . . .	19
4.3	Rezultate și discuții . . . . .	20
	<b>Concluzii și perspective</b>	<b>22</b>
	<b>Bibliografie selectată</b>	<b>24</b>
	<b>Diseminarea rezultatelor</b>	<b>28</b>

# Capitolul 1

## Fundamentul teoretic

### 1.1 Introducere în sistemele de joasă dimensionalitate. Doturi cuantice și efectul Kondo

În dezvoltarea componentelor electronice, este necesar să se ia în considerare fenomenele cuantice care au loc în dispozitivele la scară nanometrică și să se studieze teoretic aceste fenomene. Un sistem este de scară nanometrică dacă dimensiunea caracteristică a regiunii de transport este mai mică decât lungimea de coerență de fază a electronului, dar este comparabilă cu lungimea de undă de Broglie a electronului și prezintă un spectru de energie discret [1, 2]. Doturile cuantice sunt mici regiuni confinate de dimensiuni comparabile cu lungimea de undă de Broglie a electronului, considerate ca obiecte cu dimensiune zero. Acestea sunt încorporate între electrozi semi-infiniți care joacă rolul de rezervoare de electroni, așa cum se arată în figura 1.1(a). Dotul se cuplează prin tunelare la electrodul stâng (drept) cu cuplajul  $\Gamma_{L(R)}$ . Mișcarea electronilor este restricționată în toate direcțiile spațiale și astfel, aceștia ocupă nivele energetice discrete în doturi, care pot fi sondate în măsurători de transport prin intermediul unor electrozi macroscopici. Nivelele de energie induse de confinare pot fi controlate prin modificarea caracteristicilor potențialului. Spectrul total al dotului este un rezultat al spectrului energetic indus de confinare și al celui generat de cuantificarea sarcinii [3]. Figura 1.1(b) ilustrează

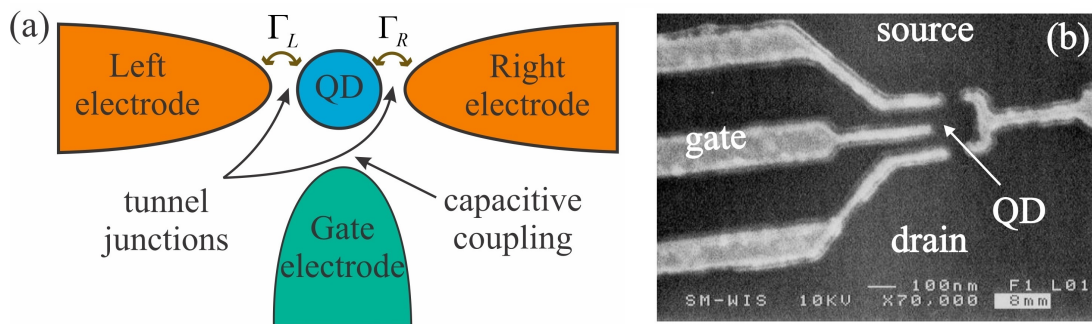


Figure 1.1: Reprezentarea schematică a unui dot cuantic cuplat la electrozii din stânga și din dreapta prin joncțiuni tunel cu cuplaje  $\Gamma_L$  și  $\Gamma_R$ . Electroful de poartă este atașat capacitiv la dot. Figura se bazează pe [3, 4]. (b) Imagine de microscopie electronică de scanare a unui dot cuantic [5].

o realizare experimentală a unui dot fabricat în heterostructura semiconductoare GaAs [5].

După cum se știe, rezistența electrică a metalelor (ex. Cu, Au) scade cu scăderea temperaturii, iar după o valoare, scăderea în continuare a temperaturii duce la saturarea rezistivității [6, 7]. Anumite metale (ex. Al, Nb) își pot pierde brusc toată rezistența electrică la o temperatură critică atunci când trec printr-o tranziție de fază de la starea conductoare la starea supraconductoare. S-a observat că, atunci când se adaugă atomi magnetici (ex. Mn, Cr) la metale nemagnetice, rezistența electrică începe să crească pe măsură ce temperatura scade, fără a prezenta o tranziție de fază. Temperatura la care rezistivitatea electrică începe să crească din nou se numește temperatura Kondo. Efectul a fost explicat pentru prima dată de Kondo, luând în considerare cuplajul antiferomagnetic între impuritățile magnetice și o mare de electroni de conducție [8]. Schimbul antiferomagnetic între spinul electronilor de conducție și spinul dotului se realizează printr-un proces de cotunelare "spin-flip" de ordinul al doilea, pentru care stările inițiale și finale ale dotului au orientări diferite de spin. Aceasta are ca rezultat deschiderea unui canal de transport suplimentar la energia Fermi prin formarea unei rezonanțe [9]. Peak-ul care apare la nivelul Fermi în densitatea de stări se numește rezonanță Kondo. Spre deosebire de metalele "bulk" în care efectul Kondo apare ca o divergență  $\ln T$  a rezistivității [Figura 1.2(a)], în doturi cuantice se manifestă ca o dependență  $\ln T$  a conductanței liniare [Figura 1.2(b)]. Efectul Kondo a fost demonstrat experimental pentru prima dată în doturi cuantice pe bază de GaAs [5, 10, 11].

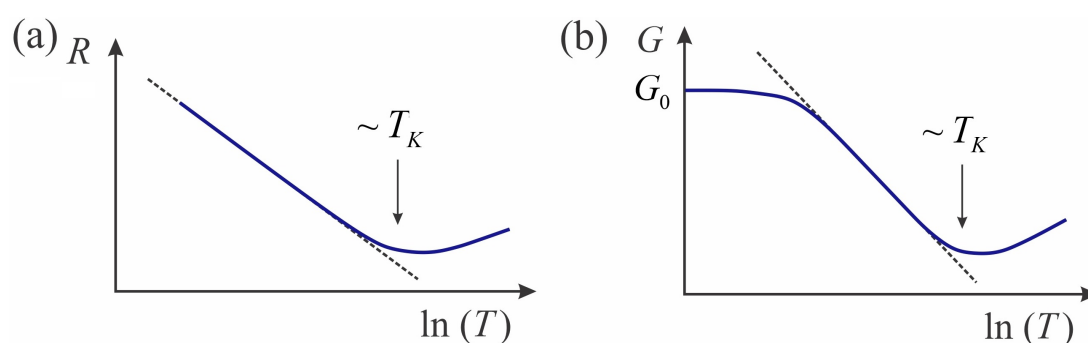


Figure 1.2: (a) Dependenta logaritmică a rezistivității  $R$  de temperatura  $T$  în metale. (b) Dependenta logaritmică a conductivității  $G$  de temperatura  $T$  în doturi cuantice, unde  $G_0 = 2e^2/h$  este cuanta de conductivitate. Figuri adaptate din [9].

## 1.2 Introducere în fermionii Majorana și modurile zero Majorana

Majorana a recunoscut în 1937 că ecuația Dirac poate fi reprezentată în termeni de funcții de undă reale [12], ceea ce implică o consecință importantă: o particulă descrisă de o funcție de undă reală este propria sa antiparticulă. Particulele care îndeplinesc această condiție sunt neutre din punct de vedere al sarcinii și se numesc fermioni Majorana (FM). Datorită faptului că ecuația Majorana are aceeași structură matematică ca și ecuația Bogoliubov-de Gennes, care descrie excitațiile cvasiparticulelor în supraconductori (SC), FM pot fi căutați în SC. FM în SC sunt excitații de "midgap" cu energie zero ( $E = 0$ ) pentru fermioni fără spin, numite moduri zero Majorana (MZM) sau, în mod echivalent, stări legate Majorana. FM din materia condensată pot fi creați ca excitații de energie zero în SC fără spin sau în SC de undă  $p$  cu împerechere triplet de spin [13, 14]. Prezența modurilor Majorana a fost observată pentru prima dată în măsurătorile de transport, în astfel de heterostructuri, ca o anomalie de tensiune zero în conductanța diferențială [15]. Vom descrie pe scurt două modele care permit crearea modurilor Majorana în materiale supraconductoare topologice: modelul Kitaev [16] și modelul Oreg-Lutchyn [17, 18].

Modelul Kitaev [16] implică electroni fără spin depuși pe suprafața unei rețele supraconductoare de undă  $p$  cu  $N$  site-uri finite. Este de precizat faptul că același site al rețelei este ocupat de un electron fără spin din cauza excluziei Pauli. Datorită faptului că orice fermion complex poate fi împărțit în doi fermioni Majorana, lanțul de  $N$  fermioni complecși poate fi reprezentat în termeni de  $2N$  FM. Atunci când cuplajul dintre FM localizați pe site-uri de rețea învecinate este mai puternic decât cuplajul dintre FM din aceleași locuri de rețea, primul și ultimul FM sunt decuplați din lanțul de FM de  $2N$ . Acești doi fermioni Majorana desperecheați sunt complet localizați la marginile rețelei și corespund unui singur mod de fermion care este delocalizat între cele două capete ale lanțului. Aceste moduri Majorana de la capetele lanțului SC sunt modurile zero Majorana. Această fază se numește topologic netrivială [19].

Deoarece supraconductorii de undă  $p$  cu împerechere de triplet de spin formează categoria supraconductorilor neconvenționali, aceștia apar rar în natură și, prin urmare, se impune



să fie înlocuiți cu alte realizări experimentale [19, 20]. S-a stabilit că o posibilă realizare experimentală a modelului Kitaev de lanț de rețea unidimensională se obține atunci când se depune un nanofir semiconductor cu cuplaj spin-orbită puternic (ex. InAs, InSb), așa cum se arată în figura 1.3, în proximitatea unui supraconductor convențional de undă  $s$  (ex. Al, Nb) într-un câmp magnetic extern [17, 18]. Sistemul propus se numește modelul Oreg-Lutchyn. Atunci când relația  $h > \sqrt{|\Delta|^2 + \mu^2}$  între energia Zeeman ( $h$ ), gap-ul supraconductor indus de proximitate ( $\Delta$ ) și potențialul chimic al nanofirului ( $\mu$ ) este îndeplinită, sistemul poate fi mapat în modelul Kitaev prin găzduirea la capetele sale a modurilor zero Majorana [21]. În acest caz, nanofirul semiconductor este transformat într-un nanofir supraconductor topologic, o configurație numită de obicei în literatura de specialitate drept nanofir Majorana [19]. Într-un sistem finit cu dimensiunea  $L$ , cele două funcții de undă Majorana se suprapun ducând la o hibridizare a modurilor zero Majorana caracterizată de energia de suprapunere  $\varepsilon_M \propto e^{-L/\xi}$  unde  $\xi$  este lungimea de coerență supraconductoare [19].

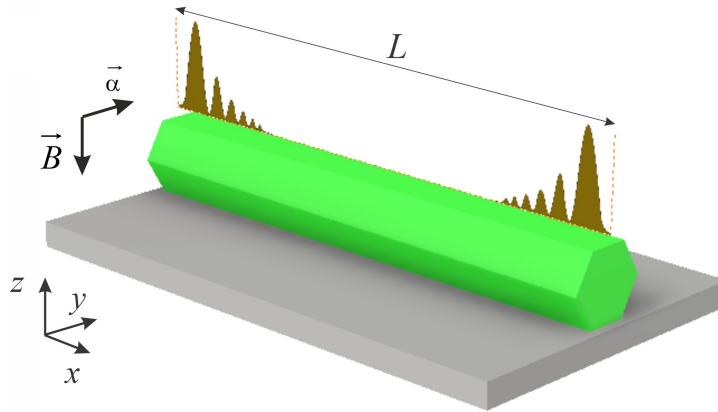


Figure 1.3: Un nanofir topologic ca rezultat al proximității unui nanofir semiconductor cu cuplaj spin-orbită puternic  $\alpha$  (reprezentat în verde), cu un supraconductor de undă  $s$  (reprezentat în gri) în prezența unui câmp magnetic ( $\vec{B}$ ). Modurile Majorana apar la capetele opuse ale nanofirului (reprezentate în portocaliu) care se suprapun pentru un nanofir de lungime finită  $L$ . Figura adaptată din [13, 14, 19, 21].

Modurile zero Majorana apar ca o pereche de moduri de margine localizate separate spațial în supraconductoare topologice care pot stoca informații ca o stare fermionică regulată nelocală. Existența modurilor zero Majorana nu este influențată de perturbațiile locale și, în general, acestea sunt protejate de decoerența cuantică.

### 1.3 Grafena

Grafena este un cristal bidimensional în care atomii de carbon hibridizați  $sp^2$  se condensează într-o structură de rețea hexagonală, care poate fi privită ca o rețea triunghiulară cu doi atomi de carbon pe celulă unitară [22]. Grafena, ca grafit monostrat, a fost pentru prima dată prezisă teoretic cu mai mult de o jumătate de secol în urmă [23] și izolată experimental aproape două decenii [24]. Grafena are o mobilitate electronică ridicată, o bună conductivitate termică, proprietăți mecanice și optice unice [25], ceea ce o face o platformă potrivită pentru numeroase aplicații, cum ar fi fabricarea senzorilor electronici [26], dispozitive optoelectronice [27] sau de stocare a energiei [28]. Rețeaua reciprocă a grafenei conține puncte cristalografice de înaltă simetrie,  $K$  și  $K'$ , situate la colțurile primei zone Brillouin, care sunt, de asemenea, numite puncte Dirac.

