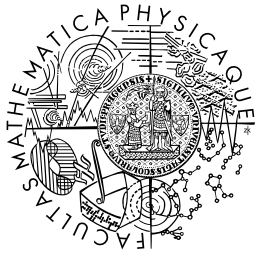


MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Vladimír Urban

Supraproud v nanorozměrných součástkách: teorie středního pole

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: prof. RNDr. Václav Janiš, DrSc.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Fyzika

Praha 2022

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V ..... dne ....

Podpis autora

Mé poděkování patří vedoucímu mojí bakalářské práce prof. RNDr. Václavovi Janišovi, DrSc. za zasvěcení mě do problematiky daného problému, za skvělé konzultace k práci, za ochotu mi vždy pomoct během řešení věcí k bakalářské práci a hlavně za trpělivost se mnou.

Název práce: Supraproud v nanorozměrných součástkách: teorie středního pole

Autor: Vladimír Urban

Ústav: Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: prof. RNDr. Václav Janiš, DrSc., Ústav teoretické fyziky

Abstrakt: Bakalářská práce se zabývá vlivem magnetického pole na diskrétní stavy Josephsonova spoje a vlivem spojitých stavů na chování jednohladinové kvantové tečky s elektronovou korelací napojené na BCS supravodiče. Interakci elektronů jsme započetli v rámci teorie středního pole. Práce má dvě části teoretickou a praktickou. V teoretické části rozebíráme fyziku problému, zavedeme model a metodu řešení pomocí Greenových funkcí. V praktické části pak uvádíme numerické výsledky. Kvantová tečka byla prvně studována v neinteragujícím případě s vnějším magnetickým polem a poté i se započtením interakce mezi elektrony. Interagující případ jsme řešili pro poloviční plnění a v závislosti na energetické hladině příměsi. Zjistili jsme, že jeden diskrétní stav Josephsonova spoje může ve spinově polarizovaném řešení přejít do pásu, pokud je fázový rozdíl mezi supravodiči nulový. Charakterizovali jsme jednotlivé příspěvky do supraproudu a vysvětlili, proč může být zavedená hustota Cooperových párů na příměsi záporná.

Klíčová slova: supraproud, kvantová tečka, Cooperovy páry, magnetické pole

Title: Supercurrent in nanoscale devices: Mean-field theory

Author: Vladimír Urban

Institute: Institute of Theoretical Physics

Supervisor: prof. RNDr. Václav Janiš, DrSc., Institute of Theoretical Physics

Abstract: The bachelor thesis deals with the influence of the magnetic field on the discrete states of the Josephson junction and the influence of the continuous states on the behaviour of a single-level quantum dot with electron correlation coupled to BCS superconductors. We calculated the interaction of electrons within the theory of the mean-field. The thesis has two parts, theoretical and practical. In the theoretical part we discuss the physics of the problem, introduce a model and method of solution using Green's functions. In the practical part we present numerical results. The quantum dot was first studied in a non-interacting case with an external magnetic field and later with the interaction between electrons. We solved the interacting case for half-filling and depending on the energy level of the impurity. We found that one discrete state of the Josephson junction can pass into a band in a spin-polarized solution if the phase difference between the superconducting leads is zero. We characterized the individual contributions to the superconducting current and explained why the established density of Cooper pairs on the impurity can be negative.

Keywords: supercurrent, quantum dot, Cooper pairs, magnetic field

Obsah

Úvod **3**
0.0.1 Cíl bakalářské práce 4

1 Model kvantové tečky **5**
1.1 Hamiltonián 5
1.2 Nambuův formalismus 6

2 Teorie středního pole **9**
2.1 Greenova funkce 9
2.2 $0 - \pi$ přechod 12
2.3 Atomová limita 13

3 Numerické výsledky **15**
3.1 Kvantová tečka v magnetickém poli 15
3.2 Interagující kvantová tečka 16

Závěr **21**

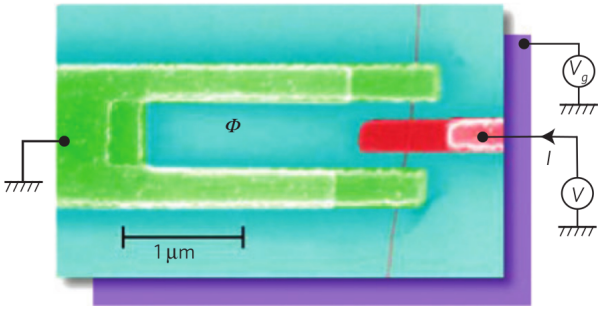
Seznam použité literatury **23**

Seznam obrázků **25**

A Přílohy **27**
A.1 Odvození Greenovy funkce kvantové tečky v neinteragujícím případě 27

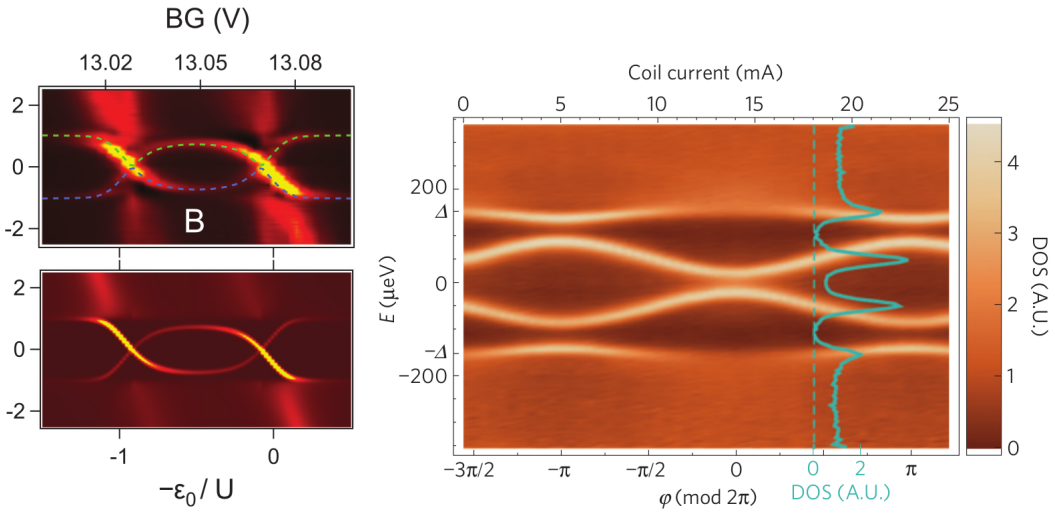
Úvod

Josephsonův spoj jsou dva BCS supravodiče mezi nimiž je nevodivá příměs (nečistota). Experimentálně se používají uhlíkové nanotrubice, kvantové tečky či samotné molekuly. Tyto nanorozměrné nečistoty jsou prostorově lokalizované s jednou nebo více oddělenými diskrétními energetickými hladinami. Josephsonovy spoje umožňují studovat některé významné fyzikální jevy např: Kondův efekt, nebo tak zvaný $0 - \pi$ přechod. (Cleuziou a kol., 2006)



Obrázek 1: Josephsonova spojka. (Pillet a kol., 2010b)

Přes Josephsonův spoj teče supraproud (Josephsonův proud), který je úměrný hustotě Cooperových stavů na příměsi.



Obrázek 2: Hustota stavů Josephsonova spoje. (Pillet a kol., 2010a) a (Pillet a kol., 2010b)

V našem případě příměs je kvantová tečka o jediné atomové hladině. Kvantová tečka neboli quantum dot je část polovodiče o velikosti pár nanometrů, která může vázat elektrony. Vázané elektrony mohou mít jen určitou diskrétní energii obdobně jako atomu.

Elektrony v supravodivých přívodech tvoří Cooperovy páry. Cooperovy páry přecházejí přes Josephsonův spoj z vodivostního pásu supravodiče na druhý supravodič buď přímo, tedy tunelováním přes potenciálovou bariéru, či využije příměs, konkrétně přeskočí na její atomovou energetickou hladinu.

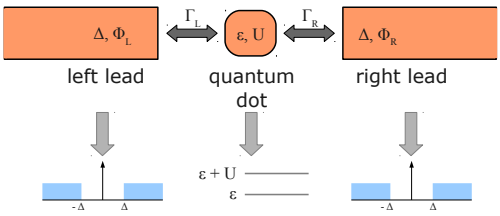
0.0.1 Cíl bakalářské práce

Cílem bakalářské práce je studovat jednak vliv magnetického pole na chování diskrétních stavů abychom zjistili souvislost mezi křížením diskrétních stavů a $0 - \pi$ přechodem. V interagujícím případě budeme separovat příspěvky od spojitých a diskrétních stavů do Josephsonova proudu a studovat změny chování diskrétních stavů oproti atomové limitě bez přítomnosti spojitých.

