Analyse der lokalen Zustandsdichte

der Kitaev-Kette

von

Stephan Kessler

Bachelorarbeit in Physik vorgelegt dem Fachbereich Physik, Mathematik und Informatik (FB 08) der Johannes Gutenberg-Universität Mainz am 6. August 2019

Gutachterin: Dr. Karin Everschor-Sitte
 Gutachter: Prof. Dr. Yuriy Mokrousov

Ich versichere, dass ich die Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie Zitate kenntlich gemacht habe.

Mainz, den

Stephan Kessler TWIST Group Institut für Physik Staudingerweg 7 Johannes Gutenberg-Universität D-55099 Mainz skessl@students.uni-mainz.de

Abstract

In ferromagnetischen Supraleitern kann es zur Existenz von sogenannten Majoranateilchen kommen, die mit ihren Eigenschaften einen wichtigen Beitrag zu einem topologischen Quantencomputer leisten können. Im Modell der Kitaev-Kette kann dies theoretisch veranschaulicht und beschrieben werden. Dazu möchten wir in der folgenden Bachelorarbeit untersuchen, wie sich die einzelnen Zustände abhängig von ihrer Position in der Kette beziehungsweise von ihrem Impuls und ihren Systemparametern verhalten. Dies haben wir durch die Betrachtung der lokalen und totalen Zustandsdichte und der Spektralfunktion des Systems ermöglicht. Auch wurden verschiedene Varianten dieser Funktionen durch unterschiedliche Näherungen implementiert, um diese auch nach experimentellen Methoden untersuchen zu können. Hierfür schauten wir uns verschiedene Verbreiterungsmechanismen der Delta-Distribution an, welche zu einer Gauß-, einer Lorentzkurve oder einer temperaturabhängigen Näherung führen. Schließlich betrachten wir mit den implementierten Funktionen, wie sich die einzelnen Zustände als Funktion der Temperatur verändern.

Ziel der Untersuchungen war es herauszufinden, wann welche Energiezustände und insbesondere die Majoranamoden besetzt sind. Wir konnten sehen, dass die lokale Zustandsdichte und die Spektralfunktion ein gut geeignetes Werkzeug sind, das System nach ihren Ortsabhängigkeiten und ihrer Bandstruktur zu untersuchen. Dabei beobachteten wir den Einfluss der einzelnen Parameter und auch des Spins auf das System. Wir bestätigten, dass die Zustände in bestimmten Abhängigkeiten ihrer Systemparameter eine oszillierende Aufenthaltswahrscheinlichkeit aufweisen. Die Majoranamoden sind hierbei vorwiegend am Rand der Kette lokalisiert und haben eine Bandlücke zu den anderen Zuständen. Auch konnte man sehen, dass die Kettenlänge keinen Einfluss auf die Oszillationen hat und mit steigender Spin-Bahn-Kopplung die Bandlücke größer wird. Schließlich betrachteten wir die Abhängigkeiten von der Temperatur und auch die Existenz einer optimalen Temperatur, bei der die Majoranamoden besonders vorteilhaft besetzt sind.

Mit den vorliegenden Ergebnissen ist es möglich, den Vergleich mit experimentellen Messungen zu erleichtern, da die lokale Zustandsdichte beispielsweise mithilfe der Rastertunnelmikroskopie direkt ermittelt werden kann.

Inhaltsverzeichnis

1	Einl	eitung		6					
2	Mec 2.1 2.2	:hanism Zusam Minim	us der Kitaev-Kette menhang zwischen Majoranas und Fermionen	7 7 7					
3	Methoden								
	3.1	Hamil	ton-Operator des Systems	10					
	3.2	Zustar	ndsdichte	11					
		3.2.1	Allgemeine Definitionen	12					
		3.2.2	Definitionen in unserem System	12					
		3.2.3	Näherungen der Delta-Distribution	15					
4	Erge	ebnisse		19					
•	4.1	Allgen	neine Ergebnisse	19					
	4.2 Untersuchung der Bandstruktur und Notwendigkeit von Magnetfeld u								
		Bahn-Kopplung	22						
		4.2.1	Einfluss des Paarpotentials	23					
		4.2.2	Einfluss des Magnetfelds	24					
		4.2.3	Einfluss der Spin-Bahn-Kopplung	25					
	4.3	Besetzungen der jeweiligen Spinkonfiguration							
	4.4	4 Abhängigkeiten der Parameter und Öszillationen der Majoranamoden 2							
		4.4.1	Variation des chemischen Potentials	27					
		4.4.2	Variation des Magnetfelds	28					
		4.4.3	Variation der Spin-Bahn-Kopplung	29					
		4.4.4	Variation der Kettenlänge	30					
	4.5	Tempe	eraturabhängigkeit des Systems	32					
		4.5.1	Allgemeine Beschreibung	32					
		4.5.2	Bestimmung einer optimalen Temperatur	33					
5	Zusa	ammen	fassung und Ausblick	37					
6	Anhang								
	6.1	Code		40					
		6.1.1	Implementierte Funktionen	40					
		6.1.2	Funktionen zum Plotten	48					
	6.2	Variat	ion der Systemparameter	49					
		6.2.1	Variation des chemischen Potentials	49					

Inhaltsverzeichnis

	6.2.2	Variation des Magnetfelds	50
	6.2.3	Variation der Spin-Bahn-Kopplung	51
6.3	Modifi	zierung des chemischen Potentials	52
6.4	Ketter	nsymmetrie	53
6.5	Techni	ische Details der Implementierung	53
	6.5.1	Festlegen der diskreten Energien	53
	6.5.2	Transformation in den Impulsraum	53

1 Einleitung

In der momentanen Forschung wird die Entwicklung eines Quantencomputers, welcher klassische Computer übertrifft, als großer Durchbruch angesehen. Im Falle eines topologischen Quantencomputers, bei dem erwartet wird, dass er dies leisten kann, ist jedoch noch weitere Forschung im Hinblick auf die Manipulation seiner Elemente notwendig. Eine Möglichkeit, diese Elemente nach einer Quantenrechnung auszulesen, ist die Analyse der elektronischen Zustände. Die lokale Zustandsdichte ist hierfür ein gut geeignetes Werkzeug und wird daher in dieser Bachelorarbeit genauer untersucht.

Ein Weg, um topologisches Quantenrechnen durchzuführen, könnte die Verwendung eines topologischen Supraleiters sein. Solche Supraleiter wurden erstmals von Kitaev im Jahr 2001 [1] mithilfe eines minimalen Modells untersucht, wobei eine triplettartige Paarung der Elektronen im Supraleiter angenommen wurde. Dieses minimale Modell zeigt den grundlegenden Mechanismus, welcher für die Existenz von Majoranamoden zuständig ist. Diese Moden haben besondere Eigenschaften wie zum Beispiel, dass sie ihre eigenen Antiteilchen [2] sind und eine nicht Abelsche Vertauschungsstatistik besitzen, welche sie für das topologische Quantenrechnen nutzbar macht [3]. Ausgehend von diesem Modell von Kitaev zeigte man, dass Majoranamoden auch in anderen Festkörpersystemen gefunden werden können. Eine der Pionierarbeiten hierzu wurde von Kane und Fu verfasst und zeigte die Existenz dieser Moden in einer Heterostruktur aus einem topologischen Isolator und einem Supraleiter mit Singulett Paarung [4]. Als weiteren Schritt zeigten Sau et al. [5], dass der topologische Isolator auch durch einen Halbleiter ersetzt werden kann.

In der folgenden Bachelorarbeit möchten wir ein solches System insbesondere mit seinen Majoranamoden genauer betrachten. In Kapitel 2 möchten wir hierbei zunächst das Thema mithilfe eines minimalen Modells von Kitaev einführen, um den Mechanismus hinter der Lokalisierung von Majoranamoden zu verstehen. In Kapitel 3 betrachten wir dann jedoch die Kitaev-Kette bestehend aus einem Ferromagneten und einem Supraleiter mit Singulett-Paarung und Spin-Bahn-Kopplung.

In Kapitel 4 untersuchen wir anschließend die Zusammensetzung und Eigenschaften unseres Systems, indem wir die Werte der Systemparameter variieren und die einzelnen Spinkonfigurationen betrachten. Zuletzt gehen wir auf die Temperaturabhängigkeit der Energiezustände ein und bestimmen eine optimale thermische Energie, bei der die Majoranas möglichst bevorzugt sind.

2 Mechanismus der Kitaev-Kette

Im minimalem Modell von Kitaev können wir den generellen Mechanismus der Lokalisation von Majoranamoden verstehen. So möchten wir im Folgenden die Zusammensetzung und Eigenschaften von diesem erläutern (in Anlehnung an [6]), bevor wir im nächsten Kapitel das komplexere System aus einem Supraleiter und einem Ferromagneten betrachten.

2.1 Zusammenhang zwischen Majoranas und Fermionen

Ein fermionischer Zustand $|1\rangle$ kann durch seinen Erzeugungsoperator c^{\dagger} und seinen Vernichtungsoperator c beschrieben werden. Hierbei gelten die folgenden Relationen mit dem Vakuumzustand $|0\rangle$:

$$c^{\dagger} |0\rangle = |1\rangle, c^{\dagger} |1\rangle = 0, c |0\rangle = 0 \text{ und } c |1\rangle = |0\rangle.$$
 (2.1)

Diese können wir nun durch Real- und Imaginärteil mithilfe zweier Operatoren γ_1 und γ_2 ausdrücken.

$$c^{\dagger} = \frac{1}{2}(\gamma_1 + i\gamma_2), \ c = \frac{1}{2}(\gamma_1 - i\gamma_2).$$
 (2.2)

Diese sind die sogenannten Majorana
operatoren, die durch die obige Transformation die Eigenschaft
 $\gamma = \gamma^{\dagger}$ besitzen. Sie sind somit ihre eigenen Antiteil
chen, weswegen eine Majoranamode die Energie E = 0 haben muss.

Ein Fermion kann folglich immer durch zwei Majoranas dargestellt werden, was jedoch auch bedeutet, dass diese lediglich in gerader Anzahl vorkommen können.

Auf den ersten Blick kann man aus den letztgenannten Eigenschaften folgern, dass Majoranas folglich nur im gebundenen Zustand eines Fermions und somit nicht als einzelnes Teilchen existieren. Allerdings können wir im nächsten Abschnitt beobachten, dass es durch eine spezielle Anordnung der Moden auch zu separaten Majoranas kommen kann.

2.2 Minimales Modell der Kitaev-Kette

Im minimalem Modell betrachten wir ein System eines eindimensionalen supraleitenden Drahts. Dieser wird durch den folgenden Hamilton-Operator beschrieben:

$$\mathbf{H} = -\mu \sum_{n} c_{n}^{\dagger} c_{n} - t \sum_{n} (c_{n+1}^{\dagger} c_{n} + \text{h.c.}) + \Delta \sum_{n} (c_{n} c_{n+1} + \text{h.c.}).$$
(2.3)

Die Systemparameter μ , t und Δ beschreiben hierbei das chemische Potential, das Elektronenhüpfen und das Paarpotential.

2 Mechanismus der Kitaev-Kette

Das minimale Modell kann mithilfe einer Kette aus N Gliedern, an denen jeweils ein Fermion mit Erzeugungsoperator c_n^{\dagger} beziehungsweise zwei Majoranas mit γ_{2n-1} und γ_{2n} positioniert sind, beschrieben werden. In Abbildung (2.1) wird diese Situation für N = 4 mithilfe von Dominos veranschaulicht.

γ_1	γ_2	γ_3	γ_4	γ_5	γ_6	γ_7	γ_8
•	•	•	•		•	•	•
<u>n</u> =	= 1	<u>n</u> =	= 2	<u>n</u> =	= 3	n	= 4

Abbildung 2.1: Veranschaulichung des minimalem Modells mithilfe von Dominosteinen: Ein Stein repräsentiert hierbei ein Kettenglied mit einem Fermion, während die Punkte jeweils für ein Majorana stehen [6].

Es gibt dabei zwei grundlegende Varianten, wie wir die Majoranamoden koppeln können. In Abbildung (2.2) ist das System im Grenzfall $\Delta = t = 0$ und $\mu \neq 0$ dargestellt. Dies ist innerhalb der sogenannten trivialen Phase, bei der es zu keinen ungekoppelten Majoranas kommt. Der Hamilton-Operator ist nach Einsetzen der Majoranaoperatoren aus Gleichung (2.2) gegeben durch:

$$H_{\text{trivial}} = (i/2) \, \mu \, \sum_{n=1}^{N} \gamma_{2n-1} \gamma_{2n}.$$
(2.4)

Im Limit $\Delta = t$ und $\mu = 0$ (Abbildung (2.3)) können wir das System in der topologischen Phase beobachten. Dies bedeutet, dass es zur Existenz von Majoranas kommt. Durch erneutes Einsetzen der Majoranaoperatoren kommen wir auf den folgenden Hamilton-Operator für diese Situation:

$$H_{\text{topologisch}} = it \sum_{n=1}^{N-1} \gamma_{2n} \gamma_{2n+1}.$$
 (2.5)



Abbildung 2.2: Kopplung der Majoranas innerhalb der Kettenglieder: Die Majoranas sind hierbei alle gekoppelt und es kommt zu keiner separaten Majoranamode [6].