În cadrul aproximației de legătură strânsă și în apropierea punctelor Dirac, legea de dispersie pentru energie este  $E_{\pm}(q) \approx \pm \hbar v_F |\vec{q}|$  cu  $v_F \approx 10^6$  m/s viteza Fermi a grafenei, unde semnul  $+/-$  se referă la banda de conducție/valență care se ating în punctele Dirac [22]. Dispersia de energie în punctele Dirac este liniară ca funcție de impuls [figura 1.4(a)] și nu prezintă nici un gap energetic [29]. Purtătorii de sarcină din grafenă se numesc fermioni Dirac de masă nulă. În cazul unei grafene nedopată, nivelul Fermi este situat în punctul Dirac, unde benzile de electroni și de goluri se ating în spațiul impulsului. Densitatea de stări  $\rho(E)$ , în apropierea punctelor Dirac, este  $\rho(E) = g_s g_v |E| / 2\pi \hbar^2 v_F^2$  unde  $g_s = 2$  și  $g_v = 2$  sunt degenerarea de vale și de spin [30]. Figura 1.4(b) ilustrează  $\rho(E)$  în apropierea punctului Dirac și pentru o lățime de bandă completă (insertie).

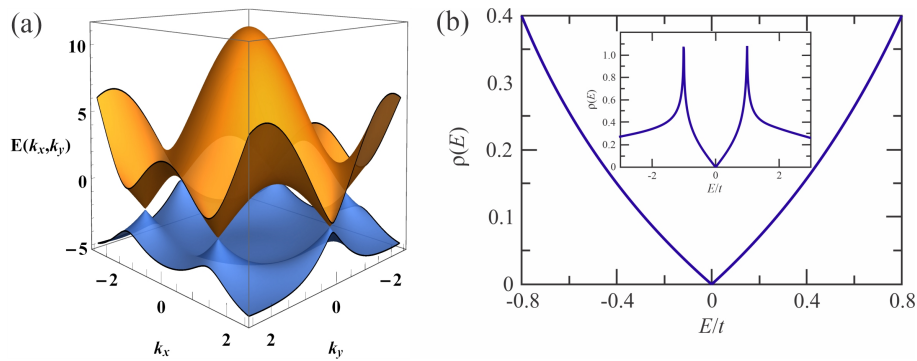


Figure 1.4: (a) Structura de bandă a grafenei  $E(k_x, k_y)$ . (b) Densitatea de stări a grafenei  $\rho(E)$  în apropierea punctului Dirac și pentru o lățime de bandă completă (insertie). Figuri adaptate din [22, 29].

# Capitolul 2

## Sondarea modurilor zero Majorana prin doturi cuantice în prezența interacțiunii electron-fonon

### 2.1 Motivație

Descoperirea modurilor zero Majorana (MZM) a deschis un nou domeniu de cercetare în comunitatea materiei condensate. Cea mai comună schemă utilizată pentru detectarea modurilor Majorana într-un supraconductor topologic din nanofir semiconductor necesită încorporarea nanofirului într-un circuit mesoscopic care se poate realiza prin cuplarea modurilor Majorana la un dot cuantic, care este conectat la electrozi metalici [31, 32]. Prezența modurilor Majorana este văzută în conductanța liniară măsurată prin dot [32]. Mai exact, atunci când dotul fără interacțiuni se cuplează la un nanofir care se află în faza de supraconductibilitate topologică, prezența modurilor Majorana se manifestă prin scăderea valorii conductanței liniare la  $e^2/2h$ . În ultimii ani, au fost propuse diverse structuri teoretice dot-nanofir Majorana, pentru a detecta prezența modurilor Majorana prin proprietățile de transport, cum ar fi conductanța [33–35], conductanța termică [36, 37] și rezonanța Fano [38, 39]. În ultimul deceniu, au fost raportate o multitudine de realizări experimentale privind detectarea semnăturilor Majorana prin măsurători de transport, utilizând dispozitive bazate pe joncțiuni electrod metalic-supraconductor (SC) [15, 40] sau diferite configurații de dot-nanofir Majorana [41, 42]. Există câteva studii teoretice relevante, care au abordat mecanismele de transport asistate de fononi la MZM [43–47].

Scopul acestui capitol este de a propune o configurație realistă, fezabilă experimental, care poate sonda modurile Majorana prin măsurători de transport. Demonstrăm că semnăturile caracteristice așteptate de la modurile Majorana sunt modificate semnificativ în prezența interacțiunii electron-fonon (IEF).

### 2.2 Modelul teoretic

Sistemul studiat este alcătuit dintr-un dot cuantic conectat la două moduri Majorana local-

izate la capetele unui nanofir topologic. Configurația dot-nanofir Majorana formează o structură de buclă care este străbătută de un flux magnetic extern  $\Phi$ , așa cum este ilustrat în figura 2.1. Astfel, proprietățile de transport ale nanojoncțiunii pot fi manipulate prin reglarea fluxului magnetic. Pentru a investiga efectul IEF asupra proprietăților de transport, considerăm că electronul localizat în dot interacționează cu un singur mod fononic optic longitudinal. Sistemul considerat se poate modela cu ajutorul următorului hamiltonian [32, 34, 38, 48]

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\alpha,k} \varepsilon_{\alpha k} c_{\alpha k}^\dagger c_{\alpha k} + i\varepsilon_M \gamma_1 \gamma_2 + \hbar\omega_0 a^\dagger a + \varepsilon_d d^\dagger d + \beta(a + a^\dagger)d^\dagger d \\ & + [(\lambda_1 d - \lambda_1^* d^\dagger)\gamma_1 + i(\lambda_2 d + \lambda_2^* d^\dagger)\gamma_2] + \sum_{\alpha,k} (V_{\alpha k} c_{\alpha k}^\dagger d + V_{\alpha k}^* d^\dagger c_{\alpha k}). \end{aligned} \quad (2.1)$$

Primul termen al ecuației (2.1) descrie mișcarea electronilor într-un sistem de stări continue, alcătuit din electroni liberi, prin operatorii de anihilare (creare)  $c_{\alpha k}$  ( $c_{\alpha k}^\dagger$ ) cu impuls  $k$  în electrodul  $\alpha$  [unde  $\alpha \equiv$  stâng ( $L$ ), și drept ( $R$ )] și  $\mu_\alpha$  reprezintă potențialul chimic în electrodul  $\alpha$ . Electrozii se află la aceeași temperatură,  $T_\alpha = T$ . Al doilea termen din ec. (2.1) caracterizează cuplajul dintre cele două moduri Majorana (notate cu  $\gamma_1$  și  $\gamma_2$ ), găzduite de capetele opuse ale buclei nanofirului topologic prin intermediul energiei de suprapunere a modurilor Majorana  $\varepsilon_M$ . Al treilea termen din ec. (2.1), reprezintă modul fononic optic longitudinal, cu  $a^\dagger$  ( $a$ ) operatorul de creare (anihilare) a fononilor și  $\hbar\omega_0$  energia fononică. Distribuția fononilor este dată de

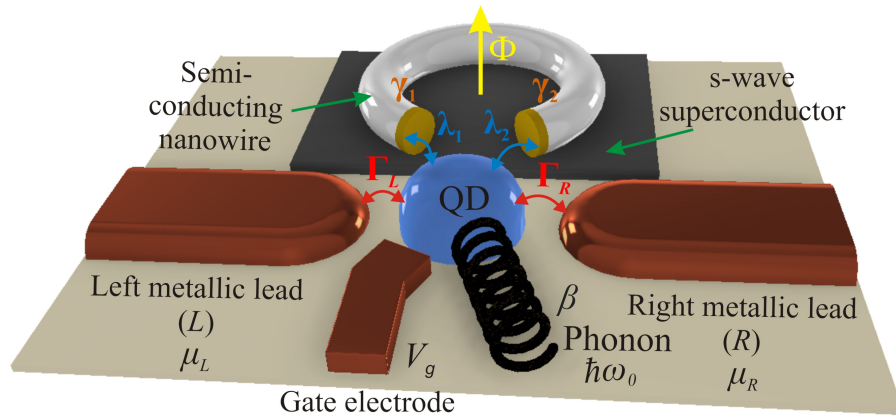


Figure 2.1: Reprezentarea schematică a unui dot cuantic atașat la două MZM, notate cu operatorii Majorana  $\gamma_1$  și  $\gamma_2$ , prin cuplaje  $\lambda_1$  și  $\lambda_2$ . Configurația dot-nanofir topologic formează o structură de buclă care este străbătută de un flux magnetic reglabil  $\Phi$ . Dotul este conectat la electrozii metalici stâng ( $L$ ) și drept ( $R$ ) prin cuplaje  $\Gamma_L$  și  $\Gamma_R$ . Potențialul chimic în electrodul  $L(R)$  este notat cu  $\mu_{L(R)}$ . Nivelul dotului este reglat prin tensiunea de poartă  $V_g$  aplicată pe electrodul de poartă. Electronul în dot interacționează cu un mod de fonon optic de frecvență  $\omega_0$  prin cuplaj electron-fonon  $\beta$ .

$N_{\text{ph}} = 1/(e^{\hbar\omega_0/k_B T} - 1)$  (în cele ce urmează  $\hbar = k_B = 1$ ). Al patrulea termen din ec. (2.1) descrie dotul cuantic cu un singur nivel, unde  $\varepsilon_d$  este energia dotului și  $d^\dagger(d)$  reprezintă operatorul fermionic de creare (anihilare) pentru electronii din dot. Următorul termen din ec. (2.1) caracterizează interacțiunea dintre electronul dotului și modul fononic optic prin cuplaj electron-fonon  $\beta$ . Următorul termen din ec. (2.1) modelează cuplarea dotului cu modurile Majorana prin cuplaje  $\lambda_1 = |\lambda_1|e^{i\phi/4}$  și  $\lambda_2 = |\lambda_2|e^{-i\phi/4}$  [38] unde faza fluxului magnetic este definită ca  $\phi = \pi\Phi/\Phi_0 = 2 \arg(\lambda_1/\lambda_2)$  și  $\Phi_0 = h/2e$  reprezintă cuanta de flux magnetic. Ultimul termen din ec. (2.1) descrie cuplajul dintre electronul dotului și electronii liberi din electrozi prin amplitudinile de tunelare  $V_{\alpha k}$ . Operatorii Majorana  $\gamma_1$  și  $\gamma_2$  sunt înlocuiți cu operatori de fermioni obișnuiți,  $\gamma_1 = (f^\dagger + f)/\sqrt{2}$  și  $\gamma_2 = i(f^\dagger - f)/\sqrt{2}$ .