1. Model kvantové tečky

1.1 Hamiltonián

Model kvantové tečky můžeme graficky znázornit na obr. 1.1



Obrázek 1.1: Schématický model Josephsonova spoje. (Janiš, 2018)

Samotný hamiltonián systému se skládá z několika částí. Začněme hamiltoniánem příměsi, ten má dvě složky. Za prvé energie atomové hladiny ϵ a za druhé Coulombická interakce U mezi elektrony se spiny nahoru ($\uparrow$) $\sigma = +1$ a dolů ($\downarrow$) $\sigma = -1$

$$\hat{H}_{imp} = \hat{H}^0_{imp} + \hat{U}_{imp} = \sum_\sigma (\epsilon - \sigma h) d^\dagger_\sigma d_\sigma + U(d^\dagger_\uparrow d_\uparrow - \frac{1}{2})(d^\dagger_\downarrow d_\downarrow - \frac{1}{2}), \tag{1.1}$$

kde h je magnetické pole. (Janiš a Yan, 2021)

Další částí jsou levý ($s = L$) a pravý ($s = R$) supravodivý přívod. BCS supravodiče jsou charakterizovány fází vodiče ϕ_s a polovinou šířky energetické mezery Δ_s. Hamiltonián přívodu má pak tvar

$$\hat{H}^s_{bath} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{s\mathbf{k}} c^\dagger_{s\mathbf{k}\sigma} c_{s\mathbf{k}\sigma} - \Delta_s \sum_{\mathbf{k}} (e^{i\phi_s} c^\dagger_{s\mathbf{k}\uparrow} c^\dagger_{s-\mathbf{k}\downarrow} + e^{-i\phi_s} c_{s-\mathbf{k}\downarrow} c_{s\mathbf{k}\uparrow}), \tag{1.2}$$

kde $\epsilon_{\mathbf{k}}$ je energie elektronu s vlnovým vektorem $\mathbf{k}$. (Janiš a Yan, 2021)

Hamiltonián se skládá i z pohybu elektronů přes Josephsonův spoj. Jak jsme už zmínili, ten může jít dvěma způsoby přes spoj. Buď přeskočí ze supravodiče na atomovou hladinu příměsi, kde hamiltonán přeskoku je (Janiš a Yan, 2021)

$$\hat{H}^s_{coup} = -t_s \sum_\sigma (c^\dagger_{s\sigma} d_\sigma + d^\dagger_\sigma c_{s\sigma}), \tag{1.3}$$

kde t je hybridizace mezi příměsí a supravodičem, nebo může tunelovat potenciálovou bariérou a přeskočit přímo na druhý supravodivý přívod. V tomto případě vypadá hamiltonián přeskoku následovně

$$\hat{H}_{direct} = -t_d \sum_\sigma (c^\dagger_{L\sigma} c_{R\sigma} + c^\dagger_{R\sigma} c_{L\sigma}), \tag{1.4}$$

avšak tento příspěvek zanedbáváme. (Meng, 2009) Označili jsme d_σ a $c_{s\sigma}$, což jsou anihilační operátory příměsi respektive supravodivého přívodu.

1.2 Nambuův formalismus

K jednoduššímu popisu problému zavedeme Nambuův formalismus (Karrasch, Oguri a Meden, 2008)

$$\Psi_{s\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c_{s\mathbf{k}\uparrow} \\ c^\dagger_{s-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \Phi = \begin{pmatrix} d_\uparrow \\ d^\dagger_\downarrow \end{pmatrix}. \tag{1.5}$$

Pak můžeme hamiltonián přepsat pomocí antikomutačních relací v řeči Nambuova formalismu. Chceme studovat jen kvantovou tečku a jelikož hamiltonián supravodivých přívodů je kvadratický, tak můžeme přes jeho stupně volnosti $\mathbf{k}$ přeintegrovat a přejít ke Greenovým funkcím pouze na příměsi. V případě neinteragujících spinů ($U = 0$) lze problém řešit analyticky. Nechme stejnou velikost poloviny šířky energetické mezery $\Delta_R = \Delta_S = \Delta$. Použijme stejnou hybridizaci mezi kvantovou tečkou a přívodem $t_R = t_L = t$. Dále označme renormalizovanou hybridizaci $\Gamma_0 = \pi t^2 \rho(0)$, kde $\rho(0)$ je hustota stavů elektronů v supravodiči na Fermiho mezi, a fázový rozdíl supravodičů $\phi = \phi_L - \phi_R$. Přejděme Fourierovou transformací z imaginárních časů k energiím. Pak pro neinteragující kvantovou tečku dostáváme inverzní Greenovu funkci příměsi:

$$\hat{G}^{(0)-1}_\sigma(z) = \begin{pmatrix} z[1+s(z)] + \sigma h - \epsilon & \cos(\frac{\phi}{2}) s(z) \Delta \\ \cos(\frac{\phi}{2}) s(z) \Delta & z[1+s(z)] + \sigma h + \epsilon \end{pmatrix}, \tag{1.6}$$

kde $s(z) = \dfrac{i\Gamma_0}{\zeta} \operatorname{sgn}(\Im z)$ je hybridizační self-energie, tedy renormalizace energetické hladiny nečistoty způsobená napojením na supravodiče. Odvození Greenovy funkce kvantové tečky po odprojektování nelokálních stupňů volnosti supravodivých přívodů je v příloze A.1.

Zavedli jsme nové komplexní číslo $\zeta = \xi + i\eta$ určené komplexní energií $z = x + iy$ pomocí vztahu $\zeta^2 = z^2 - \Delta^2$. Využijeme konvenci pro komplexní odmocninu

$$\xi\eta = xy, \quad \operatorname{sgn}(\xi) = \operatorname{sgn}(x), \quad \operatorname{sgn}(\eta) = \operatorname{sgn}(y). \tag{1.7}$$

Energie ζ pro reálné $z = x \pm i0$ je reálná mimo interval energií $(-\Delta, \Delta)$ a imaginární uvnitř intervalu

$$\begin{aligned} \zeta &= \operatorname{sgn}(x)\sqrt{x^2 - \Delta^2} \quad \text{pro} \quad |x| > \Delta, \\ \zeta &= \pm i\sqrt{\Delta^2 - x^2} \quad \text{pro} \quad |x| < \Delta. \end{aligned} \tag{1.8}$$

Dle vztahů (1.8) je potom hybridizační self-energie ryze imaginární mimo energetickou mezeru a ryze reálná v ní

$$\begin{aligned} s(x \pm i0) &= \pm \frac{i\Gamma_0 \operatorname{sgn}(x)}{\sqrt{x^2 - \Delta^2}} \quad \text{pro} \quad |x| > \Delta, \\ s(x \pm i0) &= \frac{\Gamma_0}{\sqrt{\Delta^2 - x^2}} \quad \text{pro} \quad |x| < \Delta. \end{aligned} \tag{1.9}$$

Následovně získáme Greenovu funkci kvantové tečky pro $U = 0$

$$\hat{G}^{(0)}_\sigma(z) = \frac{1}{D^{(0)}_\sigma(z)} \begin{pmatrix} z[1+s(z)] + \sigma h + \epsilon & -\cos(\frac{\phi}{2}) s(z) \Delta \\ -\cos(\frac{\phi}{2}) s(z) \Delta & z[1+s(z)] + \sigma h - \epsilon \end{pmatrix}, \tag{1.10}$$

kde jsme označili

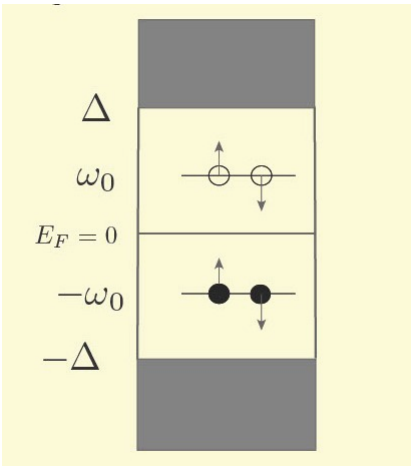
$$D_\sigma^{(0)}(z) = [z(1+s(z)) + \sigma h]^2 - \epsilon^2 - \cos^2(\frac{\phi}{2}) s^2(z)\Delta^2$$

determinant inverzní Greenovy funkce příměsi. Napojení nečistoty na přívody získáváme nové energetické spektrum celého Josephsonova spoje. Přes spoj přechází Cooperovy páry. Na rozbití Cooperova páru je třeba energie Δ. Pokud získá Cooperův pár energii větší či rovnou Δ, rozpadne se a může se nacházet v libovolném stavu. Naopak, když Cooperův pár nemá dostatečnou energii může se ve spoji nacházet jen na určité energetické hladině. Energie Δ nám rozděluje možné spektrum stavů. V energetickém intervalu $(-\infty, -\Delta\rangle \cup \langle\Delta, \infty)$ (v tzv. pásu) mohou být elektrony kdekoliv, proto v tomto intervalu nazýváme stavy spojitými. Naproti tomu interval energetické mezery $(-\Delta, \Delta)$, kde elektrony mohou být jen v určitých izolovaných stavech, označujeme jako stavy diskrétní. Záporná část spektra představuje zaplněné stavy, jsou na nich vázané elektrony. Kladná část spektra jsou díry. Elektrony při přechodu přes Josephsonův spoj mohou jít jen přes díry. (Oguri, Tanaka a Bauer, 2013) a (Vecino, Martín-Rodero a Levy Yeyati, 2013)

Nulový determinant určuje čtyři diskrétní stavy $\pm\omega_\sigma$ v nenulovém magnetickém poli. Pro nulové magnetické pole máme jen dva stavy $\pm\omega_0$. Diskrétní stavy nejsou nezávislé, platí mezi nimi vztah $\omega_\uparrow^+ = -\omega_\downarrow^-$ a $\omega_\downarrow^+ = -\omega_\uparrow^-$, kde jsme označili $\pm\omega_\sigma = \omega_\sigma^\pm$. Nezávislé diskrétní stavy jsou určeny rovnicí

$$\omega_\sigma(1+s_\sigma) = -\sigma h + \sqrt{\epsilon^2 + c_\phi^2 s_\sigma^2 \Delta^2}, \tag{1.11}$$

kde jsme označili $c_\phi = \cos(\frac{\phi}{2})$ a $s_\sigma = s(\omega_\sigma)$.