In einem eindimensionalen Draht kann es folglich zu Majoranamoden kommen. Um das System genauer beschreiben zu können, ist eine numerische Lösung des Hamilton-Operators sinnvoll. Dazu betrachten wir das System im Bogoliubov-de-Gennes-Formalismus (BdG-Formalismus) [7], der den Hamilton-Operator in der Basis der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $C = (c_1, \ldots, c_N, c_1^{\dagger}, \ldots, c_N^{\dagger})^T$ darstellt. Es gilt folglich:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}C^{\dagger}\mathbf{H}_{\mathrm{BdG}}C.$$
 (2.6)

2 Mechanismus der Kitaev-Kette



Abbildung 2.3: Kopplung der Majoranas zwischen den benachbarten Kettengliedern: An den Rändern der Kette kommt es jeweils zu einer Majoranamode (γ_1/γ_8) , die aufgrund ihrer Lokalisation nicht miteinander koppeln können [6].

Durch Diagonalisieren des H_{BdG} können wir nun die Energieeigenwerte und -eigenvektoren des Systems bestimmen. Durch die Transformation in den H_{BdG} -Formalismus betrachten wir jeweils die Energiedifferenzen zum Vakuumzustand und bekommen zusätzlich Zustände für die zugehörigen Löcher der Elektronen (negative Energiezustände).



Abbildung 2.4: In (a) sind die Energieeigenwerte des H_{BdG} bei Variation des Systemparameters μ beginnend im topologischen System bei $\Delta = t$ und $\mu = 0$ für N = 10 gezeigt. Die Majoranamoden sind bei der Nullenergie bis $\mu \approx 2t$ zu beobachten. In (b) ist die Besetzung der Majoranamoden abhängig von ihrer Position bei $\mu = 0$ dargestellt. Diese besetzen jeweils zu 50% die Zustände an den Rändern, die in der Mitte dahingegen nicht (in Anlehnung an [6]).

Um zu überprüfen, ob die Existenz von Majoranas nicht nur eine fein abgestimmte Lösung ist, betrachten wir in Abbildung (2.4a) die Energieeigenwerte in Abhängigkeit von μ . Für einen recht großen Bereich können wir hierbei Majoranamoden beobachten, weswegen wir folglich von einer topologischen Phase sprechen können, die allmählich bei $\mu \approx 2t$ in eine triviale Phase übergeht. Zusätzlich sind diese durch eine große Bandlücke stabil, welche nur allmählich beim Übergang der Phasen kleiner wird.

Abbildung (2.4b) bestätigt unsere Anschauung, dass die Majoranas jeweils am Rand der Kette lokalisiert sind.

Durch diese Eigenschaften wird deutlich, weshalb der betrachtete Mechanismus besonders interessant ist und wir im Folgenden ein solches System betrachten möchten.

Nachdem wir uns im letzten Kapitel mithilfe des minimalen Modells von Kitaev mit dem Mechanismus zur Realisierung von Majoranamoden befasst haben, möchten wir in diesem Kapitel nun ein System bestehend aus einem Supraleiter und einem Ferromagneten untersuchen, wobei Letzterer als ein externes Magnetfeld angenommen wird. Unsere Betrachtungen beziehen sich hierbei auf die Grenzschicht zwischen diesen, in der es zu einer topologischen Phase kommen kann. Wir können folglich von einem topologischen Supraleiter sprechen. In dieser Arbeit betrachten wir diese lediglich in einer Dimension (Abbildung(3.1)).



Abbildung 3.1: System bestehend aus einem Ferromagneten (blau) und einem Supraleiter (rot). Die Pfeile geben die Richtung des Magnetfelds an (z-Richtung). Die Ausdehnung in y-Richtung ist hierbei annähernd 0, wodurch die Grenzschicht (violett) als 1D-System angenommen werden kann [8].

3.1 Hamilton-Operator des Systems

Das im letzten Abschnitt beschriebene System wird mithilfe des folgenden Hamilton-Operators mathematisch beschrieben [9]:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} \left(\boldsymbol{c}_{i}^{\dagger} \boldsymbol{c}_{j} + h.c. \right) - \mu \sum_{i} \boldsymbol{c}_{i}^{\dagger} \boldsymbol{c}_{i} - \sum_{i} \boldsymbol{c}_{i}^{\dagger} \left(\boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \boldsymbol{c}_{i} + i \alpha_{\mathrm{R}} \sum_{\langle ij \rangle} \left(\boldsymbol{c}_{i}^{\dagger} \hat{\boldsymbol{z}} \cdot \left(\hat{\boldsymbol{d}}_{ij} \times \boldsymbol{\sigma} \right) \boldsymbol{c}_{j} + h.c. \right) + \sum_{i} \left(\Delta c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} + h.c. \right).$$

$$(3.1)$$

Hierbei sind i und j jeweils Gitterpunkte, wobei die Summation über $\langle ij \rangle$ sich auf die benachbarten Punkte bezieht und über alle N Gitterpunkte ausgeführt wird. Dazu ist \hat{d}_{ij} ein Einheitsvektor zwischen den Stellen von i und j.

Dazu gilt $c_i^{\dagger} = (c_{i\uparrow}^{\dagger}, c_{i\downarrow}^{\dagger})$, wobei der Pfeil nach oben für Spin up und der nach unten für Spin down steht.

Im Vergleich zum Hamilton-Operator des minimalen Modells (Gleichung (2.3)) wurde hier der Spin eingeführt, indem wir mithilfe der Pauli-Matrizen eine weitere Entartung des Systems hinzugefügt haben. Auf diesen wirken nun die neu eingeführten Systemparameter h für das Magnetfeld des Ferromagneten und $\alpha_{\rm R}$ für die Rashba Spin-Bahn-Kopplung im Supraleiter, die eine impulsabhängige Aufspaltung der Spinzustände bewirkt. Das Paarpotential Δ wirkt jetzt lediglich auf Elektronen im Supraleiter desselben Kettenglieds (Singulett-Paarung) statt wie beim minimalen Modell von Kitaev auf die benachbarten (Triplett-Paarung). Den Einfluss der letztgenannten Parameter auf die Zusammensetzung unseres Systems wird in Kapitel 4.2 näher untersucht.

Das chemische Potential μ sowie das Elektronenhüpfen t sind wie im Hamilton-Operator des minimalen Modells in Gleichung (2.3) definiert.

Im Folgenden drücken wir die Parameter unseres Systems in Abhängigkeit des Parameters t aus. Zur Berechnung der Energieeigenwerte und -vektoren geht man nun analog zur Berechnung in Kapitel 2.2 vor, indem man den Hamilton-Operator im BdG-Formalismus darstellt. Die Basis der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ist nun durch $C = (c_{11\uparrow}, c_{11\downarrow}, c_{21\uparrow}, c_{21\downarrow}, ..., c_{N_xN_y\uparrow}, c_{N_xN_y\downarrow}, c_{11\uparrow}^{\dagger}, c_{11\downarrow}^{\dagger}, c_{21\uparrow}^{\dagger}, c_{21\downarrow}^{\dagger}, ..., c_{N_xN_y\uparrow}^{\dagger}, c_{N_xN_y\downarrow})^T$ gegeben. Daran kann man erkennen, dass wir unsere Basis durch sogenannte Löcher (Abwesenheit von Elektronen) erweitert haben. Durch diese Vergrößerung der Basis können die Energieeigenwerte und -vektoren unseres Systems in Bezug auf den Vakuumzustand durch Diagonalisierung des Hamiltonians erhalten werden. Der Hamilton-Operator und die Diagonalisierung des Systems waren in dieser Form bereits implementiert [8]. Darauf aufbauend nutzen wir diese Energieeigenwerte und -vektoren, um die Zustandsdichte zu berechnen.

Die Bedingung für die topologische Phase ist nun nicht mehr allein abhängig vom chemischen Potential, sondern auch vom Magnetfeld und dem Paarpotential, und gegeben durch [10]:

$$\mu_1 = \pm \sqrt{(h)^2 - (\Delta)^2} - 2, \quad \mu_2 = \pm \sqrt{(h)^2 - (\Delta)^2} + 2,$$
 (3.2)

wobei μ_1 und μ_2 jeweils die obere beziehungsweise untere Grenze angeben.

3.2 Zustandsdichte

Die numerische Berechnung der Zustandsdichte und insbesondere der lokalen Zustandsdichte ist die Methode, welche im Rahmen dieser Bachelorarbeit in die vorhandene Software integriert wurde und im Folgenden zur Analyse unseres Systems verwendet wird. Sie ist ein nützliches Werkzeug, um Informationen der einzelnen Zustände auf einen Blick untersuchen zu können. Je nachdem, ob wir die totale Zustandsdichte, die lokale Zustandsdichte oder die Spektralfunktion betrachten, erhalten wir eine Aussage über die Gesamtanordnung, die Orts- oder die Impulsabhängigkeiten der Energieniveaus. Zunächst möchten wir die Zustandsdichte allgemein einführen, bevor wir uns mit den Definitionen unseres Systems und den Eigenschaften der einzelnen Funktionen befassen.

3.2.1 Allgemeine Definitionen

Man betrachte eine Menge an Eigenwerten $\{E_1, ..., E_i, ..., E_N\}$ mit den Eigenvektoren $\{\psi_1, ..., \psi_i, ..., \psi_N\}$. Die Eigenvektoren seien nun wie folgt in einer Basis aus Zuständen s dargestellt:

$$|\psi_i\rangle = \sum_s c_s^{(i)} |\varphi_s\rangle \tag{3.3}$$

mit

$$c_s^{(i)} = \langle \varphi_s | \psi_i \rangle \tag{3.4}$$

und

$$\sum_{s} |c_s^{(i)}|^2 = 1. \tag{3.5}$$

Totale/lokale Zustandsdichte

Die Zustandsdichte gibt an, wieviele Zustände pro Energieintervall dE auftreten und somit wie stark eine Energie E besetzt ist.

Die totale Zustandsdichte (DOS) bezieht sich auf das ganze System und ist wie folgt definiert:

$$n(E) = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i} \delta(E - E_i).$$
(3.6)

Hierbei ist N die Anzahl der Zustände unseres Systems, δ die Delta-Distribution und i der Index des jeweiligen Zustandes.

Eine lokale Zustandsdichte (LDOS), die sich lediglich auf einen Zustand $|\varphi_s\rangle$ bezieht, kann nun wie folgt beschrieben werden:

$$n_s(E) = \sum_i |c_s^{(i)}|^2 \cdot \delta(E - E_i).$$
(3.7)

Lokale und totale Zustandsdichte sind durch folgende Beziehung verknüpft:

$$n(E) = \frac{1}{N} \sum_{s} n_s(E).$$
 (3.8)

Die Zustandsdichte ist folglich eine Funktion, die angibt, wie stark ein Energiewert besetzt ist.

3.2.2 Definitionen in unserem System

Wie im Kapitel 3.1 bereits beschrieben, betrachten wir in unserem System den Spin der Elektronen wie auch eine um Löcher erweiterte Basis, was dem BdG-Formalismus entspricht. Das heißt wir haben $N = 4 \cdot N_x \cdot N_y$ Eigenwerte mit N Eigenvektoren, die in der Basis der Erzeugungsoperatoren der Elektronen C (siehe Abschnitt 3.1) dargestellt

sind. Hierbei ist in unserem betrachteten System $N_y = 1$. Die Vorfaktoren $c_s^{(i)}$ aus Gleichung (3.3) werden im Folgenden mit u für Elektronen und v für Löcher beschrieben, welche die Einträge der jeweiligen Eigenvektoren bilden. Dazu werden die Vorfaktoren für die unterschiedlichen Spinrichtungen zusammengenommen, da diese zum selben Ortszustand beitragen.

Berücksichtigen wir dabei Elektronen und Löcher, bleiben wir im H_{BdG} -Formalismus. Da jedoch lediglich die Elektronen physikalisch relevant sind, werden in der elektronischen Konfiguration die Vorfaktoren für die Löcher vernachlässigt. Hierbei wird jedoch die Teilchen-Loch-Symmetrie des Systems gebrochen.

Im Folgenden möchten wir unsere Ergebnisse in der elektronischen Konfiguration darstellen. Für die Zustandsdichte kann es jedoch auch sinnvoll sein, die Darstellung im H_{BdG} -Formalismus zu wählen, um Sachverhalte einfacher darzustellen.

Dabei wird nun zwischen der totalen Zustandsdichte, der lokalen Zustandsdichte und der Spektralfunktion unterschieden.

Lokale/Totale Zustandsdichte

Mit der Zustandsdichte ist es in unserem System möglich, Informationen über die Natur der elektronischen Zustände zu erhalten. Sie gibt an, wie stark ein bestimmter Energieeigenwert besetzt ist.