În cadrul formalismului funcției Green de neechilibru, curentul care curge din electrodul  $\alpha$  în dotul cuantic este dat de relația [49–51]:

$$I_\alpha = \frac{ie}{h} \int d\varepsilon \{ \Gamma_\alpha(\varepsilon) [\mathbf{f}_\alpha(\varepsilon) [\mathbf{G}_d^r(\varepsilon) - \mathbf{G}_d^a(\varepsilon)] + \mathbf{G}_d^<(\varepsilon)] \}_{11}, \quad (2.2)$$

unde  $\mathbf{G}_d^{r(a)}(\varepsilon)$ ,  $\mathbf{G}_d^{<(>)}(\varepsilon)$ ,  $\Gamma_\alpha(\varepsilon)$  și  $\mathbf{f}_\alpha(\varepsilon)$  sunt funcțiile Green retardată (avansată), "lesser" ("greater"), matricea de cuplaj dot-electrozi și matricea funcției Fermi-Dirac pentru electrodul  $\alpha$  în reprezentarea Nambu. Menționăm că legea lui Kirchhoff  $I_S + I_L + I_R = 0$  este îndeplinită [51]. În regimul subgap,  $|eV| < \Delta$ , curentul  $I_\alpha$  poate fi descompus în  $I_\alpha = I_\alpha^{ET} + I_\alpha^{LAR} + I_\alpha^{CAR}$  unde  $I_\alpha^{ET}$ ,  $I_\alpha^{LAR}$  și  $I_\alpha^{CAR}$  sunt curenții generați în procesele de tunelarea electronică (ET), de reflexie Andreev locală și transversă (LAR și CAR). Procesul ET se manifestă prin transmiterea unui electron de la un electrod la celălalt. Procesul LAR se referă la tunelarea unui electron/gol de la un electrod în materialul SC prin intermediul unui MZM, după care acesta este reflectat ca un gol/electron în același electrod. Într-un proces CAR, o pereche de MZM se conectează la doi electrozi, în care un electron/gol de la un electrod intră prin tunelare în materialul SC printr-un MZM și apoi iese prin tunelare ca gol/electron prin intermediul celuilalt MZM la celălalt electrod [52]. Presupunând simetria electron-gol în cuplaje dot-electrozi  $\Gamma_\alpha^e = \Gamma_\alpha^h = \Gamma$  și  $\mu_L = -\mu_R = eV/2$  cu  $\mu_S = 0$  în materialul SC, curentul total poate fi exprimat ca

$$I = \frac{ie}{2h} \Gamma \int d\varepsilon [f_L^e(\varepsilon) - f_R^e(\varepsilon)] [\mathbf{G}_d^>(\varepsilon) - \mathbf{G}_d^<(\varepsilon)]_{11}. \quad (2.3)$$

Pentru a calcula  $\mathbf{G}_d^{<(>)}(\varepsilon)$ , am folosit transformarea canonică care ne permite să eliminăm termenul de cuplare electron-fonon în hamiltonian (2.1). În urma aplicării transformării canonice rezultă un nou hamiltonian transformat, decuplat într-o parte fononică și o parte electronică, și renormarea energiei dotului, a cuplajelor dot-electrozi și dot-MZM  $\tilde{\varepsilon}_d = \varepsilon_d - g\omega_0$ ,  $\tilde{\Gamma}_\alpha = \Gamma_\alpha e^{-g(2N_{\text{ph}}+1)}$  și  $\tilde{\lambda}_j = \lambda_j e^{-g(N_{\text{ph}}+1/2)}$  cu  $g = (\beta/\omega_0)^2$ . Funcțiile Green ”greater” și ”lesser” vor fi exprimate ca  $\mathbf{G}_d^>(\varepsilon) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \mathcal{L}_p \tilde{\mathbf{G}}_d^>(\varepsilon - p\omega_0)$  și  $\mathbf{G}_d^<(\varepsilon) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \mathcal{L}_p \tilde{\mathbf{G}}_d^<(\varepsilon + p\omega_0)$  where  $\mathcal{L}_p$  denotă factorul Franck-Condon [48]. Pentru a determina  $\tilde{\mathbf{G}}_d^{<(>)}$ , am aplicat ecuația Keldysh,  $\tilde{\mathbf{G}}_d^{<(>)} = \tilde{\mathbf{G}}_d^r \tilde{\Sigma}^{<(>)} \tilde{\mathbf{G}}_d^a$ , unde  $\tilde{\Sigma}^{<(>)}$  este energia proprie corespunzătoare. Elementele matricei funcției Green  $\tilde{\mathbf{G}}_d^r$  au fost determinate prin utilizarea tehnicii ecuației de mișcare [53]. Cunoscând  $\mathbf{G}_d^{<(>)}(\varepsilon)$ , toate proprietățile de transport ale dotului pot fi explorate. Calculele detaliate pot fi găsite în lucrarea noastră [54].

## 2.3 Rezultate și discuții

În această secțiune, prezentăm principalele rezultate pentru proprietățile de transport ale sistemului dot-MZM atât în absența cât și în prezența IEF, în cadrul mai multor regimuri de parametrii relevanți experimental. Gap-ul SC  $\Delta$  în configurațiile experimentale tipice este de ordinul  $250 \mu\text{eV}$ , pentru nanofire topologice [15]. Valorile cuplajelor dot-electrozi  $\Gamma$  și dot-MZM  $|\lambda_j|$  sunt de ordinul a câtorva  $\mu\text{eV}$  [33]. În calcule, toate energiile sunt măsurate în unități de  $\Gamma$ . Valoarea cuplajului electron-fonon și energia fononului sunt alese ca  $\beta = 2.5 \Gamma$  și  $\omega_0 = 5 \Gamma$ .

### 2.3.1 Rezultate obținute în absența interacțiunii electron-fonon

În această secțiune, studiem comportamentul conductanței liniare ( $\mathcal{G}$ ) și diferențiale ( $dI/dV$ ) atunci când se modifică parametrii sistemului în absența IEF. Pentru a înțelege influența polarizării electrice asupra periodicității lui  $dI/dV$  în prezența fluxului magnetic  $\phi$ , introducem  $\mu_L = qeV$  și  $\mu_R = (q-1)eV$  cu  $\mu_L - \mu_R = eV$  și  $0 \leq q \leq 1$ . Prezentăm în figurile 2.2(a) și (b) rezultatele pentru conductanța diferențială totală la temperatura zero  $dI_L/dV$ , în funcție de faza fluxului magnetic  $\phi$  pentru MZM în cazul în care nu se suprapun ( $\varepsilon_M = 0$ ) și în cazul în care se suprapun ( $\varepsilon_M \neq 0$ ). Figura 2.2(c) ilustrează componenta CAR a conductanței diferențiale totale la temperatura zero,  $dI_L^{\text{CAR}}/dV$ . Nivelul dotului este  $\varepsilon_d = 0$ . Observăm că  $dI_L/dV$

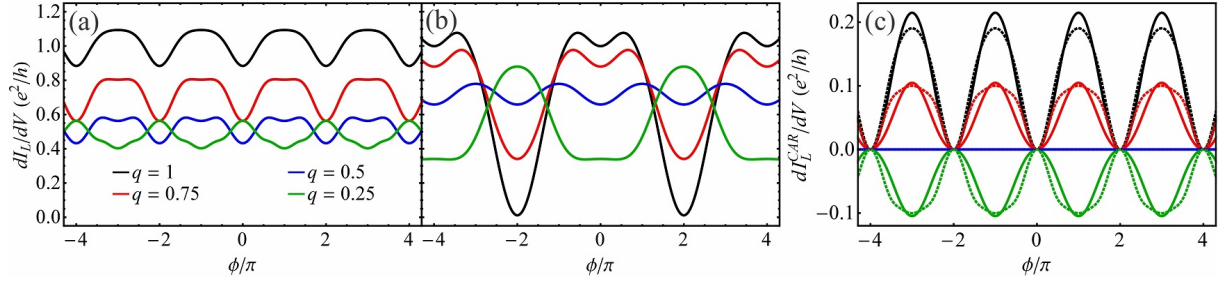


Figure 2.2:  $dI_L/dV$  vs.  $\phi$  cu: (a)  $\varepsilon_M = 0\Gamma$  și (b)  $\varepsilon_M = 0.3\Gamma$ . (c)  $dI_L^{CAR}/dV$  vs.  $\phi$  unde liniile continue (punctate) corespund la  $\varepsilon_M = 0.3\Gamma$  ( $\varepsilon_M = 0\Gamma$ ). Potențialul aplicat este  $\mu_L = qeV$  cu  $eV = 0.28\Gamma$  și  $\mu_L - \mu_R = eV$ ,  $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 0.3\Gamma_R$ ,  $\varepsilon_d = 0\Gamma$  și  $T = 0\Gamma$ .

prezintă o funcție periodică de  $2\pi$  în  $\phi$  pentru  $\varepsilon_M = 0$  și rămâne neschimbată atunci când se modifică polarizarea sistemului. Atunci când  $\varepsilon_M \neq 0$ , periodicitatea lui  $dI_L/dV$  poate fi de  $2\pi$  și  $4\pi$  în funcție de modul în care este aleasă polarizarea dotului. Contribuția proceselor CAR la  $dI_L/dV$  este finită, cu excepția cazului în care  $\mu_L = -\mu_R = eV/2$ . Se remarcă faptul că periodicitatea conductanțelor diferențiale și liniare nu este afectată de o posibilă asimetrie care apare în cuplajele dot-electrozi ( $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ ). Acest lucru indică în continuare că periodicitatea conductanței ar fi o semnătură robustă în experimente.

În cele ce urmează, ne concentrăm pe cazul  $\mu_L = -\mu_R = eV/2$  când doar procesele ET și LAR contribuie la conductanțele liniare și diferențiale. Explorăm componentele ET și LAR ale conductanței liniare  $\mathcal{G}$  la temperatura zero atunci când cuplajul  $|\lambda_2|$  este variat cu  $|\lambda_1|$  fix. Rezultatele sunt prezentate în Figura 2.3(a) pentru  $\mathcal{G}$  cu componentele sale ET ( $\mathcal{G}_{ET}$ ) și LAR ( $\mathcal{G}_{LAR}$ ) în funcție de faza fluxului magnetic  $\phi$  pentru energia de suprapunere  $\varepsilon_M = 0$  atunci când energia dotului este  $\varepsilon_d = 0$ . Observăm că  $\mathcal{G}_{ET}$  și  $\mathcal{G}_{LAR}$  oscilează cu o periodicitate de  $2\pi$ , cu

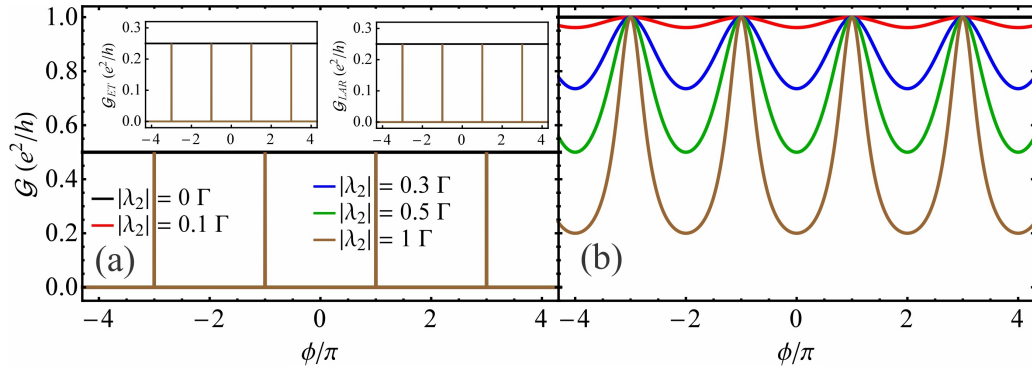


Figure 2.3: (a)  $\mathcal{G}$  vs.  $\phi$  pentru  $\varepsilon_M = 0\Gamma$ . Inseturile din stânga și din dreapta se referă la rezultatele pentru componentele ET ( $\mathcal{G}_{ET}$ ) și LAR ( $\mathcal{G}_{LAR}$ ) ale  $\mathcal{G}$  în funcție de  $\phi$ . (b)  $\mathcal{G}$  vs.  $\phi$  pentru  $\varepsilon_M = 0.3\Gamma$ . Cuplajul  $|\lambda_1| = 0.3\Gamma$  este fixat și cuplajul  $|\lambda_2|$  este variat la  $\varepsilon_d = 0\Gamma$  și  $T = 0\Gamma$ .

amplitudinea  $\mathcal{G}_{ET} = \mathcal{G}_{LAR} = e^2/4h$  și  $\mathcal{G}$  atinge valoarea  $e^2/2h$ , independent de valorile finite ale lui  $|\lambda_2|$ . De notat că conductanțele liniare la temperatura zero sunt independente de valorile energiei dotului  $\varepsilon_d$ . Când  $\varepsilon_M \neq 0$ ,  $\mathcal{G}$  este compus din conductanța ET,  $\mathcal{G} \approx \mathcal{G}_{ET}$ , și prezintă o periodicitate de  $2\pi$  în  $\phi$  la  $\varepsilon_d = 0$  [vezi figura 2.3(b)]. Spre deosebire de cazul în care modurile Majorana sunt degenerate, maximele lui  $\mathcal{G}$  pentru MZM hibridizate ating valoarea  $e^2/h$ .

Pentru a studia în continuare comportamentul lui  $\mathcal{G}$  în regimul  $\varepsilon_d \neq 0$  și  $\varepsilon_M \neq 0$ , conductanța liniară totală  $\mathcal{G} \approx \mathcal{G}_{ET}$  la temperatura zero este reprezentată grafic în Figura 2.4 în funcție de faza fluxului magnetic  $\phi$  și de energia dotului  $\varepsilon_d$  atunci când valoare cuplajului  $|\lambda_1|$  este fixă și cuplajul  $|\lambda_2|$  este variabil. În cazul în care  $\varepsilon_d = 0$ , conductanța liniară are o periodicitate de  $2\pi$  în funcție de  $\phi$ . Atunci când energia dotului  $\varepsilon_d \neq 0$ ,  $\mathcal{G}$  prezintă o periodicitate de  $4\pi$  în  $\phi$ , independentă de valorile finite ale cuplajului  $|\lambda_2|$ . Se remarcă faptul că conductanța diferențială prezintă o periodicitate de  $2\pi$  în faza fluxului magnetic  $\phi$  pentru  $\varepsilon_M = 0$ , indiferent de reglajul nivelul dotului  $\varepsilon_d$ . Pentru MZM hibridizate, periodicitatea  $2\pi$  a lui  $dI/dV$  în  $\phi$  se transformă într-o periodicitate de  $4\pi$  atunci când energia dotului  $\varepsilon_d$  este finită,  $\varepsilon_d \neq 0$ .