Obrázek 1.2: Diskrétní a spojité stavy Josephsonova spoje. (Janiš, 2018)

Případ s interagujícími spiny ($U \neq 0$) je složitější, nedá se řešit analyticky. Proto se interagující případ modeluje pomocí interakční self-energie

$$\hat{G}^{-1}(\omega) = \hat{G}_\sigma^{(0)-1}(\omega) - \Sigma_\sigma(\omega). \tag{1.12}$$

Důležitou vlastností Josephsonovy spojky je možnost průchodu supraproudu, který teče přes kvantovou tečku napojenou na BCS supravodiče (Janiš, 2018)

$$J = -\Gamma_0 \Delta \sum_\sigma \left[\frac{\underset{\omega_\sigma}{\mathrm{Res}} \mathcal{G}^*_\sigma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega_\sigma^2}} + \int_{-\infty}^{-\Delta} \frac{\Re \mathcal{G}^*_\sigma(\omega)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}} \frac{\mathrm{d}\omega}{\pi} \right] \sin(\frac{\phi}{2}). \tag{1.13}$$

Příspěvek do supraproudu pochází jak od diskrétních stavů, první člen, tak od spojitých, druhý člen. Velikost a znaménko příspěvku od obou členů se mění při kvantovém přechodu $0 - \pi$, který odpovídá při nulové teplotě křížení diskrétních stavů.

.

2. Teorie středního pole

Při řešení mnohočásticových systémů jsou problémem nezanedbatelné vzájemné interakce částic. Silná interakce má vliv na kvalitativní chování systému. Bohužel takto složité chování není přesně řešitelné. Proto zavádíme přibližné teorie. Máme zhruba dvě možnosti jak problematiku řešit. Za prvé můžeme udělat počítačové simulace, ale numerika je omezena na konečný počet stupňů volnosti systému. Nebo můžeme problém zjednodušovat a aproximovat do té doby, než se dá řešit analyticky.

Mezi numerické metody řešení patří zejména numerická renormalizační grupa (NRG) a kvantové Monte Carlo (QMC). Obě metody jsou probírány v článku Karrasch a kol. (2008). V různých aproximacích, kde řešíme problém analyticky, máme možnost použít teorii středního pole nebo zavést dynamické korekce.

Teorie středního pole zavádí parametry, které jsou určeny selfkonzistentně.

2.1 Greenova funkce

Do neinteragující Greenovy funkce příměsi je třeba zavést Coulombické odpuzování elektronů s různými spiny, což v sobě zahrnuje matice interakční self-energie

$$\Sigma_\sigma = U \begin{pmatrix} n_{-\sigma} & \nu \\ \nu & -n_\sigma \end{pmatrix}, \tag{2.1}$$

kde jsme uvažovali, že efektivní interakce se rovná Coulombově interakci. (Janiš, Pokorný a Žonda, 2016) Zavedli jsme nábojovou hustotu

$$n = n_\uparrow + n_\downarrow, \tag{2.2}$$

magnetizaci

$$m = n_\uparrow - n_\downarrow \tag{2.3}$$

a hustotu Cooperových párů ν.

Veličiny n, m a ν představují aproximaci středního pole. V této teorii středního pole, odpovídající slabé interakci, dochází k nefyzikálnímu přechodu do magnetického stavu při konečných teplotách. Ale zavedením efektivní interakce mezi elektrony Λ, jak je diskutováno v článku (Janiš a Yan, 2021), se tento přechod potlačí. V našem případě předpokládáme, že efektivní interakce se rovná Coulombické $\Lambda = U$, neboť tento zjednodušující předpoklad teorie středního pole nemá kvalitativní vliv na analýzu v této práci. Teorie středního pole popisuje chování nečistoty připojené na supravodivé přívody při všech teplotách a libovolném magnetickém poli. Aproximaci středního pole řešíme v Matsurbarově formalismu. Sumy přes Matsurbarovy frekvence můžeme přepsat pomocí spektrální reprezentace. Ve spektrální reprezentaci můžeme zapsat Greenovu funkci. Ta má dvě části za prvé diagonální část, což je takzvaná normální Greenova funkce, a nediagonální část je pak anomální Greenova funkce.

Normální interagující Greenova funkce kvantové tečky

$$G_\sigma(\omega_+) = \frac{\omega\left[1 + s(\omega_+)\right] + \sigma h_U + \epsilon_U}{\left[\omega\left[1 + s(\omega_+)\right] + \sigma h_U\right]^2 - \epsilon_U^2 - c_\phi^2\left[s(\omega_+)\Delta - U\nu\right]^2}, \tag{2.4}$$

kde $h_U = \left(h + \frac{U}{2}m\right)$ a $\epsilon_U = \left(\epsilon + \frac{U}{2}n\right)$.

Anomální interagující Greenova funkce kvantové tečky je

$$\mathcal{G}_\sigma(\omega_+) = -c_\phi \frac{s(\omega_+)\Delta - U\nu}{\left[\omega\left[1 + s(\omega_+)\right] + \sigma h_U\right]^2 - \epsilon_U^2 - c_\phi^2\left[s(\omega_+)\Delta - U\nu\right]^2}. \tag{2.5}$$

Podobně jako u neinteragujícího případu označme determinant inverzní Greenovy funkce příměsi

$$|D_\sigma(\omega)|^2 = \left[(\omega + \sigma h_U)^2 - \epsilon_U^2 - U^2\nu^2 c_\phi^2 - \frac{\Gamma_0^2(\omega^2 - c_\phi^2\Delta^2)}{\omega^2 - \Delta^2}\right]^2 + \frac{4\Gamma_0^2[|\omega|(\omega + \sigma h_U) + U\nu c_\phi^2\Delta]^2}{\omega^2 - \Delta^2}. \tag{2.6}$$

Normální a anomální Greenova funkce má reálnou a imaginární složku. Rozdělme si Greenovu funkci na reálnou a imaginární část. Imaginární část normální Greenovy funkce mimo energetickou mezeru

$$\Im G_\sigma(\omega_+) = \frac{-\Gamma_0}{|D_\sigma(\omega)|^2\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}\left\{|\omega|\left[(\omega + \sigma h_U + \epsilon_U)^2 + U^2\nu^2 c_\phi^2 + \frac{\Gamma_0^2(\omega^2 - c_\phi^2\Delta^2)}{\omega^2 - \Delta^2}\right] + 2\,\mathrm{sgn}\,(\omega)U\nu c_\phi^2(\omega + \sigma h_U + \epsilon_U)\Delta\right\}. \tag{2.7}$$

Imaginární část anomální Greenovy funkce mimo energetickou mezeru

$$\Im \mathcal{G}_\sigma(\omega_+) = \frac{-\Gamma_0 c_\phi\,\mathrm{sgn}\,(\omega)}{|D_\sigma(\omega)|^2\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}\left\{\Delta\left[(\omega + \sigma h_U)^2 + U^2\nu^2 c_\phi^2 - \epsilon_U^2 - \frac{\Gamma_0^2(\omega^2 - c_\phi^2\Delta^2)}{\omega^2 - \Delta^2}\right] + 2U\nu\omega(\omega + \sigma h_U)\right\}. \tag{2.8}$$

Nulový determinant inverzní plné Greenovy funkce zase určuje 4 diskrétní stavy. Rovnice pro nezávislé diskrétní stavy

$$\omega_\sigma(1 + s_\sigma) = -\sigma\left(h + \frac{U}{2}m\right) + \sqrt{\left(\epsilon + \frac{U}{2}n\right)^2 + c_\phi^2(s_\sigma\Delta - U\nu)^2}. \tag{2.9}$$

Zastavme se na chvíli nad řešením rovnice (2.9). Může někdy diskrétní stav přejít z energetické mezery do pásu, tedy $\omega_\sigma = \Delta$? Diskutujme případ pro nulové magnetické pole $h = 0$ a pro poloviční plnění $\epsilon = -\frac{U}{2}n$. Pro tyhle podmínky rovnici (2.9) můžeme přepsat do tvaru

$$\omega\sqrt{\Delta^2 - \omega^2} + \omega\Gamma_0 = c_\phi\left(\Gamma_0\Delta - U\nu\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}\right). \tag{2.10}$$

Z formule (2.10) vidíme, že její řešení může být $\omega_\sigma = \Delta$, ale jen pro $\phi = 0$. Též vidíme, že výše zmíněné podmínky nemají vliv na otázku, kdy je řešením $\omega_\sigma = \Delta$.