Die lokale Zustandsdichte bezieht sich hierbei auf ein bestimmtes Kettenglied. Allerdings können wir diese auch als Funktion ihrer Position in einer zweidimensionalen Visualisierung darstellen und somit die Energieabhängigkeiten in der ganzen Kette auf einen Blick untersuchen. Auf diese Weise erhalten wir viele Informationen über die Orts- und Energieabhängigkeiten in einer Abbildung.

Darüber hinaus kann es von Interesse sein, die Energieabhängigkeiten des Gesamtsystems zu betrachten. Dies können wir mithilfe der totalen Zustandsdichte abbilden.

Mit den obigen Annahmen kommen wir auf die folgende Darstellung der elektronischen lokalen Zustandsdichte für den Zustand am Ort \vec{r} [11]:

$$n_{\vec{r}}(E) = \sum_{E_i,\sigma} |u_{i\vec{r}\sigma}|^2 \cdot \delta(E - E_i).$$
(3.9)

Hierbei summieren wir über den Spin σ und die Eigenwerte E_i. Dazu werden die Vorfaktoren u für die elektronische Konfiguration betrachtet, jedoch spielen auch weiterhin die Löcher (E<0) eine Rolle, die somit angeben, wie stark ein Elektron nicht besetzt ist.

Da Gleichung (3.6) im BdG-Formalismus jedoch die totale Zustandsdichte für Elektronen und Löcher angibt, definieren wir hierfür die elektronische Zustandsdichte durch die Verknüpfung zur lokalen Zustandsdichte (siehe Gleichung (3.8)):

$$n(E) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}} n_{\vec{r}}(E).$$
(3.10)

Die totale Zustandsdichte im elektronischen Formalismus gibt auf diese Weise an, wie stark die Elektronen bezogen auf das gesamte System abhängig von ihrer Energie besetzt sind.

Für die totale Zustandsdichte im H_{BdG} -Formalismus können wir weiterhin die einfachere Darstellung aus Gleichung (3.6) wählen. Mit dieser können wir zwar nicht die tatsächliche Stärke der Besetzung angeben, jedoch ist hiermit die Anzahl der entarteten Zustände besser zu erkennen.

Spektralfunktion

Die lokale Zustandsdichte im Impulsraum ist die sogenannte Spektralfunktion, die folglich die Besetzungen der einzelnen Energien abhängig des Impulses in Beziehung setzt. Im Folgenden stellen wir auch diese in einer zweidimensionalen Abbildung dar, um so die Energieabhängigkeiten über das komplette Impulsspektrum bestimmen zu können. Mit ihr ist es so möglich, die Bandstruktur unseres Systems zu analysieren. Diese ist gegeben durch [11]:

$$A(E,k) = \sum_{E_i,\sigma} |u_{ik\sigma}|^2 \cdot \delta(E - E_i).$$
(3.11)

Zur Berechnung der Spektralfunktion haben wir zunächst die Transformation des Hamiltonian in den k-Raum als Funktion vom Impuls k implementiert. Es gilt hierbei [6]:

$$H(k) = \langle k | H_{BdG} | k \rangle \tag{3.12}$$

 mit

$$|k\rangle = (N)^{-1/2} \sum_{n=1}^{N} e^{-ikn} |n\rangle$$
 (3.13)

und

$$n\rangle = (0, ..., 1, ..., 0)^T,$$
 (3.14)

wobei die 1 an der n-ten Stelle steht.

Bei dieser Transformation wird angenommen, dass die Kette zu einem Ring verbunden wird, wodurch es keine Majoranas mehr an den Rändern geben kann und der Hamilton-Operator 2π -periodisch wird.

Wir erhalten somit im Gegensatz zu der vorherigen Darstellung ein kontinuierliches Spektrum für k-Werte zwischen $-\pi$ und π .

Temperaturabhängigkeit

Die Temperatur T kann die Eigenschaften des Systems signifikant beeinflussen. Deren Abhängigkeiten können mithilfe der Fermi-Dirac-Statistik beschrieben werden, da wir Elektronen, also Fermionen, betrachten.

Die Besetzungswahrscheinlichkeit wird hierbei durch die Fermi-Verteilung, die Werte zwischen 0 und 1 annimmt, modifiziert:

$$W(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_{\rm B}T}\right) + 1}.$$
(3.15)

Hierbei ist k_B die Boltzmann-Konstante. In der Abbildung (3.2) können wir ihren Verlauf für verschiedene Temperaturen für ein chemisches Potential $\mu = 1$ betrachten.



Abbildung 3.2: Fermifunktion für verschiedene Temperaturen.

Der Systemparameter μ ist hierbei eine charakteristische Größe: Er ist der Wendepunkt der Fermi-Verteilung, welcher an dieser Stelle immer den Wert 1/2 besitzt. Für T ≈ 0 können wir hierbei beobachten, dass die Zustände bis zur Energie des chemischen Potentials voll besetzt sind, an der es zu einer scharfen Trennung kommt und die höheren Energien somit nicht besetzt sind. Durch Erhöhung der thermischen Energie des Systems wird dieser Übergang allmählich flacher, sodass im Grenzfall T $\rightarrow \infty$ jede Energie im betrachteten Bereich einen Wert von etwa 1/2 erreicht.

Die Teilchendichte in Abhängigkeit der Temperatur können wir demnach berechnen, indem wir sie mit der Zustandsdichte D(E) multiplizieren:

$$\langle n(E) \rangle = W(E) \cdot D(E).$$
 (3.16)

Diese Formel wenden wir anschließend für unsere drei Zustandsdichten (totale/lokale Zustandsdichte, Spektralfunktion) an und erhalten somit die dazugehörigen temperaturabhängigen Größen.

3.2.3 Näherungen der Delta-Distribution

In den obigen Definitionen wird die Delta-Distribution verwendet, welche jedoch mathematisch eine unendliche Höhe und keine Breite hat. Allerdings ist es bei der Zustandsdichte von besonderem Interesse, wie stark die verschiedenen Zustände besetzt sind. Jedoch geht diese Information durch die unendliche Höhe in der mathematischen

Definition verloren. Zusätzlich möchten wir in unserem Modell Verbreiterungsmechanismen berücksichtigen. So ist es sinnvoll, die Delta-Distribution mit Funktionen zu nähern, die ihre Eigenschaften näherungsweise erfüllen und gleichzeitig die Physik wiedergeben. In der Implementierung wurden so drei verschiedene Näherungsfunktionen (Gauß-Funktion, Lorentzkurven und temperaturabhängige Näherung) genutzt, mit denen man je nach Messungsart und Verbreiterungsmechanismen die lokale Zustandsdichte bestimmen kann. Diese Funktionen haben alle den Flächeninhalt 1 und werden im Folgenden näher erläutert.

Näherungsfunktion	$\delta(E)$	Höhe $h = \delta(0)$	Breite b
Lorentzkurve	$\frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{E^2 + \Gamma^2}$	$rac{1}{\pi\cdot\Gamma}$	2Γ
Gaußkurve	$\sqrt{\frac{ln(2)}{\pi\Gamma^2}} \cdot \exp\left(\frac{-E^2 \cdot ln(2)}{\Gamma^2}\right)$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi ln(2)\Gamma^2}}$	2Γ
Temperaturabhängig [12]	$\frac{exp\left(\frac{E}{k_{\rm B}T}\right)}{k_{\rm B}T \cdot \left(exp(\frac{E}{k_{\rm B}T}) + 1\right)^2}$	$rac{1}{4k_{ m B}T}$	$2k_{\rm B}{\rm T}\cdot(3+2\sqrt{2})$

Fabelle 3.1: Näherungen	der	Delta-Distribution in	m Verg	gleich
-------------------------	----------------------	-----------------------	--------	--------

Lorentzkurven bzw. Gaußkurven treten häufig bei Verbreiterungsmechanismen wie beispielsweise der Phononen- oder der Dopplerverbreiterung auf. Der Parameter Γ gibt an, wie schmal bzw. hoch der Peak ist. Im Grenzfall $\Gamma \to 0$ nähern sich die beiden Kurven der Delta-Distribution an.

Die Ableitung der Fermi-Funktion ist eine temperaturabhängige Funktion, die beispielsweise bei einer Messung in der Rastertunnelmikroskopie vorkommt [13], bei der es unter anderem auch möglich ist, Elektronen aufzunehmen, und welche somit zur Messung der lokalen Zustandsdichte geeignet ist. Diese Funktion ist abhängig von der thermischen Energie k_BT und nähert sich für $k_BT \rightarrow 0$ der Delta-Distribution an.

Die genannten Näherungskurven sind in Abbildung (3.3) im Vergleich für eine Breite von 0.001 dargestellt. Hierbei sind zwar kleine, aber trotzdem sichtbare Unterschiede zwischen den Funktionen zu erkennen. Vor allem die Höhe der einzelnen Peaks ist unterschiedlich, wodurch unter anderem starke Intensitätsunterschiede erkennbar sein können. In der Darstellung der Zustandsdichte möchten wir im Folgenden die Funktionen durch ihre Höhe normieren, sodass ein Peak der Höhe 1 einem vollbesetzten Zustand entspricht. Um genauer zu sehen, welche Parameterwahl für unsere Anwendungen geeignet ist, betrachten wir bereits im Vorhinein die lokale Zustandsdichte für eine Breite der Näherungen von b = 0.1 (Abbildung (3.4)).

Einzelne Zustände sind hier allerdings kaum erkennbar. Dies liegt daran, dass sich diese bei einer zu großen Breite der einzelnen Peaks überlagern.



Abbildung 3.3: Näherungen der Delta-Distribution (a) Lorentzkurve, (b) Gausskurve und (c) Temperaturabhängige Näherung.



Abbildung 3.4: Lokale Zustandsdichte bei einer Breite von b = 0.1: N\u00e4herung durch (a) Lorentzkurve, (b) Gau\u00dfkurve und (c) Temperaturabh\u00e4ngige N\u00e4herung. Die gezeigten Bilder sind unscharf und unterscheiden sich nur leicht, wobei die Abbildung in (a) etwas unsch\u00e4rfer als in (b)/(c) ist.



Abbildung 3.5: Lokale Zustandsdichte bei einer Breite von b = 0.01: N\u00e4herung durch (a) Lorentzkurve, (b) Gau\u00d6kurve und (c) Temperaturabh\u00e4ngige N\u00e4her rung. Die Bilder sind jeweils scharf und einzelne Zust\u00e4nde sind klar zu erkennen.

Um möglichst hochauflösende Bilder der lokalen Zustandsdichte zu erhalten, ist es somit wichtig, den Parameter Γ bzw. die thermische Energie k_BT ausreichend klein zu wählen. In Abbildung (3.5) haben wir die Breite auf b = 0.01 variiert, wobei die gewählte Größe hierbei deutlich besser geeignet ist und im Folgenden, falls nicht anders erwähnt, auf diesen Wert gesetzt wird.

Für die meisten Betrachtungen spielt die Wahl der Näherung keine signifikante Rolle, weswegen wir, falls nicht anders erwähnt, im weiteren Verlauf die Lorentzkurve mit $\Gamma = 0.01$ als Näherung annehmen.

Nachdem wir im letzten Kapitel das zu betrachtende System und die Methoden zur Analyse eingeführt haben, möchten wir sie in diesem Kapitel anwenden. Dabei gehen wir vor allem auf die Zusammensetzung und die Eigenschaften des Systems abhängig von ihren Parametern und der Temperatur ein. Dafür setzen wir im Folgenden die Systemparameter so, dass wir nach Gleichung (3.2) in der topologischen Phase sind und Majoranamoden beobachten können. Auf diese Weise wählen wir die Systemparameter im Allgemeinen auf $\mu = 1.75$, $\alpha_{\rm R} = 0.3$, h = -2, $\Delta = 1$ und die Kettenlänge auf N = 25.

4.1 Allgemeine Ergebnisse

Um einen ersten Eindruck über die allgemeine Anordnung der Energiezustände zu bekommen, schauen wir uns zunächst die totale Zustandsdichte an, die Informationen über die gesamte Verteilung der Energieniveaus gibt.



Abbildung 4.1: Totale Zustandsdichte des Systems im Vergleich. In (a) wird die exakte Darstellung der Delta-Distribution gezeigt, während in (b) und (c) die Lorentzkurve als Näherung benutzt wurde. In (b) betrachten wir lediglich die Anzahl der Zustände bei einer bestimmten Energie (H_{BdG}-Formalismus) und in (c) wird zusätzlich die Besetzung der einzelnen Zustände berücksichtigt (Elektronischer Formalismus). In (b) und (c) wurde die totale Zustandsdichte durch die Höhe der Delta-Distribution und die inverse Kettenlänge normiert, sodass ein Peak der Höhe 1 einem vollbesetzten Zustand entspricht.