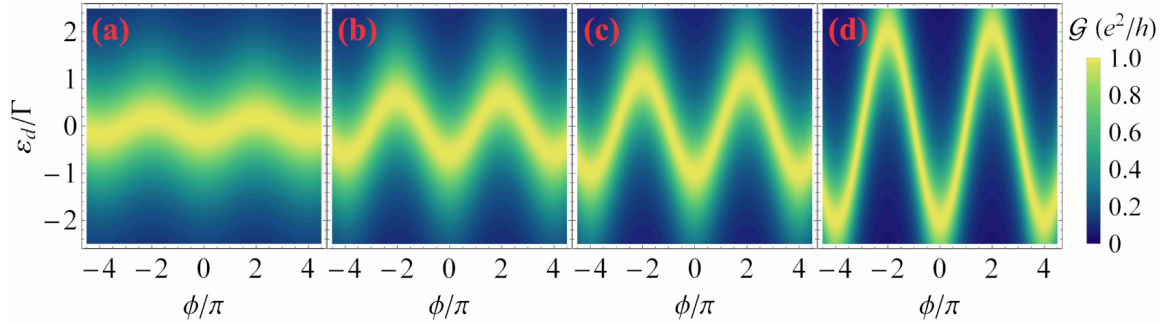


Figure 2.4:  $\mathcal{G}$  vs.  $\phi$  și  $\varepsilon_d$  la  $T = 0\Gamma$  cu  $\varepsilon_M = 0.3\Gamma$  și  $|\lambda_1| = 0.3\Gamma$  la valori diferite ale lui  $|\lambda_2|$ : (a)  $|\lambda_2| = 0.1\Gamma$ , (b)  $|\lambda_2| = 0.3\Gamma$ , (c)  $|\lambda_2| = 0.5\Gamma$  and (d)  $|\lambda_2| = 1\Gamma$ .

### 2.3.2 Rezultate obținute în prezența interacțiunii electron-fonon

În această secțiune, analizăm influența IEF asupra caracteristicilor de transport ale sistemului dot-MZM. Reprezentăm în Figura 2.5 conductanța liniară  $\mathcal{G}$  în funcție de faza fluxului magnetic  $\phi$  la temperatura zero și la o temperatură finită pentru energia dotului  $\varepsilon_d = 0$ , în cazurile  $\beta = 0$  și  $\beta \neq 0$ , pentru MZM nehibridizate și hibridizate. Am constatat, că conductanța liniară la temperatura zero nu depinde de puterea cuplajului electron-fonon  $\beta$  pentru modurile Majorana nehibridizate, în concordanță cu rezultatele obținute pentru un dot atașat la un MZM cu



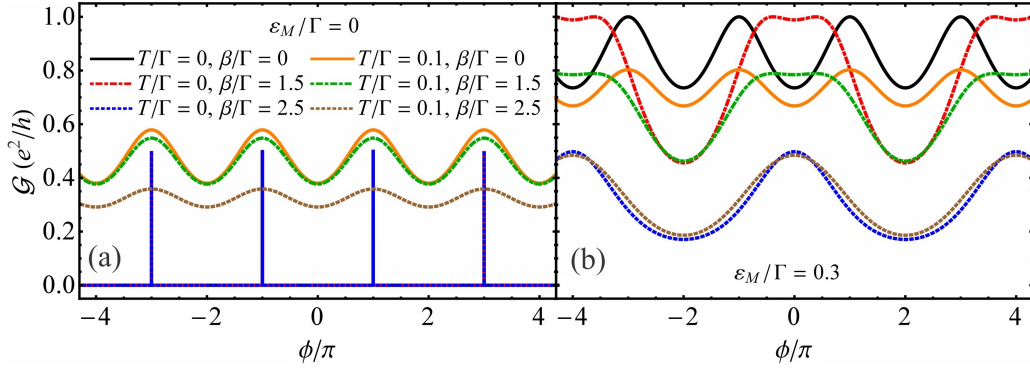


Figure 2.5:  $\mathcal{G}$  vs.  $\phi$  la valori diferite ale lui  $\beta$  pentru: (a)  $\epsilon_M = 0\Gamma$  și (b)  $\epsilon_M = 0.3\Gamma$ . Restul parametrilor sunt:  $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 0.3\Gamma$  și  $\epsilon_d = 0\Gamma$ .

IEF [45]. Conductanța liniară își păstrează periodicitatea de  $2\pi$  în prezența IEF pentru  $\epsilon_M = 0$ . În cazul  $\beta \neq 0$  cu  $\epsilon_M \neq 0$ ,  $\mathcal{G}$  depinde de energia dotului și de  $\beta$ , atât la temperatura zero cât și la temperaturi diferite de zero. Pentru  $\epsilon_M \neq 0$ , periodicitatea  $2\pi$  a conductanței liniare în funcție de  $\phi$  se schimbă la  $4\pi$  în prezența IEF, ceea ce este atribuită energiei finite renormalizate a dotului  $\tilde{\epsilon}_d$ . Se menționează că influența IEF asupra conductanței liniare poate fi eliminată cu o bună aproximație la  $\tilde{\epsilon}_d = 0$  atunci când se reglează nivelul dotului la  $\epsilon_d = \beta^2/\omega_0$ . În concluzie, atunci când se introduce IEF în sistem, periodicitatea lui  $\mathcal{G}$  în funcție de  $\phi$  trece de la  $2\pi$  la  $4\pi$  atunci când se modifică  $\tilde{\epsilon}_d$  prin nivelul de dot  $\epsilon_d$  sau puterea IEF  $\beta$  pentru MZM hibridizate.

În figurile 2.6(a) și (b) conductanța diferențială  $dI/dV$  în funcție de faza fluxului magnetic  $\phi$  este reprezentată la temperatura zero pentru  $\epsilon_M = 0$  și  $\epsilon_M \neq 0$ , cu valorile diferite ale lui  $\beta$  cu cuplajele  $|\lambda_1| = |\lambda_2|$  și energia dotului  $\epsilon_d = 0$  cu o valoare dată a voltajului  $eV$ . În cazul în care  $\beta = 0$ ,  $dI/dV$  prezintă o periodicitate de  $2\pi$  în faza fluxului magnetic  $\phi$  pentru MZM nehibridizate. Observăm că prin variația lui  $\beta$  se poate realiza o tranziție între  $2\pi$  și  $\pi$  în periodicitatea lui  $dI/dV$  pentru MZM degenerate și între  $2\pi$  și  $4\pi$  pentru MZM hibridizate. Figurile 2.6(c) și (d) prezintă rezultatele pentru  $dI/dV$  în funcție de  $\phi$  la temperatura zero, în absența și în prezența IEF, când nivelul dotului este reglat  $\epsilon_d \neq 0$ , pentru  $\epsilon_M = 0$  și  $\epsilon_M \neq 0$ , cu  $|\lambda_1| = |\lambda_2|$  atunci când  $\beta$  și  $eV$  sunt fixate. Putem observa că atunci când nivelul dotului este egal cu  $\epsilon_d = \beta^2/\omega_0$ , energia dotului renormalizată dispare  $\tilde{\epsilon}_d = 0$ , ceea ce duce la suprimarea efectului IEF asupra periodicității lui  $dI/dV$ . Astfel, periodicitatea conductanței diferențiale se modifică atunci când se reglează nivelul dotului  $\epsilon_d$ .

Sperăm că descoperirile noastre să clarifice comportamentul modurilor Majorana în experimentele de transport în care prezența IEF joacă un rol principal.

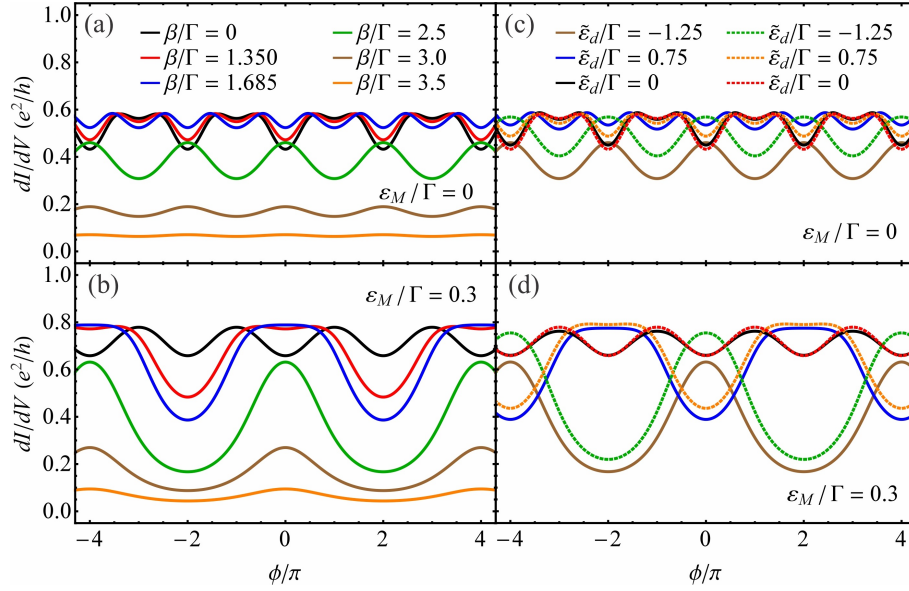


Figure 2.6: (a), (b)  $dI/dV$  vs.  $\phi$  pentru valori diferite ale lui  $\beta$  la  $\varepsilon_d = 0\Gamma$  și (c), (d)  $dI/dV$  vs.  $\phi$  la valori diferite ale lui  $\varepsilon_d$ , cu și fără IEF ( $\tilde{\varepsilon}_d = \varepsilon_d - \beta^2/\omega_0$ ), unde liniile continue (punctate) corespund la  $\beta = 2.5\Gamma$  ( $\beta = 0\Gamma$ ) cu  $eV = 0.28\Gamma$ ,  $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 0.3\Gamma$  și  $T = 0\Gamma$ . Energia de suprapunere: (a), (c)  $\varepsilon_M = 0\Gamma$  și (b), (d)  $\varepsilon_M = 0.3\Gamma$ .

# Capitolul 3

## Fizica Kondo de neechilibru a unui dot cuantic conectat la electrozi de grafenă în prezența câmpurilor magnetice

### 3.1 Motivație

Descoperirea grafenei [24] a extins domeniile de cercetare existente și a permis dezvoltarea de noi nanodispozitive cuantice bazate pe grafenă [55], care dezvăluie proprietăți fizice unice [22]. Astfel de dispozitive cuantice sunt nanojoncțiuni, a căror implementare se poate baza pe cuplarea doturilor cuantice la sisteme mai largi, cum ar fi cele metalice [49, 50], feromagnetice [56], sau cu electrozi de grafenă [57–59]. Alegerea electrozilor poate influența în mod semnificativ proprietățile de transport ale configurației bazate pe doturi. Efectul Kondo în doturile conectate la electrozi normali s-a analizat teoretic prin utilizarea modelului de impurități Anderson în cadrul ecuației de mișcare [50, 60]. Există eforturi experimentale pentru a confirma efectul Kondo în astfel de sisteme [10, 61]. Efectul adatomilor magnetici asupra proprietăților fizice ale grafenei a fost investigat teoretic în literatura de specialitate [62, 63]. Detaliile privind investigarea experimentală a efectului Kondo în grafenă, indus de vacanțele în rețeaua cristalină sau de adatomii magnetici prin caracteristicile de transport, au fost raportate în [64, 65]. Până în prezent, câteva lucrări teoretice din literatura de specialitate, au abordat caracteristicile termoelectrice ale doturilor cuantice conectate la sistemele de grafene [57–59].

Scopul acestui capitol este de a investiga transportul de tip Kondo în neechilibru într-un dot cuantic cu energie coulombiană finită, atașat la electrozi de grafenă, când dotul este străbătut de un câmp magnetic.