Diskrétní stavy ω_σ skutečně mohou přejít do pásu, ale jen pro $\phi = 0$, což je případ, kdy Josephsonův supraproud je nulový $J = 0$.

V spektrální reprezentaci můžeme přepsat nábojovou hustotu

$$n = n_g + n_b = \sum_{\alpha,\sigma} f(\alpha\sigma\omega_\sigma) \operatorname*{Res}_{\alpha\sigma\omega_\sigma} G_\sigma \\ - \sum_\sigma \left[\int_{-\infty}^{-\Delta} + \int_{\Delta}^{\infty} \right] f(\omega) \Im G_\sigma(\omega_+) \frac{\mathrm{d}\omega}{\pi}, \quad (2.11)$$

kde n_g, n_b značí příspěvek od energetické mezery (diskrétní příspěvek) a od pásu (spojitý příspěvek), f je Fermiho funkce. (Janiš a Yan, 2021)

Podobně můžeme přepsat magnetizaci a hustotu Cooperových párů (Janiš a Yan, 2021)

$$m = m_g + m_b = \sum_{\alpha,\sigma} \sigma f(\alpha\sigma\omega_\sigma) \operatorname*{Res}_{\alpha\sigma\omega_\sigma} G_\sigma \\ - \sum_\sigma \sigma \left[\int_{-\infty}^{-\Delta} + \int_{\Delta}^{\infty} \right] f(\omega) \Im G_\sigma(\omega_+) \frac{\mathrm{d}\omega}{\pi}, \quad (2.12)$$

$$c_\phi \nu = c_\phi(\nu_g + \nu_b) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\sigma} f(\alpha\sigma\omega_\sigma) \operatorname*{Res}_{\alpha\sigma\omega_\sigma} \mathcal{G}_\sigma \\ - \frac{1}{2} \sum_\sigma \left[\int_{-\infty}^{-\Delta} + \int_{\Delta}^{\infty} \right] f(\omega) \Im \mathcal{G}_\sigma(\omega_+) \frac{\mathrm{d}\omega}{\pi}. \quad (2.13)$$

Zadefinujme následující vztahy

$$X_\sigma = \sqrt{\epsilon_U^2 + c_\phi^2 (s_\sigma \Delta - U\nu)^2}, \quad (2.14)$$

$$K_\sigma = 2X_\sigma \left[1 + \frac{s_\sigma \Delta^2}{\Delta^2 - \omega_\sigma^2} \right] - 2c_\phi^2 (s_\sigma \Delta - U\nu) \frac{\omega_\sigma s_\sigma \Delta}{\Delta^2 - \omega_\sigma^2}. \quad (2.15)$$

.

Dále označme $\bar{\sigma} = -\sigma$, $\Delta f_\sigma = f(-\omega_\sigma) - f(\omega_\sigma)$ a $\Gamma_\sigma = s_\sigma \Delta - U\nu$. Potom můžeme diskrétní příspěvky k hustotám přepsat ve tvarech

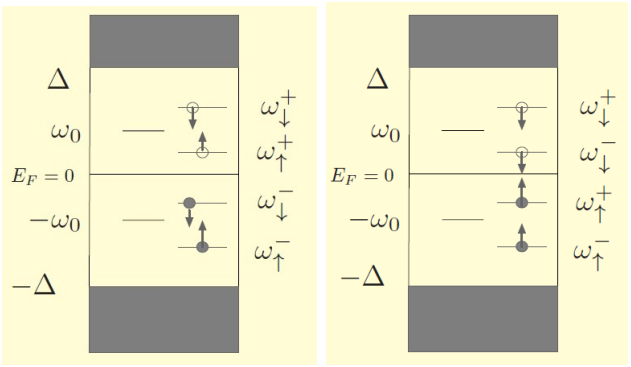
$$n_g = \frac{1}{K_\uparrow K_\downarrow} \sum_\sigma K_\sigma [X_{\bar{\sigma}} - \epsilon_U \Delta f_{\bar{\sigma}}], \quad (2.16)$$

$$m_g = \frac{1}{K_\uparrow K_\downarrow} \sum_\sigma \sigma K_\sigma [X_{\bar{\sigma}} \Delta f_{\bar{\sigma}} - \epsilon_U], \quad (2.17)$$

$$\nu_g = \frac{1}{2K_\uparrow K_\downarrow} \sum_\sigma K_\sigma \Gamma_{\bar{\sigma}} \Delta f_{\bar{\sigma}}. \quad (2.18)$$

2.2 $0 - \pi$ přechod

V Josephsonově spoji rozlišujeme dvě fáze 0 a π. Fáze 0 se vyznačuje malou magnetizací a diskrétními stavy, kde $\omega_\uparrow > 0$ a $\omega_\downarrow > 0$. Naopak v π fázi pozorujeme velkou magnetizaci a pro diskrétní stavy platí $\omega_\uparrow < 0$ a $\omega_\downarrow > 0$. Stavy pro obě fáze vidíme na obr. 2.1.



Obrázek 2.1: Diskrétní a spojité stavy Josephsonova spoje pro 0 a π fázi. (Janiš, 2018)

Změnu z 0 fáze na π fázi nazýváme $0 - \pi$ přechodem. V $0 - \pi$ přechodu dojde k tzv. překřížení diskrétních stavů. V 0 fázi máme volné stavy pro oba elektrony s opačným spinem. Cooperovy páry prochází spojkou bez problémů. Jelikož hustota Cooperových párů odpovídá hustotě Josephsonova proudu, je diskrétní příspěvek Josephsonova proudu dominantní. Naopak v π fázi nemáme volný stav pro elektron se spinem nahoru. V důsledku toho Cooperovy páry nemohou procházet přes energetickou mezeru. Jediný příspěvek je tak od spojitých stavů, což je zpětný tunelovací Josephsonův proud.

K $0 - \pi$ přechodu dojde pro $\omega_\uparrow = 0$. Podmínka $0 - \pi$ přechodu pak je podle (2.9)

$$h_U = \sqrt{\epsilon_U^2 + c_\phi^2(\Gamma_0 - U\nu)^2}. \tag{2.19}$$

2.3 Atomová limita

Atomová limita je případ, kdy polovina šířka energetické mezery jde do nekonečna $\Delta \to \infty$. V atomové limitě vymizí veškeré spojité příspěvky. Rovnice pro mezerové stavy (2.9) přejde do tvaru

$$\omega_\sigma = -\sigma h_U + \sqrt{\epsilon_U^2 + c_\phi^2(\Gamma_0 - U\nu)^2}. \tag{2.20}$$

Podobně rovnice (2.11) až (2.13)

$$n = n_g = 1 - \frac{\epsilon_U(\Delta f_\uparrow + \Delta f_\downarrow)}{2\sqrt{\epsilon_U^2 + c_\phi^2(\Gamma_0 - U\nu)^2}}, \tag{2.21}$$

$$m = m_g = \frac{1}{2}(\Delta f_\downarrow - \Delta f_\uparrow), \tag{2.22}$$

$$c_\phi \nu = c_\phi \nu_g = \frac{c_\phi(\Gamma_0 - U\nu)(\Delta f_\uparrow + \Delta f_\downarrow)}{4\sqrt{\epsilon_U^2 + c_\phi^2(\Gamma_0 - U\nu)^2}}. \tag{2.23}$$

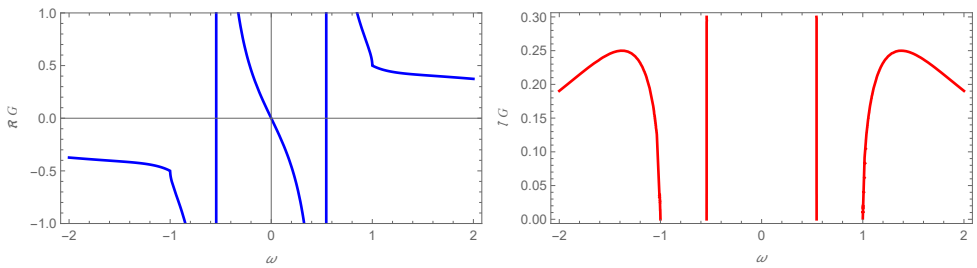
Případ atomové limity byl podrobně studován ve článcích Janiš a Yan (2021) a Janiš a kol. (2016).