In der Abbildung (4.1) sehen wir die totale Zustandsdichte in drei verschiedenen Dar-

stellungsformen, die je nach Situation unterschiedlich gut geeignet sind. Die exakte Darstellung ist hierbei am besten, um die Bandstruktur zu beschreiben. So können wir hier (Abbildung (4.1a)) gut erkennen, dass es zur Bildung von zwei Bändern im positiven Bereich kommt, die allerdings lediglich diskret besetzt sind. Gut zu sehen ist auch, dass es eine Bandlücke zwischen diesen gibt. Dazu kann man beobachten, dass Nullenergiezustände vorkommen, zu denen höhere Energiezustände eine Bandlücke aufweisen. In Abbildung (4.1b) können wir nun zusätzlich erkennen, wie oft ein Zustand innerhalb der Breite der Näherungsfunktion vorkommt. Eine nicht-ganzzahlige Höhe bedeutet hier, dass Zustände sich nur teilweise überlagern. Die meisten sind folglich einfach besetzt, wenige auch mehrfach. Der Peak bei E=0 ist leicht größer als 1, was darauf hinweist, dass es zwei Nullzustände gibt. Wir können folglich, wie auch im minimalen Modell in Kapitel 2.2, zwei Majoranazustände identifizieren, die jeweils leicht voneinander abweichen und sich somit nur teilweise überlagern. Eine genauere Erklärung hierfür betrachten wir in Abschnitt 4.4.4.

Im dritten Bild (Abbildung (4.1c)) bekommt man zusätzliche Informationen, indem nicht nur die Anzahl der Zustände, sondern auch die Besetzung dieser berücksichtigt wird. Auffällig ist hierbei, dass positive Zustände (Elektronen) bei dieser Parameterwahl generell mehr besetzt sind, als die negativen (Löcher). Bei den Löchern sind nur die höchsten Energien der Bänder etwas stärker besetzt.

Als Nächstes möchten wir herausfinden, wie die Zustände abhängig von ihrer Position in der Kette besetzt sind. Hierfür schauen wir uns die lokale Zustandsdichte an (Abbildung (4.2)).



Abbildung 4.2: Lokale Zustandsdichte in Abhängigkeit der Position x in der Kette. (a) gesamtes Energiespektrum (b) Nahansicht der Majoranamoden.

Auch hier sind die vorher anhand der totalen Zustandsdichte erkannten Eigenschaften deutlich zu sehen. Zusätzlich fällt auf, dass die Besetzungen der Zustände Oszillationen mit unterschiedlichen Frequenzen aufweisen.

Die Majoranazustände sind vorwiegend wie im minimalen Modell (Kapitel 2.2) an den beiden Rändern der Kette lokalisiert und haben eine Bandlücke zu den anderen Zuständen, wodurch diese stabil sind. Sie weisen allerdings zusätzlich Besetzungswahrscheinlichkeiten innerhalb der Kette auf, die mit einer gedämpften Schwingung von den Rändern weg auftreten. Dies kann man dadurch erklären, dass es gewisse Wahrscheinlichkeiten für die Delokalisation der Majoranas gibt.

Zusätzlich fällt auf, dass das System eine Kettensymmetrie besitzt, da die Besetzungen der Zustände in der Mitte der Kette gespiegelt sind.

Nachdem wir uns nun die Besetzungswahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit des Ortes angeschaut haben, liegt es nahe, diese auch im Impulsraum zu betrachten. Dies ist mithilfe der Spektralfunktion des Systems möglich.



Abbildung 4.3: Spektralfunktion in Abhängigkeit des Impulses. Hierbei sind vier Bänder zu erkennen, die kontinuierlich verlaufen. Je nach Impuls sind diese unterschiedlich besetzt.

Im Impulsraum werden die vorher betrachteten Bänder deutlich. Hier sind diese als einzelne Kurven gut erkennbar und auch die Bandlücken zwischen diesen werden deutlich. Durch die geänderten Randbedingungen kommt es hier, wie erwartet, nicht mehr zu Majoranazuständen und wir erhalten ein kontinuierliches Spektrum.

Die Bänder weisen abhängig von ihrem Impuls unterschiedliche Besetzungswahrscheinlichkeiten auf, die sich an den Extrema der Bandstrukturen zwischen Elektronen und Löchern umkehren. Folglich sind die Elektronen des niedrigeren Bandes nach dem ersten Extremum im Vergleich zu vorher nur noch sehr schwach besetzt und nach einem zweiten Extremum wieder etwas mehr.

All diese Eigenschaften möchten wir in den folgenden Kapiteln abhängig vom Spin, den Parametern und auch der Temperatur des Systems genauer untersuchen. Zunächst möchten wir allerdings die Zusammensetzung unseres Systems verstehen und die Notwendigkeit der Anwesenheit von Magnetfeld und Spin-Orbit-Kopplung betrachten, die im minimalen Modell der Kitaev-Kette noch nicht gebraucht wurden.

4.2 Untersuchung der Bandstruktur und Notwendigkeit von Magnetfeld und Spin-Bahn-Kopplung

Im Vergleich zum minimalen Modell in Kapitel 2.2 führten wir eine weitere Entartung des Systems durch den Spin hinzu und wir betrachten statt einer Triplett- nun eine Singulett-Paarung der Elektronen im Supraleiter. Zusätzlich mussten wir zwei weitere Systemparameter einführen - ein externes Magnetfeld h und die Spin-Bahn-Kopplung $\alpha_{\rm R}$, um einen ähnlichen Effekt wie im minimalen Modell mit einer Singulett-Paarung zu erhalten. In diesem Kapitel möchten wir auf diese Weise klären, welchen Einfluss das anders wirkende Paarpotential Δ , die Spin-Bahn-Kopplung $\alpha_{\rm R}$ und das Magnetfeld h auf unser System haben. Dazu schauen wir uns zunächst die Situation an, bei dem wir diese Parameter gleich 0 setzen.



Abbildung 4.4: System für $\Delta = \alpha_{\rm R} = h = 0$. (a) DOS (H_{BdG}) und (b) Spektralfunktion. In (a) kann man erkennen, dass die meisten Zustände zweifach besetzt sind, während in (b) lediglich ein besetztes Elektronenband zu sehen ist.

Man kann deutlich erkennen, dass in der Spektralfunktion (Abbildung (4.4b)) nur ein Band zu sehen ist, das größtenteils bei positiven Energien verläuft. Aufgrund der Entartung unseres Systems erwarten wir allerdings vier Bänder - jeweils zwei für Elektronen und Löcher. In der Darstellung der totalen Zustandsdichte in Abbildung (4.4a) können wir die sogenannte Kramer-Entartung beobachten, bei der die Zustände mit gleichem Spin dieselbe Energie haben. Durch diese kommt es so zu Überlagerungen von jeweils zwei Bändern. Zusätzlich sind diejenigen, die vorwiegend im negativen Bereich vorzufinden sind, nicht erkennbar, da diese nicht besetzt sind.

Mit der betrachteten Konfiguration der Systemparameter können allerdings keine Majoranas existieren. Zum einen kommt es zu einer Lückenschließung um die Nullenergie, wodurch es zu keinen stabilen Majoranamoden kommen kann. Zum anderen sind die Zustände wegen der Kramer-Entartung zweifach besetzt, was aufgrund der Eigenschaft,

dass Majoranas ihre eigenen Antiteilchen sind, zu keinen Majoranamoden führen kann. Folglich brauchen wir einerseits Systemparameter, die eine Bandlücke um die Nullenergie erzeugen, und andererseits welche, die mit dem Spin wechselwirken, um die Kramer-Entartung zu brechen.

4.2.1 Einfluss des Paarpotentials

Hierfür möchten wir zuerst den Einfluss des Paarpotentials genauer untersuchen. Dafür setzen wir als Nächstes lediglich die Spin-Bahn-Kopplung und das Magnetfeld gleich 0.



Abbildung 4.5: System für $\alpha_{\rm R} = h = 0$. (a) DOS (H_{BdG}) und (b) Spektralfunktion. Man kann nun deutlich eine Bandlücke um die Nullenergie und in (b) zwei Bänder erkennen. Jedoch können wir in (a) weiterhin die Kramer-Entartung beobachten.

Das Paarpotential hat hierbei alle positiven Energiezustände in der Energieskala nach oben und alle negativen nach unten verschoben. Dadurch wurden allerdings die vorherigen Bänder am Nullübergang in der Art und Weise getrennt, dass Teile des höheren Bandes mit dem des niedrigeren ineinander übergingen und umgekehrt. Mit diesem Ansatz können wir auch erklären, warum das elektronische Band bei höheren Impulsen schwächer besetzt ist, da Teile dessen im Band der Löcher wiederzufinden sind.

Allerdings können wir trotzdem keine Majoranas beobachten, da wir weiterhin eine Kramer-Entartung haben.

Im Gegensatz zum minimalen Modell der Kitaev-Kette brauchen wir in unserem betrachteten System folglich eine spinabhängige Wechselwirkung, weswegen wir uns in den nächsten beiden Abschnitten mit dem Magnetfeld und der Spin-Bahn-Kopplung näher beschäftigen wollen.

4.2.2 Einfluss des Magnetfelds

Nachdem wir im vorherigen Abschnitt überprüft haben, ob man einen spinabhängigen Term benötigt, möchten wir uns im nächsten Schritt anschauen, ob hierfür lediglich ein Magnetfeld ausreichend wäre. Dafür setzen wir im Folgenden die Spin-Bahn-Kopplungskonstante $\alpha_{\rm R} = 0$.



Abbildung 4.6: System für $\alpha_{\rm R} = 0$. (a) DOS (H_{BdG}) und (b) Spektralfunktion. Die meisten Zustände in (a) sind hierbei lediglich einfach besetzt und in (b) sind jeweils 2 Bänder für Elektronen und Löcher zu beobachten.

Man kann erkennen, dass das Magnetfeld die Kramer-Entartung gebrochen hat. Dieses hat hierbei die Bänder je nach Spinrichtung nach oben bzw. unten in der Energieskala verschoben. Allerdings ist klar zu erkennen, dass es zu einer Lückenschließung um die Nullenergie kommt und wir somit auch keine Majoranas beobachten können.

Unser System muss folglich so moduliert werden, dass es lediglich beim Phasenübergang zwischen topologischer und trivialer Phase zu einer Lückenschließung kommt. Einen solchen Effekt bewirkt die Spin-Bahn-Kopplung, die auch mit dem Spin interagiert und proportional zum Impuls wirkt. Fügen wir diese wieder hinzu, kommen wir auf die ursprünglich betrachtete Abbildung aus Kapitel 4.1 (Abbildung (4.3)).

Auch können wir somit den Verlauf der Besetzungen erklären:

Wie auch vorher das Paarpotential verschiebt die Spin-Orbit-Kopplung die positiven Energiezustände in energetisch höhere Niveaus, trennt so unsere vorherigen Bänder an der Lückenschließung und bildet somit die Bandstruktur in Abbildung (4.3). Auf diese Art und Weise können wir erklären, weshalb es zu unterschiedlichen Besetzungen in Abhängigkeit des Impulses kommt.

4.2.3 Einfluss der Spin-Bahn-Kopplung

Die Spin-Bahn-Kopplung ist, wie das Magnetfeld, ein spinabhängiger Term. Dieser könnte möglicherweise im Gegensatz zum Magnetfeld auch alleine ausreichen, um die gewünschten Eigenschaften zu erreichen.

Um dies zu beantworten, schauen wir uns als Letztes die Situation an, in der wir das Magnetfeld h = 0 setzen.



Abbildung 4.7: System für h = 0. (a) DOS (H_{BdG}) und (b) Spektralfunktion. In (b) sind jeweils zwei Bänder für Elektronen und Löcher zu erkennen. In (a) können wir jedoch wiederum eine zweifache Besetzung der Zustände beobachten.

Allerdings können wir auch hier keine Majoranamoden erkennen, da die Zustände wiederum zweifach besetzt sind. Die Spin-Bahn-Kopplung bewirkt folglich nur eine Verschiebung der Bänder im Impulsraum, bricht jedoch nicht die Zeit-Umkehr-Symmetrie und dadurch die Kramer-Entartung. Dieses Phänomen ist die sogenannte Spin-Impuls-Verriegelung und lässt sich dadurch erklären, dass die Konfiguration mit dem Spin senkrecht auf dem Impuls die Energie des Spin-Bahn-Kopplungsterms minimiert.

Zusammenfassend wird klar, dass wir sowohl ein Magnetfeld als auch die Spin-Orbit-Kopplung benötigen, um ein System zu erhalten, indem wir Majoranazustände beobachten können.

4.3 Besetzungen der jeweiligen Spinkonfiguration

Im letzten Abschnitt betrachteten wir bereits die Wechselwirkungen des Magnetfelds und der Spin-Bahn-Kopplung mit dem Spin. Die genaue Besetzung der Zustände der jeweiligen Spinkonfiguration kann das dabei gewonnene Verständnis bestätigen und er-

weitern.

Deshalb möchten wir als Nächstes den Einfluss der einzelnen Spinrichtungen up bzw. down untersuchen. Dazu schauen wir uns zunächst die lokale Zustandsdichte des Systems im Vergleich an (Abbildung (4.8)).