## 3.2 Modelul teoretic

Considerăm un dot cuantic cuplat la doi electrozi din grafenă monostrat, așa cum este ilustrat în figura 3.1. Sistemul este modelat de următorul hamiltonian [57–59, 63]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\alpha,s,\sigma} \int_{-k_c}^{+k_c} dk \varepsilon_k c_{\alpha s k \sigma}^\dagger c_{\alpha s k \sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_{d\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \\ & + \sum_{\alpha,s,\sigma} \int_{-k_c}^{+k_c} dk \{ \mathcal{V}_{\alpha s \sigma}(k) c_{\alpha s k \sigma}^\dagger d_{\sigma} + [\mathcal{V}_{\alpha s \sigma}(k)]^* d_{\sigma}^\dagger c_{\alpha s k \sigma} \}. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Primul termen din ec. (3.1) modelează fermionii Dirac de masă nulă în electrozi unde  $c_{\alpha s k \sigma}^\dagger$  ( $c_{\alpha s k \sigma}$ ) este operatorul de creare (anihilare) pentru fermionii Dirac de masă nulă, cu momentul  $k$  și spinul  $\sigma$  în electrodul de grafenă  $\alpha$  [ $\alpha \equiv$  stâng ( $L$ ) și drept ( $R$ )]. În plus,  $s$  reprezintă indicele de vale și  $\varepsilon_k = \hbar v_F k$  este relația de dispersie liniară a energiei pentru fermioni Dirac de masă nulă în grafenă, unde viteza Fermi a grafenei este  $v_F$ . Electrozii grafenei sunt la aceleași temperaturi,  $T_\alpha = T$ . Definim un impuls de tăiere  $k_c$  astfel încât relația de dispersie liniară să fie îndeplinită, unde  $D = \hbar v_F k_c$  este energia de tăiere. Al doilea termen din ec. (3.1) descrie dotul unde  $\varepsilon_{d\sigma} = \varepsilon_d + \sigma \Delta \varepsilon_d / 2$  reprezintă nivelul de energie al dotului dependent de spin cu  $\sigma = +1$  pentru electronii cu spin în sus ( $\uparrow$ ) și  $\bar{\sigma} = -1$  pentru electronii cu spin în jos ( $\downarrow$ ). Aici,  $\Delta \varepsilon_d = |g| \mu_B B$  este despicarea Zeeman, unde  $g$  și  $\mu_B$  sunt factorul Landé și magnetonul Bohr. Notăția  $d_{\sigma}$  ( $d_{\sigma}^\dagger$ ) reprezintă operatorul de anihilare (creare) fermionică pentru un electron din dot. Nivelul dotului se poate regla prin tensiunea aplicată pe electrodul de poartă. Următorul termen

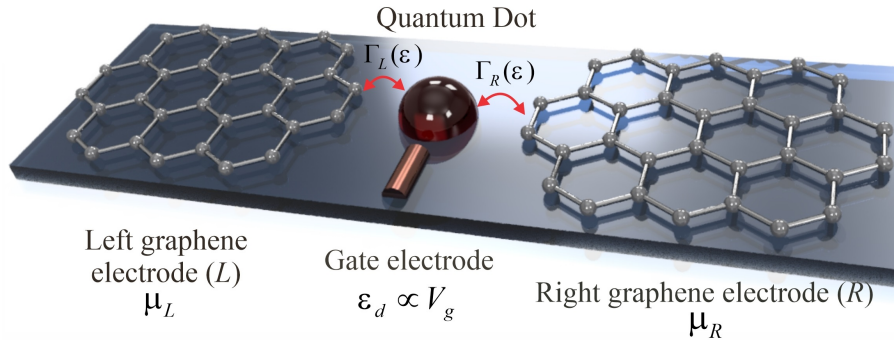


Figure 3.1: Reprezentarea schematică a unui dot cuantic conectat la electrozi de grafenă (stâng -  $L$  și drept -  $R$ ) cu potențiale chimice ( $\mu_L$  și  $\mu_R$ ).  $\Gamma_\alpha(\varepsilon)$  reprezintă cuplajul dintre dot și electrod  $\alpha$ .  $\varepsilon_d$  este nivelul de energie în dot independent de spin care poate fi reglat prin tensiunea de poartă  $V_g$  aplicată pe electrodul de poartă.

din ec. (3.1) se referă la interacțiunea de repulsie a electronilor din dot cu energia coulombiană  $U$ . Aici,  $n_{d\sigma} = d_{\sigma}^{\dagger}d_{\sigma}$  reprezintă operatorul numărului de ocupare pentru electronii din dot cu spin  $\sigma$ . Ultimul termen în relația (3.1) modelează cuplarea electronilor localizați la electrozii de grafenă cu amplitudinea de tunelare  $\mathcal{V}_{\alpha s\sigma}(k)$ .

Curentul total dependent de spin care curge prin dot poate fi exprimat ca [49, 50]:

$$I_{\sigma} = \frac{e}{\hbar} \int_{-D}^{+D} d\varepsilon \frac{\Gamma_L(\varepsilon)\Gamma_R(\varepsilon)}{\Gamma_L(\varepsilon) + \Gamma_R(\varepsilon)} [f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)] \rho_{d\sigma}(\varepsilon), \quad (3.2)$$

unde  $\rho_{d\sigma}(\varepsilon) = -\text{Im}G_{d\sigma}^r(\varepsilon)/\pi$  reprezintă densitatea de stări în dot pentru electronii cu spin  $\sigma$ ,  $G_{d\sigma}^r(\varepsilon)$  și  $\Gamma_{\alpha}(\varepsilon) = 2\pi\eta|\varepsilon|\theta(D - |\varepsilon|)$  sunt funcția Green retardată pentru dot și tăria cuplajului dintre dot și electrodul de grafenă  $\alpha$  cu  $\eta$  fiind un parametru de cuplaj adimensional.  $f_{\alpha}(\varepsilon)$  este funcția de distribuție Fermi-Dirac pentru fermionii Dirac în electrodul  $\alpha$  caracterizată de  $\mu_{\alpha}$  potențialul chimic. Densitatea de stări totală și conductanța diferențială totală sunt exprimate ca  $\rho_d(\varepsilon) = \sum_{\sigma} \rho_{d\sigma}(\varepsilon)$  și  $dI/dV = \sum_{\sigma} dI_{\sigma}/dV$ . Cunoscând funcția Green retardată pentru dot, toate proprietățile de transport ale dispozitivului pe bază de grafenă pot fi explorate. Pentru a calcula  $G_{d\sigma}^r(\varepsilon)$  a fost folosită tehnica ecuației de mișcare [53] combinată cu schema de decuplare a lui Lacroix [53]. Funcțiile de corelație de ordin superior care apar în funcția Green retardată au fost determinate în cadrul aproximației Meir [49]. Calculele detaliate privind funcția Green retardată sunt prezentate în articolul nostru [66].

Am constatat, că temperatura Kondo dispare în punctul Dirac din apropierea punctului simetric particulă-gol din dot. În plus, departe de punctul de simetrie particulă-gol, temperatura Kondo rămâne finită în punctul Dirac, rezultat care este în concordanță cu calculele bazate pe grupul de renormare numeric în limita finită a  $U$ -lui [67]. Pe baza studiilor anterioare [68, 69], se poate stabili că, comportamentul corect al temperaturii Kondo în funcție de potențialul chimic, nu este încă complet clarificat chiar și în limita  $U \rightarrow \infty$  pentru sistemele pe bază de grafenă. Sunt necesare analize suplimentare pentru a înțelege comportamentul temperaturii Kondo și în cazul  $U$  finit. Se remarcă că o estimare mai corectă a temperaturii Kondo are nevoie de calcule autoconsistente, mai degrabă decât de tehnica non-autoconsistentă propusă de Meir et al. [49] și în loc să se folosească aproximația lui Lacroix [53], este necesară aplicarea unei scheme de decuplare mai precisă [60].

### 3.3 Rezultate și discuții

În această secțiune, prezentăm principalele rezultate obținute pentru nanodispozitivul dot-grafenă. Pentru a simplifica calculele, am folosit ca unitate de energie  $D$  cu  $D \approx 7$  eV, fiind o valoare rezonabilă pentru grafenă [59, 62]. Dotul cuantic este realizat dintr-o heterostructură de GaAs cu parametrii de sistem prezentați în lucrarea noastră [66].

În figura 3.2(a) densitatea de stări pentru dot este reprezentată pentru o energie coulombiană finită  $U = 0.069 D$  la trei valori diferite ale temperaturii  $T$  în absența câmpului magnetic. Observăm că peak-urile Kondo apar în spectru la potențialul chimic al electrodului stâng ( $\varepsilon \approx \mu_L$ ) și drept ( $\varepsilon \approx \mu_R$ ). Rezonanțele Kondo au o formă ascuțită la temperaturi scăzute, iar magnitudinea lor scade odată cu creșterea temperaturii. La temperaturi înalte, peak-urile Kondo sunt total șterse, în concordanță cu rezultatele obținute anterior pentru doturile conectate la electrozi normali [50, 70]. În plus, pe lângă peak-urile Kondo care depind puternic de temperatură, în densitatea de stări apar două rezonanțe largite, care corespund transmisiilor rezonante prin dot. Figura 3.2(b) ilustrează rezultatele pentru densitatea de stări cu energia coulombiană finită  $U = 0.069 D$  la temperatura  $T = 5 \cdot 10^{-6} D$ , în prezența unui câmp magnetic extern. În câmp magnetic rezultă că peak-urile Kondo care apar inițial la  $\varepsilon = \mu_\alpha$  se vor despica în două peak-uri cu amplitudini reduse. Rezonanțele Kondo sunt deplasate cu desplicarea Zeeman din pozițiile nemagnetice date de potențialele chimice înspre energii mai mari pentru electronii cu spin  $\uparrow$  și către energii mai joase pentru electronii cu spin  $\downarrow$ . Acest comportament al peak-urilor Kondo este în concordanță cu rezultatele lui [50], pentru un dot cuplat la electrozi metalici în prezența

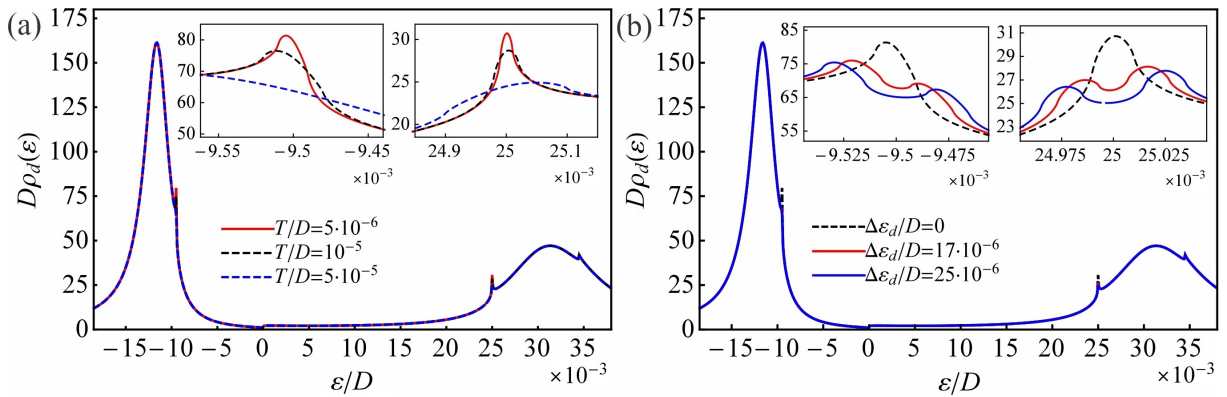


Figure 3.2: Densitatea de stări la neechilibru pentru dot la valori diferite ale: (a) temperaturii  $T$  cu  $\Delta\varepsilon_d = 0 D$  și (b) desplicării Zeeman  $\Delta\varepsilon_d$  la  $T = 5 \cdot 10^{-6} D$  cu  $U = 0.069 D$ ,  $\mu_L = 25 \cdot 10^{-3} D$ ,  $\mu_R = -9.5 \cdot 10^{-3} D$ ,  $\eta = 0.02$  și  $\varepsilon_d = -0.022 D$ .

câmpului magnetic. Este important de remarcat că densitatea de stări dispare la  $\varepsilon = 0$ , independent de orientarea spinului. Mai mult, rezonanțele Kondo nu apar atunci când potențialul chimic în electrozi este fixat în punctul Dirac, adică  $\mu_\alpha = 0$ , în concordanță cu rezultatele obținute pentru un adatom plasat pe o suprafață de grafenă cu  $U \rightarrow \infty$  [71].

Rezultatele numerice pentru conductanța diferențială  $dI/dV$  printr-un dot cu interacțiuni ( $U \rightarrow \infty$ ), în funcție de tensiunea aplicată  $eV$ , sunt prezentate în figura 3.3(a) pentru valori diferite ale temperaturii  $T$ , în absența câmpului magnetic. Peak-ul de tensiune se dezvoltă în conductanța diferențială la temperaturi scăzute atunci când diferența dintre potențialele chimice este egală cu despicarea Zeeman, adică  $eV = \Delta\mu = \Delta\varepsilon_d = 0$ , ceea ce reprezintă o transmisie rezonantă prin dot cuantic. Forma peak-ului Kondo depinde puternic de temperatură  $T$  și de potențialul  $eV$ . La temperaturi joase, peak-ul Kondo are o formă mai ascuțită și mai îngustă, iar odată cu creșterea temperaturii, amplitudinea rezonanței se reduce și se lărgeste. Magnitudinea peak-ului are valoarea sa maximă la  $eV = 0$  și scade rapid atunci când tensiunea  $eV$  deviază de la  $eV = 0$ . Figura 3.3(b) prezintă rezultatele numerice pentru conductanța diferențială  $dI/dV$  în funcție de tensiunea aplicată  $eV$  pentru valori diferite ale despicării Zeeman  $\Delta\varepsilon_d$  și la o valoare fixă a temperaturii  $T = 5 \cdot 10^{-6} D$ . Observăm că, câmpul magnetic aplicat pe dot duce la despicarea peak-ului de tensiune zero, în două rezonanțe cu amplitudini reduse. Rezultatele noastre arată un comportament similar cu acele sisteme compuse din doturi conectate la electrozi metalici în prezența unui câmp magnetic [50].