3. Numerické výsledky

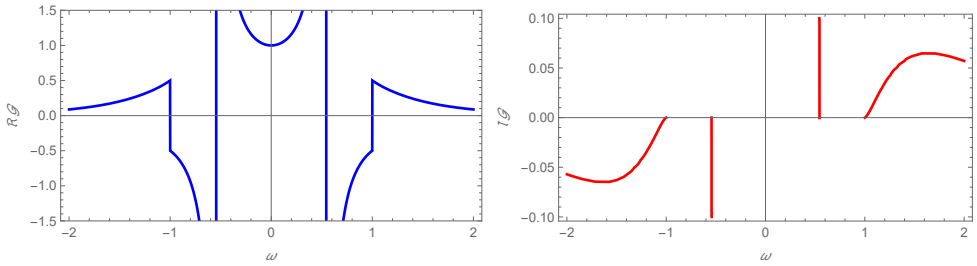
Pro všechny výpočty jsme volili polovinu šířky energetické mezery $\Delta = 1$ a renormalizovanou hybridizaci $\Gamma_0 = 1$.

3.1 Kvantová tečka v magnetickém poli

Začněme neinteragující kvantovou tečkou v magnetickém poli. Nejprve jsme zjistili závislost složek normální a anomální Greenovy funkce na frekvenci ω. Na obr. 3.1 vidíme, že reálná složka normální Greenovy funkce je středově souměrná zatímco imaginární část je osově souměrná. U anomální Greenovy funkce na obr. 3.2 je symetrie opačná.



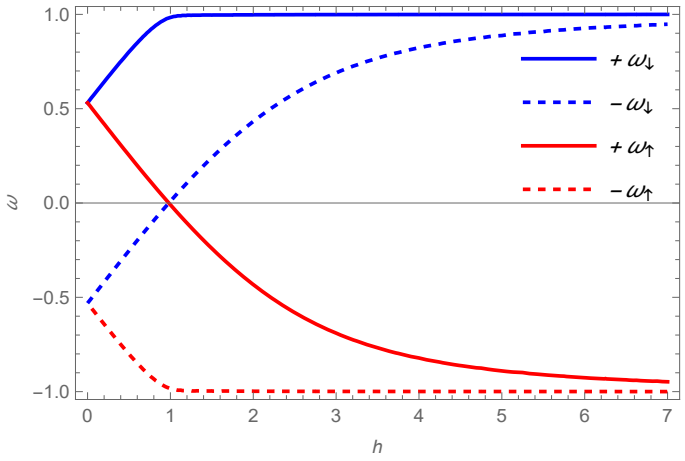
Obrázek 3.1: Reálná a imaginární složka normální Greenovy funkce pro $h = 0$, $\epsilon = 0$ a $\phi = 0$.



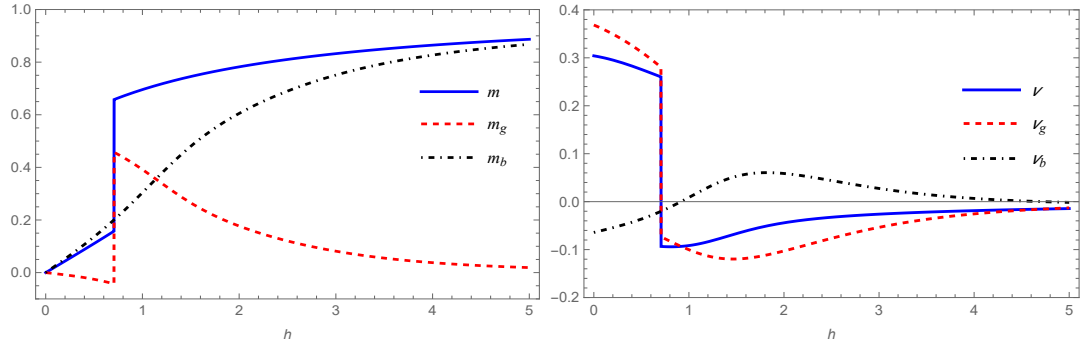
Obrázek 3.2: Reálná a imaginární složka anomální Greenovy funkce pro $h = 0$, $\epsilon = 0$ a $\phi = 0$.

V sekci 2.2 jsme diskutovali $0 - \pi$ přechod. Na obr. 3.3 je řešení rovnice (1.11) pro diskrétní stavy v závislosti na magnetickém poli. Vidíme obě fáze a samotný přechod, kdy dojde ke křížení diskrétních stavů. Z obrázku je taky patrná symetrie stavů uvedená v sekci 1.2.

Na obr. 3.4 je vidět skok magnetizace, jak jsme už psali výše, v 0 fázi je magnetizace zanedbatelná a v π fázi je vysoká. U hustoty Cooperových páru vidíme, že nejprve je dominantní diskrétní příspěvek. V π fázi nemohou už Cooperovy páry procházet energetickou mezerou, proto je diskrétní příspěvek skoro nulový. Spojitý příspěvek mění přechodem též znaménko, ovšem zde to není zapříčiněno křížením stavů, ale skokem magnetizace. Obecně je v π fázi hustota Cooperových párů záporná a blízká nule, tedy páry jen tunelují a zápornost hustoty Cooperových párů odpovídá opačnému toku Josephsonova proudu.



Obrázek 3.3: Diskrétní stavy pro $\epsilon = 0$ a $\phi = \pi/8$.



Obrázek 3.4: Magnetizace a hustota Cooperových párů pro $\epsilon = 0$, $\phi = \pi/2$ a $T = 0$.

3.2 Interagující kvantová tečka

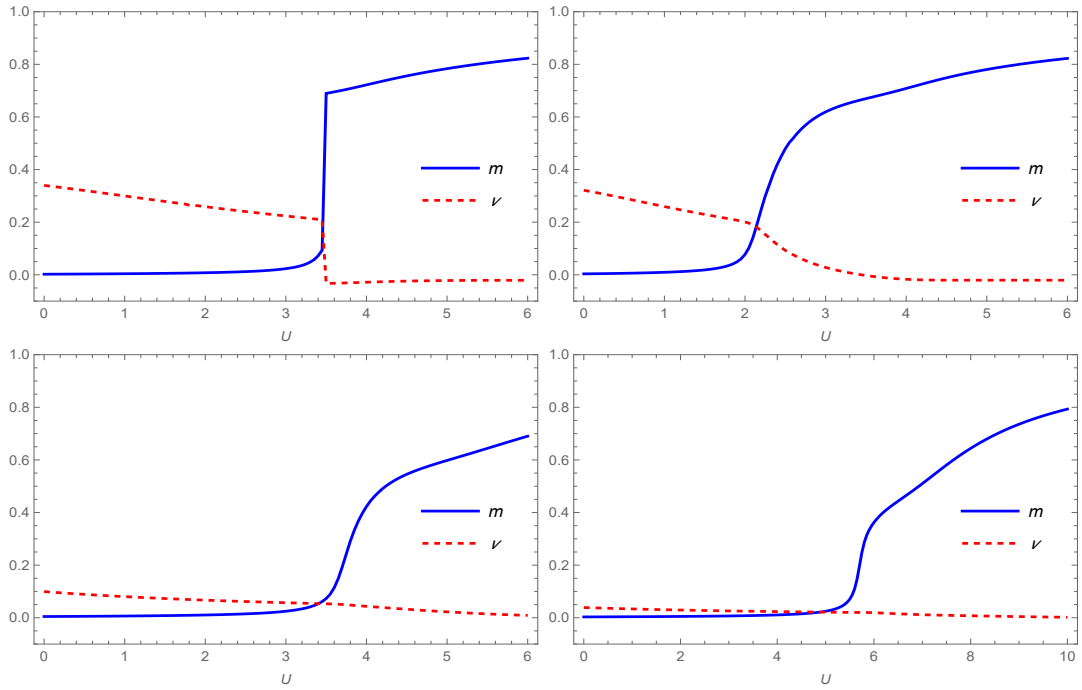
Pro interagující kvantovou tečku jsme museli jednotlivé hodnoty iterovat. Přesnost veličin je v řádu 10^{-4}. Nejdříve jsme řešili rovnice v polovičním plnění $\epsilon = -U/2$. Na obr. 3.5 je znázorněna magnetizace a hustota Cooperových párů na interakci mezi elektrony pro různé teploty. Je zřejmé, že pro vysoké teploty je hustota Cooperových párů blízká nule, tedy i Josephsonův supraproud.

Problematiku obr. 3.6 jsme už diskutovali výše v sekci 3.1. Je vidět, že závislost magnetizace a hustoty Cooperových na interakci je podobná jako na magnetickém poli.