Abbildung 4.8: Lokale Zustandsdichte für unterschiedliche Spinkonfigurationen (a) gesamt, (b) Spin up und (c) Spin down. Die jeweiligen Spinrichtungen in (b) und (c) decken jeweils gewisse Energiebereiche des gesamten Spektrums in (a) ab. In (b) sind lediglich die positiven, vorwiegend die höheren Energiebereiche besetzt. In (c) kommen vor allem die niedrigeren Energien sowie Elektronen und Löcher vor.

Die unterschiedlichen Spinkonfigurationen decken größtenteils unterschiedliche Energiebereiche ab. Majoranamoden können wir jedoch lediglich für Spin down beobachten. Dies bedeutet allerdings nicht, dass die Majoranas einen Spin besitzen, sondern lediglich, dass nur die Energiezustände für Spin down im topologischen Bereich sind.

Um einen genaueren Eindruck zu bekommen, wie die einzelnen Bänder verlaufen, betrachten wir als Nächstes die jeweiligen Spektralfunktionen.



Abbildung 4.9: Spektralfunktion für unterschiedliche Spinkonfigurationen (a) gesamt,
(b) Spin up und (c) Spin down. Die beiden Spinkonfigurationen kommen jeweils in mehreren Bändern vor. Dabei werden in (b) nicht dieselben Bandabschnitte wie in (c) besetzt.

Der Vergleich (Abbildung (4.9)) der Spektralfunktionen für die unterschiedlichen Spinorientierungen bestätigt die vorher gemachten Beobachtungen. Darüber hinaus kann man feststellen, dass die einzelnen Bänder nicht nur von lediglich einer Spinrichtung besetzt sind, sondern in Teilen auch von beiden Orientierungen.

Dabei sind bei höheren Impulsen unterschiedliche Besetzungen zu sehen und zusätzlich ist bei den mittleren Bändern der Spektralfunktion (Abbildung (4.9c)) erkennbar, wie diese einen gemeinsamen Verlauf bilden, der durch die Bandlücke der Nullenergie unterbrochen wird. Aus den Abbildungen (4.9b/c) können wir außerdem jeweils die Form des Bandes in Abbildung (4.4b) rekonstruieren, indem wir die besetzten Abschnitte der einzelnen Bänder aneinanderfügen. Dies macht erneut deutlich, dass wir somit ohne den Einfluss des Paarpotentials, des Magnetfelds und der Spin-Bahn-Kopplung von zwei vollbesetzten Bändern ausgehen können, wovon jeweils eins von Elektronen mit Spin up beziehungsweise Spin down besetzt ist. Diese Beobachtungen stützen die Theorie, dass die Wirkung der letztgenannten Systemparameter die Ursache für den speziellen Verlauf der Spektralfunktion sind, wodurch keine klar abgetrennten Bänder für die Spinkonfigurationen zu beobachten sind.

4.4 Abhängigkeiten der Parameter und Oszillationen der Majoranamoden

In den letzten Kapiteln konnten wir verstehen, wie es in dem von uns betrachteten System mit Singulett-Paarung zur Existenz von Majoranamoden kommen kann. Dabei sind wir vorwiegend auf die Notwendigkeit der einzelnen Systemparameter eingegangen. Im nächsten Schritt werden wir deren Einfluss in Abhängigkeit ihrer Stärke untersuchen. Dafür betrachten wir im Folgenden, wie sich das System bei Variation des chemischen Potentials, des Magnetfelds, der Spin-Bahn-Kopplung und der Kettenlänge verhält. Dabei möchten wir insbesondere auf die Oszillationen und die Bandlücke der Majoranamoden eingehen. Die Beschreibung dieser Eigenschaften erfolgt hierbei jedoch lediglich auf phänomenologischer Basis. Dazu wird nur ein Teil der untersuchten Bilder gezeigt - die kompletten Bilderserien hierzu sind im Anhang (Kapitel 6) dargestellt.

4.4.1 Variation des chemischen Potentials

Zunächst möchten wir das chemische Potential innerhalb der topologischen Phase variieren. Wie in Gleichung (3.2) beschrieben, können wir somit für unsere Systemparameter das chemische Potential μ zwischen - $\sqrt{3} + 2 \approx 0.27$ und $\sqrt{3} + 2 \approx 3.73$ wählen. Generell kann man beobachten, dass mit steigendem chemischen Potential die Elektronen stärker, während die Löcher dementsprechend weniger besetzt sind.

Dazu sieht man, dass an den Rändern des topologischen Phasenraums die Bandlücke nur sehr klein ist, während sie in der Mitte am größten ist. Dieses Verhalten kann man damit erklären, dass sich beim Übergang von der trivialen in die topologische Phase die Bandlücke der Majoranamoden schließt und diese somit in der Nähe dieses Phasenübergangs aufgrund von Stetigkeitsbedingungen klein ist. Dieses Verhalten konnten wir bereits im



Abbildung 4.10: Lokale Zustandsdichte bei unterschiedlichen Werten des chemischen Potentials (a) $\mu = 0.3$, (b) $\mu = 1.73$ and (c) $\mu = 3.6$. In (a) und (c) wird das System an der Unter- bzw. Obergrenze und in (b) in der Mitte der topologischen Phase dargestellt.

minimalen Modell der Kitaev-Kette feststellen.

Als Letztes können wir beobachten, dass die Oszillation der Majoranamoden in Abbildung (4.10b) eine kleinere Frequenz hat und die Majoranamoden am Rand der Kette stärker lokalisiert sind als in den anderen Abbildungen.

Eine Parameterwahl von μ in der Mitte der topologischen Phase sollte folglich bevorzugt werden, da wir somit einen möglichst stabilen Zustand erhalten.

4.4.2 Variation des Magnetfelds

Des Weiteren möchten wir im folgenden Abschnitt die Abhängigkeiten vom Magnetfeld untersuchen. Wie auch beim chemischen Potential müssen wir beim magnetischen Feld h beachten, dass wir Parameter innerhalb der topologischen Phase wählen. Mit der Bedingung aus Gleichung (3.2) kommen wir nun auf $-\sqrt{17}/4 \approx -1.03 > h > -\sqrt{241}/4 \approx -3.88$.

Analog zu der Untersuchung des chemischen Potentials können wir erneut beobachten, dass die Bandlücke am Übergang zur trivialen Phase (Abbildungen (4.11a) und (4.11c)) wiederum nur sehr gering ist und wir nur instabile Majoranamoden mit starker Delokalisation erhalten.

Allerdings können wir statt in der Mitte der topologischen Phase die stärkste Lokalisation am Rand der Kette und die größte Bandlücke der Majoranas bei h = -1.5 (siehe Abbildung (4.11b)) beobachten.

Folglich hängen diese Eigenschaften nicht nur vom momentan betrachteten Bereich der topologischen Phase ab. Zusätzlich bewirkt die Änderung des Magnetfelds eine Energieverschiebung der einzelnen Spinkonfiguration, was wir in Abschnitt 4.2.2 und 4.3 erkannten. Diesen Effekt können wir auch im Verlauf von Abbildung (4.11) beobachten, bei der zunächst vorwiegend die positiven und anschließend die negativen Energiewerte besetzt sind. Dies spielt für die Stabilität der Majoranamoden eine Rolle, wodurch wir



Abbildung 4.11: Lokale Zustandsdichte bei unterschiedlichen Werten des magnetischen Feldes (a) h = -1.1, (b) h = -1.5 and (c) h = -3.8. In (a) und (c) werden wiederum Werte an den Rändern der topologischen Phase dargestellt. In (b) wurde h auf den Wert mit der besten Lokalisation der Majoranamoden und der größten Bandlücke festgelegt.

für h = -1.5 eine günstige Konfiguration erhalten.

4.4.3 Variation der Spin-Bahn-Kopplung

In Abschnitt 4.2.2 konnten wir erkennen, dass die Spin-Bahn-Kopplung die vom Magnetfeld bewirkte Lückenschließung um die Nullenergie öffnet und somit die Existenz von Majoranamoden in unserem System ermöglicht. Im Folgenden möchten wir näher untersuchen, welchen Einfluss die Stärke dieses Systemparameters hat.

Anders als das chemische Potential und das Magnetfeld ist die Spin-Bahn-Kopplung nicht explizit in der Bedingung für die topologische Phase aufgeführt. Allerdings müssen wir trotzdem beachten, den Parameter $\alpha_{\rm R}$ so zu wählen, dass wir eine genügend große Bandlücke der Majoranamoden haben und numerische Ungenauigkeiten vermeiden können. Im Folgenden haben wir $\alpha_{\rm R}$ zwischen 0.1 und 3.2 variiert (Abbildung (4.12)).

Hierbei steht der Verlauf der Bandlücke in Abhängigkeit von $\alpha_{\rm R}$ in Einklang mit den in Kapitel 4.7 getroffenen Beobachtungen. Zusätzlich fällt aber auch auf, dass die Stärke dieses Effekts mit steigender Spin-Bahn-Kopplung abnimmt und die Bandlücke auf diese Weise immer weniger zunimmt.

Bei der Oszillation der Majoranamoden können wir einen interessanten Verlauf feststellen. Für kleine $\alpha_{\rm R}$ (Abbildung (4.12a)) erkennen wir, dass die Oszillationen nur schwach gedämpft und die Majoranas nur schwach am Rand lokalisiert sind. Bei einem Wert von $\alpha_{\rm R} = 1.3$ (Abbildung (4.12b)) sind jene stark gedämpft und die Majoranas besonders stark am Rand lokalisiert, während für einen Wert von $\alpha_{\rm R} = 3.2$ (Abbildung (4.12c)) die Majoranas wieder mehr delokalisiert sind. Wir können folglich feststellen, dass die Dämpfung dieser Oszillationen ein Maximum bei $\alpha_{\rm R} \approx 1.3$ besitzt.

Zusätzlich kann man erkennen, dass die Frequenz der Majoranaschwingung im betrach-



Abbildung 4.12: Lokale Zustandsdichte bei unterschiedlichen Werten der Spin-Bahn-Kopplung (a) $\alpha_{\rm R} = 0.1$, (b) $\alpha_{\rm R} = 1.3$ und (c) $\alpha_{\rm R} = 3.2$. Im Verlauf nimmt die Größe der Bandlücke mit steigender Spin-Bahn-Kopplung zu. In (a) sind die Majoranamoden stark delokalisiert, während diese in (b) vor allem am Rand lokalisiert sind. In (c) können wir allerdings wieder eine größere Oszillationslänge beobachten.

teten Bereich keine auffälligen Änderungen hat und somit unabhängig von der Spin-Bahn-Kopplung ist.

4.4.4 Variation der Kettenlänge

Durch die Betrachtung einer Kette mit endlicher Länge kann es zu Effekten kommen, die in einem theoretisch beschriebenen System mit unendlicher Länge nicht vorkommen. Diese Effekte haben einen kleineren Einfluss je länger die Kettenlänge ist. Diese möchten wir im nächsten Schritt bei Variation dieses Systemparameters betrachten.



Abbildung 4.13: Lokale Zustandsdichte bei unterschiedlichen Werten der Kettenlänge (a) N = 25, (b) N = 50 und (c) N = 100. Die generelle Verteilung bleibt im Verlauf gleich, wobei die einzelnen Bänder dichter besetzt werden und die Oszillationsfrequenzen im Verhältnis zur Kettenlänge größer werden.

In Abbildung (4.13) können wir sehen, dass sich die Gesamtanordnung der einzelnen Zustände bei Erhöhung der Kettenlänge nicht ändert. Weiterhin können wir Besetzungen innerhalb der Bandstrukturen beobachten, die durch die höhere Anzahl an Zuständen dichter besetzt sind. Aufgrund der normierten Skala ist die Frequenz der einzelnen Oszillationen gestiegen, die jedoch absolut gesehen gleich geblieben ist. Auch die Majoranamoden verändern sich auf diese Weise nicht, jedoch sind diese im Bezug zur Kette stärker am Rand lokalisiert.

Eine weitere Auffälligkeit ist, dass die Majoranas in den Abbildungen für N = 50 und N = 100 stärker besetzt sind.

Um dies verstehen zu können, schauen wir uns als Nächstes die totale Zustandsdichte im H_{BdG} -Formalismus an.



Abbildung 4.14: Totale Zustandsdichte (H_{BdG}) bei unterschiedlichen Werten der Kettenlänge (a) N = 25, (b) N = 50 und (c) N = 100. Der Peak für die Majoranamoden in (a) erreicht lediglich eine Höhe knapp über h = 1, während in (b) und in (c) dieser nahezu exakt bei h = 2 liegt.

In Abbildung (4.14) können wir erkennen, dass die Majoranamoden für N = 25 leicht von einander abweichen und sich somit nur teilweise überlagern. Dies spielt bei einer höheren Kettenlänge nur noch eine kleine Rolle, wodurch für N = 50 oder N = 100 der Peak nahezu exakt die Höhe h = 2 erreicht. Wir können daher davon ausgehen, dass die Abweichung der Majoranamoden ein Effekt der endlichen Größe der Kette ist. So kommt es folglich auch zu den beobachteten Intensitätsunterschieden in Abbildung (4.13).