Sperăm că sistemul dot-grafenă propus aici, ilustrat în figura 3.1, va permite o verificare experimentală a constatărilor noastre, care poate contribui semnificativ la extinderea cunoștințelor în domeniul nanoelectronicii bazate pe grafene.

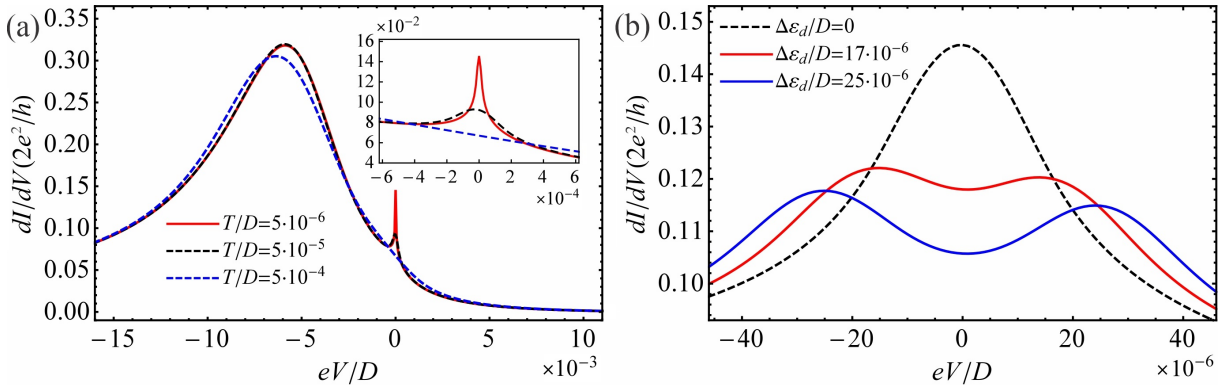


Figure 3.3: (a)  $dI/dV$  vs.  $eV$  la valori diferite ale: (a) temperaturii  $T$  cu  $\Delta\varepsilon_d = 0 D$  și (b) despicării Zeeman  $\Delta\varepsilon_d$  la  $T = 5 \cdot 10^{-6} D$  cu  $U \rightarrow \infty$ ,  $\mu_R = -0.022 D$ ,  $\eta = 0.015$  și  $\varepsilon_d = -0.068 D$ .

# Capitolul 4

## Proprietățile optice ale doturilor cuantice sferice: aplicarea potențialului Hellmann invers pătratic

### 4.1 Motivație

Prezența confinării cuantice în nanostructuri cu dimensiuni joase ar putea produce efecte optice neliniare, care sunt relevante în dezvoltarea dispozitivelor optoelectronice, cum ar fi celulele solare [72] și diodele emițătoare de lumină [73]. Studiile teoretice din literatura de specialitate indică faptul că forma potențialului de confinare spațială pentru mișcarea purtătorilor de sarcină în doturi joacă un rol important în determinarea proprietăților optice ale doturilor [74–77]. Proprietățile optice ale nanostructurilor semiconductoare cu dimensiuni joase, cum ar fi gropile, firele și doturile cuantice, au fost investigate experimental în literatura de specialitate [78–80].

Scopul acestui capitol este de a investiga teoretic proprietățile optice ale unui dot sferic, în care confinarea spațială a purtătorilor de sarcină este modelată de potențialul Hellmann invers pătratic (HIP). Discutăm în detaliu influența dimensiunii caracteristice a dotului, a parametrului potențialului de confinare, a intensității optice incidente asupra coeficientului de absorbție și asupra modificărilor indicelui de refracție în cazul unui sistem cuantic cu două nivele.

### 4.2 Modelul teoretic

În modelul nostru, confinarea spațială pentru mișcarea unui electron într-un dot cu simetrie sferică este aproximată cu un potențial HIP, care, folosind seria Taylor, este exprimat ca [81]:

$$V(r) \approx V_0 \left[ \frac{1}{2} - 2 \frac{R_0}{r} + \left( \frac{R_0}{r} \right)^2 \right], \quad (4.1)$$

unde  $R_0$  și  $V_0$  sunt dimensiunea caracteristică a dotului și un parametru potențial. În cadrul aproximației masei efective, ecuația Schrödinger independentă de timp a sistemului, în coordonate sferice, poate fi separată într-o ecuație radială și într-o ecuație orbitală. Soluțiile celei din



urmă sunt date de armonicile sferice, în timp ce ecuația radială a fost rezolvată prin metoda parametrică Nikiforov-Uvarov [82, 83].

Cunoscând nivelele energetice ale dotului cu funcțiile de undă corespunzătoare, proprietățile optice ale sistemului pot fi analizate. S-a considerat un sistem de dot cu două nivele iradiat de lumină și s-a studiat comportamentul coeficientului de absorbție optică și modificările relative ale indicelui de refracție, variind  $R_0$ ,  $V_0$  și intensitatea optică  $I$ . Coeficientul de absorbție optică  $\alpha(\omega)$  este exprimat ca suma coeficienților de absorbție optică de ordin întâi (liniar)  $\alpha^{(1)}(\omega)$  și nelinier de ordin al treilea  $\alpha^{(3)}(\omega)$ ,  $\alpha(\omega) \approx \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega)$ . În mod similar, modificările relative ale indicelui de refracție este dată de suma termenilor liniar  $\Delta n^{(1)}(\omega)/n_r$  și nelinier de ordin al treilea  $\Delta n^{(3)}(\omega)/n_r$ ,  $\Delta n(\omega)/n_r = \Delta n^{(1)}(\omega)/n_r + \Delta n^{(3)}(\omega)/n_r$  [75].

### 4.3 Rezultate și discuții

În această secțiune, prezentăm principalele rezultate privind proprietățile optice ale unui dot realizat dintr-o heterostructură de GaAs cu parametri de sistem prezentați în lucrarea noastră [81].

Arătăm coeficienții de absorbție liniar  $\alpha^{(1)}(\omega)$ , nelinier de ordin al treilea  $\alpha^{(3)}(\omega)$  și total  $\alpha(\omega)$  în funcție de energia fotonului  $\hbar\omega$  în Figura 4.1(a) când dimensiunea caracteristică a dotului  $R_0$  este variată cu  $V_0$  fixat și în Figura 4.1(b) când  $V_0$  este reglat cu  $R_0$  fixat la o anumită intensitate optică  $I$ . Observăm că  $\alpha^{(1)}(\omega)$  și  $\alpha(\omega)$  ating valori maxime în timp ce  $\alpha^{(3)}$  prezintă un minim la energia fotonului egală cu diferența de energie dintre cele două nivele,  $\hbar\omega = E_{21}$ . Maximul lui  $\alpha^{(1)}(\omega)$  și  $\alpha(\omega)$ , precum și minimul lui  $\alpha^{(3)}(\omega)$  sunt deplasate înspre energii mai mici atunci când dimensiunea caracteristică a dotului  $R_0$  crește [Figura 4.1(a)]. În cazul în care  $V_0$  este variat și  $R_0$  este fixat, poziția maximelor  $\alpha^{(1)}(\omega)$  și  $\alpha(\omega)$ , sau minimul lui  $\alpha^{(3)}(\omega)$  sunt

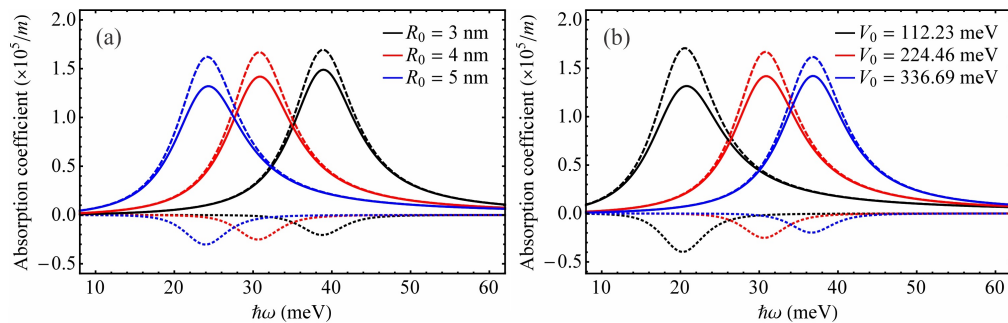


Figure 4.1:  $\alpha^{(1)}(\omega)$  (linia întreruptă),  $\alpha^{(3)}(\omega)$  (linia punctată) și  $\alpha(\omega)$  (linia continuă) vs.  $\hbar\omega$  la valori diferite ale lui: (a)  $R_0$  cu  $V_0 = 224.46 \text{ meV}$  și (b)  $V_0$  cu  $R_0 = 4 \text{ nm}$  la  $I = 8 \cdot 10^8 \text{ W/m}^2$ .

deplasate înspre valori mai mari ale energiei cu creșterea lui  $V_0$  [Figura 4.1(b)].

Arătăm  $\Delta n^{(1)}(\omega)/n_r$ ,  $\Delta n^{(3)}(\omega)/n_r$  și  $\Delta n(\omega)/n_r$  ca o funcție de  $\hbar\omega$  în Figura 4.2(a)-(c) atunci când  $R_0$  variază, la o valoare constantă a lui  $V_0$  și în Figura 4.2(d)-(f) atunci când  $V_0$  variază, la o valoare dată pentru  $R_0$  cu o intensitatea optică  $I$  constantă. Observăm că  $\Delta n^{(1)}(\omega)/n_r$ ,  $\Delta n^{(3)}(\omega)/n_r$  și  $\Delta n(\omega)/n_r$  intersectează valoarea zero în care energia fotonului incident este egală cu diferența de energie dintre nivelele,  $\hbar\omega = E_{21}$ . Poziția punctului de intersecție se deplasează spre energii mai mici odată cu creșterea mărimii caracteristice a dotului  $R_0$  la o valoare fixă al lui  $V_0$  [Figura 4.2(a)-(c)]. Atunci când  $R_0$  are o valoare constantă și mărimea lui  $V_0$  este variată [Figura 4.2(d)-(f)], punctul de intersecție al modificărilor indicelui de refracție se deplasează spre energii mai mari odată cu creșterea lui  $V_0$ .

Notăm că intensitatea optică crescută suprimă amplitudinea coeficienților de absorbție și modificările indicelui de refracție, fără a avea niciun efect asupra poziției rezonanțelor sau a punctelor de intersecție.

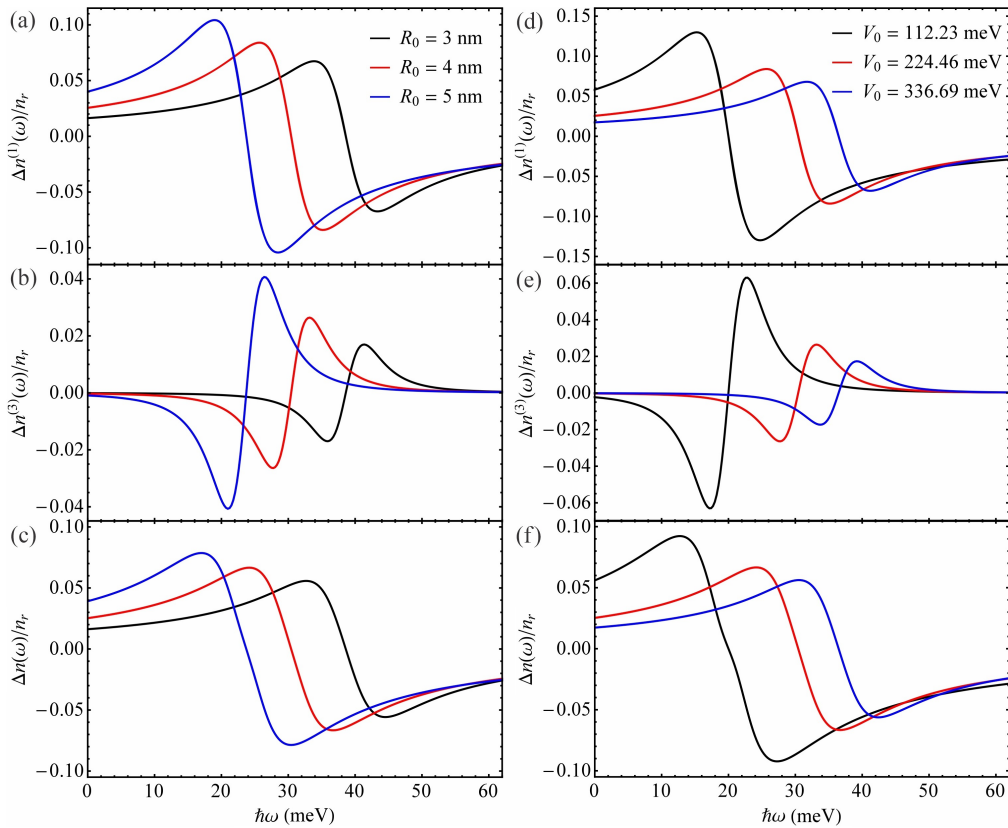


Figure 4.2: (a)  $\Delta n^{(1)}(\omega)/n_r$ , (b)  $\Delta n^{(3)}(\omega)/n_r$ , (c)  $\Delta n(\omega)/n_r$  vs.  $\hbar\omega$  la valori diferite ale lui  $R_0$  cu  $V_0 = 224.46 \text{ meV}$  și (d)  $\Delta n^{(1)}(\omega)/n_r$ , (e)  $\Delta n^{(3)}(\omega)/n_r$ , (f)  $\Delta n(\omega)/n_r$  vs.  $\hbar\omega$  la valori diferite ale lui  $V_0$  cu  $R_0 = 4 \text{ nm}$  la  $I = 8 \cdot 10^8 \text{ W/m}^2$ .