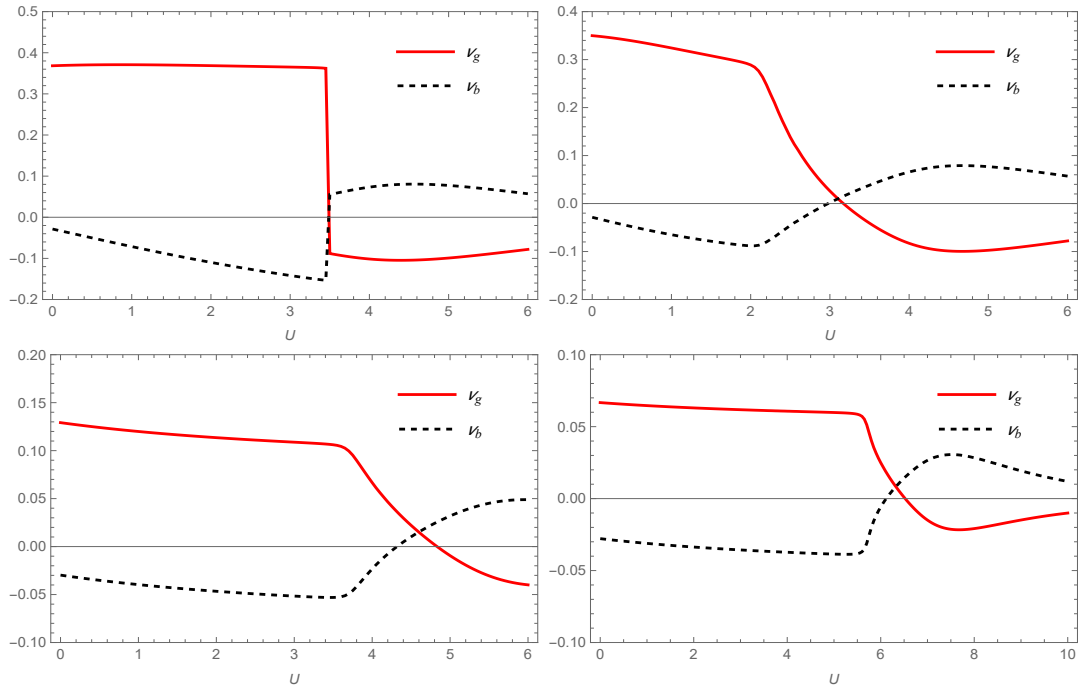
Křížení diskrétních stavů máme na obr. 3.7. Znovu vidíme, že jen dva diskrétní stavy jsou nezávislé. Na obr. 3.8 už uvádíme jen nezávislé diskrétní stavy v závislosti na interakci pro různé teploty.

Zvláštní případ je pro nulové magnetické pole v polovičním plnění. Při nulovém magnetickém poli je magnetizace též nulová. Pro tento případ nedojde k $0 - \pi$ přechodu. Diskrétní stav zanikne pro $\Gamma_0 = U\nu$, ale stačí slabé pole, aby se stav ω_0 rozštěpil a dojde k $0 - \pi$ přechodu, jak je vidět na obr. 3.9.

Ještě jsme dělali závislost na atomové hladině příměsi. Případ jsme udělali pro maximální fázový rozdíl $\phi = \pi$, tedy pro případ, kdy přes Josephsonův spoj neteče žádný supraproud $J = 0$. Vidíme z obr. 3.10, že nábojová hustota klesá s rostoucím ϵ, tedy klesá s klesajícím chemickým potenciálem. Pro $\epsilon + U/2$ je

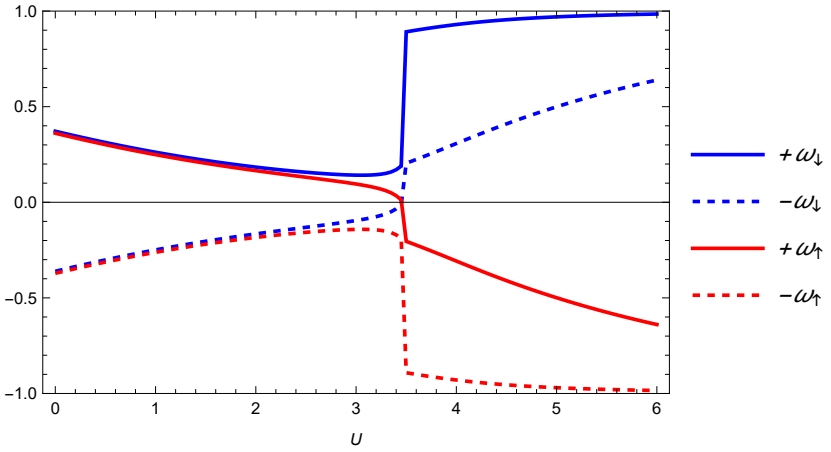


Obrázek 3.5: Magnetizace a hustota Cooperových párů pro teploty $T = 0, 0.1, 0.5$ a 1 při $\epsilon = -U/2$, $h = 0.01$, $n = 1$, $\phi = \pi/2$.

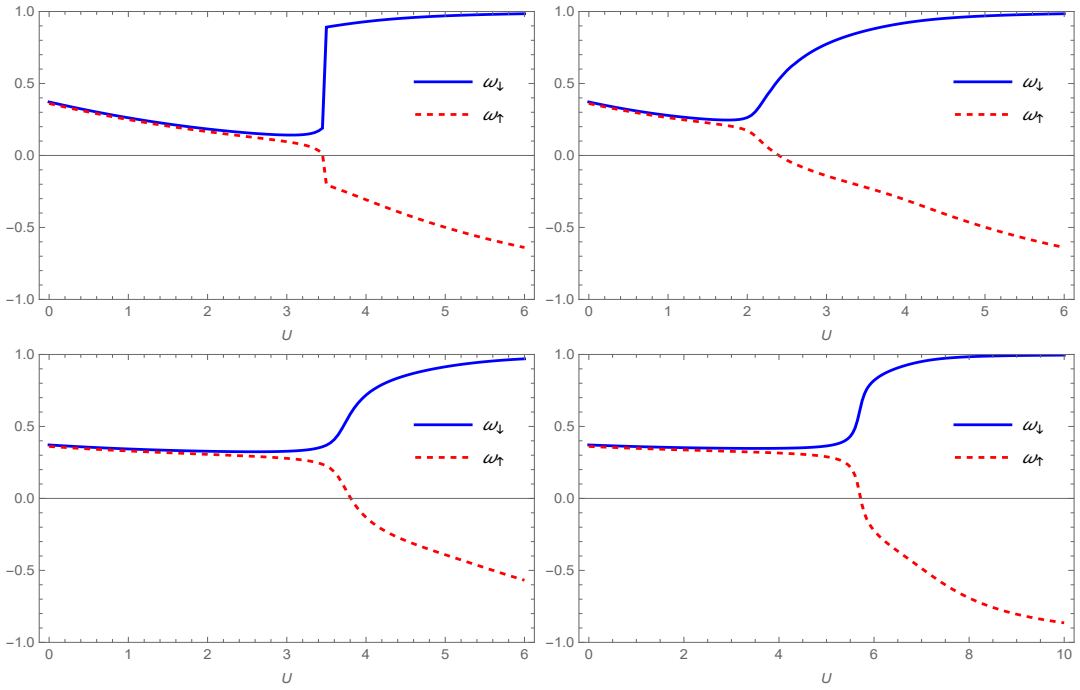


Obrázek 3.6: Diskrétní a pásová hustota Cooperových párů pro teploty $T = 0, 0.1, 0.5$ a 1 při $\epsilon = -U/2$, $h = 0.01$, $n = 1$ a $\phi = \pi/2$.

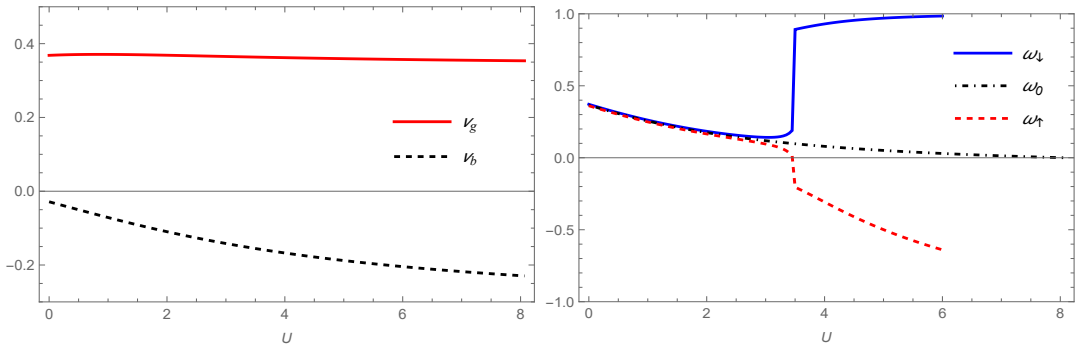
nábojová hustota $n = 1$, což je přesně poloviční plnění. U magnetizace pozorujeme dva přechody, které sledujeme i v křížení diskrétních stavů na obr. 3.11.