In Abbildung (4.15) können wir die Bildung von Bandstrukturen betrachten. Bei Erhöhung der Kettenlänge kann man gut sehen, wie die vorher identifizierten Bänder immer dichter besetzt werden und die Energien allmählich nicht mehr diskret, sondern kontinuierlich besetzt werden. Für N = 100 kann man nun keine einzelnen Energiezustände mehr erkennen, sondern lediglich die Bereiche der einzelnen Bänder. Dies liegt daran, dass auch diese gezeichneten Linien eine Breite haben, aber es verdeutlicht, was wir im Grenzfall N $\rightarrow \infty$ erhalten: kontinuierliche Bandstrukturen und eine Linie für die Majoranamoden.



Abbildung 4.15: Totale Zustandsdichte (exakte Darstellung) bei unterschiedlichen Werten der Kettenlänge (a) N = 25, (b) N = 50 und (c) N = 100. In (a) sind größtenteils einzelne Linien erkennbar, die sich in (b) allmählich stärker überlagern. In (c) können wir lediglich vier Bänder und eine Linie für die Majoranamoden beobachten.

4.5 Temperaturabhängigkeit des Systems

In den bisherigen Betrachtungen haben wir die Temperatur unseres Systems nicht berücksichtigt. Die Besetzung der einzelnen Zustände hängt jedoch signifikant mit der Temperatur zusammen, weswegen wir deren Abhängigkeit und deren Einfluss auf unser System in diesem Kapitel näher betrachten wollen. Dazu gehen wir darauf ein, bei welchen Temperaturen man das System besonders vorteilhaft betrachten kann.

4.5.1 Allgemeine Beschreibung

Zunächst betrachten wir das System für eine Temperatur nahe 0 und vergleichen dieses mit dem temperaturunabhängigen System. Hierbei betrachten wir lediglich den Verlauf der lokalen Zustandsdichte, wobei totale Zustandsdichte und Spektralfunktion denselben Verlauf zeigen würden.

In Abbildung (4.16) kann man gut erkennen, dass die Besetzungen durch die Temperatur modifiziert wurden. Durch die Betrachtung der Fermi-Verteilung wird klar, dass die Zustände bis zur Energie des chemischen Potentials, die bei E = 0.875 liegt, mit der gleichen Wahrscheinlichkeit wie vorher besetzt werden und Energien, die höher als dieses sind, unbesetzt bleiben. Für höhere Temperaturen verschiebt sich dieses Bild und auch höhere Energien können besetzt sein. Dies wollen wir uns für drei verschiedene Temperaturen im Folgenden anschauen.

In Abbildung (4.17a) können wir erneut das System für eine sehr niedrige Temperatur sehen, während in den Abbildungen (4.17b/c) die Temperatur schrittweise erhöht wurde. Die vorher voll besetzten Zustände unterhalb der Energie des chemischen Potentials werden hierbei schwächer besetzt, während höhere Energien allmählich aufsteigend stärker vorkommen. Bei sehr hohen Temperaturen (Abbildung (4.17c)) sind die Zustände etwa so besetzt, wie es ohne Temperaturabhängigkeit der Fall war. Lediglich wurden diese jeweils mit einem Faktor 1/2 durch die Fermi-Funktion modifiziert. Die Temperatur hat



Abbildung 4.16: Lokale Zustandsdichte (a) Temperaturunabhängig, (b) für $k_BT = 0.01$. Der Verlauf in (b) ist im Vergleich bis zu einem bestimmten Energieniveau gleich wie in (a). Oberhalb dieser Kante sind die Zustände allerdings nicht mehr besetzt.





folglich einen erheblichen Einfluss darauf, wie die Zustände unseres Systems besetzt sind.

4.5.2 Bestimmung einer optimalen Temperatur

Bei der Betrachtung der Temperaturabhängigkeit fällt auf, dass Energiezustände für eine bestimmte Temperatur gegenüber anderen bevorzugt sein können, indem der Wert der Fermi-Funktion an der jeweiligen Stelle größer ist.

Dies möchten wir in diesem Abschnitt für unsere Majoranamoden genauer untersuchen,

indem wir versuchen, diese im Verhältnis zu den näheren Energiezuständen möglichst zu bevorzugen. Dies kann beispielsweise vorteilhaft sein, wenn man die Zustände experimentell messen möchte und so die Majoranas besonders gut aufnehmen kann. Folglich möchten wir diese gegenüber den elektronischen Zuständen bevorzugen.

Auf diese Weise möchten wir erneut die Fermi-Funktion für drei verschiedene Temperaturen betrachten (Abbildung (4.18)).



Abbildung 4.18: Fermifunktion für verschiedene Temperaturen.

Beim Verlauf der Fermi-Funktion ist auffällig, dass die Nullenergie gegenüber den nächsthöheren Zuständen für niedrige und hohe Temperaturen nahezu denselben Wert hat. Die Steigung an diesem Punkt ist nahezu gleich Null. Für eine thermische Energie von $k_BT = 1$ ist diese allerdings bevorzugt und weist eine deutliche negative Steigung auf. Dies deutet darauf hin, dass es folglich eine Temperatur geben muss, an der der Nullbzw. der Majoranazustand maximal gegenüber den nächstgelegenen positiven Energiezuständen bevorzugt ist.

Um diese zu bestimmen, optimieren wir die Ableitung der Fermi-Funktion für E = 0:

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial W}{\partial E} \Big|_{\mathbf{E}=0} \right) = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{1}{2\mathbf{k}_{\mathrm{B}} \mathbf{T} \cdot \cosh^{2} \left(\frac{\mu}{2\mathbf{k}_{\mathrm{B}} \mathbf{T}} \right)} \right). \tag{4.1}$$

Durch weitere Rechnung kommen wir auf die folgende Bedingung für unsere optimale Temperatur:

$$k_{\rm B}T = \mu \tanh\left(\frac{\mu}{2k_{\rm B}T}\right).$$
 (4.2)

Gleichung (4.2) können wir allerdings nicht weiter analytisch vereinfachen. Jedoch kann man den Wert der optimalen Temperatur numerisch bestimmen. Für unser System ergibt sich so $k_{\rm B}T_{\rm optimal} \approx 0.566928$. Schließlich möchten wir unser System bei dieser thermischen Energie betrachten (Abbildung (4.19)). Im Vergleich zu den anderen Temperaturen erkennt man bei genauer Betrachtung, dass die Besetzung der Zustände bei



Abbildung 4.19: Lokale Zustandsdichte in der Nahansicht bei (a) $k_BT = 0.01$ und (b) bei der optimalen Temperatur. Die Majoranamoden sind in (b) zwar absolut gesehen schwächer als in (a) besetzt, jedoch im Vergleich zu den näheren elektronischen Zuständen stärker als in (a).

dieser Temperatur besonders vorteilhaft für die Majoranamoden ist.



Abbildung 4.20: Lokale Zustandsdichte mit temperaturabhängiger Näherung bei der optimalen Temperatur. Die Abbildung ist unscharf und einzelne Zustände sind nicht erkennbar.

Diese berechnete Temperatur ist allerdings lediglich ein Anhaltswert. Zur Bestimmung der zu wählenden Temperatur spielen auch andere Effekte eine Rolle, die mitberücksichtigt werden müssen. Beispielsweise können wir bei der temperaturabhängigen Näherung der Delta-Distribution feststellen, dass es zu einem unscharfen und nahezu unbrauchbaren Bild kommt (Abbildung (4.20)).

In diesem Fall müssen wir die Genauigkeit unserer Messung zusätzlich beachten. Allerdings gibt uns unsere optimale Temperatur auch eine weitere Information: So lange unsere thermische Energie niedriger als diese ist, ist eine möglichst hohe Temperatur möglichst vorteilhaft. In diesem Fall könnte man folglich die höchste Temperatur auswählen, bei der unser aufgenommenes Bild noch scharf genug ist.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Bachelorarbeit untersuchten wir die Realisierung von Majoranamoden in einem ferromagnetischen Supraleiter. Die implementierten Methoden der totalen Zustandsdichte, der lokalen Zustandsdichte oder der Spektralfunktion waren für eine detaillierte Beschreibung der einzelnen Zustände auch in Abhängigkeit ihrer Position oder ihres Impulses sehr gut geeignet.

In Kapitel 2 betrachteten wir zunächst das minimale Modell von Kitaev, um den Mechanismus zur Existenz von Majoranas verstehen zu können. Hierbei konnten wir diese innerhalb der topologischen Phase am Rand der Kette beobachten.

Anschließend modifizierten wir in Kapitel 3 dieses minimale Modell zu den Eigenschaften des von uns betrachteten ferromagnetischen Supraleiters und führten die zur Analyse benutzten Methoden ein. Dabei konnten wir in Kapitel 4 beobachten, dass es auch in unserem System zur Existenz von Majoranamoden kommt. Diese weisen allerdings nicht nur Besetzungswahrscheinlichkeiten am Rand der Kette auf, sondern auch in Form einer gedämpften Oszillation im Inneren. Zusätzlich untersuchten wir, wie sich einerseits das System zusammensetzt und andererseits wie sich die Zustände abhängig der Systemparameter oder der Temperatur verhalten. Hierbei konnten wir sehen, welchen Einfluss die im Vergleich zum minimalen Modell geänderten Eigenschaften auf das System hatten und wie notwendig die neu eingeführten Größen des Magnetfelds und der Spin-Bahn-Kopplung für die Realisierung der Majoranamoden sind. Auch konnten wir beobachten, dass sich die Bandlücke oder die Oszillationen der Majoranas mit ihren Systemparametern verändern. Hierbei ist die Wahl von chemischen Potential und Magnetfeld inmitten der topologischen Phase und eine höhere Spin-Bahn-Kopplung für eine möglichst große Bandlücke vorteilhaft. Die Kettenlänge hat keinen Einfluss auf die Anordnung der Zustände selbst, jedoch sind die Majoranamoden für ein größeres System anteilig stärker am Rand lokalisiert.

Als Letztes betrachteten wir die Temperaturabhängigkeiten der einzelnen Zustände und konnten erkennen, dass der Verlauf abhängig von der Energie teilweise stark abweicht von den vorherigen Betrachtungen. Dabei werden einige Besetzungen der Energiewerte mehr und einige weniger beeinflusst. Diese Eigenschaft konnten wir schließlich nutzen, um eine Temperatur zu berechnen, bei der die Majoranamoden möglichst bevorzugt sind.

Aufgrund des beschränkten Umfangs dieser Arbeit konnten allerdings auch einige Dinge nicht genauer untersucht werden. So wurden beispielsweise die Methoden auch für eine zweidimensionale Betrachtung implementiert, aber die Auswirkungen dessen nicht näher herangezogen und analysiert. Dazu wäre besonders bei der Variation der einzelnen Systemparameter eine quantitative Beschreibung vorteilhaft, in der man die zu untersuchenden Größen als Funktion des jeweiligen Systemparameters darstellt und anhand

5 Zusammenfassung und Ausblick

dieser die Veränderungen genauer beschreiben kann. Die exakten Abhängigkeiten der Bandlücke und auch der Majoranamoden können darüber hinaus nur mit einer analytischen Betrachtung bestimmt werden.

Literaturverzeichnis

- [1] A. Y. Kitaev, Physics-Uspekhi 44, 131 (2001).
- [2] E. Majorana and L. Maiani, Nuovo Cim. (engl. Transl. Soryushiron Kenkyu) 63, 149 (1981).
- [3] J. Alicea, Y. Oreg, G. Refael, F. von Oppen, and M. P. A. Fisher, Nature Physics 7, 412 (2011).
- [4] L. Fu and C. L. Kane, Physical Review Letters **100**, 096407 (2008).
- [5] J. D. Sau, R. M. Lutchyn, S. Tewari, and S. D. Sarma, Physical Review Letters 104, 040502 (2010).
- [6] Topology in condensed matter, https://topocondmat.org/, accessed: 2019-07-20.
- [7] P. DE GENNES, Superconductivity of Metals and Alloys, Advanced Book Classics (Addison-Wesley Publishing Company, 1966).
- [8] J. Nothhelfer, Localized Majorana modes in superconductor-ferromagnet heterostructures - A path towards topological quantum computation, Master's thesis.
- [9] K. M. Hals, M. Schecter, and M. S. Rudner, Physical Review Letters 117, 017001 (2016).
- [10] M. Sato, Y. Takahashi, and S. Fujimoto, Physical Review B 82, 134521 (2010).
- [11] K. Björnson and A. M. Black-Schaffer, Physical Review B **91**, 214514 (2015).
- [12] J.-X. Zhu, Bogoliubov-de Gennes Method and Its Applications (Springer International Publishing, 2016).
- [13] J. Klein, A. Léger, M. Belin, D. Défourneau, and M. J. L. Sangster, Physical Review B 7, 2336 (1973).