## Concluzii și perspective

Această teză se concentrează pe investigarea teoretică a proprietăților de transport ale diferitelor nanodispozitive, bazate pe doturile cuantice, pe nanofire topologice și pe grafenă. Mai precis, s-au studiat caracteristicile de transport induse de modurile zero Majorana (MZM) pentru un sistem realist în care electronii din dot interacționează cu un mod de fonon optic. S-a investigat efectul Kondo într-un dot cu interacțiuni, atașat la electrozi de grafenă. În final, s-au discutat proprietățile optice ale doturilor semiconductoare sferice, în cazul în care confinarea spațială este aproximată cu un potențial Hellmann pătratic invers (HPI).

Primul capitol al tezei abordează o scurtă discuție despre transportul cuantic în sisteme de joasă dimensionalitate, cum ar fi doturile cuantice, prin prezentarea efectului Kondo. S-au discutat fermionii Majorana, modurile zero Majorana și proprietățile electronice ale grafenei. Ultima parte a capitolului 1 descrie fenomenele care caracterizează proprietățile optice ale sistemelor cuantice cu două nivele realizate în doturi cuantice semiconductoare.

Capitolul al doilea abordează studiul teoretic al proprietăților de transport ale unui circuit Majorana format din două moduri zero Majorana atașate la un dot în prezența interacțiunii electron-fonon (IEF). Joncțiunea dot-nanofir Majorana este străbătută de un flux magnetic reglabil, ceea ce duce la manipularea proprietăților de transport ale dispozitivului. Interacțiunea electronului din dot cu un mod de fonon optic are ca rezultat procese de transport asistate de fonon. Curentul de transport care curge prin sistem a fost determinat utilizând tehnica funcției Green de neechilibru combinată cu o transformare canonică. S-a constatat că conducția liniară la temperatura zero prezintă o periodicitate de  $2\pi$  în faza fluxului magnetic și este imună la prezența IEF, la modificările nivelului de energie în dot și la valorile finite ale cuplajului dot-Majorana pentru MZM nehibridizate. Periodicitatea de  $2\pi$  a conductanței liniare se transformă în  $4\pi$  atunci când energia dotului diferă de zero sau când se introduce IEF în sistem pentru MZM hibridizate. S-a obținut că în prezența IEF periodicitatea conductanței diferențiale, în funcție de faza fluxului magnetic trece de la  $2\pi$  la  $\pi$  pentru MZM nehibridate și de la  $2\pi$  la  $4\pi$  pentru MZM hibridizate, prin modificarea valorii cuplajului electron-fonon. S-a arătat că periodicitatea conductanței diferențiale și liniare rămâne neschimbată și pentru un sistem unde dotul se atașează asimetric la electrozi în absența IEF, ceea ce ar facilita verificarea experimen-

tală. S-a studiat influența IEF asupra curentului într-un dispozitiv în care dotul se conectează doar la un singur MZM. Geometriile dispozitivelor discutate în acest capitol, ar trebui să fie fezabile experimental, luând în considerare progresele recente în nanotehnologie [41, 42]. Se speră că rezultatele obținute pot servi drept ghid pentru măsurătorile experimentale de detectare a modurilor Majorana prin utilizarea doturilor. În viitor, am dori să explorăm proprietățile de transport ale unui dispozitiv mai realist care implică cuplarea unui nanofir Majorana la un dot, în care dotul este conectat asimetric la electrozi, în prezența IEF.

Capitolul 3 abordează o investigație teoretică a efectului Kondo de neechilibru într-un dot atașat la doi electrozi de grafenă atunci când un câmp magnetic este aplicat pe dot. Funcția Green retardată a fost determinată prin utilizarea metodei ecuației de mișcare în cadrul schemei de decuplare Lacroix [53] și a aproximației Meir [49]. Am dedus formule pentru temperatura Kondo pentru dopări diferite al electrozilor de grafenă. Câmpul magnetic aplicat duce la divizarea rezonanțelor Kondo care sunt distruse la temperaturi înalte. Peak-ul de tensiune zero în conductanța diferențială nu apare atunci când potențialele chimice al electrozilor sunt fixate în punctul Dirac. Se speră că descoperirile noastre pot servi drept ghid pentru verificarea experimentală a efectului Kondo în astfel de sisteme, extinzând cunoștințele în domeniul nanoelectronicii bazate pe grafene. În viitor, am dori să determinăm funcția Green în cadrul unei scheme de decuplare mai precise [60] în loc de cea propusă de Lacroix [53] prin utilizarea calculelor autoconsistente în locul aproximației Meir [49]. Funcția Green rezultată poate fi un candidat promițător pentru aproximarea analitică a unei formule îmbunătățite pentru temperatura Kondo.

Capitolul 4 abordează o analiză teoretică a proprietăților optice liniare și neliniare ale unui dot cuantic sferic cu două nivele realizat într-o heterostructură semiconductoare GaAs. Confinarea spațială pentru electroni a fost aproximată cu un potențial HPI. S-au găsit soluțiile proprii ale ecuației radiale a lui Schrödinger prin aplicarea metodei parametrice Nikiforov-Uvarov [82, 83]. S-a constatat că poziția rezonanțelor în spectrul coeficienților de absorbție optică și punctul de intersecție al modificărilor indicelui de refracție pot fi deplasate prin variația mărimii caracteristice a dotului sau a parametrului potențial. S-a obținut că intensitatea luminoasă crescândă suprimă amplitudinea coeficienților de absorbție și a modificărilor indicelui de refracție. În viitor, intenționăm să extindem investigația privind influența presiunii hidrostatice externe și a temperaturii asupra proprietăților optice ale doturilor sferice.

# Bibliografie selectată

- [1] C. W. J. Beenakker, [Phys. Rev. B](#) **44**, 1646 (1991).
- [2] D. Ryndyk, *Theory of Quantum Transport at Nanoscale: An Introduction* (Springer International Publishing, Cham, Switzerland, 2016).
- [3] C. Fühner, *Magneto-transport investigations on multi-electron quantum dots: Coulomb blockade, Kondo effect, and Fano regime*, [PhD dissertation](#), Hannover: Universität (2002).
- [4] L. P. Kouwenhoven and P. L. McEuen, Single electron transport through a quantum dot, in *Nanotechnology*, edited by G. Timp (Springer New York, New York, NY, 1999) pp. 471–535.
- [5] D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner, [Nature](#) **391**, 156 (1998).
- [6] L. Kouwenhoven and L. Glazman, [Phys. World](#) **14**, 33 (2001).
- [7] R. Van Roermund, *Theoretical Study of non-equilibrium transport in Kondo quantum dots*, [Theses](#), Université de Grenoble (2010).
- [8] J. Kondo, [Prog. Theor. Phys.](#) **32**, 37 (1964).
- [9] S. De Franceschi and W. van der Wiel, UndefinedKondo effect in quantum dots, in *UndefinedHandbook of Nanophysics: Nanoparticles and Quantum Dots*, edited by K. Sattler (2010) pp. 646–664.
- [10] S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp, and L. P. Kouwenhoven, [Science](#) **281**, 540 (1998).
- [11] J. Schmid, J. Weis, K. Eberl, and K. v. Klitzing, [Physica B](#) **256-258**, 182 (1998).
- [12] E. Majorana, [Nuovo Cim.](#) **14**, 171 (1937).
- [13] F. v. Oppen, Y. Peng, and F. Pientka, in *Topological Aspects of Condensed Matter Physics: Lecture Notes of the Les Houches Summer School: Volume 103, August 2014* (Oxford University Press, 2017).
- [14] R. Aguado, [Riv. Nuovo Cim.](#) **40**, 523 (2017).
- [15] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, [Science](#) **336**, 1003 (2012).
- [16] A. Y. Kitaev, [Phys. Usp.](#) **44**, 131 (2001).
- [17] Y. Oreg, G. Refael, and F. von Oppen, [Phys. Rev. Lett.](#) **105**, 177002 (2010).
- [18] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, [Phys. Rev. Lett.](#) **105**, 077001 (2010).
- [19] P. Marra, [J. Appl. Phys.](#) **132**, 231101 (2022).

- [20] R. Hütten, *Transport through interacting quantum dots with Majorana fermions or phonons*, PhD dissertation, Heinrich-Heine-University Düsseldorf (2013).
- [21] J. Alicea, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 076501 (2012).
- [22] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [23] P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
- [24] K. S. Novoselov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [25] R. Tarcan, O. Todor-Boer, I. Petrovai, C. Leordean, S. Astilean, and I. Botiz, *J. Mater. Chem. C* **8**, 1198 (2020).
- [26] Q. He, S. Wu, Z. Yin, and H. Zhang, *Chem. Sci.* **3**, 1764 (2012).
- [27] K. Rana, J. Singh, and J.-H. Ahn, *J. Mater. Chem. C* **2**, 2646 (2014).
- [28] A. Olabi, M. A. Abdelkareem, T. Wilberforce, and E. T. Sayed, *Renew. Sustain. Energy Rev.* **135**, 110026 (2021).
- [29] S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 407 (2011).
- [30] J.-N. Fuchs and M. Goerbig, in *Introduction to the physical properties of graphene. Lecture notes* (2008).
- [31] K. Flensberg, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 090503 (2011).
- [32] D. E. Liu and H. U. Baranger, *Phys. Rev. B* **84**, 201308 (2011).
- [33] Y. Cao, P. Wang, G. Xiong, M. Gong, and X.-Q. Li, *Phys. Rev. B* **86**, 115311 (2012).
- [34] J. P. Ramos-Andrade, P. A. Orellana, and S. E. Ulloa, *J. Phys.: Condens. Matter.* **30**, 045301 (2018).
- [35] L. S. Ricco, Y. Marques, J. E. Sanches, I. A. Shelykh, and A. C. Seridonio, *Phys. Rev. B* **102**, 165104 (2020).
- [36] M. Leijnse, *New J. Phys.* **16**, 015029 (2014).
- [37] R. López, M. Lee, L. Serra, and J. S. Lim, *Phys. Rev. B* **89**, 205418 (2014).
- [38] Q.-B. Zeng, S. Chen, L. You, and R. Lü, *Front. Phys.* **12**, 127302 (2016).
- [39] A. M. Calle, M. Pacheco, P. A. Orellana, and J. A. Otálora, *Ann. Phys.* **532**, 1900409 (2020).
- [40] A. D. K. Finck, D. J. Van Harlingen, P. K. Mohseni, K. Jung, and X. Li, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 126406 (2013).
- [41] M. T. Deng, S. Vaitiekenas, E. B. Hansen, J. Danon, M. Leijnse, K. Flensberg, J. Nygård, P. Krogstrup, and C. M. Marcus, *Science* **354**, 1557 (2016).