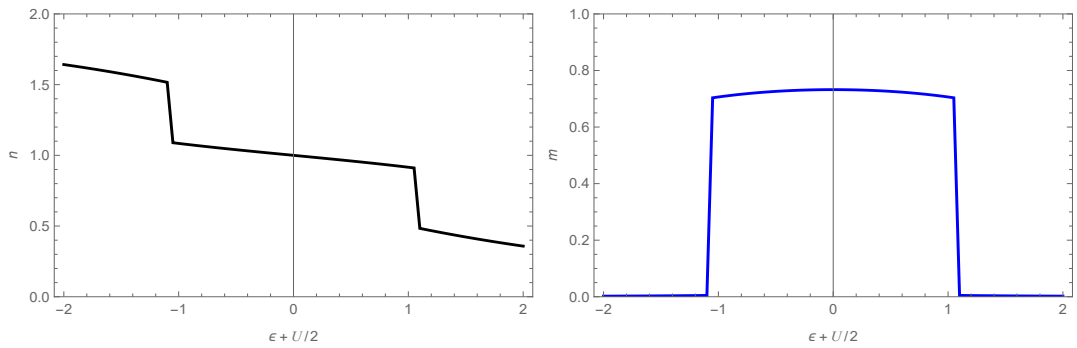
Obrázek 3.7: Diskrétní stavy pro $T = 0$, $\epsilon = -U/2$, $h = 0.01$, $n = 1$ a $\phi = \pi/2$.



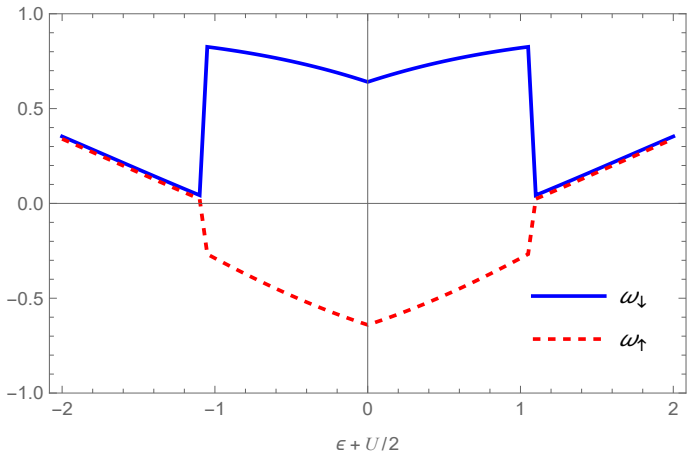
Obrázek 3.8: Diskrétní stavy pro teploty $T = 0, 0.1, 0.5$ a 1 při $\epsilon = -U/2$, $h = 0.01$, $n = 1$ a $\phi = \pi/2$.



Obrázek 3.9: Diskrétní, pásová hustota Cooperových párů pro $h = 0$ a diskrétní stavy v nulovém ($h = 0$) a slabém ($h = 0.01$) magnetickém poli pro $\epsilon = -U/2$, $n = 1$, $\phi = \pi/2$ a $T = 0$.



Obrázek 3.10: Nábojová hustota a magnetizace pro $U = 4$, $h = 0.01$, $\phi = \pi$ a $T = 0$.



Obrázek 3.11: Diskrétní stavy pro $U = 4$, $h = 0.01$, $\phi = \pi$ a $T = 0$.

Závěr

Studovali jsme závislost chování diskrétních stavů a Josephsonova proudu na magnetickém poli a na interakci mezi elektrony. Zde jsme v závislosti na magnetickém poli studovali, kde dochází k překřížení stavů, což je spojeno s $0-\pi$ přechodem. Víme, kdy k přechodu dochází (2.19). Známe symetrii mezi diskrétními stavy. V nulovém magnetickém poli máme dva diskrétní stavy (jeden je nezávislý), vložením Josephsonova spoje do magnetického pole sejmeme degeneraci stavů a máme čtyři stavy z toho dva nezávislé. Zjistili jsme, že na rozdíl od atomové limity může diskrétní stav přejít do pásu, ale jen pokud je fázový rozdíl mezi supravodivými přívody nulový $\phi = 0$.

Sledovali jsme chování charakteristických veličin v 0 a π fázi. Závislosti na magnetickém poli a na interakci v polovičním plnění jsou podobné. Magnetizace je nízká v 0 fázi a vysoká π fázi. Dochází ke skokovému nárůstu magnetizace v $0-\pi$ přechodu. Pro nenulové teploty je tenhle nárůst vyhlazen. Hustota Cooperových páru je v π fázi zanedbatelná, jelikož Cooperovy páry nemohou přecházet přes diskrétní stavy v důsledku překřížení stavů. Mohou jen kvantově tunelovat, proto je hustota Cooperových párů záporná, protože Josephsonův proud teče v opačném směru. V 0 fázi mohou Cooperovy páry jednoduše procházet přes diskrétní stavy. Změna znaménka spojitého příspěvku hustoty Cooperových párů je dána nárůstem magnetizace. Zápornost hustoty Cooperových párů je rozdíl od aproximace atomové limity, kde k danému jevu nedochází, a tedy je přímým důsledkem vlivu spojitých stavů. S rostoucí teplotou klesá hustota Cooperových párů k nule stejně tak Josephsonův proud, protože hustota supraproudu je úměrná hustotě Cooperových párů.

Diskrétní stavy v interagujícím případě pro poloviční plnění jsou pro slabou interakci (v 0 fázi) skoro nerozlišitelné. Teprve v oblasti $0-\pi$ přechodu se od sebe velmi oddělují a následně v π fázi se přibližují k hranicím energetické mezery Δ a $-\Delta$. Při nulovém magnetickém poli existují diskrétní stavy jen v 0 fázi a pak zanikají pro $\Gamma_0 = U\nu$.

Nakonec známe závislost nábojové hustoty a magnetizace na energetické hladině příměsi. Nábojová hustota klesá s rostoucí energií hladiny. Magnetizace se nachází nejdříve v 0 fázi pak dojde k přechodu do π fáze a následně opět spadne do 0 fáze. Podobně je tomu i pro diskrétní stavy, které v jsou v 0 fázi skoro nerozlišitelné. Ale v přechodu do π fáze se překříží a pak jsou dobře oddělitelné.

Seznam použité literatury

Cleuziou, J.-P., Wernsdorfer, W., Bouchiat, V., Ondarcuhu, T. a Monthioux, M. (2006). Carbon nanotube superconducting quantum interference device. *Nature Nanotechnology*, **1**(1), 53–59.

Janiš, V. (2018). Superconducting quantum dot in magnetic field: crossing of gap states. URL `https://www.fzu.cz/~janis/resources/MFF_TKS_2018.pdf`. Institute of Physics, Academy of Sciences of the Czech Republic, Praha, CZ. 2022-06-21.

Janiš, V. a Yan, J. (2021). Many-body perturbation theory for the superconducting quantum dot: Fundamental tole of the magnetic field. *Physical Review B*, **103**(23), 1–18.

Janiš, V., Pokorný, V. a Žonda, M. (2016). Spin-symmetric solution of an interacting quantum dot attached to superconducting leads: Andreev states and the $0 - pi$ transition. *The European Physical Journal B*, **89**(9), 1–12.

Karrasch, C., Oguri, A. a Meden, V. (2008). Josephson current through a single Anderson impurity coupled to BCS leads. *Physical Review B*, **77**(2), 1–15.

Meng, T. (2009). Andreev bound states in Josephson quantum dot devices. URL `https://wwwpub.zih.tu-dresden.de/~meng/Tobias_Meng_diploma_thesis.pdf`. Institut Néel, Département Nano, Grenoble, France. 2022-06-26.

Oguri, A., Tanaka, Y. a Bauer, J. (2013). Interplay between Kondo and Andreev-Josephson effects in a quantum dot coupled to one normal and two superconducting leads. *Physical Review B*, **87**(7), 1–11.

Pillet, J.-D., Joyez, P., Žitko, R. a Goffman, M. F. (2010a). Tunneling spectroscopy of a single quantum dot coupled to a superconducter: From Kondo ridge to Andreev bound states. *Physical Review B*, **88**(4), 3–4.

Pillet, J.-D., Quay, C. H. L., Morfin, P., Bena, C., Levy Yeyati, A. a Joyez, P. (2010b). Andreev bound states in supercurrent-carrying carbon nanotrubes revealed. *Nature Physics*, **6**(12), 965–966.

Vecino, E., Martín-Rodero, A. a Levy Yeyati, A. (2013). Josephson current through a correlated quantum level: Andreev states and *pi* junction behaviour. *Physical Review B*, **68**(3), 1–9.