6 Anhang

6.1 Code

6.1.1 Implementierte Funktionen

Im Folgenden ist der Code der implementierten Funktionen zu sehen. Diese wurden eingebettet in die bereits vorhandene Matrix-Klasse [8] zur Berechnung des H_{BdG} . Hiermit ist es möglich totale/lokale Zustandsdichte und die Spektralfunktion zu bestimmen sowie den H_{BdG} im Impulsraum zu berechnen und zu diagonalisieren. Zusätzlich gibt man den Funktionen die Näherungsart und den Energiebereich. Für die temperaturabhängigen Plots gibt es jeweils eine weitere Funktion.

```
1
2 def calculate_DOS(self, energy_range =1.5, gauss = False, thermalized =
      False):
    ....
3
    Calculate the density of states for energies between -1.5 to 1.5 in a
4
        vector
    .....
5
    if gauss == True: # Naeherung der Delta-Distribution - Gauss
6
     def delta(x):
7
        return 1 / (np.pi*self.gamma**2/np.log(2))**0.5 * np.e **(-x**2 * np
8
            .log(2) /(self.gamma**2))
     N1 = int(energy_range * 16 / (self.gamma)) # Anzahl der diskreten
9
         Energiewerte
10
   elif thermalized == True: # Temperaturabhaengige Naeherung
11
      def fermiabl(energy):
      if energy > 20 * self.thermE:
12
13
        return O
      if energy > 10*self.thermE:
14
        return 1/ (np.exp(energy/ self.thermE) * self.thermE)
15
      else:
16
        return 1/ ((np.exp(energy/ self.thermE) +1 )**2)* np.exp(energy/
17
            self.thermE) / self.thermE
18
      delta = vectorize(fermiabl)
      d = np.log(3+2*2**0.5)
19
      N1 = int(energy_range * 16 / (self.thermE *d ))
20
^{21}
22
    else: # Lorentzkurve
23
      def delta(x):
24
       return 1 / np.pi * self.gamma / (x ** 2 + self.gamma ** 2)
25
     N1 = int(energy_range * 16 / (self.gamma))
26
27
28
```

```
6 Anhang
```

```
Nx = self.Nx
29
   Ny = self.Ny
30
    E = np.linspace(-energy_range, energy_range, N1)
31
32
    self.CalculateEigenValues()
33
34
    DOS = np.zeros(shape = N1, dtype = float)
35
36
    for e in range(N1): # Iterieren \tilde{A}_4^{\frac{1}{4}}ber die Energien
37
      a = 0
38
39
      for j in range(4 * Nx * Ny):# Iterieren \tilde{A}^{\frac{1}{4}}ber die Eigenwerte
40
        a += delta(E[e] - self.EigenValues[j])
41
      DOS[e] = a.real
42
    self.DOS = DOS # Setzen der Matrixinstanz
43
44
45
46 def calculate_DOS_thermal(self, energy_range =1.5, gauss = False,
     thermalized = False):
    .....
47
    Calculate the density of states for energies between -1.5 to 1.5 in a
48
       vector
    ....
49
    if gauss == True: # Naeherung der Delta-Distribution - Gauss
50
     def delta(x):
51
        return 1 / (np.pi*self.gamma**2/np.log(2))**0.5 * np.e **(-x**2 * np
52
             .log(2) /(self.gamma**2))
     N1 = int(energy_range * 16 / (self.gamma)) # Anzahl der diskreten
53
          Energiewerte
    elif thermalized == True:# Temperaturabhaengige Naeherung
54
      def fermiabl(energy):
55
        if energy > 20 * self.thermE:
56
57
          return O
         if energy > 10*self.thermE:
58
           return 1/ (np.exp(energy/ self.thermE) * self.thermE)
59
        else:
60
          return 1/ ((np.exp(energy/ self.thermE) +1 )**2)* np.exp(energy/
61
              self.thermE) / self.thermE
      delta = vectorize(fermiabl)
62
      d = np.log(3+2*2**0.5)
63
      N1 = int(energy_range * 16 / (self.thermE *d ))
64
65
66
   else: # Lorentzkurve
67
     def delta(x):
68
        return 1 / np.pi * self.gamma / (x ** 2 + self.gamma ** 2)
69
     N1 = int(energy_range * 16 / (self.gamma))
70
71
   Nx = self.Nx
72
73
    Ny = self.Ny
   E = np.linspace(-energy_range, energy_range, N1)
74
75
    self.MakeDeltaMatrix()
    self.MakeEnergyMatrix()
76
    self.CalculateEigenValues()
77
```

```
6 Anhang
```

```
78
     def fermi_distribution(energy, mu, thermal): # fermi-verteilung
79
       return 1/ (np.exp((energy - mu)/ thermal) +1 )
80
81
82
     DOS = np.zeros(shape = N1, dtype = float)
83
84
     for e in range(N1): # Iterieren \tilde{A}^{1}_{4}ber die Energien
85
      a = 0
86
       for j in range(4 * Nx * Ny): # Iterieren \tilde{A}^{\frac{1}{4}}ber die Eigenwerte
87
         a += delta(E[e] - self.EigenValues[j])
88
89
         a *= fermi_distribution(E[e], self.mu/2, self.thermE) # Modifizieren
              durch Fermi-verteilung
       DOS[e] = a.real
90
91
    self.DOS = DOS
92
93
94
95
96 def calculate_LDOS2D(self, energy_range = 1.5, gauss = False, thermalized
         = False):
97
     .....
98
    Calculate the local density of states for each site represented in a
99
        matrix for y = y\_LDOS for energies between -1.5 and 1.5
     ....
100
     if gauss == True: # Naeherung der Delta-Distribution - Gauss
101
     def delta(x):
102
         return 1 / (np.pi*self.gamma**2/np.log(2))**0.5 * np.e **(-x**2 * np
103
             .log(2) /(self.gamma**2))
      N1 = int(energy_range * 16 / (self.gamma))
104
     elif thermalized == True: # Temperaturabhaengige Naeherung
105
       def fermiabl(energy):
106
         if energy > 20 * self.thermE:
107
           return 0
108
         if energy > 10*self.thermE:
109
           return 1/ (np.exp(energy/ self.thermE) * self.thermE)
110
         else:
111
           return 1/ ((np.exp(energy/ self.thermE) +1 )**2)* np.exp(energy/
112
               self.thermE) / self.thermE
       delta = vectorize(fermiabl)
113
       d = np.log(3+2*2**0.5)
114
       N1 = int(energy_range * 16 / (self.thermE *d ))
115
116
117
    else: # Naeherung durch Lorentzkurve
118
      def delta(x):
119
        return 1 / np.pi * self.gamma / (x ** 2 + self.gamma ** 2)
120
       N1 = int(energy_range * 16 / (self.gamma))
121
122
123
124
125
    Nx = self.Nx
126
```

```
6 Anhang
```

```
Ny = self.Ny
127
128
     E = np.linspace(-energy_range, energy_range, N1) # Festlegen des
129
        Energiespektrums
     LDOS = np.zeros(shape= N1, dtype= float) # Berechnen der lokalen
130
         Zustandsdichte
    LDOSup = np.zeros(shape= N1, dtype= float)
131
    LDOSdown = np.zeros(shape= N1, dtype= float)
132
     self.CalculateEigenValues()
133
     x = self.x_LDOS
                         # Setzen der Position
134
135
     y = self.y_LDOS
136
137
     for e in range(N1): # Iteration \tilde{A}_{4}^{1} ber das Energiespektrum
138
       dos0 = 0
       a = 0
139
      b = 0
140
       c = 0
141
       for j in range(4 * Nx * Ny): # Iteration \tilde{A}^{1}_{4} ber alle Zustaende
142
         #uu = self.EigenVectors[:, j][2 * x + 2 * y * Nx] # u spin up
143
         #ud = self.EigenVectors[:, j][2 * x + 1 + 2 * y * Nx] # u spin down
144
         vu = self.EigenVectors[:, j][2 * x + 2 * y * Nx + 2 * Nx * Ny]
145
         vd = self.EigenVectors[:, j][2 * x + 1 + 2 * y * Nx + 2 * Nx * Ny]
146
         a += (np.abs(vu) ** 2 + np.abs(vd) **2) * delta(E[e] - self.
147
             EigenValues[j]) # Gesamtsystem
         b += (np.abs(vu) ** 2) * delta(E[e] - self.EigenValues[j]) # Spin up
148
         c += (np.abs(vd) **2) * delta(E[e] - self.EigenValues[j]) # Spin
149
             down
       LDOS[e] = a.real
150
       LDOSup[e] = b.real
151
       LDOSdown[e] = c.real
152
153
154
155
     self.LDOS = LDOS # Setzen der Instanzen der Klasse
156
     self.LDOSup = LDOSup
157
158
     self.LDOSdown = LDOSdown
159
160
161 def calculate_LDOS2D_thermal(self, energy_range = 1.5, gauss = False,
       thermalized = False):
162
     .....
163
    Calculate the local density of states for each site represented in a
164
         matrix for y = y_LDOS for energies between -1.5 and 1.5
     ....
165
    if gauss == True:
166
167
      def delta(x):
         return 1 / (np.pi*self.gamma**2/np.log(2))**0.5 * np.e **(-x**2 * np
168
             .log(2) /(self.gamma**2))
      N1 = int(energy_range * 16 / (self.gamma))
169
    elif thermalized == True:
170
      def fermiabl(energy):
171
         if energy > 20 * self.thermE:
172
           return 0
173
```

6 Anhang

```
if energy > 10*self.thermE:
174
           return 1/ (np.exp(energy/ self.thermE) * self.thermE)
175
         else:
176
           return 1/ ((np.exp(energy/ self.thermE) +1 )**2)* np.exp(energy/
177
              self.thermE) / self.thermE
       delta = vectorize(fermiabl)
178
       d = np.log(3+2*2**0.5)
179
       N1 = int(energy_range * 16 / (self.thermE *d ))
180
181
182
183
    else:
184
       def delta(x):
185
         return 1 / np.pi * self.gamma / (x ** 2 + self.gamma ** 2)
186
       N1 = int(energy_range * 16 / (self.gamma))
187
188
     def fermi_distribution(energy, mu, thermal):
189
      return 1/ (np.exp((energy - mu) / thermal) +1 )
190
191
192
    Nx = self.Nx
193
    Ny = self.Ny
194
    #self.MakeDeltaMatrix()
195
    #self.MakeEnergyMatrix()
196
    E = np.linspace(-energy_range, energy_range, N1)
197
    LDOS = np.zeros(shape= N1, dtype= float)
198
199
    LDOSup = np.zeros(shape= N1, dtype= float)
    LDOSdown = np.zeros(shape= N1,dtype= float)
200
    self.CalculateEigenValues()
201
    x = self.x_LDOS
202
    y = self.y_LDOS
203
204
     for e in range(N1):
205
      dos0 = 0
206
       a = 0
207
      b = 0
208
       c = 0
209
       for j in range(4 * Nx * Ny):
210
         #uu = self.EigenVectors[:, j][2 * x + 2 * y * Nx] # u spin up
211
         #ud = self.EigenVectors[:, j][2 * x + 1 + 2 * y * Nx] # u spin down
212
         vu = self.EigenVectors[:, j][2 * x + 2 * y * Nx + 2 * Nx * Ny]
213
         vd = self.EigenVectors[:, j][2 * x + 1 + 2 * y * Nx + 2 * Nx * Ny]
214
         a += ( np.abs(vu) ** 2 + np.abs(vd) **2) * delta(E[e] - self.
215
            EigenValues[j])
216
         b += ( np.abs(vu) ** 2) * delta(E[e] - self.EigenValues[j])
217
         c += ( np.abs(vd) **2) * delta(E[e] - self.EigenValues[j])
218
       a *= fermi_distribution(E[e], self.mu/2, self.thermE)
219
       b *= fermi_distribution(E[e], self.mu/2, self.thermE)
220
       c *= fermi_distribution(E[e], self.mu/2, self.thermE)
221
       LDOS[e] = a.real
222
223
       LDOSup[e] = b.real
       LDOSdown[e] = c.real
224
225
```

```
6 Anhang
```

```
226
227
     self.LDOS = LDOS
228
229
     self.LDOSup = LDOSup
230
     self.LDOSdown = LDOSdown
231
232
233
234 def calculate_k_space_matrix2D(self, kx, ky):
     """ Calculate the matrix in momentum space for a given k"""
235
236
237
     Nx = self.Nx
     Ny = self.Ny
238
     k_space_matrix = np.zeros([4, 4], dtype = "complex")
239
240
     def column_basis_vector(N, n):
241
      x = np.zeros([N,1], dtype = "complex")
242
       x[n] = 1
243
      return x
244
245
246
     def k_vector(kx, ky, Nx, Ny):
247
       x = np.zeros([Nx * Ny,1], dtype = "complex")
248
       for j in range(Ny):
249
         for i in range(Nx):
250
           x += np.exp(-1.j*(i+1)*kx) * np.exp(-1.j*(j+1)*ky) *
251
               column_basis_vector(Nx * Ny, i + j * Nx)
       return (Nx * Ny) ** (-0.5) * x
252
253
     a = k_vector(kx, ky, Nx, Ny)
254
255
     for i in range(2):
256
       for j in range(2):
257
         k_space_matrix[2*i, 2*j] = np.dot(np.transpose(np.conjugate(a)), np.
258
             dot(self.EnergyMatrix[i * 2 * Nx * Ny :(i + 1) * 2 * Nx * Ny :2
             , j * 2 * Nx * Ny :(j + 1) * 2 * Nx * Ny:2], a))[0][0]
         k_space_matrix[2*i+1,2* j] = np.dot(np.transpose(np.conjugate(a)),
259
             np.dot(self.EnergyMatrix[i * 2 * Nx * Ny +1 :(i + 1) * 2 * Nx *
             Ny +1 :2, j * 2 * Nx * Ny :(j + 1) * 2 * Nx * Ny:2], a))[0][0]
         k_space_matrix[2*i,2* j+1] = np.dot(np.transpose(np.conjugate(a)),
260
             np.dot(self.EnergyMatrix[i * 2 * Nx * Ny:(i + 1) * 2 * Nx * Ny
             :2, j * 2 * Nx * Ny + 1 :(j + 1) * 2 * Nx * Ny + 1:2], a))[0][0]
         k_space_matrix[2*i+1, 2*j+1] = np.dot(np.transpose(np.conjugate(a)),
261
              np.dot(self.EnergyMatrix[i * 2 * Nx * Ny +1 :(i + 1) * 2 * Nx *
              Ny+1 :2, j * 2 * Nx * Ny + 1 :(j + 1) * 2 * Nx * Ny + 1 :2], a)
             )[0][0]
262
263
     self.k_space_matrix = k_space_matrix
264
265
266 def calculate_spectral_function2D(self, ky = 0, energy_range = 1.5, gauss
      = False, thermalized = False):
     .....
267
```

```
6 Anhang
```

```
Calculate the spectral function for values of k between -pi to pi
268
         represented in a matrix for a certain ky for energies between -1.5
         and 1.5
     ....
269
     if gauss == True:
270
      def delta(x):
271
         return 1 / (np.pi*self.gamma**2/np.log(2))**0.5 * np.e **(-x**2 * np
272
             .log(2) /(self.gamma**2))
       N1 = int(energy_range * 16 / (self.gamma))
273
    elif thermalized == True:
274
275
       def fermiabl(energy):
276
         if energy > 20 * self.thermE:
277
           return 0
278
         if energy > 10*self.thermE:
           return 1/ (np.exp(energy/ self.thermE) * self.thermE)
279
280
         else:
           return 1/ ((np.exp(energy/ self.thermE) +1 )**2)* np.exp(energy/
281
               self.thermE) / self.thermE
       delta = vectorize(fermiabl)
282
       d = np.log(3+2*2**0.5)
283
       N1 = int(energy_range * 16 / (self.thermE *d ))
284
285
286
    else:
287
       def delta(x):
288
289
        return 1 / np.pi * self.gamma / (x ** 2 + self.gamma ** 2)
290
      N1 = int(energy_range * 16 / (self.gamma))
291
     E = np.linspace(-energy_range, energy_range, N1)
292
     kx = np.linspace(-np.pi, np.pi, 300)
293
     spectral_function = np.zeros(shape=(N1, 300),dtype= float)
294
     spectral_functionup = np.zeros(shape=(N1, 300),dtype= float)
295
     spectral_functiondown = np.zeros(shape=(N1, 300),dtype= float)
296
297
     for e in range(N1):
298
      dosk0 = 0
299
       for k1 in range(300):
300
         self.CalculateEigenValuesk1(kx[k1], ky)
301
         a = 0
302
        b = 0
303
         с = 0
304
         for j in range(4):
305
           #uu = self.EigenVectorsk[:, j][0] # u spin up
306
           #ud = self.EigenVectorsk[:, j][1] # u spin down
307
           vu = self.EigenVectorsk[:, j][2]
308
           vd = self.EigenVectorsk[:, j][3]
309
           a += (np.abs(vu) ** 2 + np.abs(vd) **2) * delta(E[e] - self.
310
               EigenValuesk[j])
           b += (np.abs(vu) ** 2) * delta(E[e] - self.EigenValuesk[j])
311
           c += (np.abs(vd) ** 2) * delta(E[e] - self.EigenValuesk[j])
312
         spectral_function[e, k1] = a.real
313
         spectral_functionup[e, k1] = b.real
314
         spectral_functiondown[e, k1] = c.real
315
316
```

```
6 Anhang
```

```
self.spectral_function = spectral_function
317
     self.spectral_functionup = spectral_functionup
318
     self.spectral_functiondown = spectral_functiondown
319
320
321
322
323 def calculate_spectral_function2D(self, ky = 0, energy_range = 1.5, gauss
      = False, thermalized = False):
     ....
324
325
     Calculate the spectral function for values of k between -pi to pi
         represented in a matrix for a certain ky for energies between -1.5
         and 1.5
     ....
326
     if gauss == True:
327
       def delta(x):
328
         return 1 / (np.pi*self.gamma**2/np.log(2))**0.5 * np.e **(-x**2 * np
329
             .log(2) /(self.gamma**2))
      N1 = int(energy_range * 16 / (self.gamma))
330
     elif thermalized == True:
331
       def fermiabl(energy):
332
333
         if energy > 20 * self.thermE:
334
           return 0
         if energy > 10*self.thermE:
335
           return 1/ (np.exp(energy/ self.thermE) * self.thermE)
336
         else:
337
           return 1/ ((np.exp(energy/ self.thermE) +1 )**2)* np.exp(energy/
338
               self.thermE) / self.thermE
       delta = vectorize(fermiabl)
339
       d = np.log(3+2*2**0.5)
340
       N1 = int(energy_range * 16 / (self.thermE *d ))
341
342
343
     else:
       def delta(x):
344
         return 1 / np.pi * self.gamma / (x ** 2 + self.gamma ** 2)
345
       N1 = int(energy_range * 16 / (self.gamma))
346
347
     E = np.linspace(-energy_range, energy_range, N1)
348
     kx = np.linspace(-np.pi, np.pi, 300)
349
     spectral_function = np.zeros(shape=(N1, 300),dtype= float)
350
     spectral_functionup = np.zeros(shape=(N1, 300),dtype= float)
351
     spectral_functiondown = np.zeros(shape=(N1, 300),dtype= float)
352
353
    for e in range(N1):
354
      dosk0 = 0
355
      for k1 in range(300):
356
357
        self.CalculateEigenValuesk1(kx[k1], ky)
358
         a = 0
         b = 0
359
         с = 0
360
         for j in range(4):
361
           #uu = self.EigenVectorsk[:, j][0] # u spin up
362
363
           #ud = self.EigenVectorsk[:, j][1] # u spin down
           vu = self.EigenVectorsk[:, j][2]
364
           vd = self.EigenVectorsk[:, j][3]
365
```

```
a += (np.abs(vu) ** 2 + np.abs(vd) **2) * delta(E[e] - self.
366
               EigenValuesk[j])
           b += (np.abs(vu) ** 2) * delta(E[e] - self.EigenValuesk[j])
367
           c += (np.abs(vd) ** 2) * delta(E[e] - self.EigenValuesk[j])
368
         spectral_function[e, k1] = a.real
369
         spectral_functionup[e, k1] = b.real
370
         spectral_functiondown[e, k1] = c.real
371
372
373
     self.spectral_function = spectral_function
     self.spectral_functionup = spectral_functionup
374
375
     self.spectral_functiondown = spectral_functiondown
```

6.1.2 Funktionen zum Plotten

Zur Visualisierung der lokalen Zustandsdichte und der Spektralfunktion wurden zwei Funktionen implementiert, die jeweils eine Matrix übergeben bekommen.

```
1 def plot_LDOS(self, matrix, name, log = False, limits = None, xlabels =
      [0, 1], ylabels = [-1.5, 0, 1.5], xticks = 2, yticks = 3):
2
    fig,axes = plt.subplots()
    if log == True: # logarithmische Skala
3
      p1 = axes.imshow(np.log10(matrix), origin='lower', extent=(-2,2,-2,2),
4
         cmap=cm.jet, interpolation = "spline36", clim = limits)
    else: p1 = axes.imshow((matrix), origin='lower', extent=(-2,2,-2,2), cmap=
5
        cm.jet, interpolation = "spline36", clim = limits)
   fig.colorbar(p1, label = "LDOS / h")
6
    axes.set_xlabel("x/N")
7
    axes.set_ylabel("E/t")
8
    axes.set_xticks(np.linspace(-2, 2, xticks))
9
    axes.set_xticklabels(xlabels)
10
    axes.set_yticks(np.linspace(-2, 2, yticks))
11
12
    axes.set_yticklabels(ylabels)
13
    plt.savefig(name + ".png", bbox_inches="tight" )
14
    return p1.properties()['clim']
15
16 def plot_spectral_function(self, matrix, name, log = False, ylabels =
      [-1.5, 0, 1.5], yticks = 3, limits = None):
    fig1,axes1 = plt.subplots()
17
      if log == True:
18
        p1 = axes1.imshow(np.loq10(matrix), origin='lower', extent
19
            =(-2,2,-2,2),cmap=cm.jet, interpolation = "spline36", clim =
            limits)
      else: p1 = axes1.imshow((matrix),origin='lower', extent=(-2,2,-2,2),
20
          cmap=cm.jet, interpolation = "spline36", clim = limits)
    fig1.colorbar(p1, label = "Spektralfunktion / h")
21
    axes1.set_xlabel("k")
22
    axes1.set_ylabel("E/t")
23
24
    axes1.set_xticks(np.linspace(-2, 2, 3))
    axes1.set_xticklabels([r"-$\pi$", 0, r"$\pi$"])
25
    axes1.set_yticks(np.linspace(-2, 2, yticks))
26
    axes1.set_yticklabels(ylabels)
27
    plt.savefig(name, bbox_inches="tight" )
28
    return p1.properties()['clim']
29
```

6.2 Variation der Systemparameter

Im Folgenden sind die kompletten Bilderserien, die in Kapitel 4.4 betrachtet wurden, dargestellt.



6.2.1 Variation des chemischen Potentials

Abbildung 6.1: $\mu = (a)0.3$, (b)0.5, (c)1.



Abbildung 6.2: μ = (a) 1.5, (b)1.73, (c) 2.

6 Anhang



Abbildung 6.3: μ = (a) 2.5, (b) 3, (c)3.6.





Abbildung 6.4: h = (a) -1.1, (b) -1.3, (c) -1.5.



Abbildung 6.5: h = (a) -2, (b) -2.25, (c) -2.5.





Abbildung 6.6: h = (a) -3, (b) -3.5, (c) -3.8.





Abbildung 6.7: $\alpha_{\rm R} =$ (a) 0.1, (b), 0.3, (c)0.5.



Abbildung 6.8: $\alpha_{\rm R}$ = (a) 0.7, (b), 0.9, (c)1.1.

6 Anhang



Abbildung 6.9: $\alpha_{\rm R} =$ (a) 1.3, (b), 1.5, (c)1.7.



Abbildung 6.10: $\alpha_{\rm R}$ = (a) 1.9, (b), 2.1, (c)2.5.



Abbildung 6.11: $\alpha_{\rm R} =$ (a) 2.75, (b), 3, (c)3.2.

6.3 Modifizierung des chemischen Potentials

Zwischen 1D und 2D Darstellung des Systems kommt es zu Verschiebungen der topologischen Phase. Auch das chemische Potential hat hierdurch einen anderen Einfluss. Da wir eine konsistente Berechnung zwischen ein- und zweidimensionaler Berechnung des Systems erreichen wollen, haben wir das chemische Potential für die Temperaturberech-

6 Anhang

nung somit wie folgt modifiziert:

$$\mu_{\text{modifiziert}} = \frac{\mu}{2}.$$
(6.1)

6.4 Kettensymmetrie



Abbildung 6.12: Differenzen der Zustände mit gleichem Abstand zur Kettenmitte

In Abbildung (6.12) ist die Kettensymmetrie nachgerechnet. Es ist zu erkennen, dass diese bis auf numerische Ungenauigkeiten vorliegt.

6.5 Technische Details der Implementierung

6.5.1 Festlegen der diskreten Energien

Die Implementierungen wurden so vorgenommen, dass in der Breite der einzelnen Peaks mindestens 16 Werte liegen. Dies garantiert, dass durch die diskreten Funktionen keine schwerwiegenden Unterschiede auftreten.

6.5.2 Transformation in den Impulsraum

Hierfür muss man beachten, dass man den Hamilton-Operator in 16 N x N Matrizen aufteilt, für die man dann einzeln die Transformation aus Gleichung 3.12 durchführt und welche somit die einzelnen Einträge des 4x4-Impulsraum-Hamilton-Operators bilden.