- [42] M.-T. Deng, S. Vaitiekėnas, E. Prada, P. San-Jose, J. Nygård, P. Krogstrup, R. Aguado, and C. M. Marcus, *Phys. Rev. B* **98**, 085125 (2018).
- [43] N. Dai and Q.-F. Sun, *Phys. Rev. B* **99**, 085436 (2019).
- [44] X.-Q. Wang, B. Wu, S.-F. Zhang, Q. Wang, and W.-J. Gong, *Ann. Physics* **415**, 168127 (2020).
- [45] X.-D. Wang, X.-Q. Wang, H.-Y. Sun, X.-F. Dai, Q. Wang, and W.-J. Gong, *Phys. Scr.* **96**, 015805 (2021).
- [46] Z.-H. Wang, *Front. Phys. (Lausanne)* **9**, 704493 (2021).
- [47] Z.-H. Wang and W.-C. Huang, *Front. Phys. (Lausanne)* **9**, 727934 (2021).
- [48] Z.-Z. Chen, R. Lü, and B.-f. Zhu, *Phys. Rev. B* **71**, 165324 (2005).
- [49] Y. Meir, N. S. Wingreen, and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 3048 (1991).
- [50] Y. Meir, N. S. Wingreen, and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2601 (1993).
- [51] G. Michałek, B. R. Bułka, T. Domański, and K. I. Wysokiński, *Phys. Rev. B* **88**, 155425 (2013).
- [52] J. Nilsson, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 120403 (2008).
- [53] C. Lacroix, *J. Phys. F: Met. Phys.* **11**, 2389 (1981).
- [54] L. Máthé, D. Sticlet, and L. P. Zárbo, *Phys. Rev. B* **105**, 155409 (2022).
- [55] H. Sun, L. Wu, W. Wei, and X. Qu, *Mater. Today* **16**, 433 (2013).
- [56] J. Martinek, Y. Utsumi, H. Imamura, J. Barnaś, S. Maekawa, J. König, and G. Schön, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 127203 (2003).
- [57] T. Aono, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 083703 (2013).
- [58] J. R. Isern-Lozano, J. S. Lim, I. Grosu, R. López, M. Crisan, and D. Sánchez, *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **227**, 1969 (2019).
- [59] S. Rodriguez, I. Grosu, M. Crisan, and I. Țifrea, *Physica E* **96**, 1 (2018).
- [60] R. Van Roermund, S.-y. Shiao, and M. Lavagna, *Phys. Rev. B* **81**, 165115 (2010).
- [61] W. G. van der Wiel, S. D. Franceschi, T. Fujisawa, J. M. Elzerman, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, *Science* **289**, 2105 (2000).
- [62] B. Uchoa, L. Yang, S.-W. Tsai, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 206804 (2009).
- [63] Z.-G. Zhu and J. Berakdar, *Phys. Rev. B* **84**, 165105 (2011).
- [64] J.-H. Chen, L. Li, W. G. Cullen, E. D. Williams, and M. S. Fuhrer, *Nat. Phys.* **7**, 535 (2010).

- [65] M. M. Ugeda, I. Brihuega, F. Guinea, and J. M. Gómez-Rodríguez, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 096804 (2010).
- [66] L. Máthé and I. Grosu, *Beilstein J. Nanotechnol.* **11**, 225 (2020).
- [67] T. Kanao, H. Matsuura, and M. Ogata, *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 063709 (2012).
- [68] M. Vojta, L. Fritz, and R. Bulla, *EPL* **90**, 27006 (2010).
- [69] T. Yanagisawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 074705 (2015).
- [70] N. S. Wingreen and Y. Meir, *Phys. Rev. B* **49**, 11040 (1994).
- [71] L. Li, Y.-Y. Ni, Y. Zhong, T.-F. Fang, and H.-G. Luo, *New J. Phys.* **15**, 053018 (2013).
- [72] A. Nozik, *Physica E* **14**, 115 (2002).
- [73] Z. Liu, C.-H. Lin, B.-R. Hyun, Z. Sher, Chin-Wei abd Lv, B. Luo, F. Jiang, T. Wu, C.-H. Ho, H.-C. Kuo, and J.-H. He, *Light Sci. Appl.* **9**, 83 (2020).
- [74] W. Xie, *Superlattices Microstruct.* **46**, 693 (2009).
- [75] W. Xie, *Superlattices Microstruct.* **48**, 239 (2010).
- [76] A. Gharaati and R. Khordad, *Superlattices Microstruct.* **48**, 276 (2010).
- [77] Y. Yakar, B. Çakır, and A. Özmen, *Opt. Commun.* **283**, 1795 (2010).
- [78] M. Tanaka, H. Yamada, T. Maruyama, and K. Akimoto, *Phys. Rev. B* **67**, 045305 (2003).
- [79] X.-L. Wang and V. Voliotis, *J. Appl. Phys.* **99**, 10.1063/1.2212056 (2006), 121301.
- [80] H. An and J. Motohisa, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 385 (2000).
- [81] L. Máthé, C. Onyenegecha, A.-A. Farcaş, L.-M. Pioraş-Țimbolmaş, M. Solaimani, and H. Hassanabadi, *Phys. Lett. A* **397**, 127262 (2021).
- [82] A. F. Nikiforov and V. B. Uvarov, *Special Functions of Mathematical Physics* (Birkhauser Boston, 1988).
- [83] C. Tezcan and R. Sever, *Int. J. Theor. Phys.* **48**, 337 (2009).



# Diseminarea rezultatelor

## Publicații în reviste ISI legate de teză

1. **L. Máthé**, Z. Kovács-Krausz, I. Botiz, I. Grosu, K. El Anouz, A. El Allati, and L. P. Zârbo\*, "Phonon-assisted tunneling through quantum dot systems connected to Majorana bound states", *Nanomater.* **13**, 1616 (2023), (DOI: [10.3390/nano13101616](https://doi.org/10.3390/nano13101616)).  
IF: 5.719  
AIS: 0.737
2. **L. Máthé\***, D. Sticlet and L. P. Zârbo, "Quantum transport through a quantum dot side-coupled to a Majorana bound state pair in the presence of electron-phonon interaction", *Phys. Rev. B* **105**, 155409 (2022), (DOI: [10.1103/PhysRevB.105.155409](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.155409)).  
IF: 3.908  
AIS: 0.977
3. **L. Máthé\***, C. P. Onyenegecha, A.-A. Farcaș, L.-M. Pioraș-Țimbolmaș, M. Solaimani and H. Hassanabadi, "Linear and nonlinear optical properties in spherical quantum dots: Inversely quadratic Hellmann potential", *Phys. Lett. A* **397**, 127262 (2021), (DOI: [10.1016/j.physleta.2021.127262](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2021.127262)).  
IF: 2.707  
AIS: 0.483
4. **L. Máthé\*** and I. Grosu, "Nonequilibrium Kondo effect in a graphene-coupled quantum dot in the presence of a magnetic field", *Beilstein J. Nanotechnol.* **11**, 225 (2020), (DOI: [10.3762/bjnano.11.17](https://doi.org/10.3762/bjnano.11.17)).  
IF: 3.649  
AIS: 0.617

## Alte publicații în reviste ISI

1. **L. Máthé** and I. Grosu\*, "Transport Through a Quantum Dot with Electron-Phonon Interaction", *Mater. Today: Proc.* **5**, 15878 (2018), (DOI: [10.1016/j.matpr.2018.06.058](https://doi.org/10.1016/j.matpr.2018.06.058)).  
IF: -  
AIS: -

\*\*\*: autor corespondent

## Participări la conferințe/workshop-uri/școli

### Prezentări orale

1. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Phonon-assisted transport in quantum dot-Majorana wire systems", exosup2022: School on Exotic Superconductivity, 13-25 June 2022, Cargèse, Corse, France (student talk)

2. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Detecting Majorana bound states in hybrid quantum dot-topological superconducting nanowire devices", 2nd Global Webinar on Materials Science and Engineering, 27 November 2021, in Webinar.
3. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Probing Majorana bound states in a quantum dot-topological superconducting nanowire ring system", 38th Global Nanotechnology Congress, 01-02 November 2021, in Webinar
4. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Quantum transport through a quantum dot side-coupled to a Majorana bound state pair in presence of electron-phonon interaction", 13th International Conference on Physics of Advanced Materials (ICPAM-13), 24-30 September 2021, Sant Feliu de Guixols, Spain
5. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Introduction to Majorana bound states: transport through a quantum dot coupled to Majorana bound states in presence of electron-phonon interaction", High Impedance Quantum Circuits, 6-10 August 2019, Villa Nante, Piedmont, Italy
6. **L. Máthé**, I. Grosu, "Thermoelectric transport through a quantum dot connected to graphene leads: Transition from the Coulomb blockade to the Kondo regime", 19th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science (IBWAP 2019), 16-19 July 2019, Constanța, Romania
7. **L. Máthé**, I. Grosu, "Splitting of the Kondo peak in a quantum dot attached to graphene contacts", 24th International Conference on Chemistry, 24-27 October 2018, Sovata, Romania

### Prezentări poster

1. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Majorana induced phonon-assisted transport in asymmetrically coupled quantum dot nanodevices", International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing (QCMC 2022), 11-15 July 2022, Lisbon, Portugal.
2. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Phonon-assisted transport in quantum dot-Majorana wire systems", exosup2022: School on Exotic Superconductivity, 13-25 June 2022, Cargèse, Corse, France.
3. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Majorana bound state signatures in current through quantum dots in the presence of electron-phonon coupling", 38th Global Nanotechnology Congress, 01-02 November 2021, in Webinar
4. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Quantum transport through a quantum dot coupled to a Majorana ring", 13th International Conference on Processes in Isotopes and Molecules (PIM 2021), 22-24 September 2021, Cluj-Napoca, Romania
5. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Phonon-assisted transport in a quantum dot coupled to a Majorana bound state", VCQ Summer School 2021-Quantum Sensing & Imaging, 06-10 September 2021, Vienna, Austria

6. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Andreev conductance through a quantum dot-Majorana ring structure", 4th Autumn School on Physics of Advanced Materials (PAMS 4), 24-30 September 2021, Sant Feliu de Guixols, Spain
7. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Quantum transport through a quantum dot coupled to a Majorana ring in the presence of phonon modes", Workshop on Quantum Information Theory and Thermodynamics at the Nanoscale, 2-6 March 2020, Al-Hoceima, Morocco
8. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Transport through a quantum dot coupled to Majorana bound states in presence of electron-phonon interaction", Conference on Signatures of Topology in Condensed Matter, 21-25 October 2019, Trieste, Italy
9. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Effect of the electron-phonon interaction on the transport properties of a quantum dot connected to Majorana bound states", 12th International Conference on Processes in Isotopes and Molecules (PIM 2019), 25-27 September 2019, Cluj-Napoca, Romania
10. **L. Máthé**, I. Grosu, "Graphene-based single electron transistor: transition from the Coulomb blockade to Kondo effect", Interfaces in Organic and Hybrid Thin-Film Optoelectronics (INFORM-19), 5-7 March 2019, Valencia, Spain
11. **L. Máthé**, I. Grosu, "Kondo Resonance splitting in a graphene-based quantum dot", 10th International Conference on Nanomaterials –R&A (NANOCON 2018), 17-19 October 2018, Brno, Czechia
12. **L. Máthé**, I. Grosu, "Nonequilibrium Kondo effect in a quantum dot coupled to graphene electrodes in presence of a magnetic field", 12th International Conference on Physics of Advanced Materials (ICPAM-12), 22-28 September 2018, Heraklion, Greece
13. **L. Máthé**, I. Grosu, "Transport through a strongly interacting quantum dot coupled to graphene electrodes", 3rd International Conference on Nanomaterials: Fundamentals and Applications (NFA 2017), 9-11 October 2017, Štrbské Pleso, Slovakia

### **Participări la școli**

1. **L. Máthé**, School on Quantum Information Theory and Thermodynamics at the Nanoscale, 24-28 February 2020, Al-Hoceima, Morocco

### **Alte prezetări poster**

1. **L. Máthé**, I. Grosu, "Transport through a quantum dot with electron-phonon interaction", 2nd Autumn School on Physics of Advanced Materials (PAMS-2), 8-14 September 2016, Cluj-Napoca, Romania

### **Premii**

1. **L. Máthé**, D. Sticlet, L. P. Zârbo, "Andreev conductance through a quantum dot-Majorana ring structure", 4th Autumn School on Physics of Advanced Materials (PAMS 4), 24-30

September 2021, Sant Feliu de Guixols, Spain - **Premiul Sponsorului** oferit de American Elements

2. **L. Máthé**, I. Grosu, "Nonequilibrium Kondo effect in a quantum dot coupled to graphene electrodes in presence of a magnetic field", 12th International Conference on Physics of Advanced Materials (ICPAM 12), 22-28 September 2018, Heraklion, Greece - **Premiul Nicolae Sulitanu** oferit de Alina Sulitanu

## Activitate didactică

1. 2016-2017 și 2017-2018: Predarea seminarului **Fizica solidului** pentru studenții din anul al treilea, la Facultatea de Fizică, Universitatea Babeș-Boyai
2. 2016-2017 și 2017-2018: Predarea seminarului **Electricitate și magnetism** pentru studenții din primul an, la Facultatea de Fizică, Universitatea Babeș-Boyai

## Finanțări și granturi

1. PN-III-P1-1.2-PCCDI-2017-0338/79PCCDI/2018 (QUTECH-RO): "Developing Quantum Information and Quantum Technologies in Romania".
2. PN-III-P1-1.1-TE-2019-0423/TE98/08.09.2020: "Superconducting phases and quantum transport in two-dimensional transition metal dichalcogenides".
3. MCID through the "Nucleu" Program within the National Plan for Research, Development and Innovation 2022–2027, project PN 23 24 01 04.
4. MCID through PNCDI III-Program 1-Development of the National Research and Development System, Subprogram 1.2-Institutional Performance-Funding Projects for Excellence in RDI, Contract No. 37PFE/30.12.2021.