Seznam obrázků

1 Josephsonova spojka. (Pillet a kol., 2010b) 3
2 Hustota stavů Josephsonova spoje. (Pillet a kol., 2010a) a (Pillet a kol., 2010b) 3

1.1 Schématický model Josephsonova spoje. (Janiš, 2018) 5
1.2 Diskrétní a spojité stavy Josephsonova spoje. (Janiš, 2018) 7

2.1 Diskrétní a spojité stavy Josephsonova spoje pro 0 a π fázi. (Janiš, 2018) 12

3.1 Reálná a imaginární složka normální Greenovy funkce pro $h = 0$, $\epsilon = 0$ a $\phi = 0$. 15
3.2 Reálná a imaginární složka anomální Greenovy funkce pro $h = 0$, $\epsilon = 0$ a $\phi = 0$. 15
3.3 Diskrétní stavy pro $\epsilon = 0$ a $\phi = \pi/8$. 16
3.4 Magnetizace a hustota Cooperových párů pro $\epsilon = 0$, $\phi = \pi/2$ a $T = 0$. 16
3.5 Magnetizace a hustota Cooperových párů pro teploty $T = 0, 0.1, 0.5$ a 1 při $\epsilon = -U/2$, $h = 0.01$, $n = 1$, $\phi = \pi/2$. 17
3.6 Diskrétní a pásová hustota Cooperových párů pro teploty $T = 0, 0.1, 0.5$ a 1 při $\epsilon = -U/2$, $h = 0.01$, $n = 1$ a $\phi = \pi/2$. . . . 17
3.7 Diskrétní stavy pro $T = 0$, $\epsilon = -U/2$, $h = 0.01$, $n = 1$ a $\phi = \pi/2$. 18
3.8 Diskrétní stavy pro teploty $T = 0, 0.1, 0.5$ a 1 při $\epsilon = -U/2$, $h = 0.01$, $n = 1$ a $\phi = \pi/2$. 18
3.9 Diskrétní, pásová hustota Cooperových párů pro $h = 0$ a diskrétní stavy v nulovém ($h = 0$) a slabém ($h = 0.01$) magnetickém poli pro $\epsilon = -U/2$, $n = 1$, $\phi = \pi/2$ a $T = 0$. 18
3.10 Nábojová hustota a magnetizace pro $U = 4$, $h = 0.01$, $\phi = \pi$ a $T = 0$. 19
3.11 Diskrétní stavy pro $U = 4$, $h = 0.01$, $\phi = \pi$ a $T = 0$. 19

A. Přílohy

A.1 Odvození Greenovy funkce kvantové tečky v neinteragujícím případě

Části hamiltoniánu (1.1) až (1.3) pro $U = 0$ a v nulovém magnetickém poli vyjádřené v Nambuově formalismu (1.5) vypadají následovně

$$\hat{H}_{imp} = \epsilon(\Phi^\dagger \hat{\sigma}_3 \Phi), \tag{A.1}$$

$$\hat{H}_{bath} = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger_{\mathbf{k}} \hat{\sigma}_3 \Psi_{\mathbf{k}} - \Psi^\dagger_{\mathbf{k}} \Delta' \Psi_{\mathbf{k}}), \tag{A.2}$$

$$\hat{H}_{coup} = -t(\Psi^\dagger \hat{\sigma}_3 \Phi + \Phi^\dagger \hat{\sigma}_3 \Psi), \tag{A.3}$$

kde $\hat{\sigma}_i$ jsou Pauliho matice a $\Delta' = \Delta \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix}$. Matice hamiltoniánu pak má tvar

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta e^{i\phi} & -t & 0 \\ -\Delta e^{-i\phi} & -\epsilon_{\mathbf{k}} & 0 & t \\ -t & 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & t & 0 & -\epsilon \end{pmatrix}. \tag{A.4}$$

Následně přejdeme ke Greenově funkci kvantové tečky a BCS přívodů

$$\hat{G} = (z\hat{I} - \hat{H})^{-1}, \tag{A.5}$$

$$\hat{G}(z) = \frac{1}{Z_+ Z_- [z^2 - (\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)] + t^2[t^2 - 2\epsilon_{\mathbf{k}}\epsilon - 2z^2]} \begin{pmatrix} V_+ - t^2 Z_- & -\Delta e^{i\phi} Z_+ Z_- & -t[L_+ - t^2] & -t\Delta e^{i\phi} Z_- \\ -\Delta e^{-i\phi} Z_+ Z_- & V_- - t^2 Z_+ & t\Delta e^{-i\phi} Z_+ & t[L_- - t^2] \\ -t[L_+ - t^2] & t\Delta e^{i\phi} Z_+ & Y_+ - t^2(z - \epsilon_{\mathbf{k}}) & t^2 \Delta e^{i\phi} \\ -t\Delta e^{-i\phi} Z_- & t[L_- - t^2] & t^2 \Delta e^{-i\phi} & Y_- - t^2(z + \epsilon_{\mathbf{k}}) \end{pmatrix}, \tag{A.6}$$

kde jsme označili $Z_\pm = z \pm \epsilon$, $V_\pm = Z_+ Z_-(z \pm \epsilon_{\mathbf{k}})$, $L_\pm = Z_\pm(z \pm \epsilon_{\mathbf{k}})$ a $Y_\pm = Z_\pm[z^2 - (\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)]$.

Definujeme Greenovu funkci kvantové tečky

$$\hat{G}(z) \equiv \frac{1}{Z_+ Z_- [z^2 - (\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)] + t^2[t^2 - 2\epsilon_{\mathbf{k}}\epsilon - 2z^2]} \begin{pmatrix} Y_+ - t^2(z - \epsilon_{\mathbf{k}}) & t^2 \Delta e^{i\phi} \\ t^2 \Delta e^{-i\phi} & Y_- - t^2(z + \epsilon_{\mathbf{k}}) \end{pmatrix}. \tag{A.7}$$

Greenovu funkci rozvineme do Taylorova rozvoje do kvadratického členu podle hybridizace

$$\hat{G}(z) \simeq \begin{pmatrix} \frac{1}{Z_-} & 0 \\ 0 & \frac{1}{Z_+} \end{pmatrix} + \frac{t^2}{Z_+^2 Z_-^2 [z^2 - (\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)]} \begin{pmatrix} Z_+^2(z + \epsilon_{\mathbf{k}}) & \Delta e^{i\phi} Z_+ Z_- \\ \Delta e^{-i\phi} Z_+ Z_- & Z_-^2(z - \epsilon_{\mathbf{k}}) \end{pmatrix}. \tag{A.8}$$

Zavedeme hybridizační self-energii $\hat{\Sigma}_c(z)$ a integrujeme přes elektrony $\epsilon_{\mathbf{k}}$

$$\int \rho(\epsilon_{\mathbf{k}})\hat{G}(z,\epsilon_{\mathbf{k}})\mathrm{d}\epsilon_{\mathbf{k}} = [z\hat{I} - \epsilon\hat{\sigma}_3 - \hat{\Sigma}_c(z)]^{-1}. \tag{A.9}$$

Hybridizační self-energie rozvinutá do Taylorova rozvoje do kvadratického členu podle hybridizace pak je

$$\hat{\Sigma}_c(z) \simeq -t^2\rho(0)\int \begin{pmatrix} \dfrac{z}{[\epsilon_{\mathbf{k}}^2 - (z^2-\Delta^2)]} & \Delta e^{i\phi}\dfrac{1}{[\epsilon_{\mathbf{k}}^2 - (z^2-\Delta^2)]} \\ \Delta e^{-i\phi}\dfrac{1}{[\epsilon_{\mathbf{k}}^2 - (z^2-\Delta^2)]} & \dfrac{z}{[\epsilon_{\mathbf{k}}^2 - (z^2-\Delta^2)]} \end{pmatrix} \mathrm{d}\epsilon_{\mathbf{k}}. \tag{A.10}$$

Vypočítáme integrál $\int \dfrac{1}{[\epsilon_{\mathbf{k}}^2 - (z^2-\Delta^2)]}\mathrm{d}\epsilon_{\mathbf{k}} = \pi i \dfrac{1}{\sqrt{z^2-\Delta^2}}\,\mathrm{sgn}\,(\Im z)$.
Hybridizační self-energie je pak daná vztahem

$$\hat{\Sigma}_c(z) = -t^2\rho(0)\begin{pmatrix} z & \Delta e^{i\phi} \\ \Delta e^{-i\phi} & z \end{pmatrix}\frac{\pi i}{\sqrt{z^2-\Delta^2}}\,\mathrm{sgn}\,(\Im z). \tag{A.11}$$

Z hybridizační self-energie pak vypočítáme Greenovu funkci kvantové tečky

$$\hat{G}^{(0)-1}(z) = [z\hat{I} - \epsilon\hat{\sigma}_3 - \hat{\Sigma}_c(z)]^{-1}, \tag{A.12}$$

$$\hat{G}^{(0)-1}(z) = \begin{pmatrix} z[1+s(z)] - \epsilon & \Delta\cos(\dfrac{\phi}{2})s(z) \\ \Delta\cos(\dfrac{\phi}{2})s(z) & z[1+s(z)] + \epsilon \end{pmatrix}. \tag{A.13}$$