

Ingénierie optimale et signatures micro-ondes de modes de Majorana en physique mésoscopique

par

Samuel Boutin

Thèse présentée au département de physique
en vue de l'obtention du grade de docteur ès science (Ph.D.)

FACULTÉ des SCIENCES
UNIVERSITÉ de SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 30 mai 2019

Le 30 mai 2019

le jury a accepté la thèse de Monsieur dans sa version finale.

Membres du jury

Professeur Ion Garate
Directeur de recherche
Département de physique

Professeur Jeffrey Quilliam
Évaluateur interne
Département de physique

Professeur Pascal Simon
Évaluateur externe
Laboratoire de Physique des Solides, CNRS
Université Paris-Sud

Professeur Claude Bourbonnais
Président rapporteur
Département de physique

*À mes parents, Denis et Huguette,
pour leur support constant*

Sommaire

La réalisation d'un ordinateur quantique est un défi scientifique et technique de taille du 21^e siècle et plusieurs approches sont poursuivies afin d'atteindre ce but. Cette thèse s'intéresse principalement à l'une d'entre elles : le calcul quantique basé sur les modes de Majorana. Cette approche s'inscrit dans le cadre de l'informatique quantique topologique et vise à tirer profit des propriétés exotiques des phases topologiques de la matière afin d'effectuer du calcul quantique intrinsèquement robuste aux erreurs. À défaut de connaître des supraconducteurs topologiques facilement accessibles dans la nature, des modes de Majorana peuvent être obtenus en faisant l'ingénierie d'un dispositif mésoscopique alliant matériaux semiconducteurs et supraconducteurs. En choisissant les bons ingrédients, il est alors possible de créer des modes de Majorana aux extrémités de nanofils hybrides formant un circuit supraconducteur topologique. Séparés en deux volets, les travaux de recherche présentés dans cette thèse s'attaquent à différents problèmes reliés à l'ingénierie et à la caractérisation de modes de Majorana dans un système mésoscopique.

Un premier volet de cette thèse vise à faciliter l'ingénierie de systèmes physiques permettant l'émergence de modes de Majorana robustes. Pour ce faire, on développe une nouvelle méthode numérique efficace basée sur les fonctions de Green récursives et inspirée par l'algorithme d'ingénierie d'impulsions par montée de gradients utilisé dans le domaine du contrôle optimal. Ce nouvel algorithme vise l'optimisation du profil spatial de paramètres et tire profit de résultats d'abord obtenus dans le contexte de l'optimisation de la dynamique de systèmes quantiques dissipatifs. La méthode développée est appliquée à l'optimisation de réseaux de microaimants permettant l'ingénierie de modes de Majorana dans des semiconducteurs à faible couplage spin-orbite comme le silicium.

Le second volet de cette thèse étudie les signatures micro-ondes de jonctions Josephson abritant des excitations topologiques. D'une part, on s'intéresse à l'effet des interactions coulombiennes sur une jonction Josephson longue formée de supraconducteurs topologiques. On étudie d'abord le spectre de cette jonction à l'aide de calculs numériques de diagonalisation exacte. Par la suite, on considère un couplage capacitif entre la jonction et un résonateur. Par un formalisme de réponse linéaire et

à l'aide de la théorie entrée-sortie, nous proposons une signature des effets Josephson fractionnaires 4π et 8π dans une mesure de réflectométrie résolue en temps du résonateur. Finalement, on s'intéresse à l'effet de la transition de phase topologique d'une jonction Josephson sur la dynamique d'un circuit supraconducteur. En particulier, on démontre que le processus non linéaire de bifurcation d'une jonction Josephson pourrait être utilisé afin de caractériser les propriétés de modes de Majorana.

Mots clés: Physique mésoscopique, supraconductivité topologique, modes de Majorana, signatures micro-ondes, circuits supraconducteurs, textures magnétiques, optimisation, contrôle optimal

Remerciements

Malgré les nombreuses heures seul devant un ordinateur, une thèse n'est pas quelque chose qui s'entreprind seul. Durant mon doctorat et plus généralement durant mes dix années au sein du département de physique, j'ai eu le plaisir d'interagir et de collaborer avec de nombreuses personnes qui ont contribué d'une part à cette thèse et, plus généralement, à rendre ces années riches en idées, en sciences et en plaisir. Mes excuses sincères à ceux et celles que je pourrais avoir oublié d'inclure dans les quelques lignes ci-dessous.

Mes premiers remerciements vont à Ion, mon directeur de thèse. Merci pour ta patience, ta disponibilité, ton appui et ta curiosité. En plus d'être un excellent physicien et chercheur, tu es une personne compréhensive et inspirante. Tes conseils et ta vision de la recherche m'accompagneront certainement dans les prochaines étapes de ma carrière. Merci d'avoir cru en moi, d'à la fois m'avoir laissé beaucoup de liberté, mais aussi d'avoir toujours été présent.

Merci également aux membres de mon comité de thèse, Pr. Claude Bourbonnais, Pr. Jeffrey Quilliam et Pr. Pascal Simon d'avoir pris le temps de lire ma thèse et pour les nombreuses questions et suggestions. Plus généralement, je tiens à remercier l'ensemble des professeurs du département pour leur disponibilité, leur confiance et leur intérêt envers les travaux des étudiants. Votre implication, votre curiosité scientifique et votre bienveillance à notre endroit contribuent à rendre le département de physique de l'UdeS un endroit si apprécié de ses étudiants. En particulier, merci à Alexandre et Michel pour vos conseils et votre support dans mes projets. Collaborer avec vous et vos équipes a toujours été un plaisir et une expérience des plus enrichissantes.

Je souhaite également remercier mes collaborateurs, collaboratrices et collègues. En particulier, merci à Julien et Sara pour cette belle aventure qu'est le projet Majorana. Ma thèse serait certainement très différente sans notre collaboration. Nos nombreuses discussions ont toujours été stimulantes et motivantes scientifiquement en plus d'être égayé par votre humour. Merci également à Jorge pour notre collaboration sur la RMN, à Andy, Christian et Jaya pour nos travaux sur GRAPE et à Shruti de m'avoir inclut dans ses projets sur les chats de Schrödinger. Ces différents projets et les nombreuses

discussions qui les ont accompagnées ont été des plus appréciées. Je tiens aussi à remercier Pedro et Udson pour la collaboration qui a mené aux derniers chapitres de cette thèse. J'espère sincèrement avoir l'occasion de développer ces idées avec vous au cours des prochaines années. Merci également à Philippe et Anqi pour leur contribution à ces travaux.

Je me dois également de remercier les membres du groupe Garate, ainsi que les nombreux collègues de bureau, que j'ai eu l'occasion de côtoyer à travers les années. Merci à Pierre, Simon, Pedro, Jorge, Jean-Michel et Sanghita. Un merci particulier à mon ami Pedro pour les collaborations, les nombreuses discussions et son enthousiasme contagieux. Merci également à tous mes anciens collègues du groupe d'Alexandre pour les discussions et projets. En particulier, merci à Kevin, Udson, Shruti, Arne, Baptiste, Agustin et Nicolas.

Je tiens à souligner le soutien financier du conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada (CRSNG), et du Fonds de Recherche du Québec – Nature et technologies (FRQNT) via leurs programmes de bourses doctorales. Merci également à Calcul Québec et à Calcul Canada, ainsi qu'à leurs équipes pour le support informatique et les très nombreuses heures de calculs sur le superordinateur Mammouth qui ont rendu ces travaux possibles. Une portion des travaux présentés dans cette thèse ont également été rendus possibles grâce au soutien financier de l'Institut quantique via ses appels à projets. Merci à l'équipe de l'IQ de croire en ses étudiants et de leur offrir cette opportunité.

Sur une note plus personnelle, je remercie mes amis et ma famille pour leur support et aussi de me rappeler qu'il existe une vie à l'extérieur de la science. En particulier, merci à mon frère, Mathieu, sa conjointe, Marie-Christine et leurs filles Emma et Laurie. Finalement, merci à mes parents, Denis et Huguette, à qui je dédie ma thèse. C'est par vos encouragements, votre présence et votre amour que cet accomplissement a été possible.

Table des matières

Sommaire	iii
Introduction	1
1 Phases topologiques et informatique quantique	4
1.1 Phases topologiques	5
1.1.1 Ce que l'on entend par topologie	5
1.1.2 Ordres et phases topologiques	7
1.1.3 Symétries antiunitaires et classification des phases	11
1.2 Modes, opérateurs et fermions de Majorana	15
1.2.1 Un peu de terminologie	15
1.2.2 Origine et propriétés des modes de Majorana	18
1.3 Calcul quantique à l'aide de modes de Majorana	20
2 Modes de Majorana : Réalisation physique et signatures expérimentales	29
2.1 Formalisme de Bogoliubov-de Gennes	30
2.1.1 Hamiltonien de Bogoliubov-de Gennes	30
2.2 Chaîne de Kitaev	34
2.2.1 Modèle et cas limites	35
2.2.2 Solution du modèle	37
2.2.3 Propriétés topologiques et modes de Majorana	40
2.3 Nanofil semiconducteur	43
2.3.1 Ingrédients du modèle	43
2.3.2 Spectre d'énergie et propriétés topologiques	46
2.3.3 Textures magnétiques et couplage spin-orbite artificiel	49
2.4 Signatures expérimentales et état de l'art	51
2.4.1 Anomalie de conductance à biais nul	51
2.4.2 Effet Josephson fractionnaire (4π)	56
2.4.3 Perspectives	61
3 Contrôle optimal pour systèmes quantiques ouverts de grande taille	64
3.1 Publication 1	65

<i>Remerciements</i>	viii
4 Ingénierie optimale et textures magnétiques	79
4.1 Publication 2	80
4.2 Publication 3	97
5 Jonction Josephson topologique en présence d'interactions	107
5.1 Publication 4	108
6 Dynamique non linéaire d'une jonction Josephson topologique	125
6.1 Bifurcation d'un circuit Josephson	126
6.1.1 Jonction 2π et modèle RCSJ : États stationnaires	127
6.1.2 Dynamique de l'amplificateur Josephson par bifurcation	132
6.2 Circuit topologique : Modèle RCSJ	136
6.2.1 Description phénoménologique	136
6.2.2 Signatures de la transition de phase topologique	138
6.3 Perspectives	144
6.3.1 Dynamique des modes de Majorana	144
6.3.2 Énergie de charge et modèle quantique	145
Conclusion et perspectives	147
A Formalisme de Bogoliubov-de Gennes	150
B Complément de la publication 4	152
B.1 Chaîne de Kitaev : Modes de Majorana	152
B.2 Transformation de Jordan-Wigner	156
Bibliographie	158

Liste des tableaux

1.1	Résumé des propriétés des symétries antiunitaires	13
1.2	Classification des phases topologiques SPT sans interactions.	14

Liste des figures

1.1	Illustration de l'équivalence topologique des formes.	5
1.2	Schéma de l'échange de modes de Majorana	21
2.1	Schéma représentant les cas limites de la chaîne de Kitaev	36
2.2	Structure de bandes de la chaîne de Kitaev	39
2.3	Structure de bandes d'un nanofil semiconducteur	44
2.4	Structure de bandes d'un nanofil en présence de supraconductivité.	47
2.5	Observation par Mourik <i>et al.</i> de l'anomalie de conductance	54
2.6	Observation par Zhang <i>et al.</i> de l'anomalie de conductance	55
2.7	Effet Josephson 4π	58
2.8	Architecture pour le calcul quantique proposée par Karzing <i>et al.</i>	62
6.1	Schémas représentant un circuit supraconducteur dans le modèle RCSJ	127
6.2	Réponse d'un oscillateur non linéaire	129
6.3	Diagramme de phase du phénomène de bifurcation	130
6.4	Bassins d'attractions des solutions stationnaires de l'amplificateur Josephson par bifurcation.	133
6.5	Solution de l'équation du mouvement stochastique du JBA en présence de fluctuations thermiques.	134
6.6	Effet de la parité intérieure p_{23} sur le diagramme de phase du JBA topologique.	137
6.7	Spectre du hamiltonien à une particule d'une jonction Josephson topologique	140
6.8	Dispersion de l'énergie des états à plusieurs particules d'une jonction Josephson topologique.	141
6.9	Dispersion de la fréquence plasma d'une jonction Josephson topologique en fonction du champ magnétique	142
6.10	Variation du courant de bifurcation à proximité d'une transition de phase topologique	143
6.11	Énergie charge et modes de Majorana	145
B.1	Diagramme de phase de la chaîne de Kitaev	156

Liste des acronymes¹

BCS Bardeen Cooper et Schrieffer. [11](#), [18](#), [30](#)

BdG Bogoliubov-de Gennes. [30](#), [31](#), [33](#), [34](#), [38](#), [40](#), [42](#), [46](#), [47](#), [52](#), [57](#), [140](#)

GRAPE Ingénierie d’impulsion par montée de gradient (*Gradient Ascent Pulse Engineering*). [80](#)

MBS État lié de Majorana (*Majorana Bound state*). [17](#), [18](#)

MZM Mode d’énergie zéro de Majorana (*Majorana zero mode*). [20](#), [21](#), [23](#), [56](#), [58](#), [60](#), [62](#), [152](#), [153](#), [155](#)

PHS Symétrie particule-trou (*Particle-Hole Symmetry*). [11](#), [14](#)

QSH Isolant de Hall quantique de spin (*Quantum Spin Hall insulator*). [9](#)

RGF Fonction de Green récursive (*recursive Green function*). [80](#)

SPT Phase topologique protégée par une symétrie (*Symmetry Protected Topological phases*). [9–11](#), [15](#)

TRS Symétrie de renversement du temps (*Time Reversal Symmetry*). [10–12](#), [14](#)

1. Bien que le coeur de cette thèse soit rédigé en français, les acronymes anglophones standards de la littérature scientifique sont parfois utilisés afin de faciliter la lecture.

Introduction

La topologie s'est récemment imposée en physique de la matière condensée comme une nouvelle façon de classifier les phases de la matière allant au-delà de l'approche usuelle basée sur les symétries [1]. En plus de leur intérêt d'un point de vue fondamental, la possible utilité des phases topologiques pour la création d'un ordinateur quantique tolérant aux fautes a séduit plusieurs par son élégance [2–4]. Dans ce paradigme, on tire profit des propriétés exotiques de certaines de ces phases telles que la forte dégénérescence de l'état fondamental et la statistique non abélienne des excitations du système, afin d'implémenter un calcul quantique robuste. Bien qu'à priori plus difficile à réaliser en laboratoire que l'approche conventionnelle, l'informatique quantique topologique offre en contrepartie l'espoir d'un meilleur passage à l'échelle nécessaire pour la réalisation d'un ordinateur quantique d'une taille appréciable. Au coeur de l'effort de recherche actuel, tant théorique qu'expérimental, pour le développement de l'informatique quantique topologique est le mode de Majorana, une propriété liée à certains défauts dans un supraconducteur topologique [5].

D'abord envisagée dans le coeur des vortex de certains supraconducteurs exotiques ayant un appariement de type triplet [6, 7], la recherche de modes de Majorana a obtenu un second souffle lors de la découverte récente des isolants topologiques [8–10]. Ainsi, les travaux de Fu et Kane en 2008 [11, 12], puis des équipes d'Oreg *et al.* [13] et de Lutchyn *et al.* [14] en 2010 ont mis en évidence qu'il était possible d'obtenir des modes de Majorana à l'aide d'un supraconducteur conventionnel mis en contact avec un isolant topologique, ou bien avec un semiconducteur ayant un fort couplage spin-orbite intrinsèque et d'un champ magnétique externe [15, 16]. Fort de ces découvertes théoriques, une signature expérimentale cohérente avec la présence de modes de Majorana a rapidement été observée dans un laboratoire de Delft en 2012 [17].

Un vaste effort de recherche a par la suite permis de développer de meilleurs dispositifs et de mieux caractériser ces possibles états topologiques [18–20]. En dépit de grand progrès, l’implémentation expérimentale de l’informatique quantique topologique basée sur les modes de Majorana n’en est encore qu’à ces balbutiements et des percées sont toujours nécessaires sur plusieurs fronts afin d’atteindre les architectures basées sur un réseau de modes de Majorana déjà envisagées par certains [21]. En parallèle de ces avancées, une autre communauté scientifique contribue au développement du calcul quantique basé sur les circuits supraconducteurs que nous qualifierons dans cette thèse de *conventionnels* par opposition aux circuits abritant des modes de Majorana [22]. Cette approche se base sur l’utilisation de circuits micro-ondes construit à l’aide de jonctions Josephson.

Les travaux présentés dans cette thèse se regroupent dans une vision d’ensemble visant à tirer profit des circuits supraconducteurs, tant conventionnel que topologique, dans le but à long terme d’effectuer du calcul quantique. En particulier, à plusieurs reprises, on cherche à tirer profit des méthodes théoriques et expérimentales du domaine des circuits supraconducteurs en développant des analogies avec les problèmes propres à l’ingénierie et à la caractérisation de modes de Majorana. Afin de mettre en contexte et de motiver les résultats de recherche présentés dans cette thèse, nous débutons par deux chapitres préliminaires. D’abord, le chapitre 1 présente une introduction aux phases topologiques, aux modes de Majorana, ainsi qu’à leur possible application au calcul quantique. Par la suite, le chapitre 2 présente les modèles physiques permettant la réalisation de modes de Majorana aux extrémités de nanofils supraconducteurs, ainsi que certaines signatures expérimentales associées. Les résultats de recherche présentés dans cette thèse se séparent ensuite sous deux thèmes.

D’une part, aux chapitres 3 et 4, nous présenterons de nouvelles méthodes d’ingénierie optimale, c’est-à-dire des méthodes numériques permettant d’optimiser les propriétés désirées d’un système physique. D’abord, le chapitre 3 discute les performances algorithmiques d’une nouvelle implémentation efficace d’une méthode de contrôle optimal pour systèmes quantiques ouverts [23]. Afin de démontrer l’importance de cet outil, il est appliqué à l’optimisation de la réinitialisation d’un résonateur suite à la mesure d’un qubit dans l’architecture d’électrodynamique quantique en circuit. Par la suite, le chapitre 4 développe un analogue du contrôle optimal dans le contexte de l’ingénierie de nanostructures topologiques. Cette approche vise l’optimisation de

profils spatiaux plutôt que temporels de paramètres dans le but de créer un système mésoscopique abritant une phase topologique [24]. La motivation derrière le développement de cet algorithme est la création d'une nouvelle architecture expérimentale pour l'étude de modes de Majorana où une texture magnétique génère un couplage spin-orbite artificiel. Ainsi, l'optimisation de réseaux de microaimants nous permet d'obtenir des régimes de paramètres permettant l'émergence d'une phase topologique robuste dans des semiconducteurs à faible couplage spin-orbite intrinsèque [25].

La seconde portion de cette thèse, formée des chapitres 5 et 6, s'articule autour des signatures de l'effet Josephson fractionnaire lors d'une mesure à l'aide de micro-ondes de jonctions topologiques. D'abord, le chapitre 5 se concentre sur la réponse linéaire d'un résonateur supraconducteur couplé capacitivement à une jonction Josephson topologique en présence de fortes interactions coulombiennes [26]. Ces interactions, que nous traitons à l'aide d'une méthode numérique de diagonalisation exacte, mènent à la fractionnalisation des modes de Majorana dans la jonction et donc à un effet Josephson de périodicité 8π . Finalement, le chapitre 6 présente des résultats préliminaires concernant la dynamique non linéaire d'un circuit supraconducteur incluant une jonction Josephson topologique. Après un rappel du phénomène de bifurcation dans une jonction Josephson conventionnelle soumise à une pompe harmonique, nous considérons l'influence de l'effet Josephson 4π sur ce phénomène.

Chapitre 1

Phases topologiques et informatique quantique

Ce premier chapitre introductif vise à établir les fondements théoriques et le contexte des problématiques abordés dans cette thèse. Dans ce but, on introduit certains éléments de terminologie utiles d'abord à la compréhension des phases topologiques de la matière à la section 1.1, puis à la compréhension de la physique des modes de Majorana à la section 1.2. Finalement, à la section 1.3, je discuterai de l'utilisation des propriétés particulières de ces phases de la matière pour la réalisation de calcul quantique.

Les concepts introduits dans ce chapitre paraîtront peut-être abstraits à certains lecteurs. Ils prendront une forme plus concrète lors des chapitres suivants avec l'introduction de systèmes physiques réalisant les concepts plus mathématiques introduits ci-dessous. Plusieurs excellents articles de revues couvrant différents aspects de ce chapitre et du suivant, l'objectif n'est pas ici d'être exhaustif ni très formel, mais plutôt d'établir un langage utile à la suite de ce manuscrit, de développer une intuition plus physique de concepts pouvant sembler abstraits et de motiver les travaux de cette thèse. Les articles de revues pertinents seront indiqués au besoin.

1.1 Phases topologiques

Bien que maintenant centrale en physique de la matière condensée, la notion de phase topologique est encore relativement nouvelle et la terminologie porte parfois à confusion. Cette section vise à mettre en contexte le développement de ce concept et les définitions importantes de manière simple et sans trop de formalisme mathématique.

1.1.1 Ce que l'on entend par topologie

La topologie en mathématiques

Si l'on consulte un dictionnaire ou une encyclopédie, on peut y lire une définition de la topologie ressemblant à ceci: « La topologie est une branche des mathématiques qui concerne les propriétés de l'espace préservé par des transformations continues »¹. Par cela on entend que le caractère topologique d'un objet ne peut être modifié par une série de transformations graduelles et locales, c'est-à-dire sans déchirement ni fusion de points distants de l'objet.

L'exemple classique de cette équivalence topologique est la transformation graduelle d'un beigne (un tore) en une tasse à café. Le genre g (*genus* en anglais), qui est simplement dans ce contexte le nombre de trous traversant la surface, est préservé tout au long de cette transformation (voir la figure 1.1). Les deux éléments sont donc dits

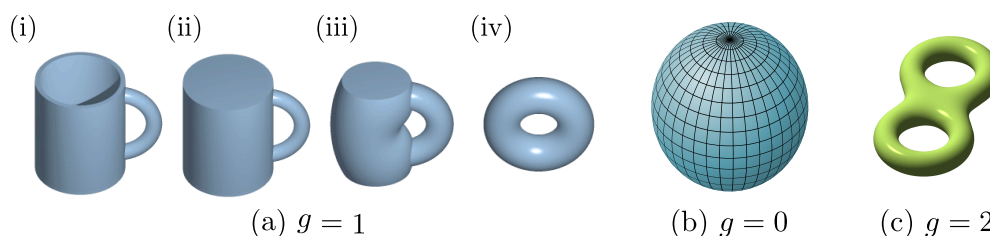


FIGURE 1.1 – Illustration de l'équivalence topologique des formes. (a) Déformation graduelle d'une tasse à café en un beigne (tore). Les quatre formes (i) à (iv) sont topologiquement équivalentes ($g = 1$). (b) Une sphère ($g = 0$). (c) Tore à deux trous ($g = 2$). Adapté de figures dans le domaine public obtenu sur [wikipedia.org](https://fr.wikipedia.org).

1. Reformulation libre de l'introduction à l'article portant sur la topologie sur le site *Wikipédia*.

topologiquement équivalents. Au contraire, si l'on tente de transformer un tore en une sphère, il y a un moment précis où le genre est modifié de $g = 1$ en $g = 0$. Similairement, si l'on tente de transformer un tore en un tore à deux trous le genre passera de manière discontinue de $g = 1$ à $g = 2$. Cette transformation est nécessairement discrète, g ne pouvant être qu'un entier (un objet ne pouvant posséder un nombre fractionnaire de trous). Le genre est donc ici un *invariant topologique*, c'est-à-dire une valeur discrète ne pouvant être modifiée par une série de transformations continues et locales.

Pour conclure cet exemple, notons que le genre est nécessairement une *propriété non locale* de l'objet, c'est-à-dire qu'il s'agit d'une propriété globale qui ne peut être mesurée par une observation locale. Comme nous le verrons à la section 1.3, c'est précisément ces notions de non-localité et de robustesse de l'information topologique face aux transformations locales qui donneront tout l'intérêt de la topologie pour le calcul quantique.

La topologie en physique de la matière condensée

Partant de ces minces notions de topologie et de leur application à la géométrie, essayons maintenant de relier ce concept mathématique aux phases de la matière. Pour ce faire, débutons par noter qu'historiquement, les phases de la matière sont classifiées par la brisure de symétries.² Ainsi, la phase solide se distingue de la phase liquide ou gazeuse (fluide) par le passage à la transition de phase d'un système ayant une symétrie de translation continue à une symétrie de translation discrète (correspondant aux vecteurs de translation du réseau cristallin). Similairement, la phase ferromagnétique se distingue de la phase paramagnétique par la brisure de la symétrie de rotation de spin et le choix spontané d'un axe de magnétisation. Cette classification des transitions de phase en termes de brisures de symétries, parfois nommée *paradigme de Landau*, est un élément central de la physique des solides et de la théorie des transitions de phases.

La découverte de l'effet Hall quantique (entier et fractionnaire) dans les années 1980 a forcé à revoir cette classification des phases basée sur la symétrie et de la compléter par des notions de topologie. En effet, dans ces expériences, il fut

2. Voir le chapitre introductif du livre du Pr. Xiao-Gang Wen [27] ou son article de revue récent [1] pour une introduction historique et une vision très intéressante des phases topologiques.

possible d'observer les signatures de transitions de phases sans brisures de symétries. Ces transitions furent comprises par l'introduction du concept d'ordre topologique. Ainsi, au lieu de différer par leurs symétries, certaines phases peuvent différer par la valeur d'un invariant topologique (similaire au genre g dans l'exemple de topologie classique de la section précédente). L'importance de l'ajout de la topologie à la classification des phases de la matière fut récemment reconnue par le prix Nobel de 2016 décerné à D. J. Thouless, F. D. M. Haldane et J. M. Kosterlitz, trois physiciens pionniers du développement de la théorie des phases topologiques [28, 29].

1.1.2 Ordres et phases topologiques

Avant de mieux définir le concept de phases topologiques, notons d'abord que l'on regroupe parfois sous cette même appellation deux concepts différents. Une première catégorie de phases est caractérisée par une forte interaction des particules. L'effet Hall quantique (fractionnaire) et certains liquides de spin quantiques appartiennent à cette première catégorie ayant un ordre topologique dit intrinsèque ou de volume. La seconde catégorie est composée de systèmes dont le caractère topologique est relié à une contrainte physique forçant le respect d'une symétrie. Les isolants et supraconducteurs topologiques appartiennent à cette seconde catégorie nommée *phase topologique protégée par une symétrie*. À moins d'une indication contraire, c'est à cette seconde catégorie que nous référerons par l'expression générale phase topologique. Nous utiliserons plutôt l'expression ordre topologique pour référer à la première catégorie.

Ordre topologique

Afin de mieux comprendre le concept d'ordre topologique, il est utile de revenir aux définitions introduites dans le contexte géométrique et de trouver leur équivalence dans le contexte de la physique quantique à plusieurs particules. Un premier élément essentiel à notre exemple géométrique était la notion de transformations graduelles et locales. Dans le contexte quantique, l'équivalent de ce concept sera l'application d'une série de transformations unitaires locales.³ Ainsi, deux fonctions d'onde seront dites

3. Plus précisément, dans le langage de l'information quantique, on parle de l'application d'un circuit quantique unitaire local de profondeur finie [30].

topologiquement équivalentes si elles peuvent être déformées l'une en l'autre par une telle transformation sans fermer le gap (voir ci-dessous). Au contraire, si cela n'est pas possible, nous dirons qu'elles appartiennent à des classes topologiques différentes. Ces classes de fonctions d'onde seront caractérisées par un invariant topologique prenant une valeur discrète.

Selon ces définitions, toute fonction d'onde appartient à une classe topologique. Par contre, une classe sera qualifiée de *topologiquement triviale*, c'est-à-dire sans ordre topologique. Cette classe correspond à la classe des états produits (particules indépendantes). Dans la limite où toutes les particules sont indépendantes, il n'y aura pas d'enchevêtrement (intrication) entre les particules. De façon plus générale, on dira que les états appartenant à la classe topologiquement triviale ont un enchevêtrement à courte portée [31]. L'exemple le plus simple de cette classe est l'isolant atomique où une série d'états électroniques localisés peuvent être vides ou occupés. L'état fondamental de tout système sans interaction appartient à cette classe. Par opposition, toute fonction d'onde n'appartenant pas à cette classe sera qualifiée de topologiquement *non triviale* et possédera donc un ordre topologique. Une phase ayant un ordre topologique de volume est alors caractérisée par un état fondamental ayant un enchevêtrement à longue portée [31].

De manière un peu plus formelle, une phase ayant un ordre topologique possède les caractéristiques suivantes: [32]

1. Il s'agit d'une phase définie à température nulle (phase quantique).
2. Une échelle d'énergie interdite (l'expression familière *gap* sera utilisée par la suite) sépare les excitations du système d'un nombre N d'états appartenant au multiplet des états fondamentaux $\{|\psi_i\rangle\}$ où $i = 1, \dots, N$.
3. L'énergie E_i de l'état $|\psi_i\rangle$ du multiplet d'états fondamentaux devient la même pour tous les états du multiplet (dégénérescence) dans la limite thermodynamique: $|E_i - E_j| = \mathcal{O}(e^{-L/\xi})$, où L est une dimension caractéristique du système et ξ une longueur de corrélation.
4. Le nombre d'états orthogonaux N formant le multiplet fondamental dépend uniquement de la *variété* sur laquelle le système est défini. En d'autres mots, N dépend de la dimensionnalité du système, des conditions frontière et de la topologie de l'espace (présence de défauts, etc.).

5. Une mesure locale ne permet pas de différencier les états $|\psi_j\rangle$ dans la limite thermodynamique. En d'autres termes, un opérateur local $\hat{\phi}$ ne permet pas de distinguer les différents états fondamentaux du système dans la limite thermodynamique: $\langle\psi_i|\hat{\phi}|\psi_j\rangle = C\delta_{i,j} + \mathcal{O}(e^{-L/\xi})$, où $i, j \in \{1, \dots, N\}$ et C est une constante.

Cette définition de la phase topologique, bien qu'abstraite, permet déjà de mieux comprendre certains des éléments définis précédemment d'une manière plus informelle. En particulier, notons que l'existence d'un gap est très importante dans la définition de la phase topologique. Une transition de phase quantique topologique (modification de l'invariant topologique) sera toujours accompagnée de la fermeture de ce gap.

En raison de l'enchevêtrement à longue portée, certaines phases ayant un ordre topologique possèdent des propriétés exotiques qui attirent l'imagination. Ainsi, dans la limite thermodynamique, l'état fondamental peut être fortement dégénéré et les excitations du système peuvent avoir une statistique d'échange non abélienne. Nous reviendrons plus en détail sur ces caractéristiques et leur possible application au calcul quantique à la section 1.3.

Phases topologiques protégées par des symétries

En se basant sur la définition de la sous-section précédente, on conclut que les systèmes sans interactions sont tous topologiquement *triviaux*, puisque l'état fondamental d'un tel système est toujours un état produit [31]. Par contre, si l'on modifie légèrement la définition d'équivalence topologique en imposant le respect de symétries, les classes d'équivalences se voient modifiées et permettent l'existence de phases topologiques non triviales sans interaction à plusieurs particules. Dans la littérature, on parle de phases topologiques protégées par une symétrie (ou à l'aide de l'acronyme anglophone phases **SPT** pour *symmetry protected topological phases*).

D'un point de vue historique, on retrouve dans la littérature des exemples de phases **SPT** depuis les années 1980, avec par exemple les travaux de Haldane sur l'effet Hall quantique anormal [33]. Par contre, leur étude du point de vue de la topologie s'est principalement développée à partir des années 2000 avec l'étude de l'isolant de Hall quantique de spin (isolant **QSH** pour *Quantum Spin Hall insulator*) et de

l'isolant topologique tridimensionnel (3D).⁴ Ces derniers sont des exemples d'une phase **SPT** où l'imposition du respect de la symétrie de renversement du temps (**TRS** pour *time reversal symmetry*) mène à une phase topologique sans nécessité d'interactions électroniques à plusieurs particules. En effet, en imposant que la transformation unitaire utilisée pour démontrer l'invariance topologique respecte la **TRS**, les états produits ne peuvent plus tous être reliés par une transformation unitaire locale. Il existe alors deux états topologiquement inéquivalents et on nomme donc parfois l'isolant topologique par le terme *isolant* \mathbb{Z}_2 en référence aux deux valeurs que peut prendre l'invariant topologique.

Maintenant que nous avons introduit les phases **SPT**, tentons une définition un peu plus formelle. En l'absence d'interactions et en présence d'une symétrie de translation, un système peut être caractérisé en termes d'un hamiltonien à une particule $h_1(\mathbf{k})$ défini sur la première zone de Brillouin et de la structure de bande associée. Le système sera dans une phase **SPT** s'il possède les caractéristiques suivantes:

1. La structure de bande possède un gap séparant la bande de conduction de la bande de valence (isolant de volume).
2. Un invariant topologique entier ν_1 peut être calculé à l'aide d'une intégrale sur la première zone de Brillouin d'une fonction des états propres de $h_1(\mathbf{k})$.
3. Le hamiltonien $h_1(\mathbf{k})$ sera topologiquement équivalent à un second hamiltonien $h_2(\mathbf{k})$ s'il est possible de déformer de manière continue (c'est-à-dire par une série de transformations infinitésimales respectant les symétries imposées) l'un en l'autre sans jamais fermer le gap durant la transformation. Ces deux systèmes seront alors décrits par le même invariant topologique ($\nu_1 = \nu_2$).
4. Il existe une *correspondance volume-frontière*, c'est-à-dire que la frontière entre une phase **SPT** topologiquement non triviale (par convention $\nu_1 \neq 0$) et une phase triviale abrite un état de bord conducteur (sans gap).

Notons que le point quatre peut être compris comme une conséquence des points précédents. À la frontière entre deux systèmes ayant un invariant topologique différent, il doit y avoir fermeture du gap et, en conséquence, apparition d'états de bord conducteurs. C'est ce qui se produit à l'interface entre un isolant topologique ($\nu = 1$) et l'air qui est topologiquement équivalent à un isolant atomique ($\nu = 0$).

4. Voir les articles de revues [8, 9] et le livre [10] pour une introduction et une revue historique des phases **SPT** sans interactions.

Pour terminer notre survol des phases **SPT** mentionnons que la notion de supraconducteurs topologiques s'est également rapidement ajoutée au domaine. Bien que la supraconductivité soit un phénomène résultant fondamentalement d'interactions à plusieurs particules, les supraconducteurs topologiques sont fréquemment décrits par une théorie de champ moyen de type **BCS**. Il est alors possible de caractériser le système à l'aide d'une structure de bande (hamiltonien Bogoliubov-de Gennes, voir section 2.1) et d'utiliser le même formalisme que dans les cas des isolants topologiques. C'est pourquoi les supraconducteurs topologiques sont généralement classifiés avec les phases **SPT** sans interactions.

Dans le contexte de cette thèse, c'est principalement à ces supraconducteurs topologiques que nous nous intéresserons et en particulier à leur réalisation dans des systèmes unidimensionnels (1D). Nous verrons au chapitre 2 qu'il s'agit d'une phase topologique protégée par une symétrie de parité fermionique, c'est-à-dire la conservation du nombre de particules (modulo 2) dans un supraconducteur, ainsi qu'une symétrie particule-trou. La correspondance volume-frontière mène alors à l'existence de modes d'énergie zéro aux extrémités du système. Ces excitations topologiques auront les propriétés de modes de Majorana.

1.1.3 Symétries antiunitaires et classification des phases

Une phase topologique peut être protégée par différentes symétries plus ou moins spécifiques à un modèle particulier.⁵ Les symétries dites antiunitaires occupent une place particulière dans le développement de la classification des phases **SPT**. On inclut dans cette catégorie la symétrie **TRS**, la symétrie de conjugaison de charge (ou **PHS** pour *particle-hole symmetry*), ainsi que leur produit (nommé symétrie chirale). Ainsi, en fonction de la dimensionnalité du système et de la préservation des symétries **TRS**, **PHS** et chirale, il est possible de dénombrer et de classifier les phases **SPT**. Suivant les références [30, 31] et en prévision du chapitre 5, introduisons la notation et rappelons brièvement quelques propriétés de ces symétries.

5. Mentionnons par exemple l'isolant topologique protégé par une symétrie cristalline qui a été prédit par Liang Fu [34] et d'abord vérifié expérimentalement dans le semiconducteur SnTe [35] (voir également l'article de revue [36]).

Symétrie de renversement du temps

Afin de comprendre pourquoi la symétrie **TRS** se doit d'être antiunitaire, considérons l'hamiltonien d'un système à plusieurs particules $\hat{\mathcal{H}}$. Comme à l'habitude, l'hamiltonien sera invariant sous la symétrie si l'opérateur de la symétrie **TRS**, $\hat{\mathcal{T}}$, commute avec $\hat{\mathcal{H}}$:

$$[\hat{\mathcal{T}}, \hat{\mathcal{H}}] = 0. \quad (1.1)$$

Pour un tel système et par définition de $\hat{\mathcal{T}}$, l'opérateur d'évolution $\hat{\mathcal{U}}(t) = \exp\{i\hat{\mathcal{H}}t\}$ doit alors obéir à

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{U}}(t)\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \hat{\mathcal{U}}(-t), \quad (1.2)$$

ce qui implique avec l'équation (1.1) que $\hat{\mathcal{T}}i\hat{\mathcal{T}}^{-1} = -i$, ce qui correspond bien à la définition d'un opérateur antiunitaire.

Afin de mieux comprendre la structure de l'opérateur $\hat{\mathcal{T}}$, considérons que l'hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ prend la forme générale suivante:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i,j} \hat{\psi}_i^\dagger H_{ij} \hat{\psi}_j, \quad (1.3)$$

où la matrice H_{ij} est l'hamiltonien à une particule. On définit une matrice unitaire U_T de sorte que

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{\psi}_i\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \sum_j (U_T)_{i,j} \hat{\psi}_j. \quad (1.4)$$

L'équation (1.1) implique alors que, pour un hamiltonien invariant sous renversement du temps, l'hamiltonien à une particule obéit à

$$U_T H^* U_T^\dagger = H, \quad (1.5)$$

c'est-à-dire que l'hamiltonien commute avec l'opérateur antiunitaire $T = U_T \mathcal{K}$, où \mathcal{K} est l'opérateur de conjugaison des nombres complexes ($\mathcal{K}i\mathcal{K} = -i$). Remarquons qu'appliquer deux fois la transformation de renversement du temps doit être équivalent à n'appliquer aucune transformation $T^2 H T^{-2} = H$. Il est alors possible d'en conclure que $T^2 = U_T U_T^* = \pm 1$ [30, 31]. Il y a donc trois types de systèmes : i) les systèmes ne préservant pas la **TRS**, ii) les systèmes avec $U_T U_T^* = +1$ et iii) les systèmes avec $U_T U_T^* = -1$.

TABLEAU 1.1 – Résumé des propriétés des symétries antiunitaires.

Symétrie	2 ^e quantification		1 ^{ère} quantification	
Renversement du temps	$\hat{\mathcal{T}}$	$\hat{\mathcal{T}}i\hat{\mathcal{T}}^{-1} = -i$	$T = U_T\mathcal{K}$	$THT^{-1} = H$
Conjugaison de charge	$\hat{\mathcal{C}}$	$\hat{\mathcal{C}}i\hat{\mathcal{C}}^{-1} = i$	$C = U_C\mathcal{K}$	$CHC^{-1} = -H$
Chirale	$\hat{\mathcal{S}}$	$\hat{\mathcal{S}}i\hat{\mathcal{S}}^{-1} = -i$	$S = U_TU_C^*$	$SHS^{-1} = -H$

Finalement, notons qu'une confusion potentielle lors de la discussion de symétries antiunitaire est le mélange de l'opérateur de symétrie à plusieurs particules (agissant dans l'espace de Fock) et l'opérateur à une seule particule. Afin d'éviter cette confusion, nous suivrons dans cette thèse la convention de la référence [31] où l'opérateur à plusieurs particules sera décrit par une police calligraphique $\hat{\mathcal{T}}$, alors que la version dans l'espace à une particule sera $T = U_T\mathcal{K}$.

Conjugaison de charge et contrainte de particule-trou

De manière similaire à l'opérateur $\hat{\mathcal{T}}$ pour la TRS, il est possible de définir pour la symétrie PHS l'opérateur *unitaire* $\hat{\mathcal{C}}$. Dans l'espace de Fock, $\hat{\mathcal{C}}$ transforme les opérateurs de création en opérateur d'annihilation et vice-versa:

$$\hat{\mathcal{C}}\psi_j\hat{\mathcal{C}}^{-1} = \sum_i (U_C^T)_{j,i}\psi_i^\dagger. \quad (1.6)$$

Si un tel opérateur commute avec l'hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$, cela implique la contrainte sur l'hamiltonien à une particule

$$U_C H^T U_C^\dagger = -H, \quad (1.7)$$

où le signe $-$ et la transposition proviennent respectivement de l'anticommutation des opérateurs fermioniques et de l'échange des éléments hors-diagonaux. L'hamiltonien étant hermitien, $H^T = H^*$ et donc l'opérateur PHS à l'échelle de l'hamiltonien à une particule $C = U_C\mathcal{K}$ est *antiunitaire* et il *anticommute* avec H . Encore une fois, il est possible d'avoir $C^2 = U_C U_C^* = \pm 1$ et donc de séparer les systèmes physiques en trois catégories.

TABLEAU 1.2 – Classification des phases topologiques SPT sans interactions en fonction de la dimension d d'un système physique. Pour les colonnes T, C et S , la valeur 0 indique que la symétrie n'est pas respectée. Le signe \pm indique le signe de T^2 ou C^2 . Reproduit de la référence [30].

Classe	T	C	S	$d = 0$	$d = 1$	$d = 2$	$d = 3$
A	0	0	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}	0
AIII	0	0	1	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}
AI	+	0	0	\mathbb{Z}	0	0	0
BDI	+	+	1	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0	0
D	0	+	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0
DIII	-	+	1	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}
AII	-	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2
CII	-	-	1	0	$2\mathbb{Z}$	0	\mathbb{Z}_2
C	0	-	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0
CI	+	-	1	0	0	0	$2\mathbb{Z}$

Symétrie chirale

Finalement, la dernière symétrie que nous considérerons dans cette section est la symétrie chirale correspondant au produit des symétries TRS et PHS. Suivant à nouveau la convention de la référence [31], un hamiltonien \hat{H} respectant cette symétrie commutera avec l'opérateur $\hat{S} = \hat{T}\hat{C}$. De manière équivalente, cela impliquera l'existence d'un opérateur unitaire $S = U_T U_C^*$ qui anticommute avec H . Contrairement au cas précédent, cette symétrie unitaire n'a que deux cas possibles puisque $S^2 = (U_T U_C^*)^2 = +1$. Les propriétés des opérateurs \hat{T} , \hat{C} et \hat{S} , étant différentes des propriétés de T , C et S , elles sont résumées dans le tableau 1.1 à titre de référence.

Classification des phases sans interactions

Cherchons maintenant à classifier les phases en fonction de leur respect ou non des trois symétries antiunitaires introduites. D'abord, puisque les symétries TRS et PHS ont chacune trois valeurs possibles, les phases de la matière se divisent en au moins 9 classes. À priori, l'invariance d'une phase à une symétrie chirale sera dictée par les deux autres symétries. Il existe pourtant un cas d'exception. En effet, une phase n'étant pas invariante aux symétries TRS et PHS peut tout de même être invariant à leur produit. Il existe donc un total de dix classes. Celles-ci sont résumées

dans la portion gauche du tableau 1.2 et étiquetées suivant la notation standard de la littérature introduite par Cartan dans un contexte purement mathématique, puis reprise par Altland et Zirnbauer dans un contexte physique [37].

Basés uniquement sur ces contraintes de symétries et des arguments de topologie, plusieurs travaux majeurs [38–40] ont permis de dénombrer les phases topologiques possibles en fonction de la classe de symétrie et de la dimensionnalité du système. La démonstration de ce résultat débordant du cadre de cette thèse, le tableau 1.2 résume simplement les résultats pour les dimensions $d = 0, 1, 2, 3$. Pour chaque classe de symétrie, le tableau indique le type d’invariant topologique caractérisant les phases SPT pour un système de dimension d . Par exemple, l’entrée \mathbb{Z}_2 indique qu’il existe uniquement deux phases topologiquement distinctes, alors que l’entrée \mathbb{Z} indique qu’il existe un ensemble (théoriquement infini) de phases topologiquement distinctes pouvant être étiquetées à l’aide d’un nombre entier. Les articles de synthèse récents [30, 31] sont recommandés afin d’en apprendre davantage sur ce domaine.

1.2 Modes, opérateurs et fermions de Majorana

Dans cette thèse, nous nous intéresserons aux modes de Majorana dans le contexte de la supraconductivité topologique. Il est donc utile de prendre quelques lignes afin de clarifier la terminologie et de présenter quelques définitions. En particulier, les mots *fermion*, *modes d’énergie zéro*, *états liés* et *opérateurs* peuvent tous être accolés au nom de Majorana. Ces mots étant parfois utilisés avec une certaine liberté, il m’apparaît utile de présenter ici la définition de chacun que j’utiliserai pour la suite.

1.2.1 Un peu de terminologie

Fermion de Majorana

Le terme fermion de Majorana est d’abord et avant tout un terme de la physique des particules. Il décrit la solution réelle à l’équation de Dirac introduite par Ettore Majorana en 1937 [41]. Contrairement à la solution de Dirac, qui engendre l’existence d’antiparticules, le fermion de Majorana est sa propre antiparticule. À ce jour,

l'existence d'une particule élémentaire ayant les propriétés d'un fermion de Majorana n'a pas encore été démontrée. Par contre, depuis les travaux originaux de Majorana, les neutrinos sont un candidat et quelques expériences très difficiles tentent encore aujourd'hui de vérifier cette hypothèse. En particulier, notons l'existence, ici même, au Canada de l'expérience Snolab à Sudbury en Ontario [42]. Cette expérience dans une mine souterraine vise à mesurer l'existence du phénomène de la double désintégration β sans neutrinos. L'observation de ce phénomène serait une preuve du caractère de fermion de Majorana des neutrinos. Nous référons le lecteur intéressé par cet aspect aux références [18, 43] afin d'en apprendre davantage sur les fermions de Majorana dans le contexte de la physique des particules et leur relation avec la physique de la matière condensée.

Opérateur de Majorana

Dans cette thèse nous utiliserons également le terme d'opérateur de Majorana. Par ce terme, nous décrirons un outil mathématique permettant de représenter des opérateurs d'annihilation (création) fermioniques $\hat{c}_j^{(\dagger)}$ en termes de deux opérateurs hermitiens

$$\hat{c}_j = \frac{1}{2} (\hat{\gamma}_{j,A} + i\hat{\gamma}_{j,B}), \quad (1.8)$$

où $\hat{\gamma}_{j,A(B)}$ sont des opérateurs de Majorana. En inversant la relation pour mettre en évidence le caractère hermitien nous obtenons

$$\hat{\gamma}_{j,A} = \hat{c}_j + \hat{c}_j^\dagger, \quad \text{et} \quad \hat{\gamma}_{j,B} = i (\hat{c}_j^\dagger - \hat{c}_j). \quad (1.9)$$

Notons que l'ajout des indices A et B est un choix de notation permettant d'associer deux opérateurs de Majorana à un même opérateur fermionique. Par contre, contrairement à un indice de spin par exemple, cet indice n'est pas associé à une propriété physique fondamentale.

Les relations d'anticommutation des opérateurs $\hat{\gamma}_{j,A(B)}$ s'obtiennent des relations fermioniques standards pour \hat{c}_j^\dagger . Ainsi, en utilisant les relations

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = 0 \quad \text{et} \quad \{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \delta_{i,j}, \quad (1.10)$$

nous obtenons la relation d'anticommutation

$$\{\hat{\gamma}_{i,\alpha}, \hat{\gamma}_{j,\beta}\} = 2\delta_{i,j}\delta_{\alpha,\beta}, \quad (1.11)$$

où $\alpha, \beta \in \{A, B\}$. Notons que le facteur 2 dans la relation d'anticommutation implique $\hat{\gamma}_{j,\alpha}^2 = 1$, tel qu'attendu pour un opérateur de Majorana.

Mode de Majorana

L'opérateur de Majorana est un outil purement mathématique. En effet, tout opérateur fermionique peut être réécrit en termes d'opérateurs de Majorana, mais ce n'est généralement pas très utile. Cela peut par contre être une astuce efficace dans le cas où le système contient des modes de Majorana, c'est-à-dire des opérateurs de Majorana qui sont des constantes du mouvement. Dans un langage un peu plus familier, on utilisera parfois l'expression *majoranas* pour référer aux modes de Majorana.

Considérons un hamiltonien à plusieurs particules $\hat{\mathcal{H}}$, un opérateur de Majorana $\hat{\Gamma}_\alpha$ sera un mode de Majorana si $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\Gamma}_\alpha] = 0$. Notons que, contrairement aux opérateurs $\hat{\gamma}_{j,\alpha}$ définis précédemment, l'opérateur $\hat{\Gamma}_\alpha$ n'est pas nécessairement associé à un seul site, mais est plutôt de façon générale un opérateur ayant une certaine extension spatiale de longueur caractéristique ξ_α . En raison de cette localisation, on parle souvent d'états liés de Majorana ou [MBS](#) pour *Majorana Bound State*. De manière un peu plus précise, pour un système de taille fini, on considérera qu'un opérateur est un mode de Majorana s'il commute avec l'hamiltonien modulo des corrections exponentiellement petites dans la limite thermodynamique. Ces corrections prendront la forme e^{-L/ξ_α} , où L est la distance entre la position moyenne de $\hat{\Gamma}_\alpha$ que nous noterons \mathbf{r}_α , et \mathbf{r}_β la position moyenne du mode de Majorana le plus près de $\hat{\Gamma}_\alpha$ [3]. Dans le cas d'un système unidimensionnel, L est simplement la taille du système. Nous considérerons dans ce chapitre ces corrections exponentiellement petites négligeables, c'est-à-dire que nous prendrons la limite $L \sim |\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta| \gg \xi_{\alpha,\beta}$.

1.2.2 Origine et propriétés des modes de Majorana

Modes de Majorana et supraconductivité

Au chapitre 2, nous décrirons comment il est possible de réaliser physiquement des **MBS** dans un supraconducteur topologique. À ce stade, donnons simplement une intuition de pourquoi un supraconducteur est un bon endroit pour rechercher ces excitations topologiques. Notons d'abord que tel qu'écrit à l'équation (1.9), un opérateur de Majorana est une superposition d'un opérateur de création et d'un opérateur d'annihilation. Dans le langage de la matière condensée, on parle donc d'un opérateur créant une superposition d'une particule et d'un trou. C'est précisément la forme que prend une excitation élémentaire dans un supraconducteur (quasi-particule de Bogoliubov), dont l'opérateur de création dans un supraconducteur conventionnel de type **BCS** est

$$\hat{b}_{n,\uparrow} = \int dx \left[u_n^*(x) \psi_{\uparrow}(x) + v_n^*(x) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(x) \right], \quad (1.12)$$

où nous noterons ϵ_n l'énergie associée à la création d'une telle quasi-particule. En raison de la contrainte particule-trou dans les supraconducteurs (voir la section 2.1 pour une introduction), pour une excitation d'énergie zéro ($\epsilon_n = 0$) les composantes de la fonction d'onde obéiront à $u_n = v_n$ et $\hat{b}_{n,\uparrow}^{\dagger}$ crée donc une superposition électron-trou. Par contre, dans un supraconducteur standard et pour $\epsilon_n = 0$, l'opérateur $\hat{b}_{n,\uparrow}$ ne sera pas un mode de Majorana en raison du spin ($\hat{b}_{n,\uparrow}^{\dagger} = b_{n,\downarrow}$). Pour obtenir un mode de Majorana, il faudra donc rechercher des modes d'énergie zéro dans un supraconducteur sans spin. Nous présenterons au chapitre 2 différents modèles permettant d'atteindre cet objectif.

Comme nous y avons fait allusion à la section précédente, notons simplement à ce stade que les **MBS** apparaîtront naturellement comme un état de bord à la frontière d'un supraconducteur topologique unidimensionnel. De manière plus générale, les **MBS** se lient à un défaut dans un supraconducteur topologique. Ainsi, en plus des frontières d'un supraconducteur 1D, les **MBS** peuvent être étudiés dans les vortex d'un système bidimensionnel. Pour l'instant, supposant l'existence de ces modes de Majorana, décrivons en plus de détail leurs propriétés particulières et leur possible application au calcul quantique.

Fermion non local et opérateur de parité

De la même manière que les opérateurs de Majorana $\hat{\gamma}_{j,A}$ et $\hat{\gamma}_{j,B}$ résultent de la décomposition d'un opérateur fermionique \hat{c}_j [voir équation (1.8)], il est toujours possible de combiner deux modes de Majorana pour former un opérateur fermionique. Ainsi, soit $\hat{\Gamma}_1$ et $\hat{\Gamma}_2$ deux modes de Majorana distants et localisés. Puisqu'il s'agit de modes de Majorana, la notion d'occupation de ces modes n'est pas très bien définie étant donné que $\hat{\Gamma}_\alpha = \hat{\Gamma}_\alpha^\dagger$. Par contre, il est toujours possible de définir un opérateur fermionique

$$\hat{d} = \frac{1}{2} \left(\hat{\Gamma}_1 + i\hat{\Gamma}_2 \right), \quad (1.13)$$

dont l'occupation est bien définie. Puisque $\hat{\Gamma}_1$ et $\hat{\Gamma}_2$ sont des modes de Majorana, l'opérateur \hat{d} est également une constante du mouvement ($[\hat{\mathcal{H}}, \hat{d}] = 0$). Il est alors clair que l'état fondamental du système est au moins doublement dégénéré puisqu'il est possible d'occuper ou non cet état sans changer l'énergie du système.

L'occupation du mode fermionique \hat{d} est décrite par l'opérateur

$$\hat{d}^\dagger \hat{d} = \frac{1}{2} \left(1 + i\hat{\Gamma}_1 \hat{\Gamma}_2 \right), \quad (1.14)$$

ou, en inversant cette relation, en termes de l'opérateur de parité d'occupation

$$\hat{P}_{12} \equiv 1 - 2\hat{d}^\dagger \hat{d} = -i\hat{\Gamma}_1 \hat{\Gamma}_2, \quad (1.15)$$

dont les valeurs propres sont $p_{12} = \pm 1$ correspondant aux états où le mode fermionique est vide (+1) ou occupé (-1). Comme nous le verrons ci-dessous, l'avantage de considérer la parité d'occupation plutôt que l'opérateur nombre est que la parité d'un ensemble de degrés de liberté peut être obtenue en prenant le produit des parités. En particulier, la parité fermionique totale du système $\hat{\mathcal{P}}$ est une quantité conservée dans un supraconducteur isolé.

Dégénérescence de l'état fondamental

De manière plus explicite, l'occupation de l'état fermionique associé à \hat{d}^\dagger a un coût en énergie nul puisque, pour un état $|\psi\rangle$ tel que $\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ nous avons pour

l'état $\hat{d}^\dagger|\psi\rangle$

$$H\left(\hat{d}^\dagger|\psi\rangle\right) = \hat{d}^\dagger H|\psi\rangle = E\left(\hat{d}^\dagger|\psi\rangle\right). \quad (1.16)$$

On qualifie donc les modes de Majorana sous-jacents de modes d'énergie zéro (ou **MZM** pour *Majorana Zero Modes*). Notons ici un élément particulier : l'opérateur fermionique \hat{d} est délocalisé sur deux régions distinctes de l'espace (d'où l'expression de fermion non local). C'est en raison de ces particularités que les **MZM** sont parfois qualifiés de « demi-fermions » dans la littérature populaire. Dans un langage plus précis, il s'agit d'une quasi-particule émergente résultant d'un processus de *fractionnement* et ayant une *dimension quantique* de $\sqrt{2}$, c'est-à-dire que la taille de l'espace de Fock formé par n **MZM** est de $(\sqrt{2})^n$. La dégénérescence de l'état fondamental croît donc exponentiellement avec n . De plus, le nombre n de **MZM** dans un système est toujours pair. En effet, puisqu'il s'agit de quasi-particules résultant d'un hamiltonien formé à la base de fermion, la dimension de l'espace de Fock du système doit correspondre à un nombre entier de fermions.

Ces différents états dégénérés pourront être étiquetés à l'aide de $n/2$ nombres quantiques correspondants à la parité d'occupation des modes fermioniques. Considérons un ensemble de $n \equiv 2N$ modes de Majorana (localisés et séparés spatialement) associés aux opérateurs $\hat{\gamma}_n$ (où $n = 1, \dots, 2N$). Il est possible de définir une base fermionique en regroupant par paires les modes de Majorana pour créer des fermions non locaux. Par exemple, on apparie ici les **MZM** ayant des indices adjacents afin de créer les opérateurs

$$\hat{d}_j = \frac{1}{2}(\hat{\gamma}_{2j-1} + i\hat{\gamma}_{2j}) \quad (1.17)$$

où $j = 1, \dots, N$. En généralisant la notation de l'équation (1.15), on note \hat{P}_j l'opérateur de parité d'occupation associé au mode \hat{d}_j et $p_j = \pm 1$ les valeurs propres associées. L'ensemble de N nombres quantiques $\{p_j\}$ permet donc de définir de manière unique les 2^N différents états fondamentaux générés par l'ensemble de $2N$ modes de Majorana.

1.3 Calcul quantique à l'aide de modes de Majorana

De façon générale, l'informatique quantique topologique vise à tirer profit des propriétés particulières des phases topologiques de la matière pour effectuer un calcul

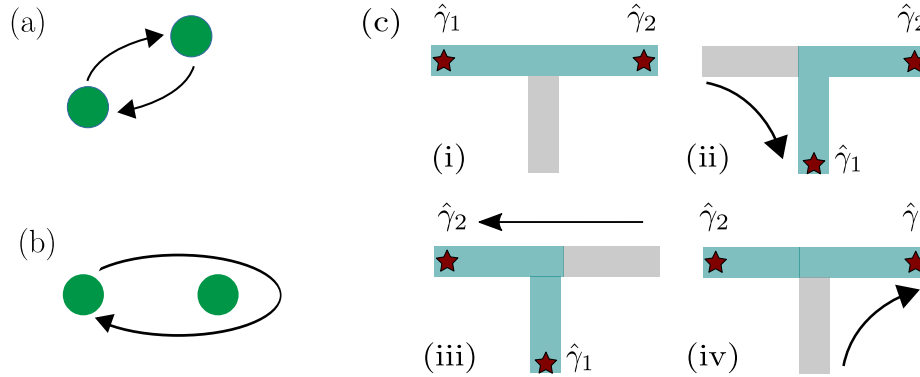


FIGURE 1.2 – (a) Échange de deux particules. (b) Échange double équivalent à l'encerclement d'une particule. (c) Étapes d'un protocole d'échange de particules à l'aide d'une jonction en forme de T dans un réseau de nanofils quantiques. Les étoiles rouges indiquent des MZM, la zone grise est un supraconducteur trivial et la zone bleue est un supraconducteur topologique [46].

quantique de manière intrinsèquement robuste. En d'autres mots, plutôt que de créer un ordinateur quantique imparfait dont la correction d'erreur est effectuée de manière logicielle à l'aide de codes de correction d'erreur, l'informatique quantique topologique vise à réduire ou même idéalement éliminer les erreurs au niveau matériel. Évidemment, il est peu probable de réussir à créer un ordinateur quantique topologique exempt de toute erreur. Par contre, il semble envisageable de créer un ordinateur quantique qui est partiellement robuste et dont la surcharge due à la correction d'erreur est grandement réduite grâce à la protection topologique de l'information et de certaines opérations logiques.

D'abord développé d'un point de vue mathématique et plutôt abstrait par des pionniers tels que A. Kitaev et M. Freedman [44, 45], le domaine s'est graduellement rapproché de la réalisation expérimentale d'abord envisagée dans des systèmes basés sur l'effet Hall quantique fractionnaire, puis au cours de la dernière décennie dans des architectures basées sur les modes de Majorana. Nous ferons ici un survol de quelques concepts importants de l'informatique quantique topologique avec un accent sur l'application de ces concepts aux modes de Majorana. Pour une introduction plus détaillée, mais tout de même accessible, nous référons le lecteur aux articles de synthèse [3, 4]. De plus, la référence [2] offre une revue plus formelle utilisant principalement le formalisme de la théorie des champs quantiques topologiques.

Statistiques d'échanges et dimensionnalité

Un élément central du calcul quantique topologique est la notion de statistique d'échange. Rappelons que les particules élémentaires se séparent en deux groupes selon leur statistique d'échange. D'une part, les bosons dont la fonction d'onde à plusieurs particules est symétrique et n'est donc pas modifiée par l'échange de deux particules. D'autre part, les fermions où la fonction d'onde est antisymétrique et acquiert donc un signe lors de l'échange de particules $|\psi\rangle \rightarrow -|\psi\rangle$ [figure 1.2(a)].

Il est naturel de se demander : « Pourquoi n'existe-t-il pas de particules dont l'échange permet d'acquérir une phase générale de sorte que $|\psi\rangle \rightarrow e^{i\theta}|\psi\rangle$? » Une telle particule, que l'on nomme *anyon* n'est pas possible dans notre univers tridimensionnel. En effet, deux échanges consécutifs sont équivalents à encercler une particule avec l'autre tel qu'illustré à la figure 1.2 (b). Or, la notion de trajectoire est à nouveau un élément topologique et, en 3D, une trajectoire d'encerclement peut être déformée en un seul point ce qui correspond à une trajectoire triviale (l'absence d'échange). En effet, en modifiant légèrement la position d'une des particules illustrées à la figure 1.2(b) dans la dimension perpendiculaire à la trajectoire d'échange, il devient possible de rétrécir la trajectoire jusqu'à un point sans jamais entrer en contact avec la seconde particule. Ainsi, puisqu'un échange double doit être équivalent à l'absence d'échange, nous obtenons la condition

$$e^{i2\theta} = 1, \quad (1.18)$$

ce qui implique deux solutions possibles correspondant à $\theta = 0$ (bosons) ou $\theta = \pi$ (fermions).

Au contraire, pour un système bidimensionnel (2D), l'argument de déformation ci-dessus n'est plus applicable et il est donc possible d'obtenir des particules obéissant à une statistique anyonique. Si l'échange d'anyons mène simplement à l'ajout d'une phase $\theta \neq 0, \pi$, tel que décrit ci-dessus, il s'agira d'anyons abéliens. Dans le cas d'un système où l'échange de particules mène à une transformation unitaire $|\psi\rangle \rightarrow \hat{U}|\psi\rangle$ à l'intérieur d'un sous-espace dégénéré, les particules sont des anyons non abéliens, c'est-à-dire pour lesquels l'ordre des échanges influe sur l'état final du système [2]. En particulier, si l'état $|\psi\rangle$ encode de l'information, l'échange de particules correspond à l'application d'une porte logique ou, autrement dit, à un calcul quantique (voir ci-dessous).

Notre univers étant 3D, les anyons seront des particules émergentes confinées dans un plan d'un système physique, tel qu'un gaz d'électrons 2D formé à l'interface entre deux semiconducteurs. À priori, la question de l'échange de particules en 1D est inexistante, puisqu'il est impossible de contourner une particule dans un système purement 1D. Par contre, la notion d'échange prend un sens si plusieurs systèmes 1D sont joints dans une géométrie de dimension supérieure, telle qu'illustrée à la figure 1.2(c) pour une jonction à trois branches. Finalement, une approche alternative dans un réseau purement 1D est de considérer un protocole d'échange basé sur la téléportation quantique. Cette approche repose sur la mesure de paires de modes de Majorana et requiert l'utilisation d'anyons ancillaires [47, 48].

Tressage et statistiques non abéliennes

Essayons maintenant de rendre un peu plus concrète une propriété importante des modes de Majorana à laquelle nous avons fait référence dans ce chapitre, mais sans démonstrations : les modes de Majorana attachés aux défauts d'un supraconducteur topologique possèdent une statistique d'échange non abélienne. Celle-ci a d'abord été discutée dans le contexte d'un mode de Majorana attaché à un vortex dans un supraconducteur 2D [6, 7]. Une décennie plus tard, les travaux de Alicea *et al.* ont démontré que la même physique peut être réalisée à l'aide d'un réseau de nanofils quantiques [46].

Considérons à nouveau un ensemble de $2N$ modes de Majorana associés aux opérateurs $\hat{\gamma}_n$ (où $n = 1, \dots, 2N$). Nous justifierons que l'échange de deux modes de Majorana $\hat{\gamma}_n$ et $\hat{\gamma}_m$ distincts ($n \neq m$) suit la règle suivante :

$$\hat{\gamma}_n \rightarrow \pm \hat{\gamma}_m \quad \text{et} \quad \hat{\gamma}_m \rightarrow \mp \hat{\gamma}_n, \quad (1.19)$$

où le choix du signe inférieur ou supérieur dépend du sens de l'échange et d'un choix de jauge. À priori, ces relations ne semblent pas très différentes de l'échange de bosons ou de fermions puisqu'elles n'impliquent qu'une phase π . Par contre, l'effet de cette transformation est très différent puisque la base n'est pas formée directement par le produit de modes de Majorana, mais plutôt par des opérateurs fermioniques \hat{d}_j ($j = 1, \dots, N$) obtenus par la combinaison des MZM en paires [voir équation (1.17)].

La base générée par l'occupation fermionique inclut donc une somme sur plusieurs produits d'opérateurs de Majorana et un changement de signe peut mener à une transformation unitaire non triviale.

Avant d'en extraire les conséquences pour le calcul quantique, tentons de justifier l'équation (1.19) à l'aide d'un argumentaire simple⁶. Soit \hat{U}_{nm} l'opérateur unitaire générant l'échange des modes de Majorana $\hat{\gamma}_n$ et $\hat{\gamma}_m$. Cet opérateur doit obéir aux contraintes physiques suivantes:

- On suppose un échange *adiabatique* de sorte que \hat{U}_{nm} agit uniquement sur le sous-espace des états fondamentaux.
- Puisque l'on considère un ensemble de modes de Majorana localisés et bien séparés spatialement, \hat{U}_{nm} agira uniquement dans le sous-espace généré par les opérateurs $\hat{\gamma}_n$ et $\hat{\gamma}_m$.
- L'échange de deux modes de Majorana ne devrait pas modifier la parité fermionique totale \mathcal{P} du système. L'opérateur \hat{U}_{nm} devrait donc uniquement dépendre du produit $\hat{\gamma}_n \hat{\gamma}_m$, c'est-à-dire de la parité d'occupation $\hat{P}_{nm} = -i \hat{\gamma}_n \hat{\gamma}_m$.
- Un opérateur unitaire peut être écrit sous la forme de l'exponentielle d'un opérateur antihermitien.

À partir de ces considérations, on en conclut que la transformation unitaire d'échange doit avoir la forme ($\hat{P}_{nm}^2 = 1$)

$$\hat{U}_{nm} = \exp \left[i \alpha \hat{P}_{nm} \right] = \cos \alpha + i \hat{P}_{nm} \sin \alpha, \quad (1.20)$$

où α est une constante réelle à déterminer et où nous avons négligé une phase globale.

Finalement, la valeur de α est fixée par le fait que, par définition, l'évolution générée par U_{nm} doit mener à l'échange des opérateurs $\hat{\gamma}_n$ et $\hat{\gamma}_m$. Ainsi, dans la représentation d'Heisenberg

$$\begin{aligned} \hat{U}_{nm}^\dagger \hat{\gamma}_n \hat{U}_{nm} &= \left[\cos \alpha - i \hat{P}_{nm} \sin \alpha \right] \hat{\gamma}_n \left[\cos \alpha + i \hat{P}_{nm} \sin \alpha \right] \\ &= \cos^2 \alpha \hat{\gamma}_n + \sin^2 \alpha \hat{P}_{nm} \hat{\gamma}_n \hat{P}_{nm} - i \sin \alpha \cos \alpha \left[\hat{P}_{nm}, \hat{\gamma}_n \right] \end{aligned}$$

6. Nous suivons ici l'approche utilisée par l'excellent cours en ligne disponible à l'adresse topocondmat.org développé par les équipes de l'Université de Delft (groupe du Pr. Akhmerov) et de l'Université du Maryland (Pr. Sau).

$$= \hat{\gamma}_n \cos 2\alpha + \hat{\gamma}_m \sin 2\alpha \quad (1.21)$$

et de manière similaire

$$\hat{U}_{nm}^\dagger \hat{\gamma}_m \hat{U}_{nm} = \hat{\gamma}_m \cos 2\alpha - \hat{\gamma}_n \sin 2\alpha. \quad (1.22)$$

Afin que \hat{U}_{nm} représente bien un échange nous avons donc $2\alpha = \pm\pi/2$, ce qui correspond bien aux deux signes de l'équation (1.19). L'opérateur de l'équation (1.20) peut donc être réécrit sous la forme

$$\hat{U}_{nm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 + i\hat{P}_{nm} \right], \quad (1.23)$$

où nous avons choisi de conserver $\alpha = +\pi/4$ et l'échange avec le signe inverse est donc obtenu par l'opérateur d'évolution \hat{U}_{nm}^\dagger . Finalement, il est possible de vérifier le caractère non abélien de la statistique d'échange en calculant le commutateur

$$\left[\hat{U}_{12}, \hat{U}_{23} \right] = \frac{1}{2} \left[\hat{P}_{23}, \hat{P}_{12} \right] = \hat{\gamma}_1 \hat{\gamma}_3, \quad (1.24)$$

et donc l'ordre des échanges aura une importance sur l'état final.

Qubit de Majorana et opérations logiques

Afin de comprendre les conséquences de l'équation (1.23) pour le calcul quantique, il faut d'abord définir un qubit de Majorana, c'est-à-dire de quelle façon l'information sera encodée dans les majoranas. Une contrainte dans la définition de ce qubit est la conservation de la parité fermionique totale dans un système fermé [49]. Ainsi, un système de $2N$ majoranas formant N sites fermioniques non locaux peut encoder au plus $N - 1$ qubit, puisque la parité d'occupation d'un des sites sera contrainte par la parité fermionique totale et la parité des autres sites (i.e. $p_N = \mathcal{P} \prod_{j=1}^{N-1} p_j$).

Cette approche où l'on maximise l'utilisation des degrés de liberté disponibles pour l'encodage d'information est nommée encodage dense. Elle possède le désavantage que le site fermionique fixé par la parité totale sera grandement enchevêtré avec l'ensemble du système et donc une erreur sur ce site se propagera rapidement à l'ensemble des qubits. En particulier, dans un système physique réel, le système n'est jamais complètement isolé de son environnement et il y a donc un risque qu'une quasi-particule s'ajoute

au système. On nomme cet effet l'empoisonnement par quasi-particules. Une seconde approche, potentiellement plus robuste, est l'encodage épars. Aussi appelé encodage redondant, l'idée dans ce cas est plutôt de fixer la parité fermionique séparément pour chaque qubit. Dans ce cas, quatre majoranas sont utilisés pour l'encodage d'un qubit et donc un empoisonnement par l'ajout d'une quasi-particule mènera à une erreur locale plutôt que globale.

Pour un seul qubit que nous considérons ci-dessous, les encodages denses et épars sont équivalents et requièrent quatre majoranas. Dans ce cas, en contraignant la parité fermionique totale à $\mathcal{P} = +1$, il est possible d'encoder un qubit dans les états logiques

$$|0\rangle \equiv |+, +\rangle, \quad \text{et} \quad |1\rangle \equiv |-, -\rangle = \hat{d}_A^\dagger \hat{d}_B^\dagger |+, +\rangle, \quad (1.25)$$

où \pm indique la parité d'occupation des modes $\hat{d}_A = (\hat{\gamma}_1 + i\hat{\gamma}_2)/2$ et $\hat{d}_B = (\hat{\gamma}_3 + i\hat{\gamma}_4)/2$, et donc $\hat{P}_{A(B)}|\epsilon_A, \epsilon_B\rangle = \epsilon_{A(B)}|\epsilon_A, \epsilon_B\rangle$ avec $\epsilon_{A(B)} = \pm 1$.

Considérons d'abord l'effet de l'échange \hat{U}_{12} des modes de Majorana 1 et 2 sur un état arbitraire du qubit $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ (avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$)

$$\hat{U}_{12}|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\alpha(1 + i\hat{P}_A)|0\rangle + \beta(1 + i\hat{P}_A)|1\rangle \right] \quad (1.26)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\alpha(1 + i)|0\rangle + \beta(1 - i)|1\rangle \right], \quad (1.27)$$

où nous avons utilisé que $\hat{P}_{12} \equiv \hat{P}_A$. La représentation de l'échange \hat{U}_{12} dans le sous-espace du qubit est donc la porte de changement de phase

$$B_{12} = e^{i\frac{\pi}{4}\sigma_z} := \begin{pmatrix} e^{i\pi/4} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}, \quad (1.28)$$

où la matrice de Pauli σ_z agit dans la base du qubit. Cette porte logique est parfois nommée porte S [50]. Par une même démarche, l'on démontre que l'échange des majoranas 3 et 4 aura le même effet dans le sous-espace du qubit et donc $B_{12} = B_{34}$. Puisque B_{12} résulte de l'échange de particules, il s'agit d'une opération logique topologiquement robuste. Son implémentation physique dépend uniquement de propriétés topologiques et sera donc exacte dans la limite d'un échange adiabatique. En particulier, elle sera indépendante des détails de la trajectoire suivie par les particules lors de leur échange.

Une seconde opération logique peut être obtenue par l'échange des majoranas 2 et 3. Dans ce cas, l'opérateur unitaire est

$$\hat{U}_{23} = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 + \hat{\gamma}_2 \hat{\gamma}_3] \quad (1.29)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 + i \left(\hat{d}_A^\dagger - \hat{d}_A \right) \left(\hat{d}_B + \hat{d}_B^\dagger \right) \right]. \quad (1.30)$$

Remarquons que les termes de la forme $\hat{d}_A^\dagger \hat{d}_B$ agissent à l'extérieur du sous-espace du qubit. La représentation de l'opérateur \hat{U}_{23} dans le sous-espace du qubit est donc

$$B_{23} = e^{i\frac{\pi}{4}\sigma_x} := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.31)$$

puisque $\hat{d}_A \hat{d}_B + c.c.$ mène à des termes hors diagonaux. À une phase globale près, l'opération B_{23} correspond à la porte logique nommée $\sqrt{\text{NON}}$. Pour s'en convaincre notons que $B_{23}^2 = i\sigma_x$, avec la matrice de Pauli σ_x l'équivalent de la porte NON dans la base des états propres de σ_z .

Finalement, afin de montrer l'importance du caractère non abélien des échanges, notons que la série d'échanges

$$B_{12} B_{23} B_{12} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

correspond à une phase globale près à la porte de Hadamard. Rappelons que la porte de Hadamard, très utilisée dans le calcul quantique, permet la création de superposition d'états en effectuant une transformation entre les bases d'états propres des opérateurs σ_x et σ_z [50]. Finalement, notons qu'en combinant l'échange de majoranas et la mesure de la parité d'ensembles de quatre modes de Majorana il est également possible d'établir un protocole implémentant une porte logique à 2 qubits protégée par les propriétés topologiques du système [3].

Calcul universel quantique et protection topologique

Un important résultat à la base de l'informatique quantique est la possibilité de réaliser tout calcul quantique à l'aide d'un petit nombre d'opérations logiques que l'on nomme ensemble universel d'opérations. Ainsi, afin d'obtenir un ordinateur quantique topologique, l'on souhaite idéalement que toutes les portes logiques de l'ensemble universel soient réalisées de manière topologiquement robuste. Malheureusement, ce n'est pas le cas du calcul basé sur les majoranas, puisque la statistique d'échange non abélienne (qui reproduit le modèle des anyons d'Ising) ne permet pas d'atteindre cet objectif [4]. En effet, il n'est pas possible de réaliser la porte à 1 qubit T (parfois nommée porte $\pi/8$) [50]

$$U_{\pi/8} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix} = e^{i\pi/8} \begin{pmatrix} e^{-i\pi/8} & 0 \\ 0 & e^{i\pi/8} \end{pmatrix}. \quad (1.33)$$

Ce problème peut être résolu à l'aide de protocoles de distillation d'états magiques tirant profit de la protection des autres portes topologiquement protégées [4].

Bien que le calcul quantique basé sur les modes de Majorana permet d'envisager du calcul quantique robuste, le Graal du calcul quantique topologique demeure la réalisation expérimentale d'une phase topologique ayant une structure suffisamment complexe pour permettre le calcul quantique universel [2]. D'un point de vue mathématique, une phase topologique dont les excitations sont des anyons de Fibonacci permet d'atteindre cet objectif. Par contre, aucune réalisation physique simple de ce modèle n'est connue, les propositions actuelles reposant généralement sur des hétérostructures complexes conjuguant effet Hall quantique fractionnaire et supraconductivité [51].

Chapitre 2

Modes de Majorana : Réalisation physique et signatures expérimentales

Le précédent chapitre a permis de se familiariser avec les notions de phases topologiques et de modes de Majorana, ainsi qu'à leur application à l'informatique quantique. L'objectif de ce second chapitre est de présenter des modèles physiques permettant de réaliser ces notions abstraites en laboratoire. Après une introduction au formalisme de Bogoliubov-de Gennes à la section 2.1, nous présenterons à la section 2.2 un modèle jouet permettant de comprendre l'émergence de modes de Majorana dans un nanofil supraconducteur : la chaîne de Kitaev. Par la suite, nous introduirons à la section 2.3 un modèle plus expérimentalement réaliste basé sur les nanofils semiconducteurs à fort couplage spin-orbite. Quelques signatures expérimentales des modes de Majorana et le statut de leurs possibles observations expérimentales seront discutés à la section 2.4. Finalement, nous offrirons à la section 2.4.3 quelques perspectives sur les directions de recherche activement poursuivies dans la communauté.

Tout comme pour le précédent chapitre, l'objectif est de mettre en contexte les travaux de recherche présentés dans les chapitres suivants et d'introduire des concepts utiles à leur compréhension. L'objectif est donc d'être pédagogique plutôt qu'exhaustif. En particulier, la réalisation de modes de Majorana dans des nanofils supraconducteurs ayant fait l'objet d'un grand nombre d'articles de synthèse, nous référons le lecteur aux références [15, 16, 18, 19, 52–54] pour des couvertures complémentaires de ce domaine de recherche.

2.1 Formalisme de Bogoliubov-de Gennes

Le formalisme de Bogoliubov-de Gennes (BdG) est particulièrement utile pour l'étude de supraconducteurs inhomogènes et sera essentiel à la compréhension de la suite de cette thèse. Nous en faisons donc une brève introduction ci-dessous. En particulier, nous insisterons sur un élément important de ce formalisme : la contrainte ou symétrie particule-trou. Cette dernière découle de la structure de l'hamiltonien BdG et on explicite ici ses conséquences sur le spectre et les états propres obtenus dans ce formalisme.

2.1.1 Hamiltonien de Bogoliubov-de Gennes

Soit $\hat{\psi}_\sigma^{(\dagger)}(x)$ un opérateur d'annihilation (création) d'un fermion à la position x avec spin σ et obéissant aux relations d'anticommutation usuelles

$$\left\{ \hat{\psi}_\sigma(x), \hat{\psi}_{\sigma'}(x') \right\} = 0, \quad \text{et} \quad \left\{ \hat{\psi}_\sigma(x), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(x') \right\} = \delta_{\sigma, \sigma'} \delta(x - x'). \quad (2.1)$$

En l'absence de l'indice de spin $\hat{\psi}(x)$ représentera ci-dessous un spineur à deux composantes $\hat{\psi}(x) \equiv (\hat{\psi}_\uparrow^\dagger(x), \hat{\psi}_\downarrow(x))^T$. Un système supraconducteur inhomogène 1D, traité à l'aide d'une théorie champ moyen BCS, est alors décrit par l'hamiltonien quadratique

$$\hat{\mathcal{H}} = \int dx \left[\hat{\psi}^\dagger(x) H_0(x) \hat{\psi}(x) + \Delta(x) \hat{\psi}_\uparrow^\dagger(x) \hat{\psi}_\downarrow^\dagger(x) + \Delta^*(x) \hat{\psi}_\downarrow(x) \hat{\psi}_\uparrow(x) \right], \quad (2.2)$$

où $\Delta(x)$ est le paramètre d'ordre (*gap* supraconducteur). Dans le contexte d'intérêt pour cette thèse, $\Delta(x)$ sera considéré un paramètre phénoménologique résultant d'un couplage par effet de proximité entre un système unidimensionnel conducteur et un supraconducteur 3D. Nous discuterons davantage ce modèle à la section 2.3.

En l'absence de supraconductivité, l'hamiltonien à une seule particule associé à l'équation (2.2) est simplement l'opérateur différentiel $H_0(x)$. Il n'est pas aussi immédiat d'écrire un hamiltonien à une particule en présence de supraconductivité en raison des termes ne préservant pas le nombre de particules. Une façon d'y arriver est de doubler la taille de l'hamiltonien à une particule en introduisant un nouveau

spineur à quatre composantes (spineur de Nambu)

$$\hat{\Psi}^\dagger = \left(\hat{\psi}_\uparrow^\dagger, \hat{\psi}_\downarrow^\dagger, \hat{\psi}_\uparrow, \hat{\psi}_\downarrow \right), \quad (2.3)$$

incluant ainsi des opérateurs de création et d'annihilations dans le même spineur. Dans cette équation et pour la suite, nous omettrons généralement la dépendance en x des opérateurs afin de simplifier la notation. À l'aide des relations d'anticommutations, l'hamiltonien peut alors s'écrire sous la forme

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \int dx \hat{\Psi}^\dagger H_{\text{BdG}}(x) \hat{\Psi}, \quad (2.4)$$

où l'hamiltonien à une particule H_{BdG} possède la structure par bloc :

$$H_{\text{BdG}}(x) = \begin{pmatrix} H_0 & -i\sigma_y \Delta \\ i\sigma_y \Delta^* & -H_0^* \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

On nomme le nouvel espace deux par deux correspondant à cette structure l'*espace électron-trou*.

Notons que la structure de H_{BdG} peut légèrement varier selon la définition du spineur de Nambu. L'effet d'un choix de base différent sera discuté à la fin de cette section. Indépendamment du choix de la base, l'hamiltonien **BdG** contient le double du nombre de degrés de liberté de l'hamiltonien initial H_0 . Ceci signifie que tous les degrés de liberté ne sont pas indépendants et donc que certains sont reliés par une contrainte. Il s'agit de la symétrie particule-trou ou de conjugaison de charge telle qu'introduite à la section 1.1.3. Dans le contexte d'un hamiltonien **BdG** cette symétrie résulte d'une contrainte stricte de la structure de l'hamiltonien et elle est donc parfois aussi nommée contrainte de Fermi [30, 55].

Symétrie particule-trou

Notons τ_α ($\alpha = x, y, z$) les matrices de Pauli agissant sur le sous-espace particule-trou. Par sa construction, l'hamiltonien **BdG** obéit à la contrainte

$$H_{\text{BdG}} = -\tau_x H_{\text{BdG}}^* \tau_x, \quad (2.6)$$

ce qui correspond au respect d'une symétrie particule-trou. Cette symétrie est alors représentée par un opérateur antiunitaire avec lequel l'hamiltonien *anticommut*

$$\{C, H_{\text{BdG}}\} = 0, \quad (2.7)$$

où $C = \tau_x \mathcal{K}$. Ainsi, suivant la notation de la section 1.1.3, nous avons $U_C \equiv \tau_x$ et donc $C^2 = \tau_x^2 = \mathbb{1}_2$.

La contrainte de l'équation (2.7) mène à un spectre d'énergie symétrique par rapport à $E = 0$. Plus précisément, soit $\phi_n(x)$ un état propre solution de l'équation différentielle définie par

$$H_{\text{BdG}}(x)\phi_n(x) = \epsilon_n \phi_n(x) \quad (2.8)$$

où ϵ_n est la valeur propre. En prenant le complexe conjugué de l'équation (2.8) et en utilisant l'équation (2.6) à la seconde ligne, nous obtenons la nouvelle équation aux valeurs propres ($\tau_x^2 = \mathbb{1}$)

$$\begin{aligned} \tau_x H_{\text{BdG}}^* (\tau_x)^2 \phi_n^* &= \epsilon_n \tau_x \phi_n^* \\ -H_{\text{BdG}} \tau_x \phi_n^* &= \epsilon_n \tau_x \phi_n^*. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Cette équation signifie que $\tau_x \phi_n^*$ est également un état propre de H_{BdG} , mais avec valeur propre $-\epsilon_n$. En d'autres mots, la contrainte particule-trou impose que le spectre de H_{BdG} soit symétrique par rapport à $E = 0$ puisque pour chaque valeur propre positive, il y aura également une valeur propre négative associée.

Par convention, dans ce qui suit nous rendrons la contrainte particule-trou explicite en choisissant une jauge de sorte que

$$\phi_{-n} = \tau_x \phi_n^* \quad \text{et} \quad \epsilon_{-n} = -\epsilon_n. \quad (2.10)$$

De plus, afin de simplifier la notation lors de calcul analytique, nous introduisons la notation standard

$$\phi_n(x) := \begin{pmatrix} u_n(x) \\ v_n(x) \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

où $u_n(x)$ et $v_n(x)$ seront des vecteurs de fonctions dont la dimension correspond au nombre de degrés libertés locaux du système sans supraconductivité (deux par exemple

pour un système avec spin). La contrainte particule-trou prend alors la forme

$$\phi_{-n}(x) := \begin{pmatrix} v_n^*(x) \\ u_n^*(x) \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

ce qui implique $u_{-n} = v_n^*$ et $v_{-n} = u_n^*$. De plus, notons que, par construction, l'hamiltonien BdG aura un nombre pair d'états propres où $\epsilon_n \neq 0$. Il est donc utile de retirer l'indice $n = 0$ lors de l'étiquetage des états propres et au besoin d'étiqueter séparément les modes d'énergie zéro. Il ne s'agit pas d'une simplification ici, mais bien uniquement d'un choix de notation.

L'équation (2.10) permet de choisir un ensemble d'états indépendants (par exemple tous les états où $n > 0$) et à réécrire toute expression analytique uniquement en termes de ces états propres. Considérons maintenant l'hamiltonien à plusieurs particules et notons $\hat{\Gamma}_n^\dagger$ l'opérateur de création associé à l'état propre ϕ_n . L'hamiltonien peut alors être réécrit sous la forme

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \sum_{n \neq 0} \epsilon_n \hat{\Gamma}_n^\dagger \hat{\Gamma}_n \quad (2.13)$$

$$= \sum_{n > 0} \epsilon_n \left(\hat{\Gamma}_n^\dagger \hat{\Gamma}_n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.14)$$

où pour la seconde égalité nous avons utilisé la contrainte particule-trou afin d'écrire l'hamiltonien uniquement en termes d'opérateurs indépendants. En prévision des sections suivantes, notons également que, suivant la classification d'Altland-Zirnbauer du tableau 1.2, un hamiltonien BdG (où $C^2 = +1$ par construction) sera membre de la classe D s'il n'est pas invariant sous renversement du temps. Dans le cas contraire il sera respectivement dans la classe BDI si $T^2 = +1$ ou dans la classe DIII si $T^2 = -1$. Nous verrons à la section suivante que la symétrie sous renversement aura donc un effet important sur le diagramme de phase topologique lors de l'étude des modes de Majorana.

Définition alternative du spineur de Nambu

Finalement, notons que la forme exacte de la matrice par bloc de l'équation (2.5) dépend de la définition du spineur $\hat{\Psi}$. En particulier, le choix alternatif¹

$$(\hat{\Psi}')^\dagger = \left(\hat{\psi}_\uparrow^\dagger, \hat{\psi}_\downarrow^\dagger, \hat{\psi}_\downarrow, -\hat{\psi}_\uparrow \right), \quad (2.15)$$

est fréquemment utilisé dans la littérature portant sur les modes de Majorana (incluant cette thèse). Dans ce cas, l'hamiltonien BdG prends la forme par bloc [18, 55]

$$H'_{\text{BdG}}(x) = \begin{pmatrix} H_0 & \Delta \mathbb{1} \\ \Delta^* \mathbb{1} & -\sigma_y H_0^* \sigma_y \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

où le terme d'appariement supraconducteur n'inclut plus de matrice de Pauli dans le sous-espace de spin. Bien que la discussion soit conceptuellement la même pour cette nouvelle base, la contrainte particule-trou implique l'opérateur $\tau_y \sigma_y$ plutôt que τ_x , ce qui complique légèrement les expressions analytiques en raison du mélange du degré de liberté de spin par l'opérateur de symétrie particule-trou. L'annexe A complémente cette section en y regroupant quelques relations mathématiques utiles à l'utilisation du formalisme BdG.

2.2 Chaîne de Kitaev

Un modèle très répandu pour introduire les états liés de Majorana est la chaîne de Kitaev [5]. Ce système jouet décrit une chaîne unidimensionnelle de fermions sans spins dans un modèle de liaisons fortes. Bien que le caractère sans spin puisse donner l'impression de n'être qu'une curiosité mathématique, sans possible réalisation expérimentale, nous verrons à la section 2.3 qu'il est possible de faire l'ingénierie d'un système mésoscopique (formé d'électrons ayant un spin) dont la physique à basse énergie est équivalente à la physique présentée ci-dessous pour la chaîne de Kitaev. Différentes variantes de cette approche sont à la base de l'effort expérimental actuel visant à faire l'ingénierie de modes de Majorana [18, 19]. Nous reviendrons par la

1. Dépendamment de la convention de signe utilisée pour le paramètre d'ordre Δ , le facteur -1 multiplie parfois la troisième composante plutôt que la quatrième.

suite à ce modèle au chapitre 5, où nous étudierons plus en profondeur les modes de Majorana présents dans la phase topologique de ce modèle ainsi que l'effet Josephson.

2.2.1 Modèle et cas limites

On considère un réseau unidimensionnel de N sites où $\hat{c}_j^{(\dagger)}$ est un opérateur d'annihilation (création) d'un fermion sans spin sur le site j ($j = 1, \dots, N$). La chaîne de Kitaev est décrite par l'hamiltonien

$$\hat{\mathcal{H}} = -\mu \sum_{j=1}^N \left(\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j - \frac{1}{2} \right) + \sum_{j=1}^{N-1} \left[-t \left(\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1} + \hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j \right) + \Delta \hat{c}_j \hat{c}_{j+1} + \Delta^* \hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j^\dagger \right], \quad (2.17)$$

où t est un paramètre de saut, μ est le potentiel chimique et $\Delta = |\Delta| e^{i\theta}$ est un paramètre d'ordre supraconducteur. En raison de l'absence de spin, et donc de l'impossibilité de former un état singulet, un paramètre d'ordre pair de type s n'est pas possible ici. Nous verrons ci-dessous que la supraconductivité dans ce modèle est donc plutôt de type p . Afin de simplifier la notation, on choisira un paramètre d'ordre réel $\Delta = |\Delta|$. Cela est possible en toute généralité puisqu'il est possible d'absorber la phase θ dans une redéfinition des opérateurs fermioniques (transformation unitaire) de la forme $c_j \rightarrow c_j e^{-i\theta/2}$. Par contre, cette transformation ne pourra complètement éliminer cette phase dans le cas d'une jonction Josephson comme discuté à la section 2.4.

Afin de comprendre le caractère topologique de la chaîne de Kitaev, il est utile de réécrire le modèle en termes d'opérateurs de Majorana. Suivant la notation de l'équation (1.8), l'hamiltonien est alors

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{i\mu}{2} \sum_{j=1}^N \hat{\gamma}_{j,A} \hat{\gamma}_{j,B} + \frac{i}{2} \sum_{j=1}^{N-1} [(\Delta - t) \hat{\gamma}_{j,A} \hat{\gamma}_{j+1,B} + (\Delta + t) \hat{\gamma}_{j,B} \hat{\gamma}_{j+1,A}]. \quad (2.18)$$

L'utilité de cette transformation n'est à priori pas évidente. Afin d'en comprendre l'intérêt, considérons d'abord deux cas limites.

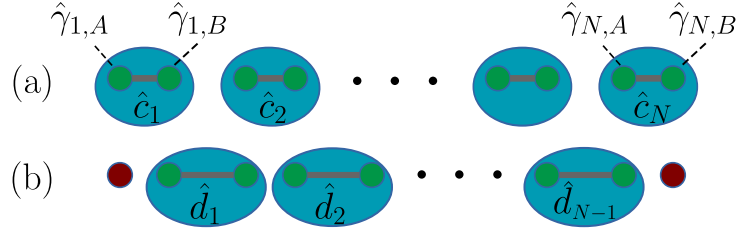


FIGURE 2.1 – Schéma de la chaîne de Kitaev. (a) Cas limite 1, $t = \Delta = 0$. Les opérateurs de Majorana à l'intérieur d'un même site sont couplés. (b) Cas limite 2: $t = \Delta$, $\mu = 0$. Les opérateurs de Majorana de sites voisins sont couplés. Pour un système de taille fini, un opérateur de Majorana est laissé libre à chaque extrémité de la chaîne (indiqué en rouge). Figure inspirée de la référence [5].

Cas limite 1: Phase « triviale »

Considérons d'abord la limite où $t = \Delta = 0$. Dans ce cas, l'hamiltonien est simplement

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{i\mu}{2} \sum_{j=1}^N \hat{\gamma}_{j,A} \hat{\gamma}_{j,B} = -\mu \sum_{j=1}^N \left(\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j - \frac{1}{2} \right), \quad (2.19)$$

et les sites de la chaîne sont découplés. L'état fondamental est alors simplement un produit tensoriel sur tous les sites vides ($\mu < 0$) ou tous les sites occupés ($\mu > 0$). Il s'agit d'un isolant atomique [voir figure 2.1(a)] et la décomposition en termes d'opérateurs de Majorana n'est pas particulièrement utile à la compréhension du système dans ce cas, l'hamiltonien étant diagonal dans la base fermionique originale. Cette limite correspond à la phase topologiquement triviale définie au chapitre précédent.

Cas limite 2: Phase « topologique »

Considérons maintenant la limite où $t = \Delta$ et $\mu = 0$. Dans ce cas l'hamiltonien de l'équation (2.18) devient

$$\hat{\mathcal{H}} = i\Delta \sum_{j=1}^{N-1} \hat{\gamma}_{j,B} \hat{\gamma}_{j+1,A}. \quad (2.20)$$

À première vue, la distinction entre cet Hamiltonien et celui de l'équation (2.19) n'est peut-être pas immédiate. En effet, en introduisant les opérateurs fermioniques

$$\hat{d}_j = (\hat{\gamma}_{j,B} + i\hat{\gamma}_{j+1,A})/2, \quad (2.21)$$

il est possible de réécrire l'équation (2.20) sous la forme

$$\hat{\mathcal{H}} = \Delta \sum_{j=1}^{N-1} \left(2\hat{d}_j^\dagger \hat{d}_j - 1 \right), \quad (2.22)$$

ce qui semble tout à fait analogue au hamiltonien de l'équation (2.19) obtenu dans le premier cas limite. Pourtant, une importante distinction se cache dans les conditions frontière et est illustrée à la figure 2.1. En effet, l'hamiltonien de départ compte N sites, alors que l'équation (2.22) se compose de $N - 1$ sites fermioniques, puisque les opérateurs $\hat{\gamma}_{1,A}$ et $\hat{\gamma}_{N,B}$ sont absents de l'hamiltonien.

Dans cette limite, les opérateurs $\hat{\gamma}_{1,A}$ et $\hat{\gamma}_{N,B}$ sont donc des modes de Majorana parfaitement localisés aux extrémités de la chaîne. Comme discuté au chapitre 1, il existe alors un fermion non local $\hat{f} = \frac{1}{2} (\hat{\gamma}_{1,A} + i\hat{\gamma}_{N,B})$, découplé de la dynamique du système. L'occupation de cet état fermionique n'affecte pas l'énergie totale de la chaîne et l'état fondamental est donc doublement dégénéré. Partant de la discussion du chapitre précédent sur les phases topologiques, l'existence de modes d'énergie zéro localisés aux extrémités de la chaîne uniquement dans le second cas limite, suggère que les deux cas appartiennent à des phases topologiques distinctes. En effet, nous verrons ci-dessous qu'en raison de la symétrie particule-trou (voir section 2.1), un état fixé à énergie zéro ne peut s'en éloigner sans la fermeture du gap de volume et une transition de phase quantique topologique sépare donc ces deux cas limites.

2.2.2 Solution du modèle

Solution numérique

Afin d'obtenir une intuition sur le diagramme de phase du modèle, considérons d'abord une approche numérique. Puisque l'hamiltonien (2.17) est quadratique, il est possible de l'écrire sous la forme

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \mathbf{c}^\dagger H_{\text{BdG}} \mathbf{c}, \quad (2.23)$$

où $\mathbf{c}^\dagger = (c_1^\dagger, c_1, c_2^\dagger, c_2, \dots)$ est un vecteur d'opérateur et H_{BdG} est une matrice hermitienne de dimension $2N \times 2N$ et correspond au hamiltonien BdG défini à la section 2.1. Puisque le système est défini sur un réseau H_{BdG} est simplement une matrice plutôt qu'un opérateur différentiel, le spectre ϵ_n et les fonctions d'onde à une particule ϕ_n peuvent être obtenus en diagonalisant numériquement H_{BdG} . Les états propres prennent la forme de vecteurs orthonormés à $2N$ composantes que nous nommerons selon la convention $\phi_n = (u_n(1), v_n(1), u_n(2), \dots, v_n(N))^T$. Comme dans la limite continue, le spectre sera symétrique par rapport à la ligne d'énergie nulle en raison de la contrainte particule-trou (voir section 2.1). Plus concrètement, cette contrainte mène aux relations $\epsilon_n = -\epsilon_{-n}$ et $\phi_{-n} = (v_n^*(1), u_n^*(1), \dots, u_n(N)^*)$.

La figure 2.2(a) présente le spectre à basse énergie de H_{BdG} en fonction du potentiel chimique pour la situation où $t = \Delta$. Notons que le point à $\mu = 0$ correspond précisément au cas limite 2 considéré précédemment. Comme attendu, on y retrouve un mode d'énergie zéro correspondant au fermion non local \hat{f} et $N - 1$ états dégénérés dont l'occupation requiert une énergie $2t = 2\Delta$ [voir l'équation (2.22)]. En s'éloignant de ce point, on observe que le mode d'énergie zéro est stable jusqu'à $\mu \approx \pm 2t$. Puisqu'il s'agit d'un système de taille fini, il n'y a pas formellement de fermeture du gap et la transition entre les phases est donc lisse. Nous verrons ci-dessous que $\mu = \pm 2t$ correspond bien à la fermeture du gap et au point critique de la transition de phase topologique dans la limite thermodynamique. Finalement, les figures 2.2(b,c) permettent d'observer que, même loin du point particulier $\mu = 0$, l'amplitude de la fonction d'onde du mode d'énergie zéro est localisée aux extrémités de la chaîne, alors que les états d'énergies finis sont délocalisés.

Structure de bande et diagramme de phase

Considérons maintenant la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$). En raison de l'invariance sous translation, l'hamiltonien de l'équation (2.17) est diagonalisable à l'aide d'une transformée de Fourier. On introduit donc les opérateurs

$$\hat{c}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikj} \hat{c}_k, \quad (2.24)$$

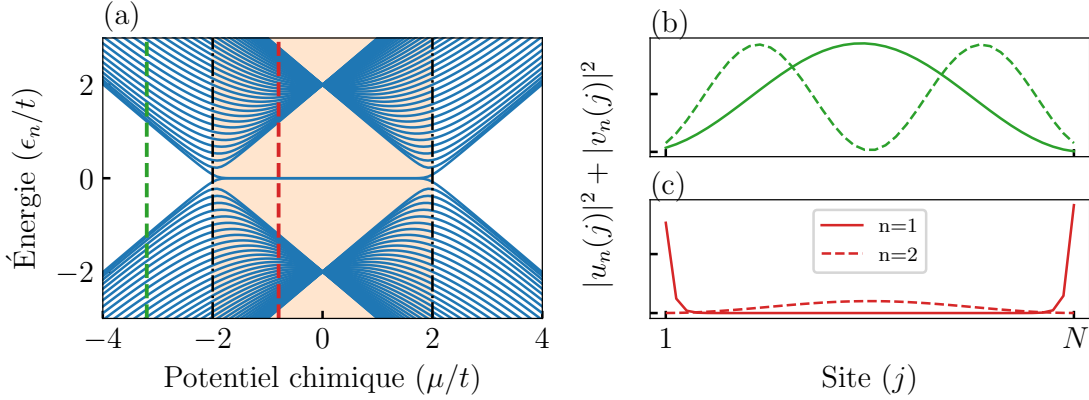


FIGURE 2.2 – (a) Niveaux d'énergie de la chaîne de Kitaev de taille finie ($N = 40$, $t = \Delta$). La zone ombragée (orange) représente la phase topologique avec la transition de phase quantique topologique indiquée par les lignes verticales noires (b,c) Amplitude de la fonction d'onde pour les deux premiers vecteurs propres (b) dans la phase triviale $\mu/t = -3.2$ et (c) dans la phase topologique $\mu/t = -0.8$.

où nous avons choisi des unités de longueur de sorte que la constante du réseau de la chaîne est $a = 1$. L'hamiltonien est alors

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \sum_k \hat{C}_k^\dagger h(k) \hat{C}_k, \quad (2.25)$$

avec les spineurs $\hat{C}_k^\dagger = (\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_{-k})$ et l'hamiltonien à une particule

$$h(k) = \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (2.26)$$

où $\mathbf{d} = (0, 2\Delta \sin(k), -2t \cos k - \mu)$ et $\boldsymbol{\tau}$ est un vecteur de matrices de Pauli.

Le spectre peut donc être obtenu simplement en diagonalisant $h(k)$ et prend la forme

$$\epsilon_{\pm}(k) = \pm |\mathbf{d}| = \pm \sqrt{(\mu + 2t \cos k)^2 + 4\Delta^2 \sin^2 k}. \quad (2.27)$$

Notons que le gap se fermera uniquement à $k = 0$ pour $\mu = -2t$ ou à $k = \pi$ pour $\mu = 2t$, ce qui est cohérent avec les résultats numériques de la figure 2.2. Ainsi, par extension des cas limites, la chaîne de Kitaev sera dans la phase topologique pour $|\mu| < 2|t|$ et $\Delta \neq 0$. De plus, notons que le terme d'appariement supraconducteur a bien une symétrie de type p , c'est-à-dire impaire sous l'inversion $k \rightarrow -k$ et linéaire en k à basse énergie. Finalement, remarquons que la phase triviale de la chaîne de

Kitaev est un cas un peu pathologique, puisqu'il ne contient qu'une seule bande. La transition de phase $|\mu| = 2|t|$ correspond donc au point où le potentiel chimique croise le minimum ou le maximum de l'unique bande du modèle.

2.2.3 Propriétés topologiques et modes de Majorana

Invariant topologique \mathbb{Z}_2

La définition des phases topologiques et triviales du modèle de Kitaev s'appuie jusqu'à présent sur le principe de correspondance volume-frontière. Nous avons utilisé le concept d'équivalence topologique et notre connaissance de l'existence (ou non) de modes d'énergie zéro à certains points de l'espace des paramètres afin de déterminer le diagramme de phase. Par contre, tel que mentionné à la section 1.1.2, il est possible de définir un invariant topologique pouvant être calculé uniquement à partir de la définition de $h(k)$ sur la première zone de Brillouin [$k \in (-\pi, \pi)$]. Nous suivons ici l'approche simple de la référence [16] pour définir cette quantité.

De manière similaire à la discussion de l'hamiltonien BdG du système de taille fini, $h(k)$ obéit également à une contrainte particule-trou. Celle-ci prend ici la forme

$$\tau_x h(k) \tau_x = -h^*(k), \quad (2.28)$$

ce qui correspond aux contraintes sur les composantes du vecteur \mathbf{d} :

$$d_{x,y}(k) = -d_{x,y}(-k) \quad \text{et} \quad d_z(k) = d_z(-k), \quad (2.29)$$

ce qui signifie qu'aux points particuliers de la première zone de Brillouin : $k = 0, \pi$, le vecteur sera parallèle ou bien antiparallèle avec l'axe z . Considérons le vecteur unitaire $\hat{\mathbf{d}}(k) \equiv \mathbf{d}(k)/|\mathbf{d}(k)|$, l'orientation sera définie par

$$s_0 = \hat{\mathbf{d}}_z(0) = \text{sgn}[-\mu - 2t], \quad s_\pi = \hat{\mathbf{d}}_z(\pi) = \text{sgn}[-\mu + 2t], \quad (2.30)$$

avec $s_{0,\pi} = \pm 1$ si $\hat{\mathbf{d}}(k = 0, \pi)$ est parallèle (+1) ou antiparallèle (-1) avec l'axe z .

D'un point de vue géométrique, on peut considérer la courbe décrite par $\hat{\mathbf{d}}(k)$

sur la surface d'une sphère lorsque k évolue de 0 à π . La courbe sera fermée dans le cas où $s_0 = s_\pi$ ou ouverte dans le cas $s_0 = -s_\pi$. Ces deux cas sont topologiquement distincts et, en raison de la contrainte particule-trou, il est impossible de passer de l'un à l'autre sans fermer le gap ($\mu = \pm 2t$ dans le cas de la chaîne de Kitaev). En effet, dans ce cas $\hat{\mathbf{d}}$ n'est pas défini puisque $|\mathbf{d}| = 0$. Ainsi, les deux phases de la chaîne de Kitaev peuvent être différenciées par l'invariant topologique

$$\nu = s_0 s_\pi, \quad (2.31)$$

où $\nu = -1$ dans le cas où $\mu < 2|t|$ ce qui correspond à la phase topologique, alors que $\nu = +1$ si $|\mu| > 2|t|$ ce qui correspond à la phase triviale. L'équation (2.31) est un exemple d'invariant topologique \mathbb{Z}_2 , c'est-à-dire pouvant uniquement prendre deux valeurs distinctes.

Invariant basé sur le pfaffien

L'équation (2.31) permet de calculer l'invariant topologique dans le cas spécifique d'un système à deux bandes. Nous n'en ferons pas la démonstration ici, mais l'invariant ν peut de façon générale être défini en termes du pfaffien d'une matrice antisymétrique [5]. Suivant la notation de la référence [56], l'invariant \mathbb{Z}_2 peut s'écrire sous la forme

$$\nu = \text{sgn} \left\{ \frac{\text{Pf} [h(k = \pi)U_C]}{\text{Pf} [h(k = 0)U_C]} \right\}. \quad (2.32)$$

Notons qu'en utilisant les propriétés du pfaffien,² il est possible de démontrer que l'équation (2.32) est équivalente à l'équation (2.31) dans la limite d'un système à 2 bandes.

Invariant topologique \mathbb{Z} et symétrie chirale

Comme mentionné précédemment, la chaîne de Kitaev représente un exemple de phase topologique protégé par une symétrie. De manière générale, différents invariants

2. Rappelons rapidement quelques-unes des propriétés du pfaffien. Similaire au déterminant, pour une matrice antisymétrique A , nous avons la relation suivante $\text{Pf}[A]^2 = \det(A)$. De plus pour une matrice 2×2 , où $A = i\sigma_y a$, nous avons $\text{Pf}[i\sigma_y a] = a$.

topologiques pourront être définis selon les symétries imposées au système. En particulier, la discussion de la section précédente repose uniquement sur la structure du hamiltonien BdG. L'invariant de l'équation (2.32) est donc valide pour un système 1D appartenant à la classe D (symétrie $C^2 = +1$). Par contre, la chaîne de Kitaev obéit à une symétrie supplémentaire qui n'a pas été considérée jusqu'à présent dans notre démarche. En effet, tel que défini à l'équation (2.26), la chaîne de Kitaev est invariante sous le renversement du temps (défini par l'opérateur antiunitaire $T = \mathcal{K}$). Si les perturbations préservent la symétrie T , la chaîne de Kitaev appartient alors à la classe BDI. En consultant le tableau 1.2, on en conclut qu'il existe donc un second invariant topologique de type \mathbb{Z} plutôt que \mathbb{Z}_2 permettant de caractériser les phases topologiques de la chaîne de Kitaev.

Une conséquence de l'invariance du hamiltonien sous T et C est l'existence d'une symétrie chirale $S = U_T U_C^* = \tau_x$. Plus concrètement, l'hamiltonien obéit alors à $\{\tau_x, h(k)\} = 0$, ce qui impose la contrainte $d_x = 0$. La trajectoire de $\hat{\mathbf{d}}(k)$ est alors contrainte sur un cercle dans le plan (d_y, d_z) plutôt que sur une sphère. Dans ce cas, il est possible de définir un nouvel invariant topologique $\nu' \in \mathbb{Z}$ correspondant au nombre d'enroulements de $\hat{\mathbf{d}}(k)$ autour de l'origine lorsque k parcourt la première zone de Brillouin [54]. Le signe de ν' correspond alors à l'orientation (horaire ou antihoraire) de l'enroulement. De plus, les invariants ν et ν' seront reliés par

$$\nu = (-1)^{\nu'}. \quad (2.33)$$

La conséquence physique de cette équation est la suivante : pour un système invariant sous renversement du temps (classe BDI, $T^2 = +1$), il existe une infinité de phases topologiques pouvant être différenciées par le nombre de modes de Majorana aux extrémités du système. Au contraire, en l'absence de cette symétrie un nombre pair de modes de Majorana à une même extrémité du système sera topologiquement équivalent à la phase triviale. Cela signifie que des perturbations respectant les symétries de la classe D permettront aux modes de Majorana de s'hybrider et de se déplacer à une énergie finie.

Notons finalement qu'une autre approche afin de calculer l'invariant topologique se base sur les propriétés de la matrice de diffusion (*scattering*) [57–59]. Cette approche sera brièvement introduite à la section 2.4.1 et utilisée au chapitre 4. Elle est

particulièrement utile lors du traitement numérique d'un système sans symétrie de translation.

2.3 Nanofil semiconducteur

La chaîne de Kitaev introduite à la section précédente est un modèle jouet dont la réalisation expérimentale peut sembler difficile à envisager. En effet, les électrons dans la nature ont un spin et donc le chemin menant à un système effectif sans spin n'est à priori pas évident. Pourtant, plusieurs approches ont été développées dans la dernière décennie pour obtenir un système physique (réalisable expérimentalement) dont le modèle à basse énergie reproduit la physique de la chaîne de Kitaev.

2.3.1 Ingrédients du modèle

L'approche la plus commune afin de reproduire la physique de la chaîne de Kitaev repose sur la combinaison des ingrédients suivants : [13, 14]

- un nanofil semiconducteur dans la limite d'un seul canal de conduction ;
- un couplage par effet de proximité à un supraconducteur conventionnel (paramètre d'ordre de symétrie s) dans la limite de grand volume ;
- un fort couplage spin-orbite intrinsèque au semiconducteur ;
- un champ magnétique externe.

Nous présentons ici chacun de ces ingrédients avant de considérer les conséquences de leur combinaison à la section suivante. Nous verrons plus loin que d'autres approches équivalentes sont possibles. En particulier, le chapitre 4 se concentre sur l'ingénierie d'un couplage spin-orbite synthétique à l'aide de textures magnétiques.

Confinement unidimensionnel

Un premier élément nécessaire à la réalisation de la chaîne de Kitaev est le confinement à un système unidimensionnel. On considère un système où la longueur caractéristique d_x du nanofil est beaucoup plus grande que sa hauteur d_z et sa largeur

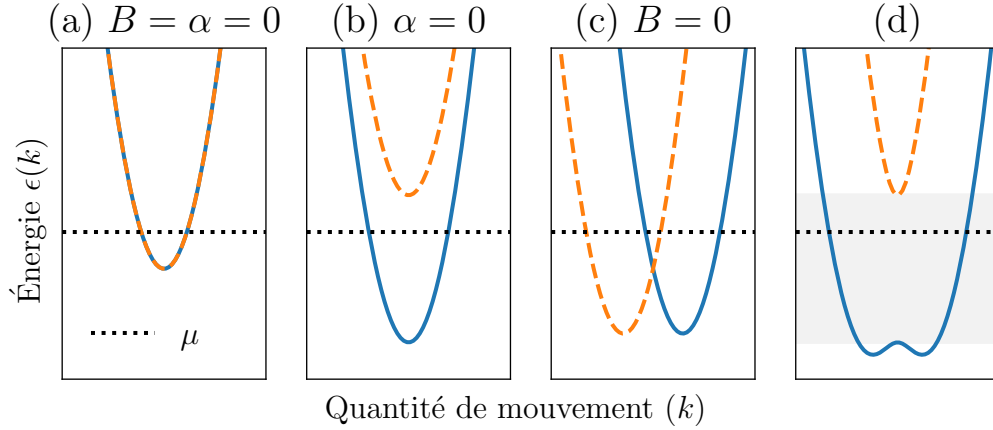


FIGURE 2.3 – (a) Bandes paraboliques dégénérées en spin. (b) Séparation en énergie des bandes par l'énergie Zeeman. (c) Séparation des bandes par un couplage spin-orbite. (d) Combinaison de l'effet du couplage spin-orbite et de l'énergie Zeeman, où le positionnement du potentiel chimique dans la zone ombragée mène à une théorie effective sans spin.

d_y , soit en raison de la géométrie intrinsèque du matériau (nanofil) ou bien en raison de l'imposition d'un potentiel électrostatique. Dans cette limite $d_x \gg d_y, d_z$, la quantité de mouvement le long du fil $p_x \equiv p \equiv \hbar k$ est un bon nombre quantique ayant une séparation δ_x petite par rapport aux autres échelles du système (limite continue) alors que la faible dimension selon y et z mènent à une quantification décrite par un petit nombre d'entiers $n_y \geq 1$ et $n_z \geq 1$, où les différentes valeurs de n_y et n_z correspondent à différents canaux de conduction. Dans le cas où $d_y, d_z \sim \lambda_f$ avec λ_f la longueur d'onde de Fermi [60], il est possible de régler le potentiel chimique du système (à l'aide de grilles électrostatiques) afin d'être dans la limite où seul le canal de conduction de plus faible énergie contribue au transport. Notons que la contrainte de la limite à une seule bande n'est pas essentielle. Les travaux des références [61–63] ont démontré que la contrainte est plutôt l'occupation d'un nombre *impair* de bandes. Par simplicité, nous supposons être dans la limite d'un seul canal de conduction pour la suite de cette thèse.

Champ magnétique et couplage spin-orbite

Avant de présenter l'hamiltonien du système en présence de supraconductivité, débutons par démontrer que la combinaison d'un couplage spin-orbite et d'un champ

magnétique uniforme permet d'obtenir un système dont la physique à basse énergie est sans spin. En combinant ces deux effets, l'hamiltonien du système est

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V_Z \sigma_z + \alpha p \sigma_y, \quad (2.34)$$

et les bandes d'énergies propres associées sont

$$\epsilon_{\pm}(p) = \frac{p^2}{2m^*} \pm \sqrt{V_Z^2 + (\alpha p)^2}, \quad (2.35)$$

où m^* est la masse effective du semiconducteur, $V_Z = \frac{1}{2}g\mu_B B_z$ est l'énergie Zeeman (avec μ_B le magnéton de Bohr et B_z le champ magnétique selon l'axe z) et α est l'amplitude du couplage spin-orbite.

L'effet de la combinaison de ces ingrédients sur le spectre du hamiltonien est résumé à la figure 2.3. En l'absence de ces deux ingrédients ($\alpha = B = 0$), l'hamiltonien de l'équation (2.34) décrit simplement un système 1D d'électrons libres formant des bandes paraboliques dégénérées en spin [figure 2.3(a)]. L'ajout d'un champ magnétique permet de lever la dégénérescence des bandes [figure 2.3(b)] par l'ajout au hamiltonien d'un terme de polarisation de spin. De manière similaire, un couplage spin-orbite mène à une polarisation en spin, mais l'amplitude du champ magnétique effectif dépend dans ce cas de la quantité de mouvement [figure 2.3(c)].

Dans le cas où le champ magnétique est perpendiculaire à l'axe du couplage spin-orbite, il y a ouverture d'un gap en $p = 0$ et il existe une gamme de potentiel chimique permettant de n'obtenir qu'un seul type de porteur. Cette situation est indiquée par la zone ombragée grise de la figure 2.3(d). En positionnant le potentiel chimique dans cette zone, à l'aide de grilles électrostatiques par exemple, il devient possible d'obtenir un système effectif sans spin. Bien entendu, le système est toujours formé d'électrons possédant un spin, mais, à basse énergie, il y a verrouillage du spin et de la quantité de mouvement et l'étiquette de spin n'est donc plus nécessaire à la description du système. Il s'agit de modes de propagation hélicaux.

Supraconductivité et effet de proximité

Afin d'obtenir un système supraconducteur, on considère que le nanofil est en contact avec un supraconducteur de grande taille. En raison de ce couplage par effet de proximité, il y aura une hybridation des propriétés du semiconducteur et du supraconducteur [64]. L'approximation la plus simple permettant de traiter cet effet est l'imposition d'un gap supraconducteur Δ induit par effet de proximité dans le nanofil. Ce dernier sera généralement inférieur à Δ_s , le gap du supraconducteur de volume. En utilisant le formalisme BdG introduit à la section 2.1, il est alors possible d'écrire l'hamiltonien effectif pour le nanofil

$$H(p) = \left(\frac{p^2}{2m^*} - \mu + \alpha p \sigma_y \right) \tau_z + V_Z \sigma_z + \Delta \tau_x, \quad (2.36)$$

où les matrices $\tau_{x,z}$ sont des matrices de Pauli agissant sur l'espace électron-trou. Remarquons que nous avons ici utilisé la base alternative définie à la fin de la section 2.1 où l'opérateur de symétrie particule-trou est $C = U_C \mathcal{K} = \sigma_y \tau_y \mathcal{K}$.

Une approche plus formelle permettant de traiter l'effet de proximité est de considérer l'action totale du système incluant le supraconducteur et le semiconducteur. Pour un supraconducteur de symétrie s (ayant un gap sans noeud), il sera alors possible d'intégrer sur ses degrés de liberté afin d'obtenir un modèle effectif uniquement pour le nanofil. Le terme de couplage entre le nanofil et le supraconducteur mènera alors à une *self-énergie* qui, à basse fréquence, agira comme le gap supraconducteur Δ définit à l'équation (2.36) (voir l'annexe de la référence [16] pour plus de détails).

2.3.2 Spectre d'énergie et propriétés topologiques

L'hamiltonien de l'équation (2.36) peut être diagonalisé à l'aide des propriétés d'anticommuation des matrices de Pauli,

$$\epsilon_{\pm}^2(p) = \xi^2(p) + (\alpha p)^2 + V_Z^2 + \Delta^2 \pm 2\sqrt{\xi^2(p) [V_Z^2 + (\alpha p)^2] + \Delta^2 V_Z^2}, \quad (2.37)$$

où nous avons utilisé la notation $\xi(k) = \frac{p^2}{2m^*} - \mu$. Ce spectre est illustré à la figure 2.4. Dans la limite $\Delta = 0$ [figure 2.4(a)], le spectre correspond simplement au spectre

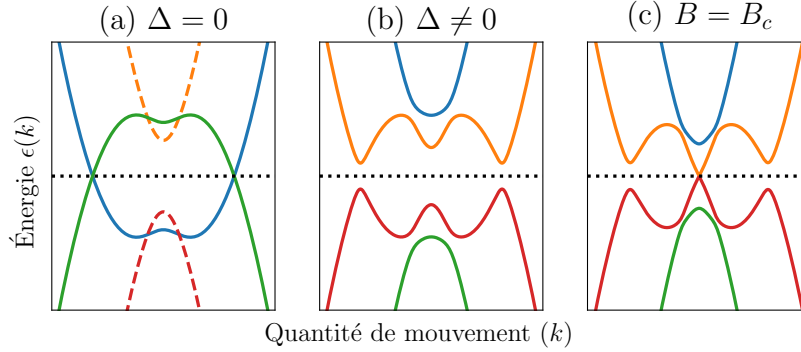


FIGURE 2.4 – Structure de bandes d'un nanofil en présence de supraconductivité.

tracé précédemment à la figure 2.3(d), mais dont des bandes additionnelles de signes opposés (où le zéro d'énergie correspond à l'énergie de Fermi) résultent de l'utilisation du formalisme BdG. En présence de supraconductivité, il y a ouverture de gap lors du croisement des bandes [figure 2.4(b)]. En particulier, en addition du gap à $p = 0$ résultant de la présence d'un champ magnétique, il y a également ouverture d'un gap à $p = p_f$ (au vecteur d'onde de Fermi). Nous noterons respectivement ces gaps par Δ_1 et Δ_2 .

Considérons d'abord le gap Δ_1 . Le spectre se simplifie grandement au point $p = 0$,

$$\epsilon_{\pm}^2(p = 0) = (V_Z \pm \sqrt{\mu^2 + \Delta^2})^2, \quad (2.38)$$

où nous avons utilisé $V_Z \geq 0$. Tel qu'illustré à la figure 2.4(c), il y aura donc fermeture du gap Δ_1 au point critique où le champ magnétique correspond à la valeur critique

$$\frac{1}{2}g\mu_B B_c \equiv \sqrt{\mu^2 + \Delta^2}. \quad (2.39)$$

En raison de cette fermeture du gap, une transition de phase pourrait se produire à ce point. En particulier, nous verrons qu'une phase topologique équivalente à la physique des modes Majorana de la chaîne de Kitaev apparaît pour $B > B_c$.

Le gap Δ_2 quant à lui correspond au gap supraconducteur de type p induit par la combinaison de la supraconductivité et du couplage spin-orbite. L'expression analytique générale pour Δ_2 étant plutôt complexe, notons simplement que, dans le

cas où $\mu = 0$, elle prend la forme [18, 65]

$$\Delta_2 = \frac{2\Delta E_{so}}{\sqrt{E_{so} \left(2E_{so} + \sqrt{V_z^2 + 4E_{so}^2} \right)}}, \quad (2.40)$$

où $E_{so} = m^* \alpha^2 / 2$ est l'échelle d'énergie associée au couplage spin-orbite. Remarquons que ce gap sera maximal ($\Delta_2 = \Delta$) en l'absence de champ magnétique, alors qu'au contraire, à fort champ magnétique, il sera réduit graduellement suivant la loi de puissance $\Delta_2 \propto B^{-1/2}$ en raison de la polarisation des spins.

Diagramme de phase

Afin d'obtenir le diagramme de phase topologique, on utilise l'invariant basé sur le pfaffien du hamiltonien défini à l'équation (2.32). Dans le cas d'une théorie à basse énergie, le bord de la zone de Brillouin $k = \pi/a$ est repoussé à l'infini dans la limite du continuum ($a \rightarrow 0$). Dans cette limite, l'hamiltonien est simplement

$$H(p \rightarrow \infty) \approx \frac{p^2}{2m^*} \tau_z, \quad (2.41)$$

et le pfaffien sera alors simplement

$$\text{Pf} [H(p \rightarrow \infty) U_c] \approx \frac{p^2}{2m^*} \text{Pf} [-i\sigma_y \tau_x] = \frac{p^2}{2m^*}. \quad (2.42)$$

Cette quantité étant toujours positive, la transition de phase topologique reposera uniquement sur la physique à $p = 0$. L'invariant topologique est alors

$$\nu = \text{sgn} \{ \text{Pf} [(V_z \sigma_z + \Delta \tau_x - \mu \tau_z) \sigma_y \tau_y] \} = \text{sgn} \{ \Delta^2 + \mu^2 - V_z^2 \}, \quad (2.43)$$

où à l'aide de la définition du champ critique de l'équation (2.39), $\nu = -\text{sgn} [B - B_c]$. Ainsi, d'un point de vue expérimental, il sera possible de contrôler la transition de phase topologique, et donc l'émergence de modes de Majorana, en variant le champ magnétique ou le potentiel chimique.

Finalement, remarquons que, puisque la transition de phase est déterminée par l'hamiltonien à $p = 0$, le couplage spin-orbite n'apparaît pas dans l'expression de

l'équation (2.43). Par contre, notons qu'il s'agit tout de même d'un ingrédient essentiel à l'émergence de modes de Majorana, car, en l'absence de couplage spin-orbite, le gap Δ_2 (gap à $p = p_f$) est nul. Ce gap est essentiel à la création d'une phase topologique et à la validité de l'équation (2.43).

2.3.3 Textures magnétiques et couplage spin-orbite artificiel

Bien que l'approche basée sur les nanofils semiconducteurs avec fort couplage spin-orbite occupe une part importante de la littérature, notons que d'autres approches sont possibles afin de faire l'ingénierie d'un système réalisant la physique de la chaîne de Kitaev. En particulier, une approche centrale à cette thèse, qui sera discutée en plus de détail au chapitre 4, repose sur l'utilisation de textures magnétiques permettant l'ingénierie d'un couplage spin-orbite effectif (parfois qualifié d'artificiel ou de synthétique). Cette texture peut être obtenue à l'aide de réseau de microaimants [66, 67] par exemple ou bien d'impuretés magnétiques [68–70]. Nous présentons ci-dessous cette équivalence à l'aide d'une transformation unitaire de manière similaire à la référence [66].

Afin de comprendre la relation entre texture magnétique et couplage spin-orbite, considérons un nanofil semiconducteur sans couplage spin-orbite ni supraconductivité, mais en présence d'un champ magnétique inhomogène. L'hamiltonien est alors

$$H = \frac{p_x^2}{2m^*} + \mathbf{b}(x) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.44)$$

où pour alléger la notation, nous avons défini $\mathbf{b} = g\mu_B\mathbf{B}/2$, de sorte que l'énergie Zeeman locale est $V_Z(x) = |\mathbf{b}(x)|$. Afin de comparer ce hamiltonien à celui de la section 2.3.1, il est utile de faire une transformation unitaire $U(x)$ permettant de se déplacer dans un référentiel où le champ magnétique est uniforme et aligné selon l'axe z . À cette fin, nous considérons la transformation [66]

$$U(x) = \exp \left\{ i \frac{\theta}{2} \sigma_{xy}(x) \right\}, \quad (2.45)$$

où l'angle polaire $\theta(x)$ et l'opérateur σ_{xy} sont définis suivant les conventions

$$\theta(x) = \arccos\left(\frac{b_z(x)}{|\mathbf{b}(x)|}\right) \quad \text{et} \quad \sigma_{xy} = \frac{b_y\sigma_x - b_x\sigma_y}{\sqrt{b_x^2 + b_y^2}}. \quad (2.46)$$

Notons que dans le cas d'une texture magnétique confiné au plan $x-z$, l'opérateur σ_{xy} est alors simplement $-\text{sgn}(b_x)\sigma_y$.

Dans le nouveau référentiel défini par U , l'hamiltonien est

$$H' = U^\dagger H U = \frac{p_x^2}{2m^*} - \frac{i\hbar}{2m^*} \{p_x, U^\dagger \partial_x U\} + \frac{\hbar^2}{2m^*} U^\dagger \partial_x^2 U + |\mathbf{b}(x)|\sigma_z, \quad (2.47)$$

où nous avons utilisé

$$U^\dagger p_x U = p_x + U^\dagger [p_x, U(x)] \quad (2.48)$$

$$= p_x - i\hbar U^\dagger \partial_x U. \quad (2.49)$$

Ainsi, dans le nouveau référentiel, l'orientation de la texture magnétique est fixe, mais, en contrepartie, il y apparition d'un potentiel et d'un couplage spin-orbite effectif pouvant varier dans l'espace

$$\tilde{\mu}(x) + \tilde{\alpha}_x(x)\sigma_x + \tilde{\alpha}_y(x)\sigma_y = -\frac{\hbar^2}{2m^*} U^\dagger \partial_x^2 U - \frac{i\hbar}{m^*} U^\dagger \partial_x U, \quad (2.50)$$

où nous regroupons dans la définition du potentiel $\tilde{\mu}(x)$ les contributions indépendantes du spin.

En particulier, dans le cas d'une texture magnétique spirale de période R dans le plan $x-z$,

$$\mathbf{b}_s(x) = b_0 \left[\cos \frac{2\pi x}{R} \hat{\mathbf{x}} + \sin \frac{2\pi x}{R} \hat{\mathbf{z}} \right], \quad (2.51)$$

la transformation unitaire est

$$U_s(x) = \exp \left\{ \frac{i\pi x}{R} \sigma_y \right\}, \quad (2.52)$$

et les paramètres du modèle effectif sont alors

$$\tilde{\mu} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* R^2}, \quad \tilde{\alpha}_x = 0 \quad \text{et} \quad \tilde{\alpha}_y = \frac{\hbar \pi}{m^* R}. \quad (2.53)$$

Les deux modèles sont alors équivalents et la longueur d'onde de la spirale magnétique détermine l'amplitude du couplage spin-orbite effectif. Nous utiliserons fréquemment cette transformation entre les deux modèles au chapitre 4.

2.4 Signatures expérimentales et état de l'art

Bien que cette thèse soit théorique, elle est fortement inspirée par les développements expérimentaux. Cette section vise donc à présenter les principales signatures expérimentales des modes de Majorana, ainsi que l'état actuel de leur observation.

2.4.1 Anomalie de conductance à biais nul

Une première signature expérimentale de l'existence de modes de Majorana aux extrémités d'un système unidimensionnel est une anomalie quantifiée de la conductance à biais (voltage) nul. Ainsi, en présence de modes de Majorana, la conductance différentielle $\frac{dI}{dV}$ sera piquée autour du point $V = 0$ avec la forme lorentzienne [54, 71]

$$\frac{dI}{dV} = \frac{2e^2}{h} \frac{\Gamma^2}{(eV)^2 + \Gamma^2}, \quad (2.54)$$

où Γ est le taux tunnel entre une sonde métallique et le mode de Majorana et $G_q \equiv 2e^2/h$ est le quantum de conductance. De façon intuitive, on peut comprendre cette signature en notant que la conductance différentielle est reliée à la densité d'état locale. Par contre, cela ne justifie pas sa quantification. Ainsi, avant de présenter quelques résultats expérimentaux, débutons par retracer une portion de l'argumentaire théorique menant à cette prédiction. Au passage, nous mettrons en évidence un lien entre la matrice de diffusion et l'invariant topologique [57, 58]. Cette relation sera centrale à l'étude numérique du chapitre 4.

Diffusion à une interface NS

Considérons l'interface entre un fil métallique (*normal*) et un supraconducteur (interface NS). Cette interface est décrite par la matrice de diffusion S qui obéit à la

structure par bloc [60]

$$S(E) = \begin{pmatrix} r_N & t_{NS} \\ t_{SN} & r_S \end{pmatrix}, \quad (2.55)$$

où $r_{N(S)}$ est une matrice de réflexion pour une particule incidente à partir de l'interface normale (supraconductrice) et t_{NS} une transmission du supraconducteur vers le métal normal (vice-versa pour t_{SN}). En raison de la conservation du nombre de particules S est une matrice unitaire. Les tailles des matrices formant les blocs de S seront dictées par le nombre de canaux de conduction de chaque côté de l'interface. En particulier, dans la limite où l'énergie E est petite par rapport au gap supraconducteur, il n'y aura aucun canal de conduction du côté "S" et il n'y aura donc pas de possibilité de transmission. La matrice de diffusion est correspond alors simplement à la matrice de réflexion $r_N(E)$.

Tout comme pour l'hamiltonien BdG, il sera utile de considérer une décomposition en termes d'un sous-espace électrons-trous de la matrice de réflexion

$$r_N(E) = \begin{pmatrix} r_{ee} & r_{eh} \\ r_{he} & r_{hh} \end{pmatrix}, \quad (2.56)$$

où les termes diagonaux représentent la réflexion d'électrons (r_{ee}) et de trous (r_{hh}), alors que les termes hors-diagonaux correspondent à une réflexion d'Andreev [72] où un électron incident est réfléchi sous la forme d'un trou (r_{he}). Ce phénomène est une signature de la brisure de la conservation de la charge dans un supraconducteur macroscopique, ce qui permet d'absorber la différence de charge $2e$ entre un électron et un trou par la création d'une paire de Cooper. De manière similaire à un hamiltonien BdG, la décomposition de l'équation (2.56) sera contrainte par la relation [55]

$$\tau_x r(-E) \tau_x = r^*(E), \quad (2.57)$$

où τ_x agit à nouveau sur le sous-espace particule-trou.

Considérons l'effet de la contrainte particule-trou et du caractère unitaire de r_N dans le cas le plus simple où r_N est une matrice 2×2 (un seul canal de conduction). L'équation (2.57) implique alors les contraintes $r_{ee}(0) = r_{hh}^*(0)$ et $r_{eh}(0) = r_{he}^*(0)$. De

plus, puisque r_N est unitaire, nous avons les conditions

$$|r_{ee}|^2 + |r_{eh}|^2 = 1, \quad \text{et} \quad 2r_{ee}r_{eh} = 0. \quad (2.58)$$

En utilisant ces propriétés, le déterminant de $r_N(0)$ prend la forme

$$Q \equiv \det r_N(0) = |r_{ee}|^2 - |r_{eh}|^2 = 1 - 2|r_{eh}|^2 = \pm 1. \quad (2.59)$$

où les deux signes correspondent à la situation d'une réflexion régulière ($r_{ee} = 1$, $Q = +1$) ou une réflexion d'Andreev parfaite ($r_{ee} = 0$, $Q = -1$). On peut démontrer que $Q = -1$ correspond à la phase topologique, alors que $Q = +1$ correspond à la phase triviale. Bien que notre démarche ne constitue pas une preuve générale, Q possède déjà les caractéristiques d'un invariant topologique. En effet, il ne peut prendre que des valeurs discrètes ($Q = \pm 1$ dans notre exemple) et cette valeur ne pourra changer que lors de la fermeture du gap. Il y aura alors ouverture de canaux de conduction dans le supraconducteur et la contrainte $r_N^\dagger r_N = \mathbb{1}$ ne sera plus valide.

La référence [57] démontre que cet argumentaire se généralise à tout système appartenant à la classe D (indépendamment du nombre de canaux de conduction). Notons au passage qu'une confusion possible dans l'interprétation de l'équation (2.59) est d'associer réflexion d'Andreev et phase topologique. En réalité, l'invariant topologique $\mathcal{Q} \equiv \text{sgn}(Q)$ compte la parité du nombre de modes d'énergie zéro. À titre d'exemple, dans le cas d'une interface NS avec un supraconducteur conventionnel (décrite par le formalisme de Blonder, Tinkham et Klapwijk [73, 74]), nous avons bien $\mathcal{Q} = +1$ tel qu'attendu dans la phase triviale. En effet, malgré la possibilité de réflexion d'Andreev, la dégénérescence de spin de ce modèle fait en sorte que, s'ils existent, les modes d'énergie zéro seront toujours en paires. De plus, dans cette phase triviale, la réflexion d'Andreev sera très sensible à la présence d'une barrière de potentiel à l'interface.

Notons que cette approche du calcul d'invariants topologiques à l'aide de la matrice de diffusion a été généralisée à d'autres classes de symétries [58], ainsi qu'à des systèmes de dimensions supérieures [59]. Finalement, notons que pour un système de taille finie, la matrice r_N ne sera en général pas unitaire près de la transition de phase topologique, puisqu'en raison du faible gap il y aura apparition de canaux de conduction dans le supraconducteur. C'est donc plutôt la matrice de diffusion totale

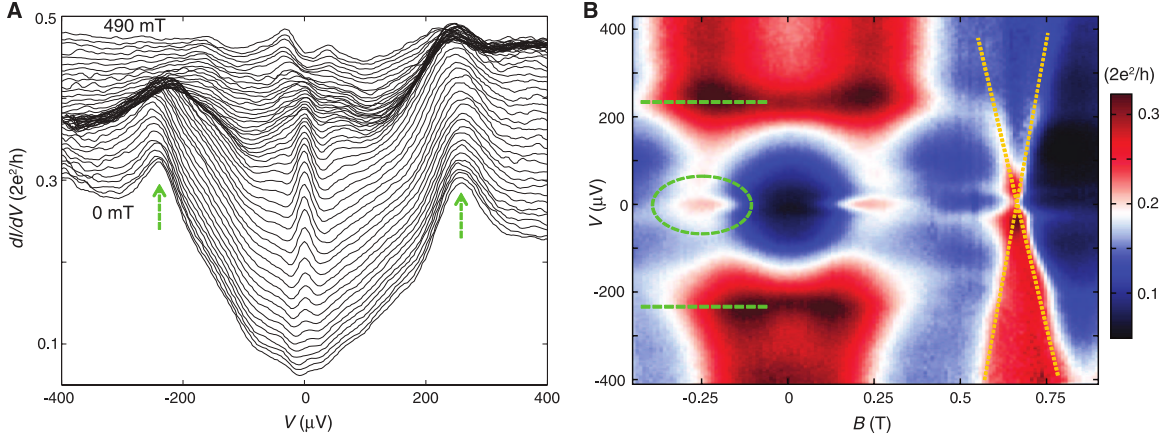


FIGURE 2.5 – Premières signatures expérimentales cohérentes avec l’observation des états liés de Majorana. (a) Conductance différentielle dI/dV en fonction du biais (V) et du champ magnétique (courbes du bas vers le haut). (b) Carte de la conductance différentielle. Figure reproduite de la référence [17]. *Reprinted with permission from AAAS.*

$S(E)$ définie à l’équation (2.55) qui sera unitaire. Par contre, en raison de la symétrie particule-trou, il sera tout de même toujours possible de choisir une base où $r_N(0)$ est réel et $Q \in (-1, 1)$. Das Sarma et al. [75] ont donné le nom de visibilité topologique à cette quantité qui agit comme une version lisse de \mathcal{Q} .

Vérifications expérimentales

Notre exploration des propriétés de réflexions de l’interface NS nous permet de mieux comprendre la quantification de l’anomalie de biais nulle introduite en début de section. Ainsi, en présence de modes de Majorana, il y aura réflexion d’Andreev parfaite à l’interface permettant le transport de charges $2e$. Cet effet sera visible par un plateau de conductance d’amplitude $G(V) = 2e^2/h$ [76] et donc une anomalie à biais nul dans la conductance différentielle.

La figure 2.5 reproduit les résultats de la première observation expérimentale d’une anomalie de biais nulle associée à des modes de Majorana [17]. Cette expérience datant de 2012 a lancé une frénésie d’activités dans le domaine et son interprétation a longtemps été l’objet de débat. En effet, contrairement à la prédiction théorique, l’anomalie observée n’est pas quantifiée et prend plutôt une valeur maximale de $0.2G_q$. Plusieurs facteurs peuvent expliquer cette disparité entre théorie et expérience dont

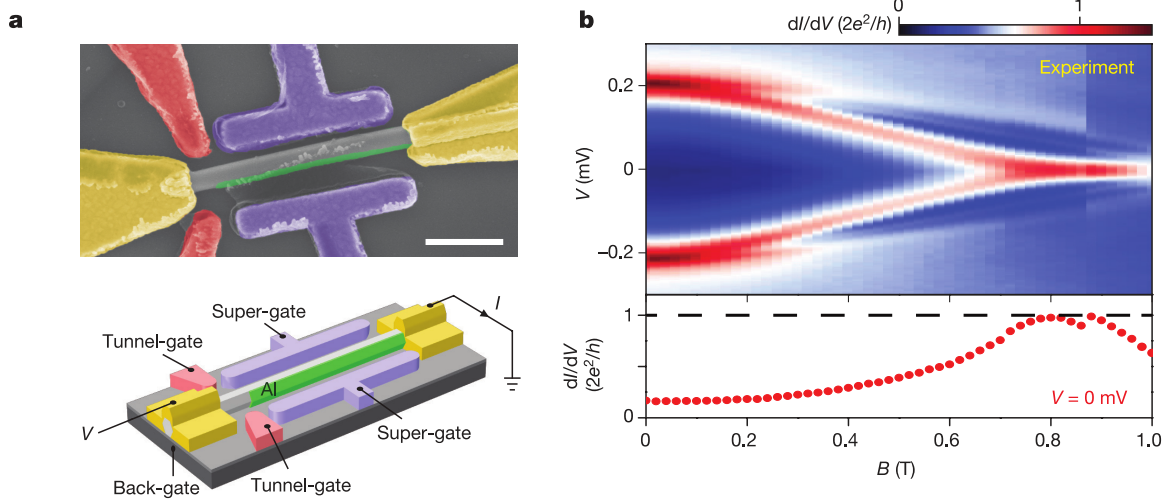


FIGURE 2.6 – Résultats expérimentaux de l'expérience de Zhang et al. (2018) démontrant la quantification de l'anomalie à biais nul. (a) Image en microscopie électronique (haut) et schéma (bas) du dispositif utilisé pour cette expérience. (b) Carte de la conductance différentielle en fonction du biais et du champ magnétique (haut). (bas) Coupe de la carte à biais nul ($V = 0$ mV) indiquant une zone de champ magnétique où l'anomalie atteint la valeur attendue de $2e^2/h$. Figure reproduite de la référence [20]. Reprinted by permission from Springer Nature: Nature [20], copyright (2018).

l'effet de la température, de la dissipation et de l'amplitude du couplage tunnel entre la sonde et le supraconducteur [77]. Un autre facteur compliquant l'analyse de cette expérience est la présence d'un gap supraconducteur *mou* (*soft gap* en anglais), c'est-à-dire qu'il existe une densité d'états non nulle à l'intérieur du gap supraconducteur. Cet effet est observé à la figure 2.5(a) où la conductance différentielle prend la forme d'un « V » pour des biais inférieurs au gap supraconducteur (indiqué par les flèches vertes). Cet effet s'explique par la présence de désordre à l'interface entre le semiconducteur et le supraconducteur [19].

Au cours des années qui ont suivi, un progrès expérimental et théorique a permis de mieux comprendre ces dispositifs et de grandement améliorer leur qualité. Ces développements ont mené à l'observation d'une anomalie à biais nul ayant la valeur quantifiée attendue [20]. Le dispositif utilisé pour cette expérience ainsi que leur résultat principal sont reproduits à la figure 2.6. Il est possible d'y observer [figure 2.6(a)] que la supraconductivité est induite dans cette expérience par le dépôt d'une mince couche d'aluminium à la surface d'un nanofil d'InSb. L'observation d'une anomalie de biais nul quantifiée à une valeur de $2e^2/h$ en présence d'un champ magnétique suffisamment

élevé semble cohérent avec l'existence de modes de Majorana [figure 2.6(b)].

2.4.2 Effet Josephson fractionnaire (4π)

Une seconde signature des MZM, initialement proposée par Kitaev [5], est l'effet Josephson fractionnaire ou effet Josephson 4π . La figure 2.7(a) présente le schéma d'une jonction Josephson : deux îlots supraconducteurs avec respectivement les paramètres d'ordre $\Delta e^{i\varphi_L}$ à gauche et $\Delta e^{i\varphi_R}$ à droite sont séparés par une barrière tunnel. On considère une situation où un couplage d'amplitude t_{LR} permet aux électrons de « sauter » d'un îlot à l'autre.

À l'aide d'un simple calcul de théorie des perturbations aux 2^e ordre en t_{LR} (voir la référence [78] par exemple), on peut démontrer que l'effet Josephson conventionnel correspond au transfert de paires de Cooper entre les deux îlots supraconducteurs. L'énergie associée est $E(\varphi) = -E_J \cos \varphi$, où $\varphi \equiv \varphi_L - \varphi_R$ est la différence de phase entre les deux îlots. Le courant traversant la jonction est alors [74]

$$I_J(\varphi) = \frac{1}{\varphi_0} \frac{\partial}{\partial \varphi} E(\varphi) = \frac{E_J}{\varphi_0} \sin \varphi, \quad (2.60)$$

avec $I_0 \equiv E_J/\varphi_0$ le courant critique de la jonction et $\varphi_0 = \hbar/2e$ le quantum de flux réduit. Il est périodique en fonction de la phase avec une période 2π .

Dans le cas de supraconducteurs topologiques, il y a dégénérescence de l'état fondamental de chacun des îlots en raison des majoranas. Il est alors possible de démontrer, en utilisant la théorie des perturbations dégénérées au 1^{er} ordre, que l'hamiltonien tunnel permet le transfert d'électrons entre les deux îlots et que la dépendance en phase du courant traversant la jonction est de période 4π .

Hamiltonien tunnel et effet Josephson conventionnel

Sans faire une démonstration complète, considérons tout de même le problème de l'effet Josephson d'un point de vue un peu plus mathématique. La jonction illustrée à

la figure 2.7(a) peut être décrite par l'hamiltonien

$$\hat{\mathcal{H}}_{JJ} = \hat{\mathcal{H}}_L(\varphi_L) + \hat{\mathcal{H}}_R(\varphi_R) + \hat{\mathcal{H}}_T, \quad (2.61)$$

où le premier (second) terme correspond au hamiltonien de l'îlot supraconducteur gauche (droit) et dépend de la phase du paramètre d'ordre $\varphi_{L(R)}$. Le dernier terme permet le saut d'électrons entre les deux îlots

$$\hat{\mathcal{H}}_T = t_{LR}\hat{\psi}_L^\dagger(0)\psi_R(0) + h.c., \quad (2.62)$$

où $\hat{\psi}_{L(R)}(0)$ est un opérateur d'annihilation d'un électron à la position de la jonction dans l'îlot gauche (L) ou droit (R). En l'absence de phases supraconductrices $\hat{\mathcal{H}}_L$ et $\hat{\mathcal{H}}_R$ peuvent être diagonalisés à l'aide du formalisme BdG tel que décrit à la section 2.1. Afin de se rapporter à ce cas de référence, il est possible d'éliminer la phase supraconductrice en effectuant une transformation unitaire de sorte que

$$\hat{\psi}_{L(R)}(x) \rightarrow \hat{\psi}_{L(R)}(x)e^{i\varphi_{L(R)}/2}, \quad (2.63)$$

ce qui mène également à $\Delta = |\Delta|e^{i\varphi_{L(R)}} \rightarrow |\Delta|$. Contrairement au cas d'un système isolé où cette transformation de jauge élimine complètement la phase supraconductrice du problème, la différence de phase demeurera présente dans l'hamiltonien tunnel où la transformation mène à $t_{LR} \rightarrow t_{LR}e^{-i(\varphi_L - \varphi_R)/2}$.

Considérons donc l'effet de la perturbation $\hat{\mathcal{H}}_T$ sur les îlots supraconducteurs dans cette jauge. Suivant la notation de l'équation (2.14), l'hamiltonien non perturbé peut alors être décomposé en terme d'états propres

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{\mathcal{H}}_L + \hat{\mathcal{H}}_R = \sum_{\alpha=L,R} \sum_{n>0} \epsilon_{n,\alpha} \hat{\Gamma}_{n,\alpha}^\dagger \hat{\Gamma}_{n,\alpha}, \quad (2.64)$$

et l'état fondamental non perturbé $|\emptyset\rangle$ est alors l'état vide pour les quasiparticules de Bogoliubov de sorte que $\hat{\Gamma}_{n,\alpha}|\emptyset\rangle = 0$. En utilisant la décomposition de l'opérateur fermionique en termes des états propres de $\hat{\mathcal{H}}_0$ tel que démontré à l'équation (A.12) de l'annexe A, l'hamiltonien tunnel devient donc

$$\mathcal{H}_T = \sum_{\sigma} \sum_{n,m>0} \left\{ t_{LR}e^{-i\varphi} \left[(u_{n,\sigma}^L)^* u_{m,\sigma}^R \hat{\Gamma}_{n,L}^\dagger \hat{\Gamma}_{m,R} + v_{n,\sigma}^L u_{m,\sigma}^R \hat{\Gamma}_{n,L} \hat{\Gamma}_{m,R} \right] \right. \quad (2.65)$$

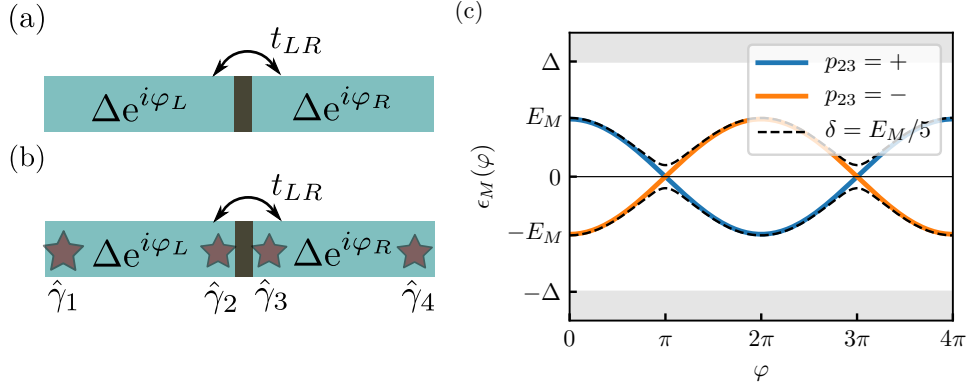


FIGURE 2.7 – (a) Schéma d'une jonction Josephson (b) Jonction Josephson topologique. Les étoiles indiquent des modes de Majorana à chaque extrémité des îlots supraconducteurs. (c) Spectre d'une jonction Josephson topologique ($E_M = \Delta/2$). Les zones grises indiquent le continuum de quasi-particules pour des énergies supérieures au gap supraconducteur Δ . La ligne pointillée indique l'ouverture de gap (dans le sous-espace de parité pair) à $\varphi = \pi, 3\pi$ lors du recouvrement des modes de Majorana (voir texte principal).

$$+(u_{n,\sigma}^L)^*(v_{m,\sigma}^R)^*\hat{\Gamma}_{n,L}^\dagger\hat{\Gamma}_{m,R}^\dagger + v_{n,\sigma}^L(v_{m,\sigma}^R)^*\hat{\Gamma}_{n,L}\hat{\Gamma}_{m,R}^\dagger] + h.c. \},$$

où σ est un indice sur l'ensemble des degrés de liberté interne tel que le spin et où l'argument $x = 0$ est sous-entendu pour toutes les fonctions d'onde. Cette décomposition rend clair que la correction au premier ordre $\langle \emptyset | \hat{\mathcal{H}}_T | \emptyset \rangle$ sera nulle. Au contraire, la correction au second ordre mènera à l'effet Josephson conventionnel [74, 78]. Ces processus du 2^e ordre incluront le transfert de paires de Cooper entre les îlots.

Jonction Josephson topologique

Considérons maintenant la situation où les deux supraconducteurs formant la jonction Josephson sont topologiques et abritent des modes de Majorana à leurs extrémités [figure 2.7(b)]. La discussion de la section précédente doit alors être modifiée puisqu'il devient nécessaire de considérer une théorie des perturbations dégénérée. En particulier, l'hamiltonien tunnel possède des éléments de matrice hors-diagonaux non nuls dans le sous-espace généré par les MZM.

On considère la projection dans le sous-espace des modes de Majorana de l'équation (2.65). Pour ce faire, il est utile de séparer les MZM dans la décomposition en

modes propres des opérateurs fermionique à l'aide de la notation [79]

$$\hat{\psi}_{L,\sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [f_{L,\sigma}(x)\hat{\gamma}_1 + ig_{L,\sigma}(x)\hat{\gamma}_2] + \sum_{n>1}(\dots), \quad (2.66)$$

où les fonctions $\sqrt{2}f_{L,\sigma}(x) = u_{1,\sigma}(x) + v_{1,\sigma}^*(x)$ et $\sqrt{2}g_{L,\sigma}(x) = u_{1,\sigma}(x) - v_{1,\sigma}^*(x)$ sont des fonctions d'onde localisées respectivement à la gauche et à la droite de l'îlot supraconducteur. En définissant des fonctions similaires $f_{R,\sigma}$ et $g_{R,\sigma}$ pour l'îlot droit, l'hamiltonien tunnel est simplement

$$\hat{\mathcal{H}}_M \equiv \hat{\mathcal{H}}_T^{(1)} = -i\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_3 E_M \cos \frac{\varphi}{2}, \quad (2.67)$$

où nous avons défini l'échelle d'énergie

$$E_M = t_{LR} \sum_{\sigma} g_{L,\sigma}(0)f_{R,\sigma}(0), \quad (2.68)$$

et où nous avons également négligé l'amplitude de la fonction d'onde des modes $\hat{\gamma}_{1,4}$ à la jonction (i.e. $f_{L,\sigma}(0) \approx 0$ et $g_{R,\sigma}(0) \approx 0$). D'un point de vue physique, l'équation (2.67) résulte donc de processus où des électrons se déplacent entre les deux îlots en raison du recouvrement des fonctions d'onde des modes de Majorana $\hat{\gamma}_2$ et $\hat{\gamma}_3$.

Le spectre du hamiltonien de l'équation (2.67) est obtenu immédiatement à l'aide des états propres et valeurs propres de l'opérateur de parité $\hat{P}_{23} = -i\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_3$ (au chapitre 5, c'est ce que nous nommerons la *parité intérieure* de la jonction)

$$\epsilon_M(\varphi) = p_{23}E_M \cos \frac{\varphi}{2}, \quad (2.69)$$

où $p_{23} = \pm 1$. Ce spectre est illustré à la figure 2.7. L'évolution de la phase de 2π correspond à un échange des états $p_{23} \rightarrow -p_{23}$. Le doublet formant le spectre possède donc une période 2π , mais, pour une parité p_{23} fixe, les niveaux d'énergie ont une périodicité de 4π . De même, le courant généré par une différence de phase, [80]

$$I_M(t) = \frac{e}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} \epsilon_M(\varphi) = -\frac{p_{23}E_M}{\varphi_0} \sin \frac{\varphi}{2}, \quad (2.70)$$

sera périodique en φ , avec une période 4π .

À priori, en plus de la parité fermionique totale $\mathcal{P} = p_{14}p_{23}$, les parités p_{23} et p_{14} sont également de bons nombres quantiques. Les modes de Majorana mènent alors à une contribution de périodicité 4π à l'effet Josephson. Par contre, deux effets peuvent rendre l'observation de ce phénomène particulièrement difficile : i) l'empoisonnement par une source de quasi-particules et ii) le recouvrement entre les modes de Majorana à l'intérieur de chaque îlot. Dans ces deux cas, p_{23} ne sera plus un bon nombre quantique et un effet Josephson de période 2π risque d'être observé. Le premier phénomène est une conséquence du fait qu'une jonction n'est jamais complètement isolée de son environnement et donc, qu'en général, il est possible pour un électron de sauter du système vers un réservoir fermionique ou vice-versa. La parité fermionique totale du système sera modifiée par un tel événement à un taux caractéristique γ_{qp} [81]. Ainsi, p_{23} fluctuera de manière stochastique en fonction de ces événements que l'on nomme empoisonnement puisqu'ils détruisent le phénomène que l'on souhaite observer [81]. Même si la parité fermionique totale est toujours conservée, il n'est plus possible de considérer séparément la parité intérieure (p_{23}) et la parité extérieure (p_{14}) dans le cas où il y a recouvrement entre les fonctions d'onde des majoranas à l'intérieur d'un même îlot supraconducteur. L'hamiltonien du système est alors

$$\hat{\mathcal{H}} = -\delta\hat{P}_{12} - \delta\hat{P}_{34} - \hat{P}_{23}E_M \cos \frac{\varphi}{2}, \quad (2.71)$$

où δ est le coût en énergie d'occupation de l'opérateur fermionique formé par les modes $\hat{\gamma}_1$ et $\hat{\gamma}_2$. Cet hamiltonien se sépare en deux secteurs (parité fermionique totale paire et impaire) et le spectre du secteur paire est indiqué par la ligne pointillée à la figure 2.7(c). Ainsi, le recouvrement des MZM mène à une ouverture du gap à $\varphi = \pi, 3\pi$ et l'effet Josephson retrouve donc une période de 2π .

Vérifications expérimentales

À priori, l'effet Josephson 4π semble être une signature claire des MZM. Par contre, en raison de plusieurs contraintes expérimentales il s'agit d'un phénomène difficile à observer. Ainsi, une expérience où la phase est évoluée adiabatiquement afin de démontrer la période 4π du spectre doit être effectuée à un taux $\gamma \sim \frac{\partial\varphi}{\partial t}$ obéissant aux inégalités : $\gamma \gg \gamma_{qp}$ afin de réduire le risque d'empoisonnement par quasi-particules, $\gamma \gg \delta/\hbar$ afin qu'une transition de type Landau-Zener permette de traverser le gap

δ et, finalement, $\gamma \ll \Delta$ afin que l'expérience soit adiabatique et qu'il n'y ait donc pas d'excitation de quasi-particules. Bien que respecter ces conditions semble être une tâche ardue, une lueur d'espoir est que les taux δ/\hbar et γ_{qp} sont généralement petits (la référence [82] estime $\gamma_{qp} \sim 100$ kHz par exemple). Malgré ces difficultés, deux approches jusqu'à maintenant semblent avoir permis de vérifier l'effet Josephson 4π .

Une première approche est basée sur l'effet Josephson alternatif où l'application d'une tension constante aux bornes d'une jonction Josephson mène à une évolution linéaire de la phase $\varphi(t) = 2eV_{dc}t/\hbar$ [74]. En considérant les équations (2.60) et (2.70), on constate que le courant traversant la jonction oscillera à la fréquence $\omega_{2\pi} = 2eV_{dc}/\hbar$ dans le cas d'une jonction conventionnelle, alors qu'il oscillera à la fréquence $\omega_{4\pi} = eV_{dc}/\hbar$ dans le cas d'une jonction Josephson topologique. La référence [83] a récemment observé la réduction de moitié de la fréquence de radiation Josephson $\omega_{2\pi} \rightarrow \omega_{4\pi}$ lors de l'ajout d'un champ magnétique $B > B_c$ signalant la transition d'un transfert de paire de Cooper dans la phase triviale au transfert d'électrons uniques dans la phase topologique.

Une seconde approche repose sur l'observation de marches de Shapiro [74]. Dans cette expérience, une excitation micro-onde de fréquence ω_{ac} mène à l'apparition de marches dans la courbe $I(V_{dc})$ à un intervalle régulier lorsque $V_{dc} = V_n = n\hbar\omega_{ac}/e^*$, où $n \in \mathbb{Z}$ est l'indice de la marche et e^* est la charge des particules traversant la jonction. La transition de phase topologique est alors marquée par la disparition des marches impaires où $V_{dc} = (2n + 1)\hbar\omega_{ac}/2e$. La disparition de la première marche de Shapiro lors de la transition de phase topologique a été rapportée dans la référence [84]. Finalement, mentionnons que ces deux expériences ont également été réalisées sur la frontière d'un isolant topologique 2D où la supraconductivité est induite par effet de proximité [85–87]. Nous considérerons plus en détail ce système au chapitre 5.

2.4.3 Perspectives

Dans l'objectif de passer de dispositifs tests, comme celui présenté à la figure 2.6(a) à la réalisation d'un processeur quantique basée sur les modes de Majorana, plusieurs percées seront encore requises et font l'objet d'activité de recherche intense. Mentionnons en quelques-unes qui n'ont malheureusement pu être couvertes en détail dans ce

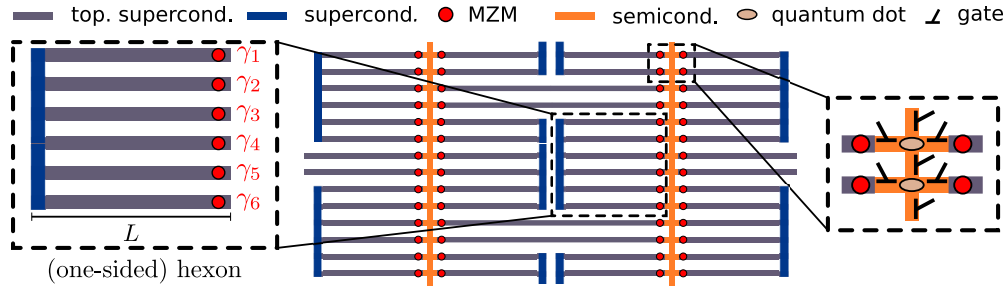


FIGURE 2.8 – Architecture proposée par Karzig *et al.* [21] afin d’effectuer du calcul quantique à l’aide de MZM. Chaque groupe de six nanofils (en gris) regroupés en un seul îlot par un supraconducteur trivial (en bleu) forme un qubit de Majorana. L’information peut être manipulée et lue à l’aide de la mesure de points quantiques (en beige) à proximité des majoranas (disques rouges). Figure reproduite de la référence [21]. *Reprinted figure with permission from Ref. [21]. Copyright (2017) by the American Physical Society.*

chapitre :

- La réalisation d’un circuit comportant de nombreux modes de Majorana requiert des méthodes de nanofabrication précises et reproductibles. À ce titre, l’approche la plus courante où des nanofils sont déposés à la surface d’un substrat semble difficile à mettre à une échelle nécessitant de nombreux nanofils. De nouvelles méthodes sont donc en développement afin d’atteindre ce but. En particulier, la croissance par zone sélectionnée [88] et les structures basées sur les gaz d’électrons 2Ds (2DEGs) à fort couplage spin-orbite [89–91] semblent prometteuses.
- Avant même de tenter d’effectuer un calcul quantique, il est nécessaire de confirmer la statistique d’échange non abélienne des modes de Majorana. Une étape intermédiaire est la vérification des règles de fusion, une propriété topologique des modes de Majorana [92].
- Dans la perspective de créer un qubit de Majorana tel que décrit au chapitre 1, il est important de réduire le risque d’empoisonnement par des quasi-particules (perte d’information dû à l’ajout ou au retrait d’un électron). Un élément central permettant d’atteindre cet objectif est la conception de qubits de Majorana ayant une énergie de charge [93]. Le risque d’empoisonnement est alors réduit par blocage de Coulomb.

Mentionnons également que, dans une perspective à plus long terme, certains envisagent l’architecture d’un futur processeur quantique basée sur les modes de Majorana. La figure 2.8 présente la proposition d’architecture de Karzig *et al.* [21] pour un tel

ordinateur. Dans cette approche, des groupes de six nanofils (format un *hexon*) sont regroupés afin de créer un îlot supraconducteur comportant six modes de Majorana et encodant un qubit. Il est alors envisagé d'utiliser des points quantiques à proximité de chacun des modes de Majorana afin de mesurer la parité de groupes de majoranas. De plus, au lieu de déplacer adiabatiquement les modes de Majorana, les auteurs de cette référence propose des protocoles permettent l'échange de modes de Majorana basés sur des mesures projectives [47, 48].

Nous reviendrons sur quelques-uns de ces points dans les prochains chapitres. En particulier, au chapitre 4 nous présenterons des perspectives pour une architecture basée sur l'ingénierie de réseaux de microaimants à la surface de 2DEGs à faible couplage spin-orbite intrinsèque comme le silicium. De plus, au chapitre 6 nous considérerons la création de circuits supraconducteurs topologiques et le rôle de l'énergie de charge dans ces systèmes.

Chapitre 3

Contrôle optimal pour systèmes quantiques ouverts de grande taille

Prenons un pas de recul face aux modes de Majorana et considérons dans ce chapitre un problème plus général relié à l'ingénierie d'un ordinateur quantique. Indépendamment de l'architecture physique envisagée pour la réalisation d'un calcul quantique, celui-ci devra éventuellement se terminer par la mesure de qubits afin d'en obtenir le résultat. Cette mesure devra se produire dans un temps fini et inclura donc un processus dynamique nécessitant la variation de certains paramètres contrôlables expérimentalement. Le problème de l'optimisation du profil temporel de ces paramètres peut être adressé par la théorie du contrôle optimal quantique à l'aide de méthodes d'ingénierie d'impulsions [94]. Ce domaine de recherche vise à optimiser le profil temporel de paramètres dans le but d'atteindre un objectif défini au moyen d'un indice de performance quantitatif, tel que la fidélité de la mesure d'un qubit par exemple.

Une mesure requiert la fuite d'information vers un observateur et ce processus est donc naturellement modélisé par un système quantique ouvert ou, autrement dit, en interaction avec son environnement et donc dissipatif. Bien qu'il existe des algorithmes de contrôle optimal adaptés aux systèmes quantiques ouverts [95], les ressources informatiques requises à leur utilisation augmentent très rapidement avec la taille de l'espace de Hilbert. En pratique, leur application est donc généralement limitée à des problèmes de taille modeste. Un résultat central de ce chapitre est le développement d'une nouvelle implémentation efficace de l'algorithme de contrôle optimal pour

systèmes ouverts *open Gradient Ascent Pulse Engineering (open GRAPE)* [96, 97]. Notre implémentation de cet algorithme, dont on pourrait traduire le nom par *ingénierie d'impulsions par montée de gradient adaptée aux systèmes ouverts*, repose sur la résolution numérique de l'équation maîtresse de Lindblad en avançant et en reculant dans le temps. Elle permet un gain de performance numérique important par rapport à l'implémentation la plus répandue de l'algorithme basée sur l'exponentielle du lindbladien dans l'espace des superopérateurs. Les performances de notre implémentation d'open GRAPE permettent l'étude de nouveaux problèmes préalablement inaccessibles en raison de la taille de l'espace de Hilbert.

Nous nous intéressons dans ce chapitre à l'optimisation de la dernière portion d'un protocole de mesure : la réinitialisation active du système suite à la mesure. En particulier, dans une architecture d'électrodynamique quantique en circuit (cQED) où un résonateur supraconducteur est couplé à un qubit [98], le résonateur comportera un grand nombre de photons suite à la mesure du qubit. Cet état photonique dépend de l'état du qubit et il est donc nécessaire d'effectuer une réinitialisation avant de pouvoir effectuer une autre mesure. L'approche standard, dite passive, est simplement d'attendre que le système retrouve son état fondamental par relaxation. Par contre, ce processus peut être lent et limite donc le taux de répétition de la mesure. Or, ce dernier doit être très grand en vue de l'implémentation de code de corrections d'erreurs basé sur une mesure active de qubits [99]. Une alternative à la réinitialisation passive, introduite dans la référence [100], est une approche active où une impulsion micro-onde est utilisée afin d'accélérer le retour vers l'état fondamental. En optimisant le profil temporel de cette impulsion, nos résultats démontrent qu'il est possible de réduire encore davantage le temps de réinitialisation par rapport à l'impulsion de réinitialisation proposée par la référence [100]. Bien que notre publication se concentre sur les qubits supraconducteurs, remarquons que l'architecture cQED est de plus en plus utilisée ou envisagée pour la mesure d'une variété de systèmes physiques, incluant les qubits de spins [101, 102] et les modes de Majorana [103, 104].

3.1 Publication 1

On reproduit dans cette section la publication :

- **S. Boutin**, C. K. Andersen, J. Venkatraman, A. J. Ferris, A. Blais. *Resonator reset in circuit QED by optimal control for large open quantum systems*, *Phys. Rev. A* **96**, 042315 (2017). [23]

Contexte et contribution

Je me suis d’abord intéressé au contrôle optimal lors d’un stage dans le groupe d’A. Blais. J’ai alors développé une version préliminaire d’une implémentation efficace de l’algorithme open GRAPE sous la supervision d’A. Ferris et A. Blais. Les résultats initiaux étant peu concluants pour le projet initialement envisagé, celui-ci a été mis sur la glace durant quelques années. Au début de mon doctorat, l’idée est venue d’adapter ce code à l’optimisation de la réinitialisation d’un résonateur supraconducteur. Nous avons également découvert à ce moment les arguments théoriques justifiant les avantages algorithmiques de notre approche. Bien qu’à priori distinct du reste de cette thèse, ce chapitre jette les bases du développement de la méthode nommée *RGF-GRAPE* développée au chapitre 4. En plus, des nombreuses analogies conceptuelles, certaines astuces mathématiques (voir l’annexe B en particulier) sont directement utilisées dans la publication de la section 4.1.

Plus précisément, pour ce travail, j’ai développé et implémenté l’algorithme sous les conseils d’A. Blais et A. Ferris. J’ai effectué l’analyse de complexité et les tests de performance numériques de notre implémentation d’open GRAPE avec des suggestions de C. K. Andersen et A. Blais. J’ai contribué au développement de l’application à la réinitialisation d’un résonateur supraconducteur et à l’analyse des données avec C. K. Andersen, J. Venkatraman et A. Blais. L’article a été écrit en collaboration avec C. K. Andersen et A. Blais. Tous les auteurs ont commenté le manuscrit final.

Finalement, notons que l’implémentation de l’algorithme open GRAPE développée pour ces travaux a également été utilisée dans le cadre d’une collaboration ayant mené à la publication [105]. Dans ces travaux, menés par la post-doctorante Shruti Puri, nous avons démontré qu’il est possible de générer des états de type *chat de Schrödinger* dans une cavité non linéaire à l’aide de l’ouverture adiabatique d’une pompe à deux photons. L’utilisation de l’optimisation a permis de démontrer qu’il existe des protocoles permettant de générer avec une grande fidélité ces états en un temps beaucoup plus court qu’envisagé précédemment.

Resonator reset in circuit QED by optimal control for large open quantum systems

Samuel Boutin,¹ Christian Kraglund Andersen,^{2,3,1,*} Jayameenakshi Venkatraman,⁴ Andrew J. Ferris,⁵ and Alexandre Blais^{1,6}

¹*Institut Quantique and Département de Physique,
Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec, Canada J1K 2R1*

²*Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, DK-8000 Aarhus C, Denmark*

³*Department of Physics, ETH Zurich, CH-8093 Zurich, Switzerland*

⁴*Department of Physics, Indian Institute of Technology Kanpur, Kanpur, 208016, India*

⁵*ICFO-Institut de Ciències Fotoniques, The Barcelona Institute of Science and Technology, 08860 Castelldefels (Barcelona), Spain*

⁶*Canadian Institute for Advanced Research, Toronto, Canada*

(Dated: September 22, 2017)

We study an implementation of the open GRAPE (Gradient Ascent Pulse Engineering) algorithm well suited for large open quantum systems. While typical implementations of optimal control algorithms for open quantum systems rely on explicit matrix exponential calculations, our implementation avoids these operations leading to a polynomial speed-up of the open GRAPE algorithm in cases of interest. This speed-up, as well as the reduced memory requirements of our implementation, are illustrated by comparison to a standard implementation of open GRAPE. As a practical example, we apply this open-system optimization method to active reset of a readout resonator in circuit QED. In this problem, the shape of a microwave pulse is optimized such as to empty the cavity from measurement photons as fast as possible. Using our open GRAPE implementation, we obtain pulse shapes leading to a reset time over four times faster than passive reset.

I. INTRODUCTION

Optimal control, which aims at devising ideal control pulses to optimize a given physical process, is finding wide applications in the fields of theoretical quantum information science [1–9], quantum optics [10] and quantum chemistry [11] amongst other quantum fields [12]. Quantum optimal control theory has also found applications in the laboratory, in particular with nuclear magnetic resonance [13], trapped ions [14] and superconducting qubits [15, 16]. In most instances, optimal control is applied to unitary processes where dissipation is a nuisance and is considered to be detrimental to the desired process. If properly engineered, dissipation can, however, be a useful resource for tasks ranging from quantum state preparation in circuit QED [17, 18] to universal quantum computation [19]. While not as widespread as its dissipation-less version, open quantum optimal control has also been studied [20–25], with the most widely used algorithms being the open system versions of the GRAPE (Gradient Ascent Pulse Engineering) [22, 26] and Krotov [27, 28] algorithms, while other optimization algorithms [29–31] may also prove useful in the context of open systems.

An important difficulty when dealing with open quantum systems is that the Schrödinger equation is replaced by a master equation and the wavefunction by a density matrix [32]. For a system of dimension d , described by the master equation $\dot{\rho} = \hat{\mathcal{L}}\rho$, a standard approach for optimal control is then to express the density matrix ρ as a vector ρ_L of dimension $d^2 \times 1$ and the superoperator

$\hat{\mathcal{L}}$ representing the master equation as a matrix L of size $d^2 \times d^2$ [22]. In this representation, time evolution can be obtained by direct matrix exponentiation which, given the large size of L even for moderate d , rapidly becomes numerically intensive. While alternative implementations with optimized time propagators, for example using expansion in Newton polynomials [33, 34] or by projection onto Krylov subspace [35, 36] can be used, they lack the simplicity of the direct matrix exponentials and are thus not as widespread. Optimal control in open quantum systems has therefore been mostly limited to systems with small Hilbert space size. Here, we present an alternative implementation of the open GRAPE algorithm that eliminates the need to generate the large matrix L . This implementation is well suited for large open quantum systems and avoids explicit matrix exponentiation by rather relying on simple and standard Runge-Kutta time-integration of the master equation.

As an example, we apply this open GRAPE implementation to a problem of current experimental interest: resonator reset in circuit QED. In this architecture, qubit readout is realized by injecting microwave photons in a resonator, which is dipole coupled to qubits, and by measuring the photons reflected or transmitted by the resonator. With excess photons in readout resonators having been shown to be a source of unwanted coherent [37–39] and incoherent [40–42] qubit transitions, it is essential to reset the system by removing the measurement photons from the resonator after readout, and before further coherent manipulations or subsequent readout of the qubit can be performed. The usual approach is to wait for several photon decay times $T_\kappa = 1/\kappa$, with κ the resonator decay rate, for the photons to leak out of the resonator [43, 44]. In practice, this is, however, often too slow as a fast repetition time of qubit measurements is

* E-mail: chanders@phys.ethz.ch

critical, e.g., for quantum error correction [45]. With this standard passive approach, this need for fast decay is in contradiction with the necessity to use high-Q resonators to avoid qubit Purcell decay [46]. Alternatively, active reset can be performed, where a microwave tone is used to empty the resonator in a shorter time. Such a reset tone can be either conditional on the readout result [44] or unconditional [43, 44] using no knowledge of the resonator and qubit states. Devising an active unconditional reset protocol is an ideal test problem for our open GRAPE implementation since it is an intrinsically dissipative process requiring a large Hilbert space size due to the many resonator photons used for qubit measurement. Moreover, active resonator reset in circuit QED was recently explored experimentally [43, 44], giving us the opportunity to consider parameters of current practical interest. In addition to this example, the numerical approach presented here has also recently been successfully applied by some of us to optimize a fast initialization of cat states in a Kerr resonator based on two-photon driving [47].

The paper is organized as follows: We first present a brief overview of open GRAPE in Sec. II. We then discuss our implementation of this algorithm in Sec. III. Section IV is devoted to the application of the algorithm to active resonator reset. Finally, Sec. V summarizes our work.

II. OPTIMAL CONTROL FOR OPEN QUANTUM SYSTEMS

Before discussing our implementation of the algorithm, we first present an overview of the problem solved by the GRAPE algorithm [26] and of open GRAPE [22]. The reader familiar with these concepts can immediately skip to Sec. III.

A. The control problem

Consider a system with the free Hamiltonian H_0 and subject to R independent control fields each described by the Hamiltonians H_k such that the full system Hamiltonian reads [9, 26]

$$H(t) = H_0 + \sum_{k=1}^R u_k(t) H_k. \quad (1)$$

The classical parameters $u_k(t)$ in the above expression can be continuously adjusted to change the strength of the control fields on the system. In the context of circuit QED, these $u_k(t)$ can, for example, correspond to the time-dependent amplitude of different microwave drives on the resonator or the qubit.

The objective of the control problem is to find the optimal set $\{u_k(t)\}$ to accomplish a specific task, most typically implementing quantum gates [5, 6]. This can be expressed as an optimization problem where the goal is

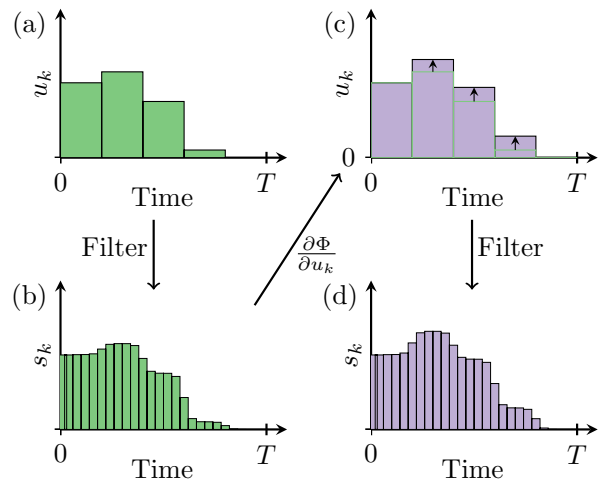


FIG. 1. Schematic of a gradient-based optimization step with GRAPE-type controls update, and Gaussian filtering to account for experimental constraints. Starting from initial controls shown in (a), we calculate the filtered experimental pulse shape in (b). From this filtered field, the gradient, $\partial\Phi/\partial u_k$, is calculated using the chain rule (see Ref. [9] or App. A for details) and the controls are updated in (c), which leads to a new filtered field in (d). The boundary conditions of the field are taken into account by fixing the first and last control.

to maximize the performance index $\Phi[\{u_k\}]$, a measure for the success of the desired task and a functional of the control parameters. As the optimization problem must be of finite dimension, the control amplitudes, $u_k(t)$, are taken to be piecewise constant. For a process of duration T , each $u_k(t)$ is divided into N time steps of duration $\Delta t = T/N$ as illustrated in Fig. 1(a). In this way, for the j^{th} step, i.e. for $t \in [(j-1)\Delta t; j\Delta t)$, the function $u_k(t)$ is a constant of amplitude $u_k(j)$ with $j \in \{1, 2, \dots, N\}$. The elements of the set $\{u_k(j)\}$ are referred to as the controls.

In practice, these sharp controls are smoothed out by the finite bandwidth of the control lines. Following Ref. [9] and as illustrated in Fig. 1(b), this important experimental consideration can be taken into account by filtering the controls in the evaluation of the performance index and its gradient. This filtering procedure maps the piecewise constant functions described by the set $\{u_k(j)\}$ to smoother piecewise constant functions defined by the larger set $\{s_k(l)\}$ with $l = 1, 2, \dots, M$ and $M = T/\delta t \gg N$. For completeness, details of this filtering procedure can be found in Appendix A.

An approach to optimize the performance index is to update the controls by using a gradient-based optimization algorithm such that [26]

$$u_k(j) \rightarrow u_k(j) + \sum_{lm} B_{kj,lm} \frac{\partial\Phi}{\partial u_l(m)}, \quad (2)$$

where $B_{kj,lm}$ are the elements of a step matrix which

depends on the details of the chosen optimization algorithm. Simple gradient descent optimization corresponds to the choice $B_{kj,lm} \propto \delta_{kl}\delta_{jm}$, while for more sophisticated methods, such as the Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) algorithm, $B_{kj,lm}$ is related to the inverse of the Hessian matrix [48]. Since the BFGS algorithm leads to improved convergence [49], it will be used in the numerical computations presented below. A non-trivial step in the update rule Eq. (2) is the evaluation of the gradient of the performance index. While this can be done by numerical derivatives, this approach become intractable for problems with a large set of controls. Using an analytical result described below for open systems, the GRAPE algorithm allows for an efficient calculation of this gradient.

B. Open GRAPE

We consider an open quantum system whose dynamics is described by the Markovian master equation

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] + \hat{\Gamma}\rho \equiv \hat{\mathcal{L}}\rho. \quad (3)$$

In this expression, $\hat{\Gamma}$ is the superoperator for the different possible dissipation channels acting on the system and which can be expressed in standard Lindblad form as [32]

$$\hat{\Gamma}\rho = \sum_j \gamma_j \hat{\mathcal{D}}[a_j]\rho, \quad (4)$$

with $\hat{\mathcal{D}}[a_j]\rho = a_j\rho a_j^\dagger - \{a_j^\dagger a_j, \rho\}/2$ and γ_j the damping rate for channel j associated to the system operator a_j .

The formal solution to this equation can be expressed as the time-ordered exponential

$$\rho(t) = \mathcal{T} \exp \left\{ \int_0^t dt' \hat{\mathcal{L}}(t') \right\} \rho(0). \quad (5)$$

Taking advantage of the piecewise constant nature of the controls, this can be written more simply as

$$\rho(T) = \hat{L}_N \dots \hat{L}_j \dots \hat{L}_1 \rho(0), \quad (6)$$

with the evolution superoperator defined from time $(j-1)\Delta t$ to time $j\Delta t$ as,

$$\hat{L}_j \cdot = \exp \left\{ -i\Delta t ([H_j, (\cdot)] + i\hat{\Gamma} \cdot) \right\} \quad (7)$$

where $H_j = H_0 + \sum_k u_k(j)H_k$ is the time-independent Hamiltonian associated to the j^{th} time step.

For many control problems, the performance index can be expressed as a function of operator averages or, alternatively, as the overlap between a final state $\rho(T)$ and a target state. In both cases, the resulting performance index takes the form

$$\Phi = \text{Tr} \left(\sigma \hat{L}_N \dots \hat{L}_1 \rho(0) \right), \quad (8)$$

where σ is either the target state or an operator whose expectation value is evaluated. In the former case, if the target state is pure this figure of merit is bounded between 0 and 1, with $\Phi = 1$ for $\rho(T) = \sigma$.

Taking advantage of the piecewise constant character of the evolution, the derivative of the performance index takes the form [26]

$$\frac{\partial \Phi}{\partial u_k(j)} = \text{Tr} \left\{ \lambda_j(\sigma) \frac{\partial \hat{L}_j}{\partial u_k(j)} \rho_{j-1} \right\}, \quad (9)$$

where

$$\rho_j = \hat{L}_j \dots \hat{L}_1 \rho(0) \quad (10)$$

is a forward-in-time evolved density matrix, while

$$\lambda_j(\sigma) = \hat{L}_{j+1}^\dagger \dots \hat{L}_N^\dagger \sigma \quad (11)$$

is the backward-in-time evolution from the final target state. To first order in Δt the derivative of the j^{th} time-evolution operator is [22]

$$\frac{\partial \hat{L}_j}{\partial u_k(j)} \approx -i\Delta t [H_k, (\hat{L}_j \cdot)]. \quad (12)$$

Approximation of the gradient to higher-order in Δt can improve convergence of the optimization [49]. Moreover, for simplicity, we have considered the controls to be parameters of the Hamiltonian only. This approach can, however, be adapted to allow for control over the dissipation rates γ_j [7].

Finally, the derivative of the performance index is

$$\frac{\partial \Phi}{\partial u_k(j)} = -i\Delta t \text{Tr} \left\{ \lambda_j(\sigma) [H_k, \rho_j] \right\}. \quad (13)$$

Thus, evaluating the gradient of the performance index requires the calculation of the forward-in-time evolved states ρ_j and of the backward-in-time evolved targets $\lambda_j(\sigma)$. The analytical result of Eq. (13) is the core of the GRAPE algorithm [26]. The standard approach to obtain these states, ρ_j and $\lambda_j(\sigma)$, is to express the density matrices and the master equation in Liouville space [22]. For a system with Hilbert space dimension d , the superoperators then take the form of $d^2 \times d^2$ matrices and the N evolution operators \hat{L}_j are obtained by computing matrix exponentials of these matrices. While simple to implement, this procedure is numerically intensive for moderate to large system sizes.

III. OPEN GRAPE WITH RUNGE-KUTTA INTEGRATION

Rather than relying on direct matrix exponentiation, we present here an approach based on numerical integration of the master equation using a standard Runge-Kutta routine. This approach is not a unique method to avoid

the matrix exponentiation for optimal control [33, 35, 36], but below we argue that, even for moderate Hilbert space dimension, d , this simple Runge-Kutta routine leads to useful computational speedups compared to performing matrix exponentials as used in standard implementations of open GRAPE [22].

With this method, the forward-in-time propagation is performed by numerical integration of the differential equation

$$d\rho = \hat{\mathcal{L}}\rho dt \quad (14)$$

starting from the initial state $\rho(0)$ using standard Runge-Kutta routines. In practice, the integration is done in a stepwise manner to obtain ρ_j for all values of j . In other words, Eq. (14) is integrated for a time Δt from the initial state ρ_0 to obtain ρ_1 , which is saved for later use. Then ρ_1 is used as initial state and integrated for a time Δt to obtain ρ_2 , and so on. Similarly, the backward-in-time propagation is performed by numerical integration of the master equation

$$-d\lambda = \hat{\mathcal{L}}^\dagger \lambda(-dt), \quad (15)$$

which is also solved stepwise but backward-in-time, such that $\lambda(t - \delta t) = \lambda(t) + \hat{\mathcal{L}}^\dagger \lambda(t)(-\delta t)$ with δt as a small numerical step, from the initial (target) state $\lambda_N = \lambda(T) = \sigma$. Backward-in-time integration for a time Δt leads to λ_{N-1} which is then used as the next initial state and, continuing this way, all λ_j are obtained. With ρ_j and λ_j calculated, the derivative given in Eq. (13) is readily evaluated using the saved ρ_j and λ_j .

A. Complexity analysis

We now turn to an evaluation of the scaling with system size d of the standard approach versus the present Runge-Kutta integration method. For simplicity, we neglect the efficiency gain that can be obtained in both cases from taking advantage of the sparse character of matrices. We also take the complexity of the multiplication and exponentiation of $n \times n$ matrices to be $\mathcal{O}(n^3)$. Better scaling can be obtained from state-of-the-art algorithms, resulting in improvements for both the standard approach and the present Runge-Kutta integration method.

In the standard approach where the density operator is represented as a vector, the matrix exponentiation involved in computing the superoperators L_j of dimensions $d^2 \times d^2$ has a complexity $\mathcal{O}(d^6)$. For the N piecewise constant steps of the controls, the total complexity is therefore

$$\mathcal{C}_{\text{exp}} = \mathcal{O}(N \times d^6). \quad (16)$$

In contrast, the Runge-Kutta integration approach described here requires the products of operators represented by $d \times d$ matrices. One caveat of this method is that the

calculation is specific to the given input state $\rho(0)$. The complexity of this approach can then be estimated as

$$\mathcal{C}_{\text{RK}} = \mathcal{O}(n_s n_{\text{RK}} \times d^3), \quad (17)$$

where n_s is the number of input states to be considered and n_{RK} the number of Runge-Kutta steps during the full time evolution. Improvement over the standard Liouville space approach is thus expected for system size $d \gg (n_s n_{\text{RK}}/N)^{1/3}$. Importantly, the numbers n_s , n_{RK} and N are often independent of system size, suggesting a computational speedup for large Hilbert spaces. When considering bandwidth filtered controls, where the N controls are replaced by $M \gg N$ sub-pixels in order to approximate a smooth function [9] (see Appendix A), computational speedup is expected for even smaller Hilbert space sizes. Note that Eq. (17) assumes that the Runge-Kutta integration is performed using matrix multiplications with complexity $\mathcal{O}(d^3)$. As mentioned previously, there is an alternate representation of the master equation Eq. (3) where ρ is a vector of dimension $d^2 \times 1$ and the Lindbladian is a $d^2 \times d^2$ matrix. In that case, the Runge-Kutta integration requires matrix-vector multiplication of complexity $\mathcal{O}(d^4)$ reducing the speedup.

A second advantage of the present approach, not captured by this simple analysis, is the reduced memory usage since superoperators in Liouville space of matrix size $d^2 \times d^2$ are never created nor stored in memory. This reduced memory requirements by the Runge-Kutta approach is independent of the representation of the density matrix used for the integration.

The optimization of an arbitrary process requires averaging the performance index over $n_s = d^2$ input states spanning the full Liouville space [24]. However, this is not the case for many processes where we can expect $n_s \ll d^2$. In particular, average over only three appropriately chosen input states is required to optimize a unitary process in the presence of dissipation [24]. Another related issue is that for a general process there may be up to d^2 dissipators in Eq. (4), which would result in the scaling of $\mathcal{O}(n_s n_{\text{RK}} \times d^5)$. However for many problems of practical interest, such as the one presented in the next section, only a few dissipators are needed.

Estimating n_{RK} is a more difficult task since, with adaptive integration step size, the number of integration steps is parameter and problem dependent [50]. As an example, for the reset process described in Sec. IV A, we observe that $n_{\text{RK}}/M \sim 10 - 100$ depending on the chosen value of M . Given that $n_s = 2$ for the reset problem, we therefore expect significant speedup even for moderate Hilbert space size of $d \sim 10$.

Finally, we note that the Runge-Kutta approach presented here is only efficient if we perform a GRAPE-type concurrent update of the controls. In the case of a Krotov-type update where only one control is updated at each step of the optimization algorithm [21], the complexity of the present method and of the approach where the density matrix is represented as a vector are expected to be similar. Indeed, the latter approach allows to reuse most

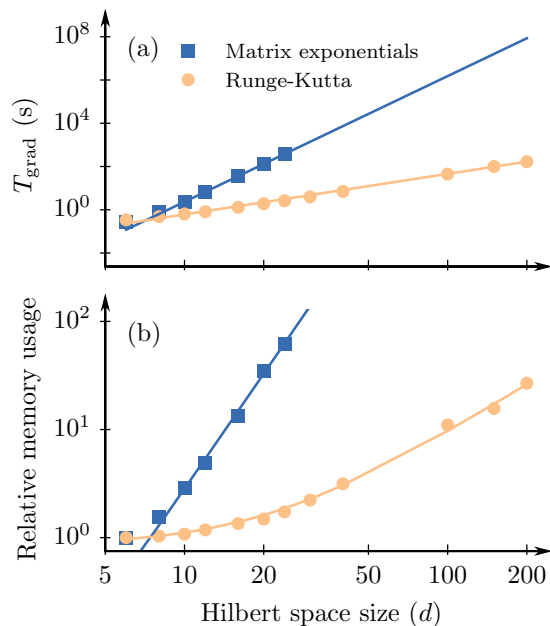


FIG. 2. (a) Average runtime per evaluation of the performance index and its gradient (T_{grad}). Points are numerical data obtained from the averaging over 100 optimization iterations. In the matrix exponentiation case, a first-order GRAPE implementation based on the control module of QuTiP is used [51]. (b) Average memory usage (RAM) during a GRAPE iteration normalized by the $d = 6$ value. Points are numerical data obtained using the “memory_profiler” package (version 0.47). For both panels, solid lines are power law fits. A constant background due to program overhead is included in the fits of the second panel (see text). The matrix-exponential calculations were only done for a Hilbert space size $d \leq 24$ due to limitations of RAM. From an initial state $|\alpha\rangle \otimes |e\rangle$, with the cavity in a coherent state with $\alpha = \sqrt{d/8}$ and the qubit in the excited state, we use the two quadratures of the cavity drive to perform an active reset (target state $|0\rangle \otimes |e\rangle$) in a time $T = \pi/g$ separated in $N = 200$ steps. The qubit and cavity are coupled through a standard Jaynes-Cummings interaction with coupling strength $g = 100\kappa$. Additional parameters are $\omega_d = \omega_r$ and $\Delta = 10\kappa$ (see Sec. IV A for definitions).

of the calculated exponentials between updates. Consequently, here we consider a GRAPE-type update where all controls are updated concurrently.

B. Performance of implementation

As a verification of the above algorithmic complexity arguments, we consider the performance of our Runge-Kutta-based open GRAPE implementation for a simplified version of the resonator reset control problem considered in the following section. More precisely, we consider a cavity-qubit system coupled through a standard Jaynes-Cummings interaction. Starting from an initial state where the cavity is in a coherent state and the qubit in

the excited state, we optimize a drive in order to empty the cavity in a time T , without perturbing the qubit state, such that the target final state is $|0\rangle \otimes |e\rangle$. This problem corresponds to a conditional reset where the qubit state is fixed leading to a single initial and final state, i.e. $n_s = 1$ in Eq. (17). In the following section, the case of unconditional reset, where the reset protocol is independent of the qubit state, will be considered.

Fig. 2(a) presents T_{grad} , the average runtime for the evaluation of Φ and its gradient as a function of Hilbert space size d for both our Runge-Kutta-based implementation of open GRAPE (orange circles) and a standard matrix exponentiation-based implementation (blue squares) [51]. In both cases, the gradient is calculated using a first order approximation as in Eq. (12). As the approaches considered are implemented using different programming languages leading to different runtime overheads, the relevant quantity in this figure is the scaling of runtime with respect to the Hilbert space size d rather than the absolute times. The solid lines are power law fits to the numerical data, $T_{\text{grad}} \propto d^\xi$ with exponent ξ . Exponents obtained are in close agreement to the previous analysis, with $\xi = 5.8$ for the matrix exponentiation case, and $\xi = 1.9$ for the Runge-Kutta-based approach. Note that this significant polynomial speedup is better than expected from the analysis in Sec. III A due to the use of sparse matrix properties in our implementation.

Fig. 2(b) presents the average memory (RAM) used during a GRAPE iteration relative to the memory usage of the $d = 6$ case for each implementation. Performing again power law fits, but allowing for a constant background to take into account possible memory overheads, one finds the exponents $\xi = 3.5$ for matrix exponentiation and $\xi = 1.5$ for our Runge-Kutta implementation. Hence, as expected from the above complexity analysis, the memory requirement of the matrix exponentiation is much greater than the Runge-Kutta approach, as it requires the storage of propagators as $d^2 \times d^2$ matrices, limiting considerably the Hilbert space sizes on a standard computer.

IV. APPLICATION TO RESONATOR RESET

As an application of this open GRAPE implementation, we consider the problem of active reset following qubit readout in circuit QED [52, 53]. Before presenting numerical results, we first briefly review qubit readout in this system and present the active reset problem.

A. Readout and reset in circuit QED

Circuit QED is characterized by the strong electric-dipole coupling g between a superconducting qubit of frequency ω_a and a microwave resonator of frequency ω_r . In the dispersive regime, where the qubit-resonator detuning $|\Delta| = |\omega_a - \omega_r| \gg g$, the system is described by

the effective Hamiltonian ($\hbar = 1$) [53]

$$H_0 = (\omega_r + \chi\sigma_z)a^\dagger a + \frac{\omega_a}{2}\sigma_z + \varepsilon(t) [a^\dagger e^{-i\omega_d t} + \text{h.c.}], \quad (18)$$

where $\chi = g^2/\Delta$ is the dispersive shift and h.c. stands for hermitian conjugate. The last term represents a drive on the cavity of amplitude $\varepsilon(t)$ and frequency ω_d . Because of the dispersive coupling, the cavity frequency is shifted by $\pm\chi$ depending on the state of the qubit. Under drive, the time-evolution leads to a qubit-state dependent population and/or phase of the cavity state. This dependency can be resolved by homodyne detection of the photons leaking out of the cavity at a rate κ , leading to a qubit measurement.

In order to include cavity damping in our calculations, we use the master equation

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] + \kappa\hat{\mathcal{D}}[a]\rho, \quad (19)$$

where κ is the cavity decay rate associated to the dissipator $\hat{\mathcal{D}}[a]\rho = a\rho a^\dagger - \{a^\dagger a, \rho\}/2$. Under a constant drive of amplitude ε , the steady-state solution in the dispersive regime (i.e. $H = H_0$) of this master equation leads to the qubit-state dependent intracavity average photon number

$$\bar{n}_{g/e} = \frac{\varepsilon^2}{(\omega_r \pm \chi - \omega_d)^2 + (\kappa/2)^2}. \quad (20)$$

Here, we are concerned with the return to vacuum state once the measurement is completed. The common approach of passive reset is to wait for a time $T \gg 1/\kappa$ for the photons to naturally escape from the resonator. We use our implementation of open GRAPE to find an optimal $\varepsilon(t)$ to speed-up this process to times smaller than $1/\kappa$ through an active process.

When driving at a frequency $\omega_r \approx \omega_d$, the average number of photons is independent of the qubit state and an active reset is easily obtained by changing the phase of the drive. However, active reset is not as simple when considering the nonlinear corrections to the dispersive Hamiltonian. The first of these corrections is a qubit-induced nonlinearity of the cavity described by the Hamiltonian¹ [54–56]

$$H_K = K(a^\dagger a)^2, \quad (21)$$

with K the Kerr-nonlinearity, which is negative in superconducting quantum circuits. This correction makes

exact analytical solutions of the active reset problem difficult as it leads to nonlinear equations of motions for the resonator state. This nonlinearity can moreover lead to vastly different qubit-state dependent resonator states, something that has been exploited for qubit readout, e.g., in the Josephson bifurcation amplifier [57]. Here, because of this nonlinearity, a reset pulse more complicated than in the purely dispersive case is found to be necessary [43].

In the next section, we present numerical results for active cavity reset based on the experimental parameters reported in Ref. [43]. For these calculations, we use the master equation of Eq. (19) with Hamiltonian $H = H_0 + H_K$ and the experimentally relevant parameters $\chi = 2\pi \times 1.3$ MHz, $K = -2\pi \times 2.1$ kHz and $\kappa = 2\pi \times 1.1$ MHz, corresponding to a photon decay time of $T_\kappa = 1/\kappa = 145$ ns. Moreover, to help in making comparisons, we will express the drive strength in similar terms as in Ref. [43] by introducing the normalized drive power $P_{\text{norm}} = P/P_{1\text{ph}}$, where P is the applied drive power and $P_{1\text{ph}}$ is the drive power leading to an average steady-state resonator population of one photon. With the above parameters, we numerically identify the corresponding driving amplitude $\sqrt{P_{1\text{ph}}} = 2\pi \times 1.595$ MHz such that $\varepsilon = \sqrt{P_{\text{norm}}P_{1\text{ph}}}$.

B. Active reset using open GRAPE

We now turn to a numerical study of active resonator reset using the open GRAPE implementation introduced in Sec. III. For simplicity, we assume the measurement preceding the resonator reset to be quantum non-demolition and, thus, consider the qubit's state to be fixed throughout the process. As a result, we can replace the operator σ_z by the number ± 1 in Eq. (18).

As we seek an active reset protocol independent of measurement outcomes, the performance index used for the open GRAPE optimization is averaged over the two qubit states. Following Eq. (8), the simplest performance index is

$$\Phi = \sum_{i=g,e} \text{Tr} \{ \rho_T \rho_i(T) \}, \quad (22)$$

with $\rho_{i=g,e}(t)$ the qubit-dependent resonator state and $\rho_T = |0\rangle\langle 0|$ the target (vacuum) state. Here, $\rho_{i=g,e}(t=0)$ are the qubit-dependent resonator states following a measurement pulse $\varepsilon(t)$ of duration T_m similar to that used in Ref. [43]. In our simulations, the resonator is initialized to the vacuum state at time $t = -T_m$, the state is then time evolved using the master equation, Eq. (19) with $H = H_0 + H_K$, leading to the qubit-dependent states, $\rho_{i=g,e}(t=0)$. Starting from these states and using the same master equation, the open GRAPE algorithm is then used to optimize the unconditional reset pulse shape $\varepsilon(t)$ for $t \in (0, T)$, with $\varepsilon(t=0)$ fixed by the measurement pulse and $\varepsilon(t=T) = 0$.

Using the parameters of the previous section, Fig. 3(a) compares the average intracavity photon number as a

¹ In the two-level approximation of circuit QED, the sign of this nonlinear corrections is qubit-state dependent, with $H_K \propto \sigma_z$. However, in the more complete multilevel treatment, the Kerr nonlinearities K_g (K_e) of the resonator for a qubit in the ground (excited) state can have the same sign [54]. In particular, for the parameters considered here the Kerr nonlinearities have the same sign and are of similar amplitudes for both qubit states [43]. For simplicity, we consider $K_e \approx K_g$.

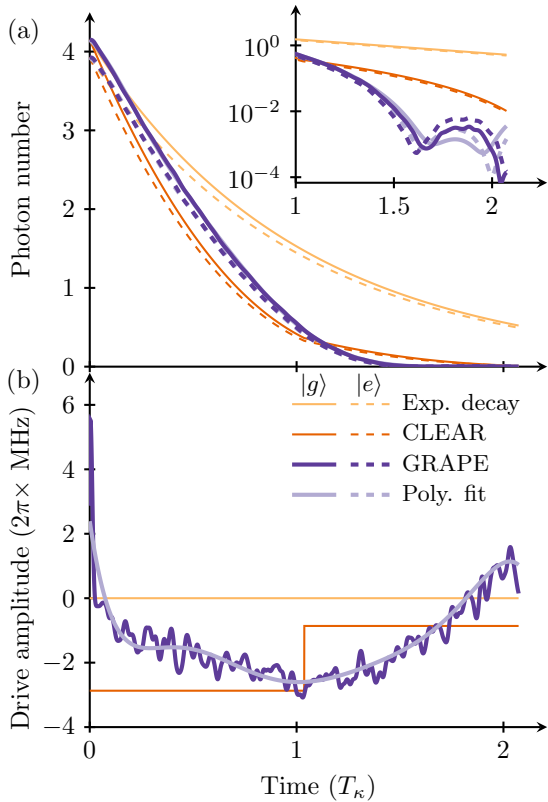


FIG. 3. (Color online) (a) Average photon number during resonator reset procedures following a readout process with drive power $P_{\text{norm}} = 4$. The solid (dashed) lines indicate results for the qubit in the ground (excited) state. See panel (b) for legend. The inset shows the average photon number for $T_\kappa > 1$ on a logarithmic scale to allow for better comparison of the reset schemes. (b) Pulse shapes for the resonator reset procedures used in panel (a). System parameters and the Hamiltonian are described in Sec. IV A. Additional parameters for the GRAPE algorithm includes a control duration $\Delta t = 1$ ns and Gaussian filtering with bandwidth $\omega_B/2\pi = 100$ MHz and subpixel duration $\delta t = 0.1$ ns (see Appendix A for parameter definitions).

function of time under various resonator reset schemes. In particular, the passive reset (thin light orange curves) is compared to GRAPE optimized active reset (thick dark purple curves) for duration $T = 300$ ns $\approx 2T_\kappa$. While there is still significant resonator population after a wait time $T \gtrsim 2T_\kappa$ in the passive case, the GRAPE optimized pulse empties the cavity independently of the qubit state. More precisely, the log-scale inset, shows that the optimized pulse shape brings the photon number below 10^{-4} while in the same time passive reset leads to a residual average photon population close to 1. The numerically found pulse shape corresponding to these results is the thick dark purple line in Fig. 3(b). It shows a fast oscillating behavior on top of a slowly evolving envelope. Importantly, the quality of the reset is only marginally affected by these rapid oscillations. Indeed, as shown by

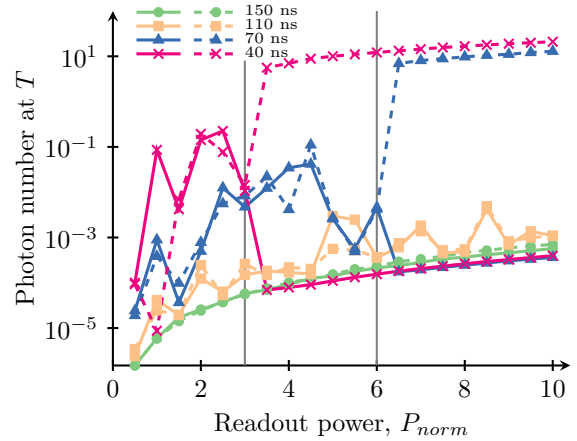


FIG. 4. Average photon number at the end of the active reset pulse as a function of the readout power P_{norm} . The results are shown for pulses of duration $T = 150$ ns, 110 ns, 70 ns and 40 ns, corresponding to $T \approx 1.04 T_\kappa, 0.76 T_\kappa, 0.48 T_\kappa, 0.28 T_\kappa$. The solid (dashed) line is the average final photon number for the qubit in the ground (excited) state. The vertical gray lines indicate the failure points for the 70 ns and the 40 ns optimizations.

the thick light purple lines in both panels, a polynomial fit to the optimized pulse shape essentially leads to changes in the average photon number that are only visible on the logscale inset of Fig. 3(a). This indicates that a complex pulse shape is not essential to obtain good performance, and that the solution may be amenable to regularization, whereby penalties are added to the objective function (for instance to penalize rapid changes in time) in order to make the result simpler and/or more robust. As pointed out in Ref. [58], the effect of noise in the control pulse, similar to fast oscillations observed here, is negligible if the noise level is below the error in reaching the target state.

As a comparison, the thin dark orange lines in Fig. 3 correspond to the average photon number and pulse shape used in an optimized two-steps active reset similar to the so-called CLEAR pulse introduced in Ref. [43]. Compared to CLEAR, the GRAPE pulse shape leads to a smaller residual photon population of the cavity in $T = 300$ ns $\sim 2T_\kappa$. Importantly, because photon decay under GRAPE optimized pulse shapes is far from exponential, in the example of Fig. 3 the cavity is already close to having reached its final state at a time ~ 220 ns. This suggests that faster resets are possible.

To further speed-up the process, we follow the insight from DRAG and optimize over two quadratures of the drive [5]. In a frame rotating at the drive frequency, the last term of the dispersive Hamiltonian of Eq. (18) is then replaced by

$$H_d = \varepsilon_X(t)(a^\dagger + a) + i\varepsilon_Y(t)(a^\dagger - a). \quad (23)$$

Results from optimization of these two quadrature are

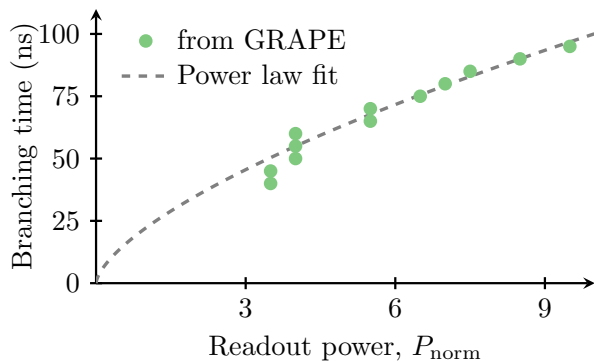


FIG. 5. The green dots are the numerical speed limit extracted from the open GRAPE optimizations. We define here the speed limit as the time where the optimization fails, corresponding to the branching points indicated by gray lines in Fig 4 for the 40 ns and 70 ns curves. The dashed gray line is a power law fit, $\propto (P_{\text{norm}})^\xi$, to the data with $\xi = 0.65$.

presented in Fig. 4, which shows the average photon number at the final pulse time T for increasing measurement power P_{norm} . As an initial guess, the X quadrature is set to the CLEAR pulse shape and the Y quadrature is randomly set. These results are shown for four different values of T , ranging from 150 ns $\sim 1.04T_\kappa$ (green circles) to times as short as 40 ns $\sim 0.3T_\kappa$ (red \times). Following the convention of Fig. 3(a), the full lines correspond to the qubit ground state and the dashed lines the qubit excited state. Unsurprisingly, the general trend is an increase of the residual photon number with P_{norm} . However, for 150 ns $\sim 1.04 T_\kappa$, the optimization results in residual population as small as 10^{-3} at high power $P_{\text{norm}} = 10$.

The difficulty of the open GRAPE algorithm to converge with decreasing T is made apparent with the large fluctuations of the residual photon number with P_{norm} . Despite this, and quite remarkably, final populations of less than 10^{-3} photons are obtained for reset times under T_κ and all P_{norm} values considered. The complexity in converging becomes more apparent at very short times where we observe large fluctuations and large separations between the results obtained for the two qubit states. These branchings, corresponding to a change in the optimization landscape as a function of T and P_{norm} [59], are illustrated by vertical gray lines for the two shortest values of T . Beyond the branching time, the optimization only finds a good solution for the qubit in the ground state. This is a result of the sign of the Kerr-nonlinearity K . Indeed, the effective detuning from the drive at high drive power is smaller when the qubit is in the ground state, thus, changing the sign of K leads to finding low photon number solutions when the qubit is rather in the excited state.

Fig. 5 presents this branching time as a function of P_{norm} . As illustrated by the dashed line, this failure time follows a simple power law behavior. This is reminiscent of a quantum speed limit, which here corresponds to the minimal time T in which the optimization can be

successful [60, 61]. For pure state evolution, the quantum speed limit can be expressed analytically in terms of the mean value and the variance of the energy [62, 63]. Expressions have also been obtained for open processes [64, 65]. The observed simple behavior with P_{norm} suggests that analytical expressions could also be obtained for the reset problem. We note, however, that variations in the initial guess for the controls, cost function or optimization algorithm could lead to faster reset times [59], and that the results of Fig. 5 therefore do not represent an absolute speed limit.

To gain more insights on the optimization, Fig. 6 presents the average photon number as a function of time and the corresponding pulse shapes obtained from GRAPE (inset). These results are shown for $T = 70$ ns (light orange lines) and $T = 110$ ns (dark blue lines) with a readout power of $P_{\text{norm}} = 6$. Both pulse shapes are similar and are reminiscent of a smoothed CLEAR pulse [43]. The Y quadrature also appears to have minimal impact and is always close to zero. For both of the final times T , the average photon number first increases from its initial value of ~ 6 before decreasing to the value shown in Fig. 4. This increase is particularly notable for the short pulse time $T = 70$ ns and points to the difficulty in converging as the reset time T is decreased. In practice, this large photon population can lead to a breakdown of the dispersive approximation used here and to a departure from the quantum non-demolition character of the dispersive readout [66]. With the parameters used here, this breakdown is expected to occur for $T = 70$ ns where the average photon number exceeds the critical photon number $n_{\text{crit}} = (\Delta/2g)^2 \sim 29$ for a short period of time.

To prevent this large photon number increase, a penalty Φ_p related to the intracavity photon number can be added

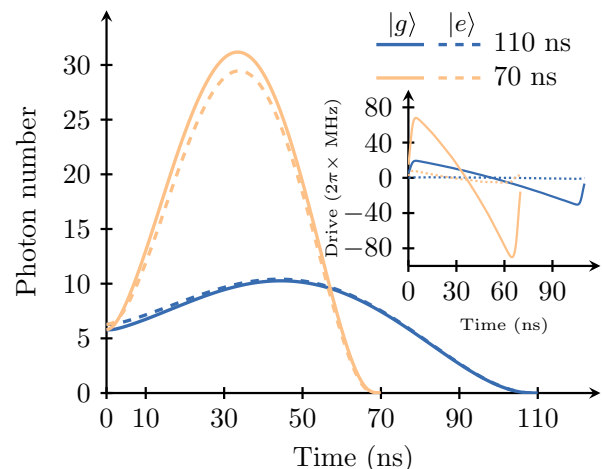


FIG. 6. Photon number as a function of time during the active reset pulse for a pulse duration of 110 ns and 70 ns. The solid (dashed) line is for the qubit in the ground (excited) state. The inset shows the corresponding Gaussian filtered drives. The solid lines of the inset is the X -drive, while the dotted is the Y -drive.

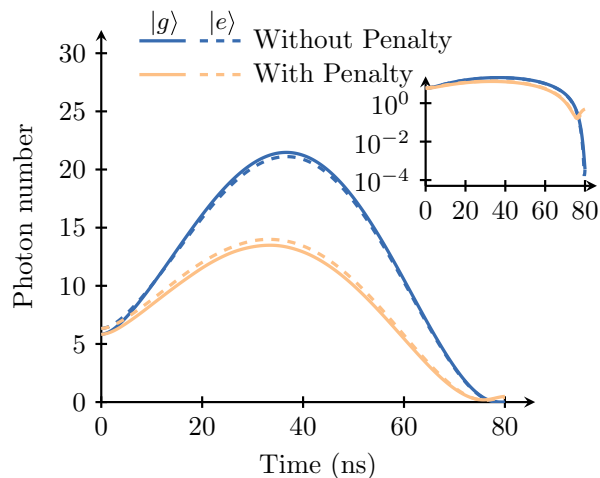


FIG. 7. Photon number as a function of time for optimized drives with (light orange curves) and without (dark blue curves) the photon number penalty, Φ_p , included. The solid (dashed) curves are for the qubit in the ground (excited) state. The inset displays the same data with a logarithm photon number axis. The parameters are the same as Fig. 3. We use the penalty weight $\beta = 0.2/T$.

to the performance index such that

$$\Phi = \Phi_0 - \beta\Phi_p, \quad (24)$$

with Φ_0 defined by Eq. (22) and β , a constant weighting the penalty, which is determined by trial and error. To penalize large photon populations we take

$$\Phi_p = \sum_{i=g,e} \int_0^T \text{Tr} \{a^\dagger a \rho_i(t)\} dt. \quad (25)$$

Details about the numerical implementation of Φ_p and its derivative with respect to the controls can be found in Appendix B. Results for optimization with this modification of the performance index are presented in Fig. 7 for $T = 80$ ns and $P_{\text{norm}} = 6$. For these values, the optimization without penalty reaches a final photon population of 10^{-4} but reaches close to 25 photons in the transient dynamics. On the other hand, using Eq. (24) with the initial value of the pulse given by the results obtained without penalty, the transient photon number can be kept well below n_{crit} . This is however achieved at the cost of an increase of the final photon number to $\sim 10^{-1}$. These results for the photon penalty may be improved by considering more diverse initial pulse shapes probing a larger region of the optimization space. In addition, a more systematic study of the role and optimal value of the weight β could improve the results.

V. CONCLUSION AND OUTLOOK

We have shown an implementation of the GRAPE algorithm for open quantum systems that circumvents

the usual explicit calculation of matrix exponentials. This implementation is advantageous when optimizing quantum processes in large open quantum systems leading to reduced computation times and memory requirements compared to standard implementations of open GRAPE based on matrix exponentials.

As an example of this approach, we have demonstrated an optimized reset protocol for a readout resonator in circuit QED. As the reset time limits the repetition time of current experiments, rapid qubit reset after readout is of high practical importance. Moreover, rapid qubit recycling can be advantageous in the implementation of quantum algorithms [67]. Furthermore the results of our optimization may be directly applied to protocols that rely on repetitive qubit readout in circuit QED, e.g., in quantum feedback schemes [68–70] or in quantum error correction protocols [45, 71]. The numerical optimization presented in this work presents a reset scheme that significantly reduces reset time compared to passive reset. Moreover, this study pinpoints the issues occurring when extremely short reset times are sought and yields a branching point beyond which the optimization algorithm fails to find a qubit-state-independent solution. We find that this branching follows a power law as a function of the readout power, indicating a relation between the system’s energy and the shortest time required to achieve the target states. Finally, we identify that our scheme can be readily extended to include additional constraints such as a penalty on large average photon numbers in order to keep the cavity population below the critical photon number set by the dispersive approximation.

While resonator reset in the dispersive regime of circuit QED serves as an instructive study, we emphasize that this implementation of GRAPE may have much broader use. As a second practical example, our approach has also been recently applied by some of us to fast cat states generation in nonlinear resonators [47]. Following recent experimental results, our work could be expanded to study resonator reset in the strongly nonlinear regime of circuit QED [44]. Our approach appears ideally suited to simulate the large Hilbert space that is needed to simulate these experiments. Another application is the optimization of qubit measurement in circuit QED [7, 72]. Finally, our implementation may prove useful in optimizing unitary gates that not only works in the qubit subspace but rely on the full Hilbert space of a resonator and multiple qubits [73].

ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge valuable feedback from F. Motzoi. CKA and JV thank Université de Sherbrooke for their hospitality. SB and AB acknowledge financial support from NSERC. CKA acknowledges financial support from the Villum Foundation Center of Excellence, QUSCOPE, and from the Danish Ministry of Higher Education and Science. JV would like to thank MITACS

Globalink Program for financial assistance. Computations were made on the supercomputer Mammouth parallele II from Université de Sherbrooke, managed by Calcul Québec and Compute Canada. The operation of this supercomputer is funded by the Canada Foundation for Innovation (CFI), NanoQuébec, RMGA and the Fonds de recherche du Québec - Nature et technologies (FRQ-NT). This research was undertaken thanks in part to funding from the Canada First Research Excellence Fund.

Appendix A: Gaussian filter

In this Appendix, we present the Gaussian filtering procedure developed by Motzoi *et. al.* in Ref. [9], and mentioned in Sec. II. In circuit QED, while typical electronics limits the controls $\{u_k(j)\}$ to a minimal duration Δt of a few ns, the limited bandwidths of control lines and pulse generators leads to a smoothed drive which can significantly modify the dynamics from the one expected from piecewise constant drives. The filtering approach summarized here allows to incorporate these experimental constraints in the GRAPE algorithm. The main idea of Ref. [9] is to calculate the dynamics using a new smoothed pulse $s_k(t) \equiv s_k[\{u_k(j)\}, t]$ which is a functional of the set of controls, while still performing the optimization on the N controls $\{u_k(j)\}$.

As the GRAPE algorithm requires a piecewise constant field, this new smoothed drive $s_k(t)$ is approximated as a piecewise constant drive, with each step a subpixel of amplitude $s_{k,n}$ and duration $\delta t \ll \Delta t$. The set of controls, $\{u_k(j)\}$, now translates into a set of drive amplitudes, $s_k(n)$, for a time $t \in [(n-1)\delta t; n\delta t]$ with $n \in \{1, 2, \dots, M\}$ and $M = T/\delta t \gg N$ the number of subpixels. The controls and the smoothed drive are related by

$$s_k(n) = \sum_{j=1}^N T_{k,n,j} u_k(j), \quad (\text{A1})$$

with $T_{k,n,j}$ a transfer function matrix which act as a filter on the controls. The derivatives of the performance index can be calculated using the chain rule

$$\frac{\partial \Phi}{\partial u_k(j)} = \sum_{n=1}^M \frac{\partial \Phi}{\partial s_k(n)} \frac{\partial s_k(n)}{\partial u_k(j)}, \quad (\text{A2})$$

where the derivative with respect to $s_k(n)$ can be found using Eq. (12), while $\partial s_k(n)/\partial u_k(j)$ comes directly from the transfer matrix.

In this paper, all numerics use transfer functions based on Gaussian filters since most experimental hardware constraints can be approximated well by such a filter [9]. Hardware components are typically characterized by their 3dB attenuation bandwidth, ω_B . Using a filter function

$$F(\omega) = \exp(-\omega^2/\omega_0^2), \quad (\text{A3})$$

with the reference bandwidth for a given control field given by $\omega_0 = \omega_B/(-\ln(1/\sqrt{2}))^{1/2} \approx \omega_B/0.5887$, the transfer matrix can now be calculated as [9]

$$\begin{aligned} T_{k,n,j} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(\omega) \cos\left(\omega \frac{2(n-1)\delta t - (2j-1)\Delta t}{2}\right) \sin\left(\frac{\omega \Delta t}{2}\right)}{\pi \omega} d\omega \\ &= \frac{\text{erf}\left[\omega_0 \frac{(n-1)\delta t - (j-1)\Delta t}{2}\right] - \text{erf}\left[\omega_0 \frac{(n-1)\delta t - j\Delta t}{2}\right]}{2}, \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

with erf being the error function.

Appendix B: Photon number penalty

In this Appendix, we detail the numerical calculation of the gradient $\partial \Phi_p/\partial s_k(j)$ of the photon number penalty to the performance index Φ_p defined in Eq. (25) of Sec. IV B. Using Appendix A, this can be translated into $\partial \Phi_p/\partial u_k(j)$ needed for the update rule, Eq. (2). We show that, even though Φ_p is the result of a time integration over the full duration of the reset process, the gradient can still be calculated using a single forward and a single modified backward evolution.

In order to calculate Φ_p numerically, we approximate the continuous integral of Eq. (25) by a discrete sum over the subpixels defined in Appendix A,

$$\Phi_p \approx \sum_{i=e,g} \sum_{n=0}^M \delta t \text{Tr}(a^\dagger a \hat{L}_n \dots \hat{L}_1 \rho_i(0)). \quad (\text{B1})$$

Now, we need to find $\partial \Phi_p/\partial u_k(j)$.

The gradient of the integration over time of the mean value of an operator A is in general given by

$$\sum_{n=0}^M \delta t \frac{\partial \langle A \rangle_n}{\partial s_k(j)} = \sum_{n=0}^M \delta t \text{Tr}\left(A \frac{\partial(\hat{L}_n \dots \hat{L}_1)}{\partial s_k(j)} \rho\right) \quad (\text{B2})$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{n=0}^M \delta t \text{Tr}\left[A \hat{L}_n \dots \hat{L}_{j+1} \left(\frac{\partial \hat{L}_j}{\partial s_k(j)}\right)\right. \\ &\quad \left. \times \hat{L}_{j-1} \dots L_1 \rho(0)\right] \Theta(n-j) \end{aligned} \quad (\text{B3})$$

where we have used the Heavyside step function

$$\Theta(n) = \begin{cases} 0 & \text{if } n < 0 \\ 1 & \text{if } n \geq 0 \end{cases}. \quad (\text{B4})$$

Using the linearity of the trace, we see that

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^M \delta t \frac{\partial \langle A \rangle_n}{\partial s_k(j)} &= \text{Tr}\left[\left(\sum_{n=0}^M \delta t \Theta(n-j) A \hat{L}_n \dots \hat{L}_{j+1}\right)\right. \\ &\quad \left.\times \frac{\partial \hat{L}_j}{\partial s_k(j)} (\hat{L}_{j-1} \dots L_1 \rho(0))\right], \end{aligned} \quad (\text{B5})$$

such that the last parentheses inside the trace is the same as the forward evolution used for the calculation of Φ_0 , while the first parenthesis is a stepwise backward evolution starting from the operator A . This backward evolution is equivalent to a sum over backward evolutions starting at all time steps. For example, for $j = M - 2$ the parenthesis reads $A\hat{L}_M\hat{L}_{M-1} + A\hat{L}_{M-1} + A = (A\hat{L}_M + A)\hat{L}_{M-1} + A$. Therefore we can rewrite the gradient of the photon

number penalty as

$$\frac{\partial \Phi_p}{\partial s_k(j)} = \delta t \sum_{i=e,g} \text{Tr} \left(\zeta_{M-j} \frac{\partial \hat{L}_j}{\partial s_k(j)} \rho_{j-1} \right), \quad (\text{B6})$$

with the quantities $\zeta_{M-j} = a^\dagger a + \hat{L}_{j+1}^\dagger \zeta_{M-j+1}$ defined recursively starting from $\zeta_M = a^\dagger a$ and $\rho_j = \hat{L}_j \dots L_1 \rho(0)$ as defined in Eq. (10). The derivative $\partial \hat{L}_j / \partial s_k(j)$ is calculated as in Eq. (12). Thus, by adding $a^\dagger a$ to the result of the backward evolution at each timestep, the scaling of the GRAPE algorithm is not affected by this more complicated performance index and the gradient of the penalty function is obtained by the calculation of only one forward and one modified backward evolution per qubit state considered.

-
- [1] J. P. Palao and R. Kosloff, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 188301 (2002).
- [2] P. Treutlein, T. W. Hänsch, J. Reichel, A. Negretti, M. A. Cirone, and T. Calarco, *Phys. Rev. A* **74**, 022312 (2006).
- [3] S. Schirmer, *Journal of Modern Optics* **56**, 831 (2009).
- [4] M. M. Müller, D. M. Reich, M. Murphy, H. Yuan, J. Vala, K. B. Whaley, T. Calarco, and C. P. Koch, *Phys. Rev. A* **84**, 042315 (2011).
- [5] F. Motzoi, J. M. Gambetta, P. Rebentrost, and F. K. Wilhelm, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 110501 (2009).
- [6] D. J. Egger and F. K. Wilhelm, *Superconductor Science and Technology* **27**, 014001 (2014).
- [7] D. J. Egger and F. K. Wilhelm, *Phys. Rev. A* **90**, 052331 (2014).
- [8] P. Doria, T. Calarco, and S. Montangero, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 190501 (2011).
- [9] F. Motzoi, J. M. Gambetta, S. T. Merkel, and F. K. Wilhelm, *Phys. Rev. A* **84**, 022307 (2011).
- [10] S. J. Glaser, U. Boscain, T. Calarco, C. P. Koch, W. Köckenberger, R. Kosloff, I. Kuprov, B. Luy, S. Schirmer, T. Schulte-Herbrüggen, *et al.*, *The European Physical Journal D* **69**, 1 (2015).
- [11] M. Shapiro and P. Brumer, *Principles of the Quantum Control of Molecular Processes*, by Moshe Shapiro, Paul Brumer, pp. 250. ISBN 0-471-24184-9. Wiley-VCH, February 2003. **1** (2003).
- [12] C. Brif, R. Chakrabarti, and H. Rabitz, *New Journal of Physics* **12**, 075008 (2010).
- [13] N. C. Nielsen, C. Kehlet, S. J. Glaser, and N. Khaneja, “Optimal control methods in nmr spectroscopy,” in *eMagRes* (John Wiley & Sons, Ltd, 2007).
- [14] N. Timoney, V. Elman, S. Glaser, C. Weiss, M. Johanning, W. Neuhauser, and C. Wunderlich, *Phys. Rev. A* **77**, 052334 (2008).
- [15] J. M. Chow, L. DiCarlo, J. M. Gambetta, F. Motzoi, L. Frunzio, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, *Phys. Rev. A* **82**, 040305 (2010).
- [16] J. Kelly, R. Barends, B. Campbell, Y. Chen, Z. Chen, B. Chiaro, A. Dunsworth, A. G. Fowler, I.-C. Hoi, E. Jeffrey, A. Megrant, J. Mutus, C. Neill, P. J. J. O’Malley, C. Quintana, P. Roushan, D. Sank, A. Vainsencher, J. Wenner, T. C. White, A. N. Cleland, and J. M. Martinis, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 240504 (2014).
- [17] N. Didier, F. Qassemi, and A. Blais, *Phys. Rev. A* **89**, 013820 (2014).
- [18] Y. Liu, S. Shankar, N. Ofek, M. Hatridge, A. Narla, K. M. Sliwa, L. Frunzio, R. J. Schoelkopf, and M. H. Devoret, *Phys. Rev. X* **6**, 011022 (2016).
- [19] F. Verstraete, M. M. Wolf, and J. Ignacio Cirac, *Nat Phys* **5**, 633 (2009).
- [20] M. Wenin and W. Pötz, *Phys. Rev. A* **78**, 012358 (2008).
- [21] S. Machnes, U. Sander, S. J. Glaser, P. de Fouquieres, A. Gruslys, S. Schirmer, and T. Schulte-Herbrüggen, *Phys. Rev. A* **84**, 022305 (2011).
- [22] T. Schulte-Herbrüggen, A. Spörl, N. Khaneja, and S. J. Glaser, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **44**, 154013 (2011).
- [23] F. F. Floether, P. de Fouquieres, and S. G. Schirmer, *New Journal of Physics* **14**, 073023 (2012).
- [24] M. H. Goerz, D. M. Reich, and C. P. Koch, *New Journal of Physics* **16**, 055012 (2014).
- [25] C. P. Koch, *Journal of Physics: Condensed Matter* **28**, 213001 (2016).
- [26] N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet, T. Schulte-Herbrüggen, and S. J. Glaser, *Journal of Magnetic Resonance* **172**, 296 (2005).
- [27] V. Krotov, *Global methods in optimal control theory*, Vol. 195 (CRC Press, 1995).
- [28] Y. Maday and G. Turinici, *The Journal of Chemical Physics* **118**, 8191 (2003).
- [29] T. Caneva, T. Calarco, and S. Montangero, *Phys. Rev. A* **84**, 022326 (2011).
- [30] N. Rach, M. M. Müller, T. Calarco, and S. Montangero, *Phys. Rev. A* **92**, 062343 (2015).
- [31] V. Engel, C. Meier, and D. J. Tannor, *Advances in Chemical Physics* **141**, 29 (2009).
- [32] C. Gardiner and P. Zoller, *Quantum Noise: A Handbook of Markovian and Non-Markovian Quantum Stochastic Methods with Applications to Quantum Optics* (Springer, New York, 2004).
- [33] M. H. Goerz, *Optimizing Robust Quantum Gates in Open Quantum Systems*, Ph.D. thesis, Kassel, Univ., Diss., 2015 (2015).
- [34] G. Ashkenazi, R. Kosloff, S. Ruhman, and H. Tal-Ezer,

- The Journal of Chemical Physics **103**, 10005 (1995).
- [35] M. H. Gutknecht, in *Frontiers of Computational Science* (Springer, 2007) pp. 53–62.
- [36] H. Tal-Ezer, *SIAM Journal on Scientific Computing* **29**, 2426 (2007).
- [37] L. C. G. Govia and F. K. Wilhelm, *Phys. Rev. A* **93**, 012316 (2016).
- [38] L. C. G. Govia and F. K. Wilhelm, *Phys. Rev. Applied* **4**, 054001 (2015).
- [39] M. Khezri, E. Mlinar, J. Dressel, and A. N. Korotkov, *Phys. Rev. A* **94**, 012347 (2016).
- [40] M. Boissonneault, J. M. Gambetta, and A. Blais, *Phys. Rev. A* **77**, 060305 (2008).
- [41] A. P. Sears, A. Petrenko, G. Catelani, L. Sun, H. Paik, G. Kirchmair, L. Frunzio, L. I. Glazman, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, *Phys. Rev. B* **86**, 180504 (2012).
- [42] C. Rigetti, J. M. Gambetta, S. Poletto, B. L. T. Plourde, J. M. Chow, A. D. Córcoles, J. A. Smolin, S. T. Merkel, J. R. Rozen, G. A. Keefe, M. B. Rothwell, M. B. Ketchen, and M. Steffen, *Phys. Rev. B* **86**, 100506 (2012).
- [43] D. T. McClure, H. Paik, L. S. Bishop, M. Steffen, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, *Phys. Rev. Applied* **5**, 011001 (2016).
- [44] C. C. Bultink, M. A. Rol, T. E. O’Brien, X. Fu, B. C. S. Dikken, C. Dickel, R. F. L. Vermeulen, J. C. de Sterke, A. Bruno, R. N. Schouten, and L. DiCarlo, *Phys. Rev. Applied* **6**, 034008 (2016).
- [45] A. G. Fowler, M. Mariantoni, J. M. Martinis, and A. N. Cleland, *Phys. Rev. A* **86**, 032324 (2012).
- [46] A. A. Houck, J. A. Schreier, B. R. Johnson, J. M. Chow, J. Koch, J. M. Gambetta, D. I. Schuster, L. Frunzio, M. H. Devoret, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, *Physical Review Letters* **101**, 080502 (2008).
- [47] S. Puri, S. Boutin, and A. Blais, *npj Quantum Information* **3**, 18 (2017).
- [48] R. Fletcher, *Practical Methods of Optimization*, A Wiley-Interscience Publication (John Wiley & Sons, 2000).
- [49] P. de Fouquieres, S. Schirmer, S. Glaser, and I. Kuprov, *Journal of Magnetic Resonance* **212**, 412 (2011), 1102.4096v2.
- [50] M. Galassi, J. Davies, J. Theiler, B. Gough, G. Jungman, P. Alken, M. Booth, and F. Rossi, “Gnu Scientific Library: Reference Manual,” (2011).
- [51] J. Johansson, P. Nation, and F. Nori, *Computer Physics Communications* **184**, 1234 (2013).
- [52] A. Wallraff, D. Schuster, A. Blais, L. Frunzio, R.-S. Huang, J. Majer, S. Kumar, S. Girvin, and R. Schoelkopf, *Nature* **431**, 162 (2004).
- [53] A. Blais, R.-S. Huang, A. Wallraff, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, *Phys. Rev. A* **69**, 062320 (2004).
- [54] M. Boissonneault, J. M. Gambetta, and A. Blais, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 100504 (2010).
- [55] J. Bourassa, F. Beaudoin, J. M. Gambetta, and A. Blais, *Phys. Rev. A* **86**, 013814 (2012).
- [56] S. E. Nigg, H. Paik, B. Vlastakis, G. Kirchmair, S. Shankar, L. Frunzio, M. H. Devoret, R. J. Schoelkopf, and S. M. Girvin, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 240502 (2012).
- [57] R. Vijay, M. H. Devoret, and I. Siddiqi, *Review of Scientific Instruments* **80**, 111101 (2009), <http://dx.doi.org/10.1063/1.3224703>.
- [58] S. Lloyd and S. Montangero, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 010502 (2014).
- [59] J. J. W. Sørensen, M. K. Pedersen, M. Munch, P. Haikka, J. H. Jensen, T. Planke, M. G. Andreasen, M. Gajdacz, K. Mølmer, A. Lieberoth, *et al.*, *Nature* **532**, 210 (2016).
- [60] T. Caneva, M. Murphy, T. Calarco, R. Fazio, S. Montangero, V. Giovannetti, and G. E. Santoro, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 240501 (2009).
- [61] M. H. Goerz, T. Calarco, and C. P. Koch, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **44**, 154011 (2011).
- [62] V. Giovannetti, S. Lloyd, and L. Maccone, *Phys. Rev. A* **67**, 052109 (2003).
- [63] L. B. Levitin and T. Toffoli, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 160502 (2009).
- [64] A. del Campo, I. L. Egusquiza, M. B. Plenio, and S. F. Huelga, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 050403 (2013).
- [65] M. M. Taddei, B. M. Escher, L. Davidovich, and R. L. de Matos Filho, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 050402 (2013).
- [66] M. Boissonneault, J. M. Gambetta, and A. Blais, *Phys. Rev. A* **79**, 013819 (2009).
- [67] E. Martín-López, A. Laing, T. Lawson, R. Alvarez, X.-Q. Zhou, and J. L. O’Brien, *Nature Photonics* **6**, 773 (2012).
- [68] D. Riste, M. Dukalski, C. Watson, G. de Lange, M. Tiggelman, Y. M. Blanter, K. Lehnert, R. Schouten, and L. DiCarlo, *Nature* **502**, 350 (2013).
- [69] C. K. Andersen, J. Kerckhoff, K. W. Lehnert, B. J. Chapman, and K. Mølmer, *Phys. Rev. A* **93**, 012346 (2016).
- [70] N. Roch, M. E. Schwartz, F. Motzoi, C. Macklin, R. Vijay, A. W. Eddins, A. N. Korotkov, K. B. Whaley, M. Sarovar, and I. Siddiqi, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 170501 (2014).
- [71] A. Córcoles, E. Magesan, S. J. Srinivasan, A. W. Cross, M. Steffen, J. M. Gambetta, and J. M. Chow, *Nature communications* **6** (2015).
- [72] E. Magesan, J. M. Gambetta, A. D. Córcoles, and J. M. Chow, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 200501 (2015).
- [73] A. W. Cross and J. M. Gambetta, *Phys. Rev. A* **91**, 032325 (2015).

Chapitre 4

Ingénierie optimale et textures magnétiques

À la section 2.3.3, nous avons décrit la possibilité d'utiliser une texture magnétique afin de générer un couplage spin-orbite artificiel. En particulier, nous avons démontré le résultat bien connu [66–70] qu'une simple transformation unitaire permet de relier un système uniforme possédant un couplage spin-orbite à un système inhomogène soumis à une texture magnétique spirale. Ainsi, en l'absence d'un couplage spin-orbite intrinsèque, l'utilisation de paramètres inhomogènes permet d'atteindre une phase topologique qui serait autrement inaccessible. Ce chapitre cherche à généraliser ce résultat en considérant les inhomogénéités de paramètres comme une ressource permettant l'ingénierie de modes de Majorana robustes. En d'autres mots, étant donné certaines contraintes expérimentales, nous cherchons à connaître le profil spatial optimal de paramètres, c'est-à-dire menant aux modes de Majorana ayant la plus grande protection topologique possible.

L'espace des paramètres formé par l'ensemble des nanofils inhomogènes étant gigantesque et en raison de l'absence de résultats analytiques au-delà de certains cas particuliers, il est nécessaire d'utiliser une méthode numérique efficace afin de s'attaquer à ce problème. Or, le chapitre 3 nous a permis de constater que l'utilisation de méthodes d'optimisation numérique permet l'obtention de solutions à un problème allant au-delà de notre régime d'intuition et ouvrant donc de nouvelles possibilités expérimentales. Ainsi, de manière analogue aux méthodes de contrôle optimal pour

l'optimisation de profils temporels, nous chercherons ici à optimiser le profil spatial de paramètres au sein d'une nanostructure. Plutôt que l'optimisation d'un processus dynamique, comme la réinitialisation d'un résonateur au chapitre précédent, l'objectif de l'optimisation sera de faire l'ingénierie d'une phase topologique.

Dans ce chapitre, nous introduisons donc une méthode efficace afin d'atteindre cet objectif. Cette méthode tire profit d'une analogie entre l'algorithme **GRAPE** utilisé au chapitre précédent pour le contrôle optimal et la méthode des fonctions de Green récursives (ou **RGF** pour *Recursive Green's functions* [106–108]). Par une grande originalité, nous nommerons donc l'algorithme résultant par l'acronyme RGF-GRAPE. Bien que la méthode développée et présentée dans la publication de la section 4.1 soit plus générale, la motivation derrière ce travail est l'optimisation de textures magnétiques et plus précisément de réseaux de microaimants permettant l'ingénierie de modes de Majorana dans un nanofil sans couplage spin-orbite intrinsèque. La méthode RGF-GRAPE est donc appliquée à ce problème dans la publication présentée à la section 4.2.

4.1 Publication 2

On reproduit dans cette section la publication

- **S. Boutin**, J. Camirand Lemyre, I. Garate. *Majorana bound state engineering via efficient real-space parameter optimization*, *Phys. Rev. B* **98** 214512 (2018). [24]

Contexte et contribution

Dans le cadre d'un projet de l'Institut quantique, j'ai établi une collaboration avec Julien Camirand Lemyre du groupe de Michel Pioro-Ladrière visant à étudier la faisabilité de créer des modes de Majorana dans une architecture basée sur le couplage spin-orbite artificiel généré par un réseau de microaimants. Dans le cadre de ce projet, qui fera l'objet de la publication de la section suivante, il est rapidement devenu clair que l'ingénierie de majoranas dans ce système était difficile en raison du faible facteur g des semiconducteurs considérés. L'idée est donc venue de développer un analogue

du contrôle optimal dans l'espace réel et c'est donc ce qui à mené à la publication présentée dans cette section.

Pour cette publication, j'ai développé et implémenté l'algorithme RGF-GRAPE. J'ai effectué l'ensemble des simulations numériques et des calculs analytiques. J'ai écrit la première version de l'article et préparé les figures. Le texte a ensuite été retravaillé en collaboration avec I. Garate. Tous les auteurs ont contribué à l'analyse des données et ont commenté le manuscrit.

Majorana bound state engineering via efficient real-space parameter optimization

Samuel Boutin,^{*} Julien Camirand Lemyre, and Ion Garate

Institut quantique et Département de Physique, Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec J1K 2R1, Canada

(Dated: November 21, 2018)

Recent progress towards the fabrication of Majorana-based qubits has sparked the need for systematic approaches to optimize experimentally relevant parameters for the realization of robust Majorana bound states. Here, we introduce an efficient numerical method for the real-space optimization of tunable parameters, such as electrostatic potential profiles and magnetic field textures, in Majorana wires. Combining ideas from quantum control and quantum transport, our algorithm, applicable to any noninteracting tight-binding model, operates on a largely unexplored parameter space and opens new routes for Majorana bound states with enhanced robustness. Contrary to common belief, we find that spatial inhomogeneities of parameters can be a resource for the engineering of Majorana bound states.

I. INTRODUCTION

Majorana bound states (MBS) are spatially localized zero-energy modes that exhibit non-abelian exchange statistics. The recent discovery and characterization of MBS in solid-state devices has established their potential for future fault-tolerant quantum computers [1]. At present, the leading platform for the study of MBS is a strongly spin-orbit coupled semiconducting nanowire, proximity-coupled to a *s*-wave superconductor and placed in a uniform magnetic field [2–5]. Alternative proposals replacing spin-orbit interactions with spiral magnetic textures generated by adatoms [6, 7] or arrays of micromagnets [8] are also promising and have been partially realized in experiments [9].

In spite of the aforementioned advances, the current state of knowledge for the realization of MBS is restricted to a small region of parameter space, comprised mainly of translationally-invariant wires. Systems with nonuniform parameters, such as superconducting gaps, magnetic fields and electrostatic potential profiles, are not analytically tractable beyond a few limiting periodic cases [10–17], and the existing numerical studies [18–22] have not been exhaustive. Thus, it would be desirable to chart the vast space of tunable experimental parameters beyond the known subregions, not only to find out if inhomogeneities could be a resource for MBS experiments, but also to provide new insights for improving Majorana-based qubits [23–25].

In this work, we introduce an optimization algorithm that undertakes an efficient search in parameter space for maximally robust MBS which are compatible with experimental constraints. The central finding of our work is that the engineering of spatial inhomogeneities increases the parameter space region for robust MBS and significantly enhances the degeneracy of Majorana zero-modes.

Our optimization approach is inspired by the Gradient Ascent Pulse Engineering (GRAPE) algorithm [26] of quantum optimal control [27], which aims to find the best

pulse shapes in time domain to perform a task, such as implementing a logical gate or reaching a desired ground state [28]. We draw an analogy between GRAPE and the Recursive Green’s function (RGF) method of quantum transport [29], which allows to transfer the insights of the former from time domain to real-space domain. This analogy turns out to be key to implement the efficient optimization of parameters for the creation of robust MBS in inhomogeneous quantum wires.

II. REAL-SPACE ANALOGUE OF OPTIMAL CONTROL

In quantum optimal control theory, one considers a system with a Hamiltonian $H = H_0 + \sum_k f_k(t)\mathcal{H}_k$, where $f_k(t)$ are some experimentally controllable time-dependent parameters and $k = 1, \dots, p$ labels distinct control fields. The control problem can be stated as the maximization of a functional $\Phi[\{f_k(t)\}]$, known as a performance index, which defines the success in accomplishing a desired task. To make this optimization problem tractable, Khaneja *et al.* [26] discretized the control functions into piecewise-constant segments $f_k(t_j)$. The gradient of Φ with respect to $\{f_k(t_j)\}$ can then be efficiently calculated by keeping in memory intermediate results of forward-in-time and backward-in-time propagator products computed iteratively (see Appendix A for a more detailed introduction to GRAPE). This insight at the core of GRAPE leads to a polynomial speedup (in the number of time steps) of numerical calculations compared to a finite-difference gradient calculation

The piecewise constant approximation of time-domain functions in GRAPE is reminiscent of tight-binding models in condensed matter physics, where space is discretized into a lattice. Hence, it is natural to ask whether a real-space analogue of GRAPE could be developed to optimize profiles of tunable static experimental parameters in one dimensional wires. In the following, we pursue this analogy for a wire with Hamiltonian

$$H = \sum_j \left(\psi_j^\dagger h_j \psi_j + \psi_{j+1}^\dagger u_j \psi_j + \psi_j^\dagger u_j^\dagger \psi_{j+1} \right), \quad (1)$$

^{*} Samuel.Boutin@USherbrooke.ca

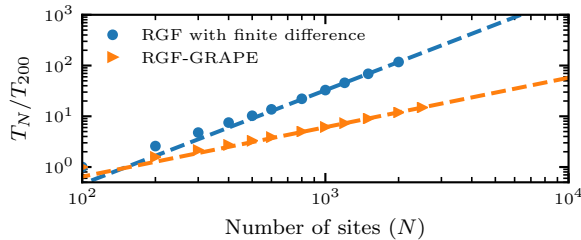


FIG. 1. Power-law fits to the average computation time T_N for the performance index (Eq. (6)) and its gradient in a Majorana wire with N sites. The RGF-GRAPE method (orange triangles, $T_N \propto N^{0.98}$) is polynomially faster than the finite-difference gradient approach (blue disks, $T_N \propto N^{1.85}$). See appendix C 3 for details.

where j is the site index. Each site contains M degrees of freedom (spin, particle-hole pseudospin, transverse channel index, etc). Accordingly, onsite terms h_j and hopping terms u_j are $M \times M$ matrices, while $\psi_j^{(\dagger)}$ are column (row) vectors of fermion annihilation (creation) operators. We subdivide the system into a superconducting scattering region of N sites ($j = 1, \dots, N$), coupled to normal metallic homogeneous leads on the left and on the right.

To connect with optimal control, we consider an onsite Hamiltonian $h_j = h_j^{(0)} + \sum_k f_{kj} \mathcal{H}_k$, where $h_j^{(0)}$ is fixed and $k = 1, \dots, p$ labels different tunable and spatially-varying parameters f_{kj} , such as the components of a magnetic field \mathbf{b}_j , an electrostatic potential V_j or a superconducting gap Δ_j . Our main goal is to perform an efficient numerical optimization of f_{kj} in quantum wires. For simplicity, we assume u_j to be fixed and uniform, but our method can be generalized to relax this assumption, e.g. to optimize an inhomogeneous spin-orbit coupling.

Similarly to the GRAPE algorithm, which iteratively constructs products of propagators to describe the system at each time step, local observables of a tight-binding lattice can be described in terms of propagators (Green’s functions) obtained iteratively from the system’s left and right boundaries. This conceptual connection becomes concrete in the RGF method [29], where the retarded Green’s function at site j and energy E is written as

$$G_j^{\text{ret}}(E) = [E - h_j - \Sigma_{j-1}^L - \Sigma_{j+1}^R]^{-1}. \quad (2)$$

Here, $\Sigma_{j\pm 1}^{L(R)}$ is the left (right) hybridization function representing the influence of sites to the left (right) of site j . These hybridization functions are obtained iteratively using the standard RGF recursion relations (cf. Appendix B).

The recursive formalism shares two major advantages of GRAPE, in that it allows for a speedup of calculations through the reuse of intermediate results and it enables analytical expressions for the derivatives of propagators. As a result, the complexity of calculating a Green’s function and its derivatives is reduced to $O(NM^3)$ (Fig. 1).

In contrast, a naive finite difference approach for calculating $\partial G_j^{\text{ret}} / \partial f_{kj'}$ for $j' = 1, \dots, N$ would incur a total computational cost of $O(N^2 M^3)$, which can rapidly become prohibitive with the length of the system.

III. MAJORANA WIRE OPTIMIZATION

A. Performance index definition

In order to optimize $\{f_{kj}\}$ for the realization of robust MBS, a performance index which is maximal for optimal spatial profiles is needed. A good index must have the following attributes: (i) it is smooth under variations of f_{kj} ; (ii) in the non-topological phase, the optimization process steers the system’s parameters towards a topological phase transition (via gap closing); (iii) in the topological phase, the optimization evolves towards maximizing the protection of the MBS (via gap opening). A simple performance index that meets the preceding criteria is

$$\Phi = -\Delta_L Q_L - \Delta_R Q_R, \quad (3)$$

where $\Delta_{L(R)} \geq 0$ is the local energy gap at the left (right) extremity of the scattering region and $Q_{L(R)}$ is the corresponding “topological visibility” [30]. For quantum wires belonging to symmetry class D [31], the latter varies continuously between ± 1 and its sign gives the \mathbb{Z}_2 topological invariant of the superconducting wire segment ($+/- 1$ in the trivial/topological phase).

To benefit from the computational efficiency of the RGF method and the analogy to GRAPE, we express Φ in terms of Green’s functions. On the one hand, $Q_{L(R)}$ is given by the determinant of the zero-energy reflection matrix at site $j = 0$ ($j = N + 1$) [32–34]. These matrices can be obtained (cf. Appendix C) from $G_0^{\text{ret}}(0)$ and $G_{N+1}^{\text{ret}}(0)$ via the Fisher-Lee relations [35–38]. On the other hand, $\Delta_{L(R)}$ can be extracted from the spectral functions. However, this requires evaluating $G_j^{\text{ret}}(E)$ for multiple energies, which is numerically costly and inefficient. Fortunately, for the purposes of optimization, the absolute value of the gap is not needed, but only a function that scales in the same way. Herein, we will construct an effective gap that is based solely on $G_j^{\text{ret}}(0)$.

To that end, we define the “center-of-mass” (CM) of the left (L) and right (R) zero-energy states (Fig. 2a),

$$\langle x_L \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}_L} \sum_{j=1}^{N/2} j \rho_j; \quad \langle x_R \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}_R} \sum_{j=N/2}^N j \rho_j, \quad (4)$$

where $\rho_j \equiv -\text{Im} \{ \text{Tr} [G_j^{\text{ret}}(0)] \} / (2\pi)$ is the zero-energy local density of states, while $\mathcal{N}_L = \sum_{j=1}^{N/2} \rho_j$ and $\mathcal{N}_R = \sum_{j=N/2}^N \rho_j$ are the total “masses” of the L and R states. In a superconducting wire weakly coupled to normal leads, zero-energy states from the leads leak in the superconducting region leading to $\rho_j \neq 0$ in both the topological and trivial phase. Hence, the CM gives a smooth and

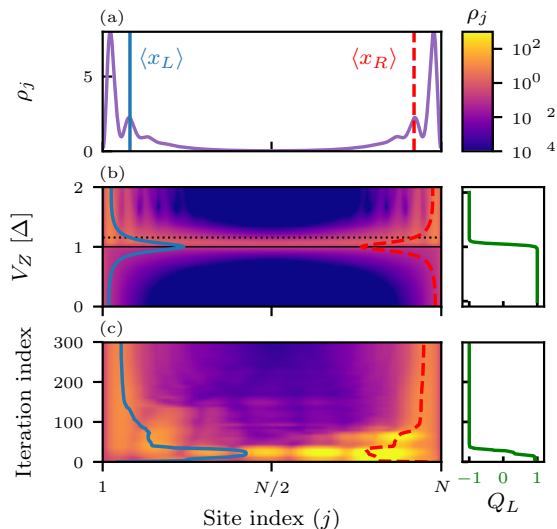


FIG. 2. (a) Zero-energy local density of states ρ_j and the corresponding “centers-of-mass” (CM) $\langle x_L \rangle$ and $\langle x_R \rangle$ (cf. Eq. (4)) in a homogeneous wire with superconducting gap Δ and Zeeman splitting V_Z . (b) Evolution of ρ_j , the two CM, and the topological visibility Q_L (green curve) as a function of V_Z . The black dotted line indicates the V_Z value used in panel (a). At the topological phase transition (solid black line), ρ_j is approximately uniform. (c) Evolution of ρ_j , the CM and Q_L with successive iterations of the RGF-GRAPE optimization algorithm.

quantitative measure of the localization of zero-energy states (Fig. 2b). Moreover, there is an inverse relation between the localization length of $E = 0$ states and the p -wave component of the superconducting gap [39]: the larger the latter is, the closer $\langle x_L \rangle$ and $\langle x_R \rangle$ get to 1 and N , respectively. With this in mind, we introduce the effective gaps

$$\tilde{\Delta}_L \equiv \frac{N/2}{\langle x_L \rangle - 1}; \quad \tilde{\Delta}_R \equiv \frac{N/2}{N - \langle x_R \rangle}, \quad (5)$$

which lead to a performance index

$$\tilde{\Phi} = -\tilde{\Delta}_L Q_L - \tilde{\Delta}_R Q_R. \quad (6)$$

The effective gaps $\tilde{\Delta}_{L(R)}$ correlate closely with the p -wave component of the superconducting gap. The optimization of $\tilde{\Phi}$ will accordingly converge towards maximally localized MBS, which is beneficial for the phase coherence of MBS-based qubits [25]. However, $\tilde{\Delta}_{L(R)}$ may be blind to localized non-topological subgap states that might appear at the extremities of the wire, insofar as these do not affect the localization length of the MBS. Though these subgap states can lead to a “soft” gap, their occupation does not flip the MBS-based qubit’s parity if the MBS are spatially well-separated [39, 40].

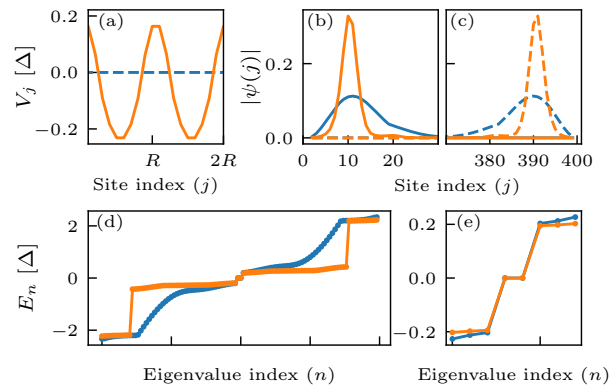


FIG. 3. Optimization of the electrostatic potential profile in a spin-orbit coupled superconducting wire with 400 sites and one subband. Blue (orange) curves are the results before (after) optimization. (a) Initial and final (optimized) gate potential textures. A period of $R = 10$ sites (lattice constant $a = 10$ nm) is enforced during the optimization. (b,c) MBS wave function amplitude. (d) Energy eigenvalues (E_n) of the isolated superconducting region. (e) Energy spectrum near zero-energy. See Appendix D for parameters.

B. Proof of concept of the optimization

Our optimization algorithm, which we name RGF-GRAPE, consists of the following steps: (i) propose an initial set of $\{f_{kj}\}$; (ii) compute $\tilde{\Phi}$ and $\partial\tilde{\Phi}/\partial f_{kj}$ adapting ideas from RGF and GRAPE (cf. Appendix C); (iii) update $\{f_{kj}\}$ via gradient ascent; (iv) repeat steps (ii) and (iii) until a maximum of $\tilde{\Phi}$ is attained. These steps are applicable to an arbitrary single-particle tight-binding model of nanowire. The occurrence of soft gaps can be reduced by running the algorithm with varying initial and optimization parameters and keeping the solution with the largest gap afterwards (cf. Appendices E and H).

To confirm that the algorithm is working properly, we consider a superconducting wire in the single channel regime without spin-orbit coupling placed under an inhomogeneous magnetic field. Starting from a topologically trivial initial state (a superposition of two spiraling fields of different periods), successive iterations of the optimization algorithm adjust the magnetic texture and drive the wire into the topological regime (Fig. 2c). The final magnetic texture, shown in Appendix F, resembles a perfect spiral in the bulk of the wire, but departs from it within a superconducting coherence length from the boundaries. At a small loss for the topological gap, the departure from a uniform spiral renders the MBS significantly more localized, which lead to a MBS energy splitting reduced by more than an order of magnitude. This finding demonstrates that boundary engineering, appropriately done, can improve the MBS characteristics. It also shows that in inhomogeneous wires, unlike in uniform ones, the zero-mode energy splitting can be suppressed without increasing the topological gap or the length of the wire.

C. Optimization of potential profiles

The electrostatic potential in realistic quantum wires is inevitably inhomogeneous and partially tunable by applying voltages on nearby gates. Recent studies [21, 41–43] have concluded that inhomogeneities result in non-topological localized states with near-zero energy. Other authors [14] have analyzed the impact of (quasi)periodic gate potentials in the topological phase diagram. Yet, there are no explicit results about the optimal spatial profile that would lead to more robust MBS.

In Fig. 3, we perform an optimization of the electrostatic potential profile. The precise relation between this potential and the gate voltage could be obtained by solving the Schrodinger-Poisson equation [44–47]. For simplicity, we constrain ourselves to smooth and periodic potentials along the wire axis. Non-periodic potentials are non-optimal in that they generically lead to soft gaps [21]. Smoothness can be achieved by imposing penalties in $\tilde{\Phi}$ against rapid potential variations (cf. Appendix E). Through successive iterations of the optimization algorithm, the potential profile evolves from a uniform initial state to a harmonic final state. Unexpectedly, harmonic modulations strongly enhance the MBS localization, while preserving the initial energy gap (albeit with a larger density of states at the gap edge). The increased localization reduces the MBS energy splitting by three orders of magnitude. Such improvement could be crucial for extending coherence times in Majorana-based qubits, whose dephasing times are expected to be limited by the zero-mode energy splittings [25]. This result appears to be a counterexample to the common belief that inhomogeneous potentials are harmful for MBS.

In view of the preceding result, one might question whether a spatially uniform superconducting gap is optimal or not. According to RGF-GRAPE, the answer turns out to be affirmative (not shown), this time in agreement with conventional wisdom [5, 48].

D. Optimization of magnetic textures

Inhomogeneous magnetic fields produced by arrays of micromagnets constitute a tunable resource for the emergence and manipulation of MBS [49]. On the one hand, spiral fields lead to an artificial spin-orbit coupling that can induce topological superconductivity in weakly spin-orbit coupled wires [8]. On the other hand, the combination of spiral and uniform magnetic fields can help attain MBS when neither of the fields alone would suffice [10]. However, once again little is known about the optimal magnetic texture conducive to more robust MBS. The RGF-GRAPE algorithm is well suited to explore this issue.

We consider a superconducting wire without intrinsic spin-orbit coupling, subjected to a uniform magnetic field \mathbf{B}_0 and a spiral-like magnetic field \mathbf{b}_j . We assume the amplitude of \mathbf{b}_j to be uniform and equal to b , while

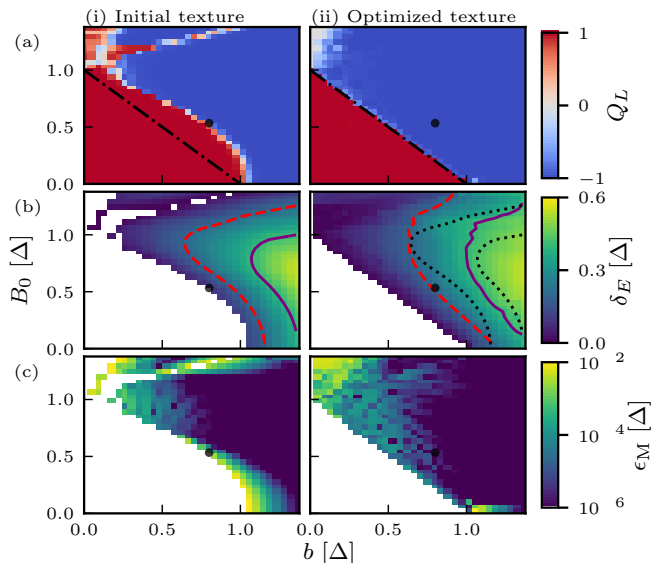


FIG. 4. Characteristics of Majorana wires with experimentally relevant parameters (cf. Appendix D) with (i) non-optimized magnetic texture (combination of uniform and spiral fields with period $R = N/16 = 25$) and (ii) optimized magnetic texture in the b - B_0 parameter space. For each point in parameter space, we take the outcome with the largest energy gap out of multiple optimizations with different optimization parameters (cf. Appendix E). The same optimized texture is used for all three rows. (a) Topological visibility Q_L (red: trivial phase, blue: topological phase). The black dot-dashed line indicates $B_0 + b = \Delta$, the expected minimal Zeeman energy to reach the topological phase. (b) Energy gap δ_E in the topological phase (white regions indicate the trivial phase). Dotted black curves are the contours drawn in the panel to the left. Dashed (solid) curves denote energy gaps of 100 (200) mK. (c) Majorana zero-mode energy splitting ϵ_M in the topological phase.

its site-dependent orientation is optimized using RGF-GRAPE. Figure 4 compares key attributes of Majorana wires between the case where \mathbf{b}_j is a perfect spiral (column (i)) and the case where \mathbf{b}_j , along with a uniform chemical potential, are optimized (column (ii)). From the topological visibility in panel (a), one can see that the optimization reaches the topological phase as long as $B_0 + b > \Delta$. In addition, the constant topological gap contours in panel (b) show that the optimization allows to increase the parameter space area where the gap is larger than experimentally relevant temperatures. It is likewise clear that, for a fixed b , adding a modest uniform field augments the topological gap. This result offers a path to circumventing the problem of small g-factors, which has impeded the experimental realization of MBS in wires with weak intrinsic spin-orbit coupling. Finally, from the zero-mode energy splitting in panel (c), it ensues that the optimization allows to greatly enhance the zero-mode degeneracy, in particular in the low B_0 region. These findings are useful for the realization of MBS using micromagnet arrays [8, 50], where b_j is limited to $\lesssim 1$ T.

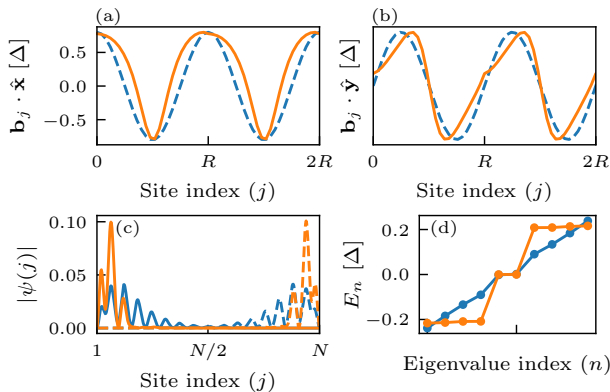


FIG. 5. Optimized magnetic textures for $B_0 = 0.53\Delta$ and $b = 0.8\Delta$ (black disks of Fig. 4). Blue (orange) curves correspond to initial (optimized) textures. (a,b) Components of the magnetic textures ($R = N/16 = 25$). (c) MBS wave function amplitude. (d) Energy spectrum near zero energy.

Figure 5 gives a more detailed account of the optimization for a fixed amplitude of B_0 and b (the black disks in Fig. 4). In this case, the optimized texture results in a large enhancement of the topological gap (from less than 50 mK to 100 mK) and a large reduction of the MBS' localization length that suppresses the MBS energy-splitting by more than two orders of magnitude. This finding suggests that small but judicious departures from simple textures can significantly improve the MBS attributes.

IV. CONCLUSION

We have introduced an efficient algorithm that optimizes real-space parameter profiles in superconducting quantum wires for the generation of robust Majorana bound states. The algorithm explores regions of parameter space where no intuitive (analytical) results are available and identifies new regimes for the emergence of MBS with strongly reduced energy splitting. Combined with realistic device simulations, our algorithm could provide detailed guidance for improved coherence in Majorana-based qubits. More generally, variations of the introduced RGF-GRAPE algorithm could be applied to characterize new topological phases in inhomogeneous low dimensional systems including photonic crystals where machine learning has recently been used for a similar purpose [51].

ACKNOWLEDGMENTS

This work was funded by the Canada First Research Excellence Fund and by the National Science and Engineering Research Council. Numerical calculations were done with computer resources from Calcul Québec and

Compute Canada. The authors benefited from fruitful discussions with P. Lopes, M. Pioro-Ladrière and S. Turcotte. The source code for this work is available at [52].

Appendix A: Gradient Ascent Pulse Engineering

This appendix is a short self-contained introduction to the GRAPE algorithm [26], with a focus on its computational complexity. The goal is to make explicit the analogy between the GRAPE algorithm, the RGF method, and the RGF-based optimization algorithm introduced in Sec. II.

For the sake of simplicity, we follow Ref. [53] and present the GRAPE algorithm for a specific optimal control problem: the optimization of a time-dependent Hamiltonian for the preparation of a target unitary transformation V in a time T . Given a time-dependent Hamiltonian

$$H(t) = H_0 + \sum_{k=1}^p f_k(t)\mathcal{H}_k, \quad (\text{A1})$$

this control problem can be stated as finding the p control functions $\{f_k(t)\}$ such that the propagator resulting from time-evolution, $U(T)$, realizes the target transformation V . One can quantify the success of a solution using the performance index $\Phi = \text{Tr}[V^\dagger U(T)]$, which is the inner product between the realized and the target propagators [54]. One can find a solution to the control problem by maximizing this performance index. While optimization algorithms, such as gradient descent, are commonplace and independent of the problem, the GRAPE algorithm uses knowledge of the structure of the propagator to calculate efficiently the gradient of Φ , which can then be used by an optimization algorithm.

In general, the propagator $U(T)$ is complicated to calculate, as it involves a time-ordered exponential. However, the problem can be greatly simplified by considering the functions $f_k(t)$ as piecewise constant functions [26]. In this reduced optimization space, the propagator is

$$U(T) = U_N U_{N-1} \cdots U_2 U_1, \quad (\text{A2})$$

where, for timestep t_j of duration $\Delta t = T/N$, the propagator of the locally time-independent Hamiltonian is

$$U_j = \exp \left\{ -i\Delta t \left[H_0 + \sum_{k=1}^p f_k(t_j)\mathcal{H}_k \right] \right\}. \quad (\text{A3})$$

By removing the time-ordering operator from the problem, the derivatives of the performance index with respect to the (now finite) set of control parameters $\{f_k(t_j)\}$ can be easily obtained using the linearity of the trace

$$\frac{\partial \Phi}{\partial f_k(t_j)} = \text{Tr} \left[V^\dagger U_N \cdots U_{j+1} \frac{\partial U_j}{\partial f_k(t_j)} U_{j-1} \cdots U_1 \right] \quad (\text{A4})$$

$$= \text{Tr} \left[P_j^\dagger \frac{\partial U_j}{\partial f_k(t_j)} X_{j-1} \right], \quad (\text{A5})$$

where in the second line we have defined the forward-in-time string of propagators $X_j = U_j U_{j-1} \cdots U_1$ and the backward-in-time string of propagators $P_j = U_{j+1}^\dagger \cdots U_N^\dagger V$. These strings of propagators are at the origin of the computational advantage of the GRAPE algorithm over more naive finite-difference approaches. In brief, due to the recursive nature of these strings (e.g. $X_{j+1} = U_{j+1} X_j$ and $P_{j-1} = U_j^\dagger P_j$), the computational cost of computing the final strings X_N and P_1 is the same as computing all the strings if one simply keeps intermediate results in memory. Thus, for the computational cost of a single forward-in-time evolution (calculation of X_N) and a single backward-in-time evolution (calculation of P_1) one can compute the performance index and all of its derivatives.

For concreteness, we summarize the GRAPE algorithm indicating, where appropriate, the computational cost of the step in brackets:

1. Choose initial vector of parameters $\{f_k(t_j)\}$.
2. Calculate and store in memory all propagators U_j [N matrix exponentials].
3. Starting from $X_0 = \mathbb{1}$, calculate and store in memory all forward propagator strings [N matrix products].
4. Starting from $P_N = V$ calculate and store in memory all backward propagator strings [N matrix products].
5. Calculate gradient of Φ with respect to $\{f_k(t_j)\}$ [$2pN$ matrix products].
6. Use gradient to update the parameter vector and return to step 2.

Steps 2-5 are the core of the GRAPE algorithm, while step 1 and 6 are general steps of any gradient-based optimization algorithm. One can see that all steps are at most linear in N . If one does not keep intermediate results in memory and computes each derivatives independently (as is usually the case in a finite-difference calculation), the complexity is $O(N^2)$. Thus, at the cost of an increased usage of memory, the GRAPE algorithm allows a polynomial speedup (in the number of timesteps) over a finite-difference approach.

Appendix B: RGF-based optimization

In this appendix, we give more details about the real-space optimization algorithm (which we name RGF-GRAPE) based on the RGF method. After stating the useful recursive relations and their derivatives, we expand on its relation to the GRAPE algorithm and its computational complexity.

1. Recursive relations

Following the notation set in Eq. (1), we consider a 1D tight-binding Hamiltonian with onsite terms h_j and nearest-neighbor hopping terms u_j . We assume there are M local degrees of freedom per site. As stated in Eq. (2), the RGF method [29] allows to write the retarded Green's function of the system, projected onto site j , as a function of the hybridization function $\Sigma_{j\pm 1}^{L(R)}$ which describes the influence on site j of the sites to the left (right). These hybridization functions are defined as

$$\Sigma_j^L = u_j G_j^L u_j^\dagger; \quad \Sigma_j^R = u_{j-1}^\dagger G_j^R u_{j-1}, \quad (\text{B1})$$

where $G_j^{L(R)}$ is the projection on site j of the Green's function of the system formed by site j and all sites to its left (right). The exact expressions for these Green's functions are obtained iteratively by using the following recursion relations (see e.g. Refs. [38, 55] for reviews):

$$\begin{aligned} G_j^L &= (E - h_j - \Sigma_{j-1}^L)^{-1} \\ G_j^R &= (E - h_j - \Sigma_{j+1}^R)^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{B2})$$

The initial left (right) lead hybridization function $\Sigma_{0(N+1)}^{L(R)}$, starting the recursion relation, can be calculated using the translation invariance of the lead defined by the sites $j \leq 0$ ($j \geq N+1$). Indeed, the translation symmetry in the semi-infinite leads implies the relations $\Sigma_{j \leq 0}^L = \Sigma_0^L$ and $\Sigma_{j > N}^R = \Sigma_{N+1}^R$. In our numerics, these lead hybridization functions are calculated using the KWANT numerical package [56].

Before considering derivatives of Green's functions and their use for efficient optimization, it is worth noting that, by itself, the RGF method has many similarities to the GRAPE algorithm. Indeed, both methods keep in memory intermediary results of recursive relations relating propagators to reduce computational complexity. The steps of the RGF algorithm for computing all lattice Green's functions G_j^{ret} , including complexity in brackets, are:

1. Compute Σ_0^L and Σ_{N+1}^R [Independent of N : $O(M^3)$].
2. Starting from Σ_0^L compute and store in memory all Σ_j^L [N matrix inversions, $2N$ matrix products: $O(NM^3)$].
3. Starting from Σ_{N+1}^R compute and store in memory all Σ_j^R [N matrix inversions, $2N$ matrix products: $O(NM^3)$].
4. Calculate all G_j^{ret} [N matrix inversions: $O(NM^3)$].

Steps 2-4 of this algorithm are analogue to steps 3-5 of the GRAPE algorithm stated in Sec. A, where the time-domain propagators have been replaced by real-space lattice Green's functions. To make even clearer the analogy between the RGF method and GRAPE, one can restate

the recursive relations of Eq. (B2) as a string of enlarged matrix products using properties of the so-called Möbius transformation [57].

Finally, from a computational complexity point-of-view, by keeping in memory all the hybridization functions Σ_j^L, Σ_j^R , one can compute with complexity $O(NM^3)$ all onsite lattice Green's functions. This is a polynomial speedup over a naive inversion of the full Hamiltonian, which is an $O(N^3M^3)$ calculation. Such a speedup is possible due the nearest-neighbor hopping structure of the problem, which leads to a block-tridiagonal matrix representation of the single-particle Hamiltonian.

2. Derivatives of the RGF expressions

Taking the onsite Hamiltonian to be $h_j = h_j^{(0)} + \lambda_j A$, with A some local operator [58], we now calculate the derivative of the lattice Green's function at site j with respect to a local parameter of a possibly different site λ_n . Using standard matrix algebra, this derivative is

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_n} G_j^{\text{ret}}(E) = G_j^{\text{ret}} \left[\delta_{n,j} A + \frac{\partial}{\partial \lambda_n} (\Sigma_{j-1}^L + \Sigma_{j+1}^R) \right] G_j^{\text{ret}}, \quad (\text{B3})$$

which can be expanded using the definition of the left and right hybridization functions. These derivatives are given by

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_n} \Sigma_j^L = u_j G_j^L \left[\delta_{n,j} A + \frac{\partial}{\partial \lambda_n} \Sigma_{j-1}^L \right] G_j^L u_j^\dagger; \quad (\text{B4})$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_n} \Sigma_j^R = u_{j-1}^\dagger G_j^R \left[\delta_{n,j} A + \frac{\partial}{\partial \lambda_n} \Sigma_{j+1}^R \right] G_j^R u_{j-1}. \quad (\text{B5})$$

In order to implement these expressions in a computer program, it is useful to rewrite them as

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_n} \Sigma_j^L = \Theta(j-n) (u_j G_j^L) (u_{j-1} G_{j-1}^L) \cdots \times (u_n G_n^L) A (G_n^L u_n^\dagger) \cdots (G_{j-1}^L u_{j-1}^\dagger) (G_j^L u_j^\dagger), \quad (\text{B6})$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_n} \Sigma_j^R = \Theta(n-j) (u_{j-1}^\dagger G_j^R) (u_j^\dagger G_{j+1}^R) \cdots \times (u_{n-1}^\dagger G_n^R) A (G_n^R u_{n-1}) \cdots (G_{j-1}^R u_{j-2}) (G_j^R u_{j-1}), \quad (\text{B7})$$

where Θ is the Heaviside function with $\Theta(j \geq 0) = 1$. By analogy to the GRAPE algorithm, we now define strings of propagators, such that derivatives can be simply expressed as

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda_n} \Sigma_j^L &= \Theta(j-n) X_{j,n}^L \frac{\partial h_n}{\partial \lambda_n} P_{j,n}^L; \\ \frac{\partial}{\partial \lambda_n} \Sigma_j^R &= \Theta(n-j) X_{j,n}^R \frac{\partial h_n}{\partial \lambda_n} P_{j,n}^R, \end{aligned} \quad (\text{B8})$$

where $\frac{\partial h_n}{\partial \lambda_n} = A$ and the Heaviside function is used to make explicit that, by definition, a left (right) hybridization function can not have a nonzero derivative with respect to a parameter to its right (left). The explicit definitions of the propagator strings in recursive form are

$$\begin{aligned} X_{j,n}^L &= (u_j G_j^L) (u_{j-1} G_{j-1}^L) \cdots (u_n G_n^L) \\ &= X_{j,n+1}^L (u_n G_n^L) \\ P_{j,n}^L &= (G_n^L u_n^\dagger) \cdots (G_{j-1}^L u_{j-1}^\dagger) (G_j^L u_j^\dagger) \\ &= (G_n^L u_n^\dagger) P_{j,n+1}^L \\ X_{j,n}^R &= (u_{j-1}^\dagger G_j^R) (u_j^\dagger G_{j+1}^R) \cdots (u_{n-1}^\dagger G_n^R) \\ &= X_{j,n-1}^R (u_{n-1}^\dagger G_n^R) \\ P_{j,n}^R &= (G_n^R u_{n-1}) \cdots (G_{j-1}^R u_{j-2}) (G_j^R u_{j-1}) \\ &= (G_n^R u_{n-1}) P_{j,n-1}^R. \end{aligned} \quad (\text{B9})$$

Similar recursive definitions can also be written for the j index.

3. RGF-based real-space optimization

Using the results of the previous subsections, one can now build an algorithm similar to GRAPE for the calculation of the derivative of lattice Green's functions with respect to the real-space profile of parameters. To make the analogy to GRAPE clearer, we first consider a performance index which depends only on a single Green's function. For example, when considering the Majorana wire optimization, this would be the case if close to the topological phase transition one considers directly the topological visibility as a performance index such that $\Phi = -\det(r) = -F[G_0^{\text{ret}}]$, with G_0^{ret} the Green's function projected on site 0, and F a function defined in App. C1.

The RGF-GRAPE optimization algorithm can be summarized in a way very similar to the GRAPE algorithm. As in the previous sections, we state the main steps of the algorithm and their respective computational complexity:

1. Choose initial vector of parameters $\{f_{k,j}\}$.
2. Calculate G_j^{ret} using the RGF method and storing all $G_j^{L(R)}$ in memory [$O(NM^3)$].
3. Starting from $X_{j,j}^L = u_j G_j^L$, calculate $X_{j,1}^L$ storing intermediate results in memory ($X_{j,j-1}^L, X_{j,j-2}^L, \dots$). Similarly compute the strings of propagators for $P_{j,n}^L, X_{j,n}^R$, and $P_{j,n}^R$. [Calculating all strings requires $4N$ matrix products: $O(NM^3)$].
4. Compute derivatives using Eqs. (B8) and (B3).
5. Use gradient to update the parameter vector and restart to step 2.

Comparing the GRAPE algorithm stated in App. A, one can see that the structure of the gradient calculation performed in steps 2-4 is very similar. This similarity extends to the computational complexity, such that the derivative of a lattice Green's function at a given site j (fixed) with respect to parameters on each site ($n = 1, \dots, N$) scales linearly with the number of sites in the scattering region. More precisely, it is the same as the RGF calculation: $O(NM^3)$. In the case of a finite-difference calculation, where one would perform the RGF calculation N times in order to vary each parameter to be optimized, the complexity would be $O(N^2M^3)$. Thus, by using the above algorithm, one obtains a polynomial speedup over finite differences.

If we now extend the above algorithm to a more general performance index, which requires the derivative of lattice Green's functions at all sites, the complexity becomes $O(N^2M^3)$ (i.e., the same as for finite-difference). This is a consequence of the fact that, in that most general case, we need to vary both indices of the propagator strings defined in Eq. (B9), which requires more matrix products. In the GRAPE analogy, this would be equivalent to having a performance index that depends on the propagator at multiple times.

Below, we consider in more detail the case of the LDOS-based performance index defined in Sec. III A for the study of Majorana wires. This index depends on multiple Green's functions belonging to different sites. Nevertheless, by exploiting the structure of the performance index, the computational complexity of the gradient calculation can be made linear in N .

Appendix C: Performance index implementation

In this appendix, we expand on the implementation of the LDOS-based performance index for Majorana wire optimization defined in Eq. (6). We first state the Fisher-Lee relations used to relate the calculation of the topological visibility to lattice Green's functions. Then, we discuss how to efficiently implement the gradient of the effective gaps defined in Eq. (5). Finally, we verify numerically the complexity of various gradient calculations.

1. Fisher-Lee relations and the topological visibility

The scattering matrix can be obtained from the Green's function using the Fisher-Lee relations generalized to account for the presence of a magnetic field [37]. Following the notation of Ref. [38], in the case of a scattering region of N sites (site index $j = 1, \dots, N$) connected to a lead to the left (L) at site 0 and to a lead to the right (R) at site $N + 1$, the matrix elements of the left reflection matrix r^L are given by

$$r_{mn}^L = \tilde{\phi}_{m,\text{out}}^{L\dagger} \Gamma_L [iG_0^{\text{ret}} \Gamma_L - \mathbb{1}] \tilde{\phi}_{n,\text{in}}^L, \quad (\text{C1})$$

with $\tilde{\phi}_{m,\alpha}^{(l)} = \phi_{m,\alpha}^{(l)} / \sqrt{\hbar v_{m,\alpha}}$ the current normalized wavefunctions of propagating modes m in lead l with mode velocity $v_{m,\alpha}$, and $\Gamma_L = i [\Sigma_0^L - (\Sigma_0^L)^\dagger]$ the skew-hermitian part of the surface self-energy of the first site of the left lead. A similar expression for r_{mn}^R can be obtained under the index changes $L \leftrightarrow R$ and $0 \leftrightarrow N + 1$. To lighten the notation, the energy dependence of $\phi_{m,\alpha}^L$, Γ_L and G_0^{ret} has been suppressed.

The calculation of the Majorana wire performance index as defined in both Eq. (3) and Eq. (6) requires the calculation of the zero-energy reflection matrices r^L and r^R . These matrices are necessary to calculate the topological visibility $Q_\alpha = \det r^\alpha$ ($\alpha = L, R$). For the numerical implementation of the gradient calculation, the derivative of the topological visibility is then computed using

$$\frac{\partial Q_\alpha}{\partial f_{k,n}} = Q_\alpha \text{Tr} \left[(r^\alpha)^{-1} \frac{\partial r^\alpha}{\partial f_{k,n}} \right], \quad (\text{C2})$$

which follows from Jacobi's formula. This expression can be related to the derivative of a Green's function using Eq. (C1) and noting that all lead quantities are independent of $f_{k,n}$. As this quantity depends on a single Green's function, the computational cost of the gradient of the topological visibility scales linearly with the length of the scattering region.

2. Majorana performance index derivatives

We now turn to the computation of the effective gaps defined in Eq. (5). As ρ_j , the zero-energy LDOS at site j , depends linearly on the retarded lattice Green's function G_j^{ret} , one can use the RGF method to compute the effective gap $\tilde{\Delta}_{L(R)}$ efficiently [complexity $O(NM^3)$]. Since these gaps depend on ρ_j on multiple sites, the computational complexity of the derivatives is *a priori* not obvious. Hence, we look in more detail at the calculation of the effective gap for the left-half of the system ($\tilde{\Delta}_L$). By symmetry, the complexity analysis will be equally valid for the right-half ($\tilde{\Delta}_R$).

The derivative of $\tilde{\Delta}_L$ with respect to some local on-site parameter λ_n is straightforward to calculate and given by

$$\frac{\partial \tilde{\Delta}_L}{\partial \lambda_n} = \frac{2\tilde{\Delta}_L^2}{N\mathcal{N}_L} \sum_{j=1}^{N/2} (\langle x_L \rangle - j) \frac{\partial \rho_j}{\partial \lambda_n}. \quad (\text{C3})$$

Using the definition of ρ_j (cf. below Eq. (4)), the preceding equation can be rewritten as a sum over derivatives of Green's function

$$\frac{\partial \tilde{\Delta}_L}{\partial \lambda_n} = \frac{\tilde{\Delta}_L^2}{N\pi\mathcal{N}_L} \text{Im} \left\{ \text{Tr} \left[\sum_{j=1}^{N/2} (j - \langle x_L \rangle) \frac{\partial G_j^{\text{ret}}}{\partial \lambda_n} \right] \right\}. \quad (\text{C4})$$

To lighten the notation and to make the analysis more general, we consider the efficient computation of the sum

$$S_n = \text{Tr} \left[\sum_{j=1}^N \gamma_j \frac{\partial G_j^{\text{ret}}}{\partial \lambda_n} \right], \quad (\text{C5})$$

where any other bounds on the values of j , such as in Eq. (C4), can be implemented through the definition of γ_j . Using Eq. (B3), the sum can be written as

$$S_n = \text{Tr} \left[\sum_{j=1}^{n-1} \gamma_j G_j^{\text{ret}} \frac{\partial \Sigma_{j+1}^R}{\partial \lambda_n} G_j^{\text{ret}} \right] + \text{Tr} [\gamma_n G_n^{\text{ret}} A G_n^{\text{ret}}] \\ + \text{Tr} \left[\sum_{j=n+1}^N \gamma_j G_j^{\text{ret}} \frac{\partial \Sigma_{j-1}^L}{\partial \lambda_n} G_j^{\text{ret}} \right], \quad (\text{C6})$$

where the bounds of the sums follow from the Heaviside function in Eq. (B8). Considering each of these three terms separately, such that $S_n = S_n^R + S_n^0 + S_n^L$, and using the cyclic and linearity properties of the trace, one obtains

$$S_n^R = \text{Tr} [M_n^R A]; \quad (\text{C7})$$

$$S_n^0 = \text{Tr} [\gamma_n (G_n^{\text{ret}})^2 A]; \quad (\text{C8})$$

$$S_n^L = \text{Tr} [M_n^L A], \quad (\text{C9})$$

where, using Eq. (B8), we have defined the matrices

$$M_n^R = \sum_{j=1}^{n-1} P_{j+1,n}^R [\gamma_j (G_j^{\text{ret}})^2] X_{j+1,n}^R, \quad (\text{C10})$$

$$M_n^L = \sum_{j=n+1}^N P_{j-1,n}^L [\gamma_j (G_j^{\text{ret}})^2] X_{j-1,n}^L. \quad (\text{C11})$$

Finally, using the definitions of the propagator strings in Eq. (B9), one notes the recursive relations

$$M_{n-1}^L = G_{n-1}^L u_{n-1}^\dagger \left[M_n^L + \gamma_n (G_n^{\text{ret}})^2 \right] u_{n-1} G_{n-1}^L; \\ M_{n+1}^R = G_{n+1}^R u_n \left[M_n^R + \gamma_n (G_n^{\text{ret}})^2 \right] u_n^\dagger G_{n+1}^R, \quad (\text{C12})$$

with boundary conditions $M_N^L = 0$, and $M_1^R = 0$. Since each recursion step requires a constant small number of matrix operations, calculating all the matrices M_n^L and M_n^R , and thus the sum S_n for all n , will have a computational complexity of $O(NM^3)$. This is again a polynomial speedup over the $O(N^2M^3)$ complexity that would be expected from a direct calculation of Eq. (C4) independently for each value of the index n . Since the essential element allowing this polynomial speedup is the cyclic property of the trace, this result is valid for any sum over the LDOS at different sites. Going back to the analogy with the GRAPE algorithm, our result for a space integral has the same structure as the efficient calculation of a performance index that includes a time integral [59].

3. Performance of implementations

To conclude this section, we supplement the previous algorithmic complexity analysis with a numerical comparison of different algorithms. As a performance benchmark we define T_N , the average time used to compute the performance index and its gradient using a single core of a standard desktop computer. To this end, we have optimized a fixed amplitude magnetic texture in a wire without intrinsic spin-orbit coupling, using different implementations of the performance index and its gradient. The texture amplitude along the z -axis is fixed such that the size of the optimization problem considered is N . The average computation time has been obtained by dividing the total simulation time by the number of performance index evaluations carried out (~ 200). The optimization is driven by an implementation of the Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) algorithm, where the performance index and its gradient are always computed together [60].

Since different methods can be implemented more or less efficiently, depending on computational details such as the programming language, one should not focus much on the absolute values of T_N , but mainly on its scaling with N , the number of sites in the scattering region. To this end, one can consider this scaling quantitatively using a power-law fit to the numerical data such that

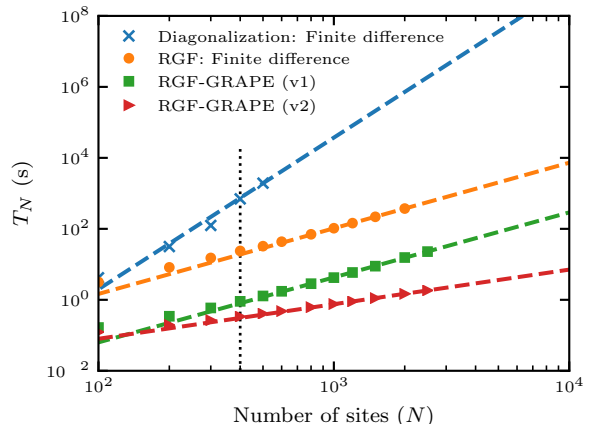


FIG. 6. Average duration T_N (in seconds) for the calculation of the performance index and its gradient, as a function of the length of the Majorana wire. The performance index is calculated using either the topological minigap (blue crosses) or the effective p -wave gap. The latter is evaluated in three different ways: (i) using the finite difference gradient (orange disks); (ii) using Eq. (C4) independently for each site index (green squares); (iii) using the recursive relation from Eq. (C12) (red triangles). The last method is clearly the most efficient. Dashed lines are power-law fits to the numerical data (see text). The dotted black vertical line indicates $N = 400$, used in most of our calculations. The numerical parameters in the simulations are $\Delta = 0.0225t$, $b = 4\Delta/3$, $\mathbf{B}_0 = 0$ (see Appendix D for more details on the model Hamiltonian).

$T_N \propto N^\xi$. The exponent ξ should then be compared to the expected complexity [61].

Figure 6 compares T_N for 4 algorithms and performance indices as a function of N . For each method, the dashed curve is the result of a power-law fit. The blue crosses are computing times for the optimization of the Majorana performance index $\Phi' = -\delta_E Q_L$ (used in Appendix G), where the minigap δ_E is obtained through diagonalization of the isolated superconducting region Hamiltonian and the gradient is computed using finite difference [62]. The three other datasets are computing times for the effective performance index, Eq. (6), where we use the RGF method to compute the performance index. Three different methods were used to compute the gradient of the performance index : (i) finite difference (orange disks), (ii) Eq. (C4) independently for each site index (green squares, labeled RGF-GRAPe v1), and (iii) the recursive relations of Eq. (C12) (red triangles, labeled RGF-GRAPe v2). These three gradient calculation methods lead to the same gradient up to numerical precision.

We now turn to the fit results. In the case of the diagonalization, we extract the exponent $\xi \approx 4.27$, which is close to the expected complexity $O(N^4)$ [63]. For the RGF-based calculations, all obtained exponents are below 2 (respectively $\xi \approx 1.85, 1.83$, and 0.98), showing that, independent of the details of the implementation of the gradient there is a clear advantage from the computational point-of-view to consider the effective gap instead of the minigap. In addition, these exponents are in agreement with the complexity analysis of Sec. B3, which stated that the calculation of the gradient of a sum over N sites should be at worst $O(N^2)$. Finally, we note that the use of the recursion relations of Eq. (C12) allows to reach a linear complexity, which is a polynomial speedup over finite difference.

Finally, to put these results into perspective, one can also look at the actual computation times for the different methods. As an example, for $N = 400$ (dotted black vertical line) the calculation times of the performance index and its gradient are $T_N = 0.34, 0.91, 23$, and 700 s. Although one should use caution when interpreting such results, since absolute timings are implementation-dependent, these numbers help to put in perspective the concrete advantage of reducing the complexity of the gradient calculation. Indeed, in the context of an optimization algorithm, which requires to repeat this calculation hundreds if not thousands of times, a speedup of the gradient calculation allows, for a fixed computation time, to consider either more realistic wire models, or more sophisticated optimization algorithms that get closer to a global maximum.

Appendix D: Nanowire model and parameters

Following the notation of Eq. (1), we consider in our calculations a noninteracting tight-binding model for a

unidimensional wire (single subband) with a superconducting scattering region of N sites ($j = 1, \dots, N$) coupled to semi-infinite metallic leads (sites $j = 0, -1, \dots$ for the left lead and sites $j = N + 1, N + 2, \dots$ for the right lead). In this case, the number of local degrees of freedom is $M = 4$, and the spinors are taken in a Bogoliubov-de Gennes basis such that

$$\psi_j^\dagger = \left(c_{j,\uparrow}^\dagger, c_{j,\downarrow}^\dagger, -c_{j,\downarrow}, c_{j,\uparrow} \right), \quad (\text{D1})$$

with $c_{j,\sigma}^{(\dagger)}$, an operator annihilating (creating) a fermion at site j with spin σ . Denoting τ_α (σ_α) the Pauli matrices acting on the particle-hole (spin) sectors, the structure of the hopping matrices is

$$u_j = -t\tau_z - i\alpha\sigma_y\tau_z, \quad (\text{D2})$$

where $t = \hbar^2/2m^*a^2$ is the hopping amplitude with m^* the effective mass and a the lattice constant, and α is the spin-orbit coupling amplitude. The onsite Hamiltonian reads

$$h_j = (2t - \mu_j)\tau_z + (\mathbf{B}_0 + \mathbf{b}_j) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \Delta_j\tau_x, \quad (\text{D3})$$

where μ_j is the effective local potential including both the local electrostatic gate voltage and the chemical potential, Δ_j is the local proximity-induced superconducting gap, \mathbf{B}_0 is a uniform magnetic field, and \mathbf{b}_j is a possibly non-uniform local magnetic field. All prefactors relating the magnetic field to the Zeeman energy, including the g -factor, are absorbed in the definitions of \mathbf{B}_0 and \mathbf{b}_j .

Unless otherwise stated, in all numerics, we consider approximate parameters for a semiconductor with negligible intrinsic spin-orbit coupling ($\alpha = 0$) [64]. We take a lattice constant $a = 10$ nm ($N = 200$ then corresponds to a $2 \mu\text{m}$ long nanowire) and an effective mass $m^* = 0.2 m_e$, where m_e is the bare electron mass. Those parameters lead to a hopping amplitude $t = 1.9$ meV. Based on the experimentally observed proximity-induced superconductivity in a GaAs two-dimensional electron gas [65], we take $\Delta = 0.0225t$ ($43 \mu\text{eV}$). For a g -factor of 2, $|\mathbf{B}_0 + \mathbf{b}| = 4\Delta/3 \approx 0.03t$ corresponds to a magnetic field of 1 Tesla. In addition, we consider uniform metallic leads ($\Delta = 0$), with a large density of states ($\mu = 1.9t$) and strongly coupled to the superconducting region (no barrier at the interface). The same values of t , α and \mathbf{B}_0 are used in both the leads and the superconducting scattering region. The strong coupling to the leads was found to ensure a good convergence of the optimization algorithm. However, as illustrated by the results of diagonalization shown in the main text (see e.g. Fig 5(d)), which correspond to the regime of isolated wires, the final results appear to be robust with respect to the details of the lead couplings and parameters. Finally, to improve the numerical stability of recursive calculations, the zero-energy Green's functions are calculated at a small but finite imaginary energy $E/t = 10^{-6} i$.

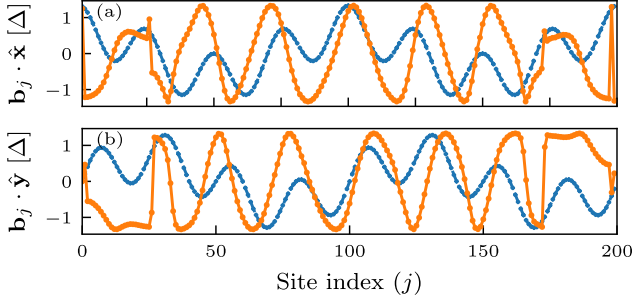


FIG. 7. (a) the x - and (b) the y -components of the initial (dashed blue) and the optimized (solid orange) magnetic textures without penalties for smoothness.

Appendix E: Regularization and parameter scaling

In order to favor smooth spatial profiles, penalty functions can be added to the performance index. We refer the reader to Ref. [66] and references therein for example penalties used in time-domain optimizations. In the case of a scalar quantity such as the electrostatic gate voltage, we add a penalty function

$$\Phi_\mu = -\beta_\mu \sum_{j=1}^{N-1} (\mu_j - \mu_{j+1})^2, \quad (\text{E1})$$

where $\beta_\mu > 0$ is a parameter that weights the cost of spatial variations in the gate voltage. A large weight will favor a flat voltage profile independently of the problem.

This type of penalty can be generalized to a vector profile. In the case of the fixed amplitude magnetic texture, we use the penalty

$$\Phi_b = \beta_b \sum_{j=1}^{N-1} \left[\hat{\mathbf{b}}_j \cdot \hat{\mathbf{b}}_{j+1} - 1 \right], \quad (\text{E2})$$

where $\hat{\mathbf{b}}_j = \mathbf{b}_j / |\mathbf{b}_j|$ is a unit vector and $\beta_b > 0$ is again a weight factor for the penalty. This penalty will favor a smooth and uniform magnetic texture, which should be more easily realizable experimentally.

In the case of an optimization involving parameters with different units or scales, it can be useful to introduce a scaling parameter w in order to control the relative weight of the different types of parameters in the gradient descent. In particular, in the case of Fig. 4 where the orientation of a fixed amplitude magnetic texture and a uniform chemical potential are optimized, a parameter w_μ is introduced in order to reduce the relative weight of the chemical potential in the optimization. This was found to reduce the risk of the optimizer (BFGS) declaring convergence too quickly following a large reduction of the gradient of the performance index with respect to only the chemical potential, without much change in the magnetic texture.

The optimal value of the heuristic parameters β and w depends on the details of the problem. Since these

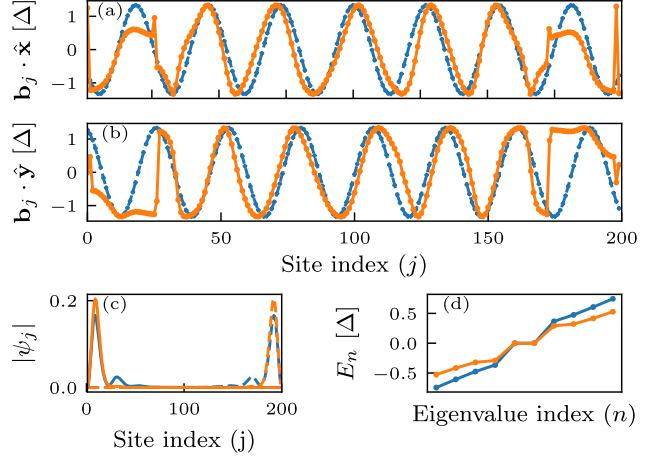


FIG. 8. (a) the x - and (b) the y -components for the optimized (solid orange) magnetic textures. Dashed blue curves are a spiral texture obtained by a harmonic fit to the x -component of the optimized texture. (c) Wavefunction amplitude for the left and right MBS (solid and dashed curves, respectively). (d) Spectrum of the isolated superconducting scattering region close to zero energy. For all panels, the orange curves are results for the optimized texture, while the blue curves are results for a perfect spiral texture fitted to the optimized texture.

are not known, it is useful to perform the optimization for a few different values. In particular, the results of Fig. 4 are obtained by considering the solution with the largest minigap δ_E out of 8 optimizations. These 8 runs of the algorithm, all starting from the same initial spiral magnetic texture, differed by the choice of the optimization parameters β_b and w_μ which were taken to be the possible combinations of $w_\mu \in \{10^{-2}, 10^{-4}\}$ and $\beta_b \in \{0.01, 0.1, 0.5, 1\}$. Due to the variation of the problem landscape and the performance index amplitude, different parameters performed better in some regions of the (B_0, b) parameter space than others. These values were found sufficient to obtain improved MBS characteristics compared to the initial configuration in all region of parameter space.

Appendix F: Proof of principle for the optimization algorithm and the role of boundaries

In this appendix, we expand on the optimization results presented as a proof of concept in Fig. 2c. For this optimization, we consider a superconducting nanowire with $N = 200$ sites, with neither intrinsic spin-orbit interaction ($\alpha = 0$) nor external magnetic field ($\mathbf{B}_0 = 0$). We optimize both the local amplitude and orientation of a magnetic texture (with the constraints $b_j \leq 0.03t = 4\Delta/3$ and $\mathbf{b}_j \cdot \hat{\mathbf{z}} = 0$). No penalties for smoothness are added ($\beta_b = 0$). In addition, we optimize the chemical potential in the superconducting region (though we

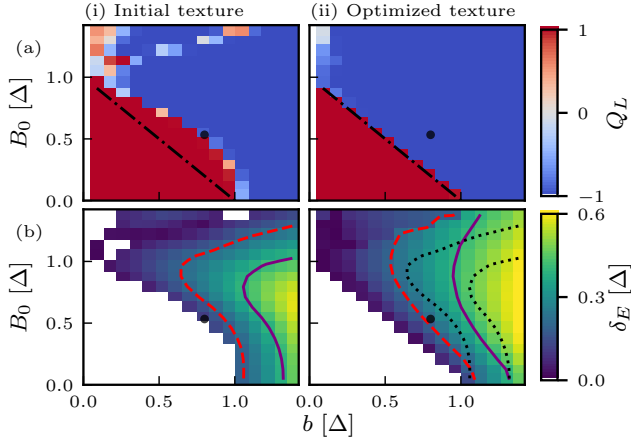


FIG. 9. (a,b) Topological visibility in a nanowire without spin-orbit coupling. (a) Initial spiral magnetic texture. (b) Magnetic textures optimized using Eq. (G1). (c,d) Energy minigap δ_E . (c) Initial spiral magnetic texture. (d) Optimized magnetic texture. Purple dashed (solid green) curves denote minigaps $\delta_E = 100(200)$ mK. Dotted black contours are a copy of the contours for the initial spiral texture (panel to the left). The dot-dashed black line indicates $B_0 + b = \Delta$, the expected minimal Zeeman energy to reach the topological phase.

restrict ourselves to a spatially uniform chemical potential).

Figure 7 compares the initial magnetic texture to the optimized result. Starting from an initial texture consisting of a sum of two spirals of different periods, the optimization converges to a solution which is spiral-like in the bulk (panels a and b), with a uniform amplitude $b_j = 4\Delta/3$ (the maximal value allowed by the imposed constraints). As shown in Fig. 2c, the system is initially in the trivial phase and the optimization drives the parameters through a topological phase transition. It is worth noting that the optimization naturally finds a smooth solution in the bulk even though no penalties were used in this optimization. By introducing such a penalty, discontinuities near the boundary can be reduced (not shown).

In order to better understand the role of the boundaries of the optimized texture, we fit the x -component of the optimized magnetic texture to an harmonic function $\mathbf{b}_j \cdot \hat{\mathbf{x}} = A \cos(2\pi j/R + \phi)$ (with fit parameters A , R and ϕ). Fig. 8 compares the optimized texture to a spiral texture built from the fit result. One can see that, while the spiral texture has a larger minigap (0.37Δ compared to 0.29Δ), the MBS in the case of the optimized texture is more localized. This smaller localization length leads to a reduced overlap of the Majorana wavefunctions and thus to a reduced zero-mode splitting from $\epsilon_M = 1 \times 10^{-3}$ to $\epsilon_M = 2 \times 10^{-5}$.

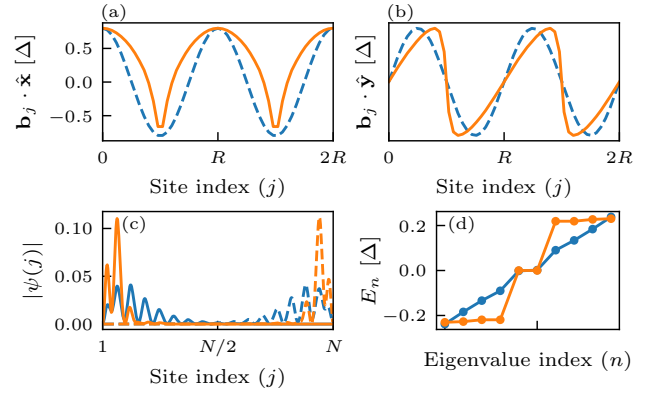


FIG. 10. Non-optimized (spiral, dashed blue) and optimized (solid orange) curves for (a) the x - and (b) the y -components of the magnetic texture. Optimization was performed for a fixed amplitude texture $|\mathbf{b}_j| = 0.018t = 4\Delta/5$ and a uniform magnetic field $\mathbf{B}_0/t = 0.012 \hat{\mathbf{x}}$ (black dot in Fig. 9). (c) Solid (dashed) curves indicate the left (right) MBS' wavefunctions. For all panels, blue curves are the results for the initial spiral texture, while the orange curves are the results for the optimized texture. (d) Spectrum of the isolated superconducting scattering region close to zero energy.

Appendix G: Maximizing the topological minigap

As a complement to the results of Sec. III D, we consider the same magnetic texture optimization, but using the performance index

$$\Phi' = -\delta_E Q_L, \quad (\text{G1})$$

where δ_E is the minigap obtained by diagonalization of the single-particle Hamiltonian [67].

Figure 9 presents optimization results for a grid of points in the (B_0, b) parameter space. Panel (a) compares the topological visibility for an initial spiral texture (column (i)) to an optimized texture (column (ii)). As for Fig. 4, where the more numerically efficient performance index $\tilde{\Phi}$ is optimized, the area of the topological (blue) region of parameter space increases for the optimized texture. For both performance indices, the optimization leads to the topological phase almost independently of the position in parameter space, as long as the total Zeeman energy $B_0 + b$ is larger than the superconducting gap Δ . Panel (b) presents the minigap δ_E in the topological phase. Similarly to the optimization of $\tilde{\Phi}$ in Fig 4, the direct optimization of the minigap leads to constant gap contours enclosing a larger area of parameter space for the topological phase.

Finally, we compare the optimization results for a point in parameter space (corresponding to the black disks in Fig. 9). Figure 10(a,b) shows the components of the optimized magnetic texture for two periods (solid orange curve) and compares them to the initial spiral texture (dashed blue curve). Figure 10(c,d) displays both the MBS' wavefunction (panel c) and the spectrum for the

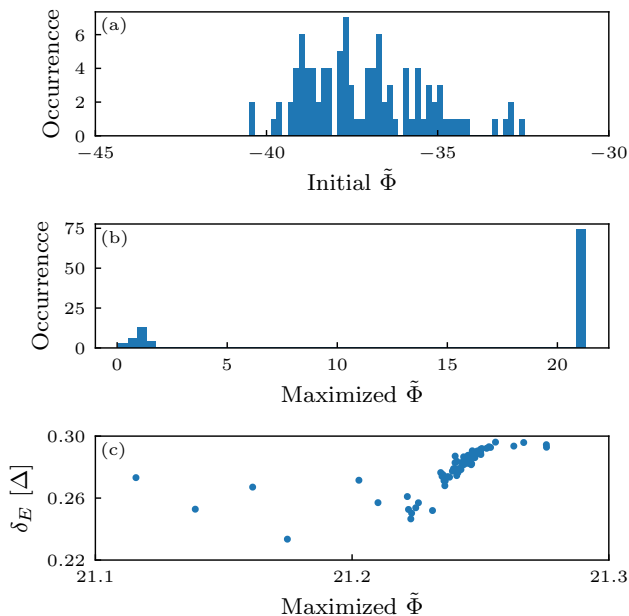


FIG. 11. Statistics of convergence of the RGF-GRAPE algorithm for the optimization of a fixed amplitude magnetic texture starting from 100 different random texture realizations (see text). (a) Distribution of the initial value of the performance index. (b) Distribution of the final value of the performance index after running the BFGS optimization algorithm until convergence. (c) Scatter plot of the bulk gap (obtained through diagonalization) as a function of the final (maximized) value of the performance index. A uniform chemical potential in the wire is also optimized (initial value $\mu = 10^{-3}t$, $w_\mu = 10^{-3}$). The numerical parameters in the simulations are $N = 200$, $b = 4\Delta/3$, $\Delta = 0.0225t$, $B_0 = \alpha = \beta_b = 0$.

superconducting region decoupled from the leads (panel d). The optimization leads to both an increased minigap and enhanced energy degeneracy between the left and right MBS. These optimization results are equivalent to the results obtained by the optimization of $\tilde{\Phi}$ presented

in Fig. 5. Hence, similar results to the numerically costly exact optimization of the topological minigap can be obtained using the LDOS-based effective performance index $\tilde{\Phi}$ presented in Sec. III.

Appendix H: Convergence statistics

In this appendix, we present additional data related to the convergence of the RGF-GRAPE algorithm and the bulk gap of the optimization results. To this end, we performed 100 optimizations each starting from a different realization of a fixed-amplitude random magnetic texture. In each realization, the magnetic field at site j is $\mathbf{b}_j(\theta_j, \phi_j) = b(\sin \theta_j \cos \phi_j \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta_j \sin \phi_j \hat{\mathbf{y}} + \cos \theta_j \hat{\mathbf{z}})$, where ϕ_j and θ_j are uncorrelated random variables taken from a uniform distribution of width 2π respectively centered around 0 and $\pi/2$.

Figure 11(a) presents the distribution of the initial value of the performance index. The negative values indicate that all initial textures are in the trivial phase. Panel (b) shows the distribution of the final performance index after performing an optimization using the BFGS algorithm where the gradient of $\tilde{\Phi}$ was calculated at each iteration using RGF-GRAPE. For 26 occurrences the optimization converged to a solution near the topological phase transition ($|\tilde{\Phi}| < 2$), where the performance index value is dominated by the topological visibility. In the remaining 74 cases the optimization converged deep in the topological phase. For these occurrences, panel (c) shows a scatter plot of the resulting bulk gap where we can see a relation between the value of the performance index and the bulk gap. For the 26 cases with $|\tilde{\Phi}| < 2$, the failure to find solutions deep in the topological phase might be explained by the presence of local minima in the high-dimensional optimization space. This standard problem of optimization can be solved by using standard methods of global optimization such as the basin hopping method.

[1] For recent experiments, see e.g. V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. Plissard, E. Bakkers, and L. Kouwenhoven, *Science* **336**, 1003 (2012); M. T. Deng, S. Vaitiekėnas, E. B. Hansen, J. Danon, M. Leijnse, K. Flensberg, J. Nygård, P. Krogstrup, and C. M. Marcus, *ibid.* **354**, 1557 (2016); J. Chen, P. Yu, J. Stenger, M. Hovevar, D. Car, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, T. D. Stanescu, and S. M. Frolov, *Science Advances* **3**, e1701476 (2017); H. Zhang, C.-X. Liu, S. Gazibegovic, D. Xu, J. A. Logan, G. Wang, N. van Loo, J. D. S. Bommer, M. W. A. de Moor, D. Car, R. L. M. Op het Veld, P. J. van Veldhoven, S. Koelling, M. A. Verheijen, M. Pendharkar, D. J. Pennachio, B. Shojaei, J. S. Lee, C. J. Palmstrøm, E. P. A. M. Bakkers, S. D. Sarma, and L. P. Kouwenhoven, *Nature* **556**, 74 (2018).

[2] A. Y. Kitaev, *Physics-Uspekhi* **44**, 131 (2001).
 [3] Y. Oreg, G. Refael, and F. von Oppen, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 177002 (2010).
 [4] For reviews, see e.g. F. Pientka, Y. Peng, L. Glazman, and F. von Oppen, *Physica Scripta* **2015**, 014008 (2015); J. Alicea, *Reports on Progress in Physics* **75**, 076501 (2012); C. Beenakker, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **4**, 113 (2013); R. Aguado, *La Rivista del Nuovo Cimento* **40**, 523–593 (2017).
 [5] R. Lutchyn, E. Bakkers, L. Kouwenhoven, P. Krogstrup, C. Marcus, and Y. Oreg, *Nature Reviews Materials* **3**, 52 (2018).
 [6] T.-P. Choy, J. M. Edge, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. B* **84**, 195442 (2011).
 [7] S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, B. A. Bernevig, and

- A. Yazdani, *Phys. Rev. B* **88**, 020407 (2013).
- [8] M. Kjaergaard, K. Wölms, and K. Flensberg, *Phys. Rev. B* **85**, 020503 (2012).
- [9] See e.g. S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, J. Li, H. Chen, S. Jeon, J. Seo, A. H. MacDonald, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, *Science* **346**, 602 (2014); M. Ruby, F. Pientka, Y. Peng, F. von Oppen, B. W. Heinrich, and K. J. Franke, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 197204 (2015); R. Pawlak, M. Kisiel, J. Klinovaja, T. Meier, S. Kawai, T. Glatzel, D. Loss, and E. Meyer, *npj Quantum Information* **2**, 16035 (2016); M. Ruby, B. W. Heinrich, Y. Peng, F. von Oppen, and K. J. Franke, *Nano Letters* **17**, 4473 (2017).
- [10] J. Klinovaja, P. Stano, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 236801 (2012).
- [11] F. Pientka, L. I. Glazman, and F. von Oppen, *Phys. Rev. B* **88**, 155420 (2013).
- [12] D. Rainis, A. Saha, J. Klinovaja, L. Trifunovic, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 196803 (2014).
- [13] P. Marra and M. Cuoco, *Phys. Rev. B* **95**, 140504 (2017).
- [14] W. DeGottardi, D. Sen, and S. Vishveshwara, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 146404 (2013).
- [15] W. DeGottardi, M. Thakurathi, S. Vishveshwara, and D. Sen, *Phys. Rev. B* **88**, 165111 (2013).
- [16] M. Pérez and G. Martínez, *Journal of Physics: Condensed Matter* **29**, 475503 (2017).
- [17] S. Hoffman, J. Klinovaja, and D. Loss, *Phys. Rev. B* **93**, 165418 (2016).
- [18] M. Tezuka and N. Kawakami, *Phys. Rev. B* **85**, 140508 (2012).
- [19] K. Pöyhönen, A. Westström, J. Röntynen, and T. Ojanen, *Phys. Rev. B* **89**, 115109 (2014).
- [20] P. Zhang and F. Nori, *New Journal of Physics* **18**, 043033 (2016).
- [21] C. Moore, T. D. Stanescu, and S. Tewari, *Phys. Rev. B* **97**, 165302 (2018).
- [22] C.-X. Liu, J. D. Sau, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **97**, 214502 (2018).
- [23] S. Plugge, A. Rasmussen, R. Egger, and K. Flensberg, *New Journal of Physics* **19**, 012001 (2017).
- [24] T. Karzig, C. Knapp, R. M. Lutchyn, P. Bonderson, M. B. Hastings, C. Nayak, J. Alicea, K. Flensberg, S. Plugge, Y. Oreg, C. M. Marcus, and M. H. Freedman, *Phys. Rev. B* **95**, 235305 (2017).
- [25] C. Knapp, T. Karzig, R. M. Lutchyn, and C. Nayak, *Phys. Rev. B* **97**, 125404 (2018).
- [26] N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet, T. Schulte-Herbrüggen, and S. J. Glaser, *Journal of Magnetic Resonance* **172**, 296 (2005).
- [27] For reviews, see e.g. S. J. Glaser, U. Boscain, T. Calarco, C. P. Koch, W. Köckenberger, R. Kosloff, I. Kuprov, B. Luy, S. Schirmer, T. Schulte-Herbrüggen, D. Sugny, and F. K. Wilhelm, *The European Physical Journal D* **69**, 279 (2015); C. P. Koch, *Journal of Physics: Condensed Matter* **28**, 213001 (2016); C. Brif, R. Chakrabarti, and H. Rabitz, *New Journal of Physics* **12**, 075008 (2010).
- [28] See e.g. F. Motzoi, J. M. Gambetta, P. Rebentrost, and F. K. Wilhelm, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 110501 (2009); A. Rahmani, B. Seradjeh, and M. Franz, *Phys. Rev. B* **96**, 075158 (2017); G. Jäger, D. M. Reich, M. H. Gorerz, C. P. Koch, and U. Hohenester, *Phys. Rev. A* **90**, 033628 (2014).
- [29] D. J. Thouless and S. Kirkpatrick, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **14**, 235 (1981).
- [30] S. Das Sarma, A. Nag, and J. D. Sau, *Phys. Rev. B* **94**, 035143 (2016).
- [31] C.-K. Chiu, J. C. Y. Teo, A. P. Schnyder, and S. Ryu, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 035005 (2016).
- [32] A. R. Akhmerov, J. P. Dahlhaus, F. Hassler, M. Wimmer, and C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 057001 (2011).
- [33] I. C. Fulga, F. Hassler, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. B* **83**, 155429 (2011).
- [34] I. C. Fulga, F. Hassler, and A. R. Akhmerov, *Phys. Rev. B* **85**, 165409 (2012).
- [35] D. S. Fisher and P. A. Lee, *Phys. Rev. B* **23**, 6851 (1981).
- [36] A. D. Stone and A. Szafer, *IBM Journal of Research and Development* **32**, 384 (1988).
- [37] H. U. Baranger and A. D. Stone, *Phys. Rev. B* **40**, 8169 (1989).
- [38] M. Wimmer, *Quantum transport in nanostructures: From computational concepts to spintronics in graphene and magnetic tunnel junctions*, Ph.D. thesis, Universität Regensburg (2008).
- [39] A. C. Potter and P. A. Lee, *Phys. Rev. B* **83**, 184520 (2011).
- [40] A. R. Akhmerov, *Phys. Rev. B* **82**, 020509 (2010).
- [41] E. Prada, P. San-Jose, and R. Aguado, *Phys. Rev. B* **86**, 180503 (2012).
- [42] G. Kells, D. Meidan, and P. W. Brouwer, *Phys. Rev. B* **86**, 100503 (2012).
- [43] D. Bagrets and A. Altland, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 227005 (2012).
- [44] A. Vuik, D. Eeltink, A. R. Akhmerov, and M. Wimmer, *New Journal of Physics* **18**, 033013 (2016).
- [45] B. D. Woods, T. D. Stanescu, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **98**, 035428 (2018).
- [46] A. E. Antipov, A. Bargerbos, G. W. Winkler, B. Bauer, E. Rossi, and R. M. Lutchyn, *Phys. Rev. X* **8**, 031041 (2018).
- [47] A. E. G. Mikkelsen, P. Kotetes, P. Krogstrup, and K. Flensberg, *Phys. Rev. X* **8**, 031040 (2018).
- [48] S. Takei, B. M. Fregoso, H.-Y. Hui, A. M. Lobos, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 186803 (2013).
- [49] G. L. Fatim, A. Matos-Abiague, B. Scharf, and I. Žutić, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 077002 (2016).
- [50] L. N. Maurer, J. K. Gamble, L. Tracy, S. Eley, and T. M. Lu, ArXiv e-prints (2018), [arXiv:1801.03676](https://arxiv.org/abs/1801.03676) [cond-mat.mes-hall].
- [51] L. Pilozzi, F. A. Farrelly, G. Marcucci, and C. Conti, *Communications Physics* **1**, 57 (2018).
- [52] S. Boutin, J. Camirand Lemyre and I. Garate, "Majorana bound state engineering via efficient real-space parameter optimization," (2018), source code. [<http://doi.org/10.5281/zenodo.1486048>].
- [53] B. Rowland and J. A. Jones, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **370**, 4636 (2012).
- [54] As Φ is in general a complex number, the actual performance index should be $|\Phi|^2$ [53]. While important in practice, this distinction does not influence the description of the algorithm and the analysis of its computational complexity.
- [55] C. H. Lewenkopf and E. R. Mucciolo, *Journal of Computational Electronics* **12**, 203 (2013).
- [56] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, and X. Waintal, *New Journal of Physics* **16**, 063065 (2014).
- [57] A. Umerski, *Phys. Rev. B* **55**, 5266 (1997).

- [58] Although we consider here a site-independent operator, our calculation naturally extends to site-dependent local operators with $A \rightarrow A_j$.
- [59] S. Boutin, C. K. Andersen, J. Venkatraman, A. J. Ferris, and A. Blais, *Phys. Rev. A* **96**, 042315 (2017).
- [60] R. Fletcher, *Practical Methods of Optimization*, A Wiley-Interscience Publication (John Wiley & Sons, 2000); R. H. Byrd, P. Lu, J. Nocedal, and C. Zhu, *SIAM Journal on Scientific Computing* **16**, 1190 (1995).
- [61] As we consider a single subband nanowire, the number of local degree of freedoms is fixed to $M = 4$ in all calculations. Hence, contrary to previous sections, we do not consider the value of M in the complexity considerations. All methods considered should have a complexity $O(N^\xi M^3)$.
- [62] The minigap is defined as the lowest excitation energy of the Majorana wire decoupled from the leads. In the main text, we refer to it as the *topological gap* or simply the *energy gap*.
- [63] Matrix diagonalization is $O(N^3)$ and finite difference requires to perform N of them for the problem considered.
- [64] The exception is Fig. 3, where we take the parameters $\alpha = 0.05t$, $\Delta = 0.0225t$ and $\mathbf{B}_0/t = 0.027\mathbf{x}$.
- [65] Z. Wan, A. Kazakov, M. J. Manfra, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and L. P. Rokhinson, *Nature communications* **6**, 7426 (2015).
- [66] N. Leung, M. Abdelhafez, J. Koch, and D. Schuster, *Phys. Rev. A* **95**, 042318 (2017).
- [67] We consider again a scattering region of length $N = 400$, and constrain the optimization problem to textures with a periodicity of 25 sites and $\mathbf{b}_j \cdot \hat{\mathbf{z}} = 0$.

4.2 Publication 3

On reproduit dans cette section la publication

- S. Turcotte, **S. Boutin**, J. Camirand Lemyre, I. Garate et M. Pioro-Ladrière. *Optimized micromagnet geometries for Majorana modes in low g -factor materials*, Arxiv 1904.06275 (2019) [25].

Contexte et contribution

Fort des méthodes développées dans le cadre de la publication précédente, il est maintenant possible de répondre à la question à l'origine de ce projet de recherche. En particulier, la publication présentée dans cette section vise à déterminer s'il est possible de faire l'ingénierie d'états liés de Majorana dans un semiconducteur à faible couplage spin-orbite intrinsèque comme le silicium. La difficulté de ce problème est dû au fait que, contrairement aux semiconducteurs à fort couplage spin-orbite intrinsèque, le facteur g est faible dans les matériaux considérés. À titre d'exemple $g = 2$ dans le silicium, alors que $g \approx 8$ dans un nanofil d'arséniure d'indium.

Cette publication résulte d'un travail fortement collaboratif. J'ai adapté l'algorithme développé à la publication de la section 4.1 au contexte des microaimants et j'ai effectué les optimisations des différents paramètres à l'aide des conseils et de l'expertise de Julien Camirand Lemyre (JCL) sur les contraintes expérimentales et la fabrication de microaimants. Sara Turcotte (ST) a développé les outils numériques et effectué les simulations visant à comprendre la robustesse des solutions optimisées sous la supervision de JCL et moi-même. Tous les membres de l'équipe ont contribué à la discussion et à l'analyse des résultats. Le manuscrit a été écrit à part approximativement égales par ST, JCL et moi-même, avec les conseils, commentaires et révisions d'Ion Garate et Michel Pioro-Ladrière.

Optimized micromagnet geometries for Majorana zero modes in low g-factor materials

Sara Turcotte,^{1,*} Samuel Boutin,¹ Julien Camirand Lemyre,¹ Ion Garate,¹ and Michel Pioro-Ladrière^{1,2}

¹*Institut quantique et Département de physique, Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec J1K 2R1, Canada*

²*Canadian Institute for Advanced Research, Toronto, Ontario, Canada.*

(Dated: April 12, 2019)

Solid-state experimental realizations of Majorana bound states are based on materials with strong intrinsic spin-orbit interactions. In this work, we explore an alternative approach where spin-orbit coupling is induced artificially through a non-uniform magnetic field that originates from an array of micromagnets. Using a recently developed optimization algorithm, we find suitable micromagnet geometries for the emergence of topological superconductivity in a one-dimensional wire without intrinsic spin-orbit coupling. We confirm the robustness of Majorana bound states against micromagnet nanofabrication errors, and identify low g-factor materials commonly used in mesoscopic physics experiments as viable candidates for Majorana devices.

I. INTRODUCTION

Topologically protected states, such as Majorana zero modes, are envisioned as building blocks for hardware efficient quantum computation [1, 2]. One of the most promising implementations relies on semiconducting nanowires with strong spin-orbit coupling and proximity-induced superconductivity [3–5]. In this setup, a magnetic field can drive a topological phase transition, where Majorana bound states (MBS) emerge as localized states at the ends of the nanowire [6]. Recent experiments have shown increasingly convincing signatures of these modes in InAs [7, 8] and InSb [9–11] nanowires. But despite progress in growth techniques [5], scaling the nanowire approach to the two-dimensional networks needed for quantum computation remains a daunting task [12–14].

Motivated by the aforementioned difficulty, new top-down fabrication methods for InAs/Al heterostructures are under development [15–17]. Likewise, exploring other classes of planar materials could lead to new prospects for MBS-based devices. For example, the low disorder of GaAs/AlGaAs or Si/SiGe heterostructures could be beneficial for topological protection [18], and the well-established fabrication capabilities of materials such as silicon would be an asset for the development of complex devices [19]. Even though induced superconductivity was demonstrated in several of these low g-factor materials [20–22], the absence of a strong spin-orbit coupling hinders the possibility of a topologically protected phase. This lack of intrinsic spin-orbit coupling can be remedied with the help of an inhomogeneous magnetic texture [23], engineered by the use of magnetic adatoms [24], arrays of micromagnets [25, 26], magnetic domains [27], or magnetic tunnel junctions [28–30] placed in proximity to the wire. The latter was also proposed as an alternative approach for the braiding of MBS.

In this work, we focus on architectures in which magnetic textures are created by micromagnet arrays. Al-

though the idea of using magnetic textures for the engineering of topological phases is widely recognized [23–25, 31, 32], relatively little effort has been devoted towards modeling realistic magnet arrays and understanding the effect of non-helical magnetic fields on MBS [26, 28]. In addition, two important obstacles of the micromagnet approach have been largely overlooked. First, the small g-factors in semiconductors such as Si, Ge or GaAs/AlGaAs heterostructures limit the Zeeman energy and therefore make it more difficult to reach the topological phase. Second, this approach is subjected to an additional source of disorder due to the possible misplacement of micromagnets during nanofabrication.

The main objective of the present paper is to demonstrate that robust topological superconductivity can be engineered in low g-factor materials placed in proximity to realistic micromagnet arrays, with the crucial help of an automated process [33] that determines the optimal magnet arrangement. In Sec. II, we introduce the model describing the Majorana wire and review the method used to optimize the shape and position of the micromagnets. In Sec. III, we investigate three simple magnet geometries and assess their robustness against variations of tunable parameters such as the chemical potential and the external magnetic field. Section IV focuses on the impact of possible micromagnet misplacements arising during the fabrication process, and identifies geometries that are resilient to this additional disorder channel. Finally, in Sec. V we analyze the engineering of MBS in various low g-factor materials, and discuss the influence of micromagnets on wires with strong intrinsic spin-orbit coupling.

II. MODEL AND METHODS

A. Single-channel nanowire model

We consider a single-band nanowire of length L with proximity-induced s-wave superconductivity. This wire could be for example a genuine nanowire or the result of electrostatic gating in a two-dimensional electron gas

* sara.turcotte@usherbrooke.ca

(2DEG) formed at the interface of a semiconductor heterostructure. Below, we will mostly concentrate on the latter scenario.

The low energy physics of the wire is described by the Hamiltonian

$$H = H_0 + H_\Delta, \quad (1)$$

where

$$H_0 = \int_0^L dx \psi^\dagger(x) \mathcal{H}_0(x) \psi(x) \quad (2)$$

is the non-superconducting part, $\psi^{(\dagger)}(x)$ is a two-component spinor that annihilates (creates) an electron at position x , and

$$H_\Delta = \int_0^L dx \left[\Delta \psi_\uparrow^\dagger(x) \psi_\downarrow^\dagger(x) + h.c. \right] \quad (3)$$

is the superconducting part with the proximity-induced s-wave gap Δ . In Eq. (2), we have defined

$$\mathcal{H}_0(x) = \frac{p_x^2}{2m^*} - \mu + \frac{1}{2} g \mu_B \mathbf{B}(x) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (4)$$

with $p_x = -i\hbar\partial_x$, m^* the effective mass, μ the chemical potential, g the effective g -factor, μ_B the Bohr magneton and $\boldsymbol{\sigma}$ a vector of spin Pauli matrices. In addition, the total local magnetic field reads

$$\mathbf{B}(x) = \mathbf{B}_0 + \mathbf{b}(x), \quad (5)$$

where we have separated an external uniform magnetic field \mathbf{B}_0 from the magnetic texture $\mathbf{b}(x)$ that is generated by polarized micromagnets (see Sec. III). We simulate cobalt micromagnets with a magnetization of $M = 1.8$ T parallel to a polarization field of amplitude $|\mathbf{B}_0| = 0.2$ T [34]. The non-uniform magnetic field can be calculated either analytically (in the case of bar magnets [35]) or else using finite elements calculations [36]. Unless otherwise specified, we focus on silicon with $m^* = 0.2$ (in units of the bare electron mass) and $g = 2$. For this material, we neglect the weak intrinsic spin-orbit interaction [19, 26] and consider a wire of length $L = 5 \mu\text{m}$. The interplay between intrinsic spin-orbit coupling and magnetic textures will be considered in Sec. V. In that case, Eq. (4) must be modified to include the additional term $\alpha p_x \sigma_y$, where α is the intrinsic spin-orbit coupling strength.

As shown in e.g. Ref. [25], a magnetic field rotating in space is unitarily equivalent to the action of a uniform magnetic field and spin-orbit coupling oriented perpendicular to the field rotation plane. In the simple magnet geometries considered below, the field rotation will take place on a single plane. Then, the amplitude of the artificial spin-orbit coupling can be written as

$$\alpha_{\text{eff}} = \frac{\hbar}{2m^*} \frac{d\phi}{dx}, \quad (6)$$

where ϕ is the magnetic field angle. In the case of a perfect spiral field of period p , with $\mathbf{b} = b_0 [\cos(2\pi x/p) \hat{\mathbf{x}} + \sin(2\pi x/p) \hat{\mathbf{z}}]$, the artificial spin-orbit coupling is uniform along the wire and has an amplitude $\alpha_{\text{eff}} = \hbar\pi/mp$.

Depending on the material used to form the 2DEG, various techniques can be employed to induce superconductivity in the channel [20–22]. Experimentally, the amplitude of the proximity-induced superconducting gap will depend on multiple parameters such as the semiconductor-superconductor interface transparency, the applied external magnetic field and the superconductor thickness [37]. As these parameters are sensitive to experimental details, hereafter we adopt the conservative estimate of $\Delta = 16.5 \mu\text{eV} \approx 200$ mK, which is approximately half the superconducting gap reported for doped silicon at zero external field in Ref. [20]. For simplicity, we approximate Δ to be independent of the magnetic field texture. This approximation is justified when the critical field of the bulk superconductor far exceeds $|\mathbf{B}(x)|$, a circumstance that will be realized when using niobium, for example.

In the following sections, we characterize the MBS by diagonalizing numerically a discretized version of Eq. (1). From the diagonalized Hamiltonian, we extract (i) the energy gap Δ_0 , also referred to as the topological gap, which separates the zero modes from the low-lying quasiparticle excitations, and (ii) the energy splitting ϵ_M between the two MBS. The latter quantity gives a quantitative measure of the MBS localization (ϵ_M decreases as the overlap between the MBS wave functions is reduced) [18]. Together, Δ_0 and ϵ_M characterize the topological protection of the MBS and provide bounds on timescales for braiding operations in future Majorana-based qubits [2].

B. Optimization method

Finding the optimal spatial configuration of the micromagnets, which will lead to the largest Δ_0 and smallest ϵ_M , is a nontrivial task. Here, we optimize micromagnet geometries following the RGF-GRAPe algorithm [33], which is based on an analogy between the recursive Green's function (RGF) method [38] used for quantum transport calculations and the gradient ascent pulse engineering (GRAPe) algorithm of quantum optimal control [39]. RGF-GRAPe allows for an efficient gradient-based optimization of functions of local (on-site) retarded Green's functions.

The optimization procedure is carried out for a nanowire that is weakly coupled to normal metallic leads [33]. The algorithm maximizes (minimizes) the localization length of zero-energy states when the wire is in the trivial (topological) phase. As a result, irrespective of the initial values of the tunable parameters, the algorithm converges towards regions in parameter space that are deep in the topological regime. The localization length is obtained from the zero-energy local density of

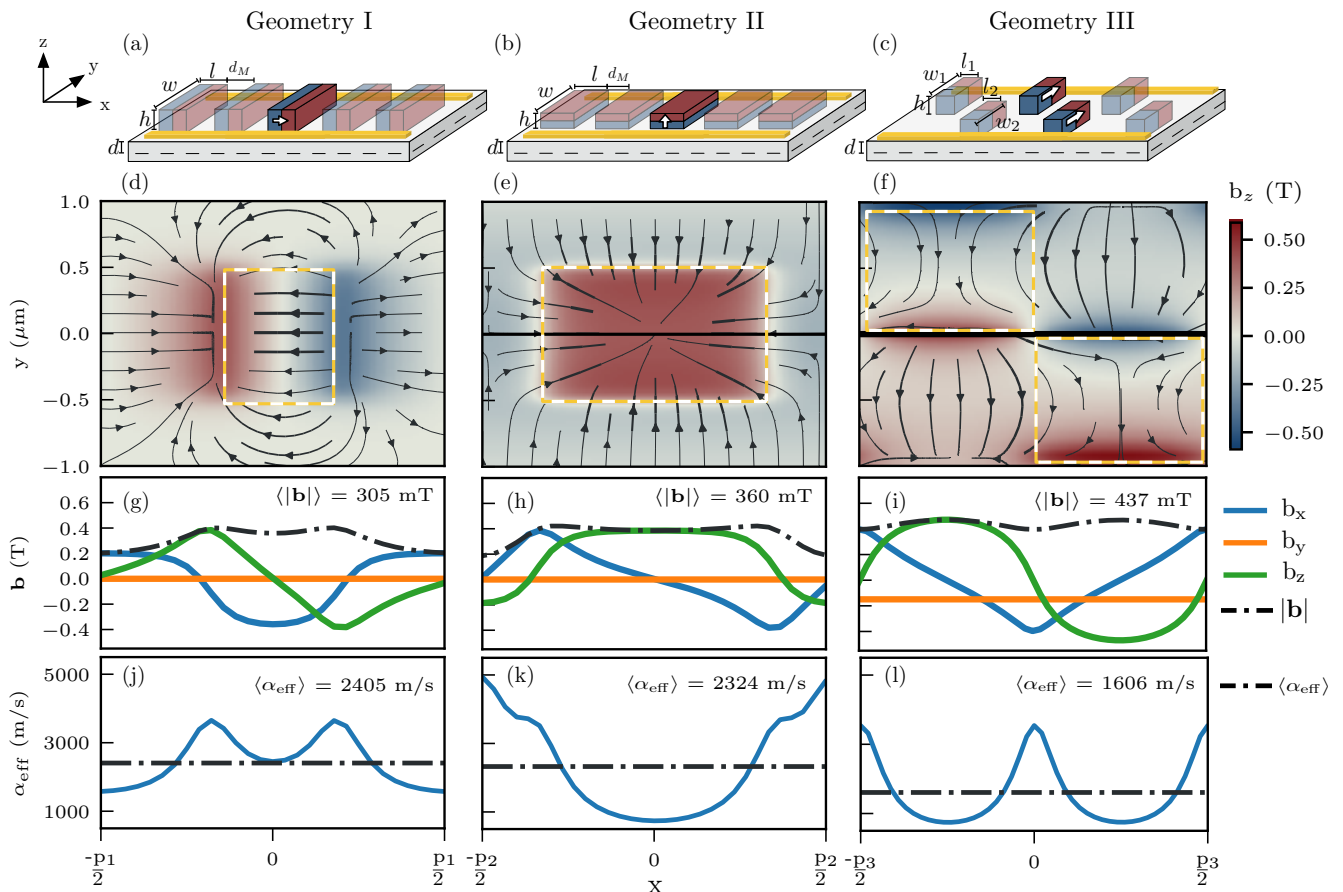


FIG. 1. (a-c) Schematics of the three studied geometries with all micromagnets polarized along the same direction. The magnets form arrays of periodicity p . Electrostatic gates (yellow) are used to deplete the two-dimensional electron gas located at a depth d below the heterostructure surface. A uniform external field is applied in the polarization direction. (a) Magnets polarized along the x axis, with parameters $l = h = 265$ nm, $w = 1$ μm , $d_M = 490$ nm, and $p = 755$ nm. (b) Magnets polarized along z axis, where $l = 520$ nm, $w = 1$ μm , $h = 280$ nm, $d_M = 250$ nm, and $p = 800$ nm. (c) Magnets polarized along y , with $l_{1,2} = 575$ nm, $w_1 = 960$ nm, $w_2 = 930$ nm, $h = 575$ nm, $y_1 = 480$ nm, $y_2 = -465$ nm, and $p = 1.15$ μm . (d-f) Magnetic field lines within a unit cell, at $d = 50$ nm. The color map describes the z component of the field. The black line at $y = 0$ represents the nanowire position, while the white and yellow dashed lines represent magnets in the unit cell. (g-i) Profiles of all three components of the magnetic field, at $d = 50$ nm. The dashed line denotes the magnitude of \mathbf{b} . (j-l) The corresponding effective spin-orbit coupling generated by $\mathbf{b}(x)$. The dashed line denotes the spatial average of α_{eff} over a unit cell.

states. In addition, the topological phase is characterized using the so-called *topological visibility* Q [40]. For a finite-size superconducting wire breaking time-reversal symmetry (class D [41]), this quantity can be obtained from the scattering matrix as $Q = \det r$, where r is the zero-energy reflection matrix in the Majorana basis. The \mathbb{Z}_2 topological invariant characterizing the phase is then simply $\mathcal{Q} = \text{sign}(Q)$, with $\mathcal{Q} = \pm 1$ in the trivial (+1) and topological (-1) phase [42].

We refer the reader to Ref. [33] for an extensive discussion of the optimization algorithm. Here, we simply mention some differences in the implementation of the algorithm between Ref. [33] and the present work. First, we use a basin hopping global optimization method [43]. This algorithm implements a series of gradient-based optimizations separated by stochastic perturbations to the optimization solution, which allows to explore a larger

portion of parameter space and reduce the risk of finding low quality local extrema. Second, we perform the optimization simultaneously for wires with different chemical potentials and require that all of them attain the topological phase. This favors solutions where the topological phase is stable on a larger chemical potential range, a desirable outcome for experimental implementations. Finally, since we consider a relatively small optimization parameter space (see Sec. III-V), we employ a simpler finite difference gradient calculation instead of the analytical gradient used in Ref. [33].

III. MICROMAGNET ARRAYS

A. Optimized geometries

In the following, we focus on geometries where all magnets are polarized in the direction of the external magnetic field \mathbf{B}_0 . This design choice leads to rotating magnetic field textures while circumventing the need for complex magnet arrays that would contain either materials with different magnetization profiles or small single-domain magnets arranged in an anti-parallel fashion [44]. For the latter configuration, an external field exceeding the coercive field would align all magnets and potentially ruin the field texture needed to attain MBS. Such constraint is absent in the geometries we consider, thereby enabling a larger parameter space for the engineering of MBS.

The three magnet arrangements (I, II and III) we study are depicted in Fig. 1 (a-c). In all three geometries, an array of micromagnets and electrostatic gates are placed at a distance d above a 2DEG. The gates produce the desired confinement potential to form a single band nanowire in the 2DEG. The magnets are polarized along the x -, z -, and y -axes for geometries I, II and III (respectively). We note that geometry III presents the added advantage of having the external field aligned along the easy axis of the magnets. The lower polarization field of the magnets in this configuration extends the tuning range of the external field.

An automated optimization of each geometry allows us to systematically take into account constraints on the design of the magnet arrays. Thus, we restrict the optimization to experimentally realizable identical magnets with dimensions $h, w, l, d_M \geq 50$ nm and a conservative aspect ratio of $h/\max(l, w) \leq 1$ (see Fig. 1 for parameter definitions) [45, 46]. Although non-periodic arrays might give rise to improved topological properties [33], we restrict the optimization to periodic arrays containing one or two micromagnets per unit cell. Thus, the starting point for the optimization is a periodic array of cubic magnets with dimensions $h, w, l, d_M = 500$ nm. Aperiodicities originating from fabrication errors will nevertheless be accounted for in Sec. IV.

Figures 1 (d-i) display the results of the optimization procedure for each geometry. An external magnetic field of $|\mathbf{B}_0| = 200$ mT, necessary to polarize the magnets, was included in the optimization. While this additional field can be detrimental to the emergence of Majorana modes [26], in the case of geometries I and III the optimization procedure naturally finds magnet array designs whose magnetic texture is offset in order to compensate for the external field. Geometry II appears to make the design of such an offset more difficult and no solution of this type is found by the optimization procedure. The resulting spin-orbit coupling calculated from Eq. (6) (without the polarizing field) is shown in Fig. 1 (j-l) and highlights the differences in spin-orbit profile for geometries with similar average Zeeman energies. The three geome-

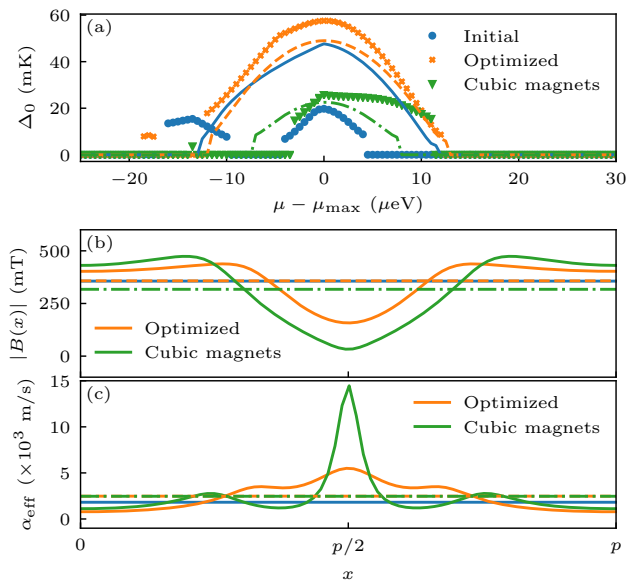


FIG. 2. Topological gap, total magnetic field amplitude and effective spin-orbit coupling for geometry I. Blue, orange and green curves correspond respectively to the starting point of the optimization, to the outcome of the optimization and to an array of cubic magnets with the same periodicity as the optimized geometry. (a) Topological gap as a function of the wire chemical potential, with $\Delta_0 = 0$ indicating the trivial phase. The chemical potential is offset so that the maximal value of Δ_0 is at $\mu - \mu_{max} = 0$ μeV . The circles, crosses and triangles are the results for magnet arrays. The lines are the results for a perfectly spiral magnetic texture, whose amplitude and periodicity correspond to the average value of the magnetic field and spin-orbit coupling in the magnet array. (b) Amplitude of the total magnetic field for a unit cell of length $p = 755$ nm. (c) Effective spin-orbit coupling strength calculated from Eq. (6). The orange dashed (green dotted-dashed) horizontal lines indicate the average of the curves over a unit cell, while the blue lines are the average values for the initial array. Even though the average Zeeman and spin-orbit energies vary little in the course of the optimization, the gain in the topological gap is significant.

tries present an average spin-orbit coupling greater than 1600 m/s. While this is an order of magnitude lower than typical values observed in InAs or InSb nanowires, it does not constitute the limiting factor to reach the topological phase (see Sec. III B).

To better appreciate the benefits of the optimization procedure, Fig. 2 (a) compares the topological gap as a function of the wire chemical potential for the initial and optimized arrays in geometry I. The optimization leads to an increase of the topological gap by a factor of ~ 3 and the topological phase is reached for a significantly wider range of the chemical potential.

As the optimized array has a smaller unit cell than the initial one, it is natural to wonder whether the observed improvement of the topological gap is solely the result of a larger effective spin-orbit coupling (a 35% in-

crease). To investigate this, we compare the optimized array to an array of cubic magnets with the same periodicity. While the increased spin-orbit coupling due to the reduced period does lead to an increased topological gap, the array of cubic magnets falls short from the optimized array. As shown in Fig. 2 (b), this can be understood by the 15% larger Zeeman energy of the optimized array compared to the cubic magnets. Another advantage of the optimized array with respect to the cubic array is that its magnetic texture partly compensates the external magnetic field. This compensation, beneficial for the topological gap, leads to smoother magnetic field profiles [see Fig. 2 (b,c)].

Finally, Fig. 2 (a) shows that the dependence of Δ_0 on μ is similar in the optimized array and in a hypothetical wire with spatially uniform Zeeman and spin-orbit energies, provided that the latter are chosen to be equal to the spatially averaged values $\langle\alpha_{\text{eff}}\rangle$ and $g\mu_B\langle|\mathbf{B}|\rangle$ of the optimized array. This behavior is reproduced in optimized arrays belonging to geometries II and III.

B. Robustness over parameter variations

It is important to assess whether or not the optimized geometries obtained in Sec. III A exhibit robust MBS over modest changes of parameters such as the chemical potential, the external magnetic field and the induced superconducting gap. Indeed, a geometry presenting a high sensitivity to such parameters would be difficult to implement experimentally, due to a limited precision in attaining the parameter values.

Although the engineered magnetic textures are not perfectly helical, we can gain useful intuition by comparing numerical results to the analytic expressions for this ideal case. In a long nanowire without intrinsic spin-orbit coupling placed under a helical magnetic field and without any uniform external field, the condition for the appearance of MBS reads

$$\frac{1}{2}g\mu_B|\mathbf{b}| > \sqrt{|\Delta|^2 + (\mu - \tilde{\mu})^2}, \quad (7)$$

where $\tilde{\mu}$ is a renormalized chemical potential due to the effective spin-orbit coupling and $|\mathbf{b}|$ the amplitude of the spiral field [25]. From Eq. (7), we anticipate that the topological phase will be realized in a larger interval of chemical potential when the amplitude of the Zeeman energy is increased. This expectation is confirmed by Fig. 3 (a), where geometry III displays the widest range of μ for which $\Delta_0 > 0$.

The intuition from the ideal helical case can be extended to understand the dependence of the topological gap on various parameters. In the ideal case, the topological protection is determined from the energy gaps at zero momentum ($k = 0$) and at the Fermi momentum ($k = k_f$). Following the notation of Ref. [47], we define

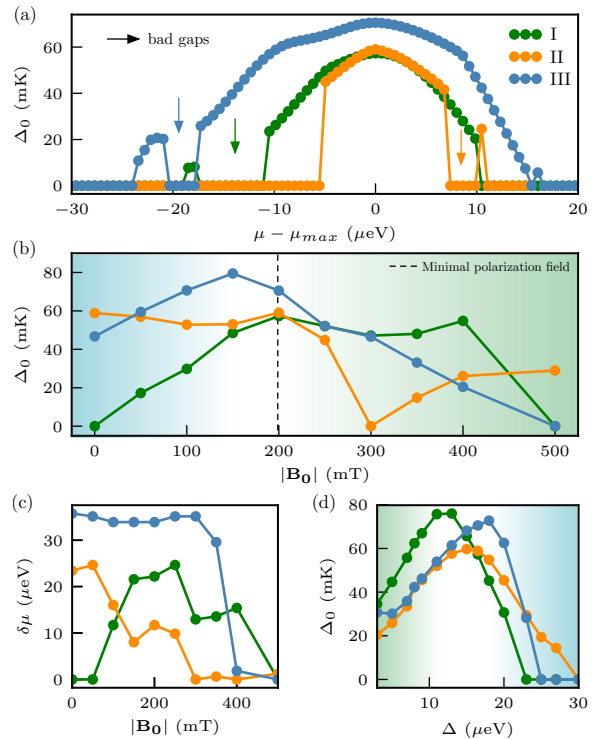


FIG. 3. Robustness of the topological gap under the variation of parameters in all three geometries. (a) Topological gap Δ_0 as function of the chemical potential at $B_0 = 200$ mT. In each geometry, the plots are offset by μ_{max} for the sake of comparison. (b) Magnetic field dependence of Δ_0 at $\mu - \mu_{max} = 0$. (c) Dependence of $\delta\mu$ (namely the interval of chemical potential for which $\Delta_0 > 10$ mK) on the external magnetic field. (d) Effect of the superconducting proximity gap Δ on the topological gap. The shaded areas in panels (b) and (d) represent the regions where the topological gap is limited by Δ_1 (blue) or Δ_2 (green); see main text for definitions.

the gap at $k = 0$ in the $\mu \approx \tilde{\mu}$ limit as

$$\Delta_1 = \frac{1}{2}g\mu_B|b - b_c|, \quad (8)$$

where $b_c = 2\Delta/(g\mu_B)$ is the critical field at which the topological phase transition occurs [cf. Eq. (7)]. The gap at $k = k_f$ is given by

$$\Delta_2 \approx \frac{2\Delta}{[2 + \sqrt{(g\mu_B b/2)^2/E_{so}^2 + 4}]^{1/2}}, \quad (9)$$

where $E_{so} = m^*\alpha_{\text{eff}}^2/2$ is the spin-orbit energy scale. The topological gap is dictated by the smallest between Δ_1 and Δ_2 . As we enter the topological phase from lower magnetic fields ($g\mu_B b \gtrsim \Delta$), Δ_0 is limited by Δ_1 . Deeper in the topological phase ($g\mu_B b \gg \Delta$), the topological gap becomes limited by Δ_2 , which decreases as the ratio $g\mu_B b/E_{so}$ increases. The latter effect follows from a reduction of the effective p -wave superconducting gap, due to the alignment of spins at $\pm k_f$ as the Zeeman field is increased.

The preceding observations are also relevant to wires placed in proximity to micromagnet arrays, as evidenced by Fig. 3 (b). For geometries I and III, the additional Zeeman energy at low external field brings the wire deeper into the topological phase (i.e. Δ_0 grows with B_0) by increasing Δ_1 . At higher B_0 , the suppression of Δ_2 brings about a decrease in Δ_0 . For geometry II, the effective spin-orbit coupling is weak enough to have $\Delta_1 > \Delta_2$ at $B_0 = 0$ T. In this case, Δ_0 is limited by Δ_2 . Accordingly, Δ_0 is quite insensitive to the external field at low B_0 , and decreases as B_0 is made stronger. At high B_0 , the function $\Delta_0(B_0)$ is nevertheless more complex than in uniform wires with perfect spiral fields, because the band structure is distorted by the non-uniform spin-orbit coupling and the appearance of undesired gaps.

Suppressions and revivals of the topological gap are revealed in Fig. 3 (a) as the chemical potential is varied. Maurer *et al.* showed [26] that undesired gaps (so-called *bad gaps*) appear in the band structure when the average Zeeman energy over a unit cell is nonzero. When the chemical potential enters a bad gap, the wire becomes a trivial insulator ($\Delta_0 = 0$). For all three geometries, the polarizing field offsets one component of the total magnetic field, thus creating a nonzero average field in a unit cell. From there, increasing the amplitude of the external field augments the energy spans for undesired gaps. As expected from the discussion of Fig. 1(g-i), this effect is most striking for geometry II where the texture cannot compensate the external magnetic field. This is further highlighted in Fig. 3 (c), where we define $\delta\mu$ as the chemical potential range over which $\Delta_0 > 10$ mK. Sharp steps in $\delta\mu(B_0)$ are indicative of the opening of bad gaps in the band structure, and the fastest reduction of $\delta\mu$ is observed for geometry II. We also note that finite size effects contribute to the reduction of $\delta\mu$ at $B \gtrsim 300$ mT due to the overlap of the MBS wave functions.

In low g-factor materials, the interplay between Δ_0 and Δ can be crucial for the observation of MBS (see Fig. 3 (d)). All geometries show robust MBS for values of Δ that are close to those reported experimentally in low g-factor materials at zero external field [20, 21]. Far from the crossover between Δ_1 -limited and Δ_2 -limited regions, the topological gap varies roughly linearly with Δ . This agrees with the behavior that one would expect in a uniform wire. However, the non-helical character of the magnetic texture becomes evident in the fact that the slope in the Δ_1 -limited region (at higher Δ) is not the same for all geometries.

IV. MAJORANA MODES WITH DISORDERED MAGNET ARRAYS

In a real device, errors in micromagnet patterning give rise to disordered arrays with non-periodic magnetic field profiles. In this section, we investigate the robustness of MBS to such fabrication noise. Specifically, we focus on the impact of random deviations from the optimized

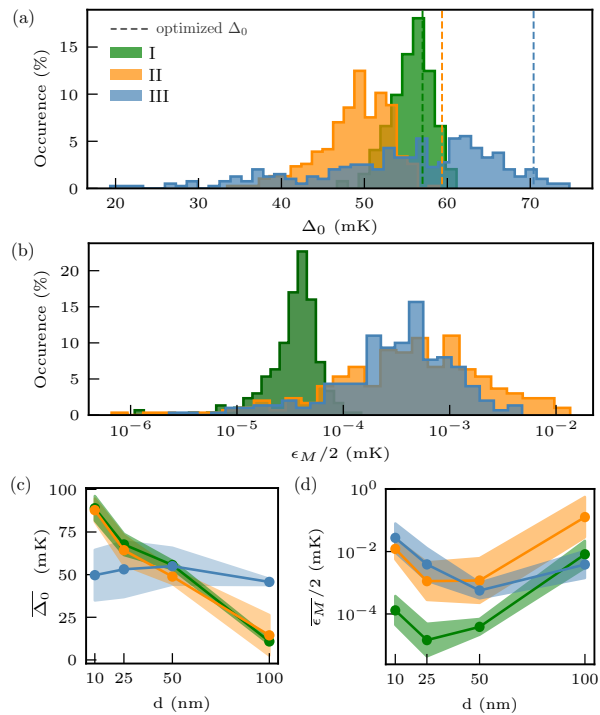


FIG. 4. Impact of fabrication errors on MBS characteristics of optimized arrays. The histograms compile (a) the topological gap Δ_0 , and (b) the MBS energy splitting ϵ_M for 300 realizations of disorder. (c,d) Disorder-averaged values of Δ_0 and ϵ_M , represented by filled circles, for optimized arrays at different 2DEG depths d . The shaded area represents the standard deviation.

array designs on two key quantities: (i) the topological gap (Δ_0), and (ii) the energy splitting between the MBS (ϵ_M).

We model the experimental variations by allowing deviations from the optimized dimensions and positions of each magnet in the array. These deviations are sampled from a gaussian distribution with a standard deviation of 20 nm. We assume the deposition of cobalt to be made in a single step, such that all magnets have the same height. The chemical potential for a wire with a disordered array is fixed to the optimized value obtained for an array without noise.

Figures 4 (a-b) and Table I depict the influence of disordered arrays on the MBS parameters. We find that certain disorder configurations lead to better MBS characteristics in geometries I and III, while all realizations of noise reduce the topological gap in geometry II. At any rate, the disorder-averaged gap is smaller than the optimized value of a perfect array, regardless of the geometry. In this regard, geometry I shows the strongest robustness against disorder, with the largest disorder-averaged gap ($\overline{\Delta_0}$), the lowest standard deviation for the gap (σ_{Δ_0}) and the lowest disorder-averaged MBS energy splitting ($\overline{\epsilon_M}$). The relative fragility of MBS to disorder in geometry III

can be understood by looking at the spatial variation of the magnetic field in Fig. 1 (d-f). Unlike in geometries I and II, small relative displacements of the magnets along the y direction lead to a strong cancellation of the spiral field amplitude and account for the broad distribution of Δ_0 and ϵ_M .

TABLE I. Topological gap Δ_0 and the MBS energy separation ϵ_M in perfect and disordered magnet arrays, for $d = 50$ nm. For perfect arrays, the optimal values (Δ_0^{opt} and ϵ_M^{opt}) are listed. For disordered arrays, disorder-averaged values ($\overline{\Delta_0}$) and standard deviations (σ_{Δ_0}) are shown.

Geom.	Δ_0^{opt} (mK)	$\overline{\Delta_0}$ (mK)	σ_{Δ_0} (mK)	ϵ_M^{opt} (nK)	$\overline{\epsilon_M}$ (nK)	σ_{ϵ_M} (nK)
I	57	56	3	56	78	36
II	59	49	4	580	2400	4000
III	70	55	11	1200	1120	1320

From the previous discussion, it appears that a trade-off has to be made between the largest topological gap in an optimized array and its robustness to disorder. Depending on the precision of microfabrication protocols, design choices could be oriented either to noise resilient geometries (such as geometry I) or to geometries with the largest optimized parameters (geometry III). Moreover, one would need to consider how other parameters, such as the distance d between the magnets and the nanowire, affect the MBS properties.

It turns out that the Zeeman energy and the effective spin-orbit coupling are greatly affected by the 2DEG depth d . In shallow 2DEGs, the increased Zeeman energy and spin-orbit coupling can boost the MBS characteristics at the expense of larger magnetic field gradients that amplify the impact of disorder. Increasing d smooths the field profiles and MBS characteristics becomes less sensitive to disorder. This effect is best seen in Fig. 4(c-d) for geometry III, where the smoother magnetic texture mitigates the impact of disorder on Δ_0 and ϵ_M . Indeed, at $d > 50$ nm, geometry III presents the strongest gap and robustness to disorder.

The reduction of Δ_0 with d in geometries I and II (Fig. 4(c)) can be understood in terms of the gaps Δ_1 and Δ_2 [cf. Eqs. (8) and (9)]. In geometry I, Δ_0 is limited by Δ_1 and the lower Zeeman energy at higher d further reduces the topological gap. In geometry II, the gap is limited by Δ_2 and the strong reduction of the spin-orbit energy contributes to the low Δ_0 at high d . In geometry III, the gap is roughly constant over the studied range in d .

V. INFLUENCE OF MATERIAL PARAMETERS ON MBS ATTRIBUTES

In previous sections, we have focused our analysis on parameters that are relevant for silicon. In the model

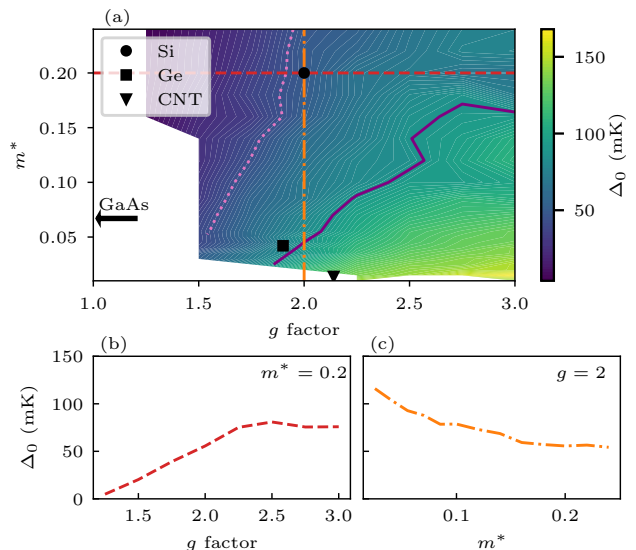


FIG. 5. (a) Topological gap Δ_0 for optimized magnet arrays (geometry I, see Fig. 1), as a function of the effective mass m^* and the g factor. Dotted light (solid dark) purple curve is a constant gap contour corresponding to $\Delta_0 = 50(100)$ mK. Each point of panel (a) is the outcome of an independent optimization starting from an array of cubic magnets (cf. Sec. II B). White regions identify the parameter space where the optimizer could not reach the topological phase. Markers indicate the experimental parameter values for carbon nanotubes (CNT) [48] and germanium [49]. The red dashed (orange dot-dashed) curves indicate cuts for the effective mass (g factor) of silicon plotted in panels (b) and (c).

Hamiltonian (see Sec. II A), the choice of material is reflected in the values of the effective mass m^* , the g factor, and the spin-orbit coupling α . The proximity-induced superconducting gap Δ is treated as a fixed phenomenological parameter.

We first explore the MBS characteristics for a region of parameter space close to that of silicon, which is relevant for weakly spin-orbit coupled semiconductors ($\alpha \approx 0$). Due to its experimental simplicity and robustness to nanofabrication errors (see Sec. IV), we focus on geometry I. Figure 5(a) presents the optimized topological gap in the parameter space spanned by m^* and g , where each point is the result of an independent optimization of the magnet array. Markers in Fig. 5 indicate the parameters corresponding to various materials, taken from the literature. In practice, one can move somewhat in parameter space by changing the material or by renormalizing parameter values e.g. through quantum confinement or through hybridization to a superconductor [50].

The influence of the g factor on the topological gap is straightforward. The band inversion leading to MBS being controlled by the Zeeman energy, sufficiently large values of g ($\gtrsim 1.5$) are needed in order to drive the topological phase transition. However, for larger Zeeman energies, the topological gap becomes limited by the effec-

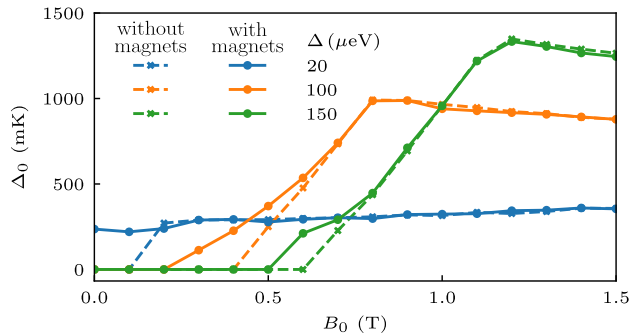


FIG. 6. Topological gap in a single-channel InAs nanowire with (disks, solid curves) and without (crosses, dashed curves) an optimized magnet array. Each disk is the result of a separate optimization. We consider a magnet array in geometry I (see Fig. 1) and an InAs nanowire of length $L = 5 \mu\text{m}$, $m^* = 0.023$, $g = 8$, and an intrinsic spin-orbit coupling $\alpha/\hbar = 3 \times 10^4 \text{ m/s}$ [5].

tive spin-orbit coupling strength induced by the magnet array [see line cut in Fig. 5(b)]. As this quantity is inversely proportional to the effective mass [cf. Eq. (6)], the largest topological gaps are found in the lower right corner of the plotted parameter space (largest g and smallest m^* values). This leads to constant gap contours (dotted light and solid dark purple curves) with a positive slope in the (m^*, g) space.

One caveat to the above analysis is that the effective mass also affects the superconducting coherence length ξ . For a fixed μ and Δ , a smaller effective mass increases the superconducting coherence length and thus the importance of finite-size effects. In particular, the overlap of MBS in regimes where Δ_0 is small becomes significant, making it difficult for the optimization procedure to reach the topological phase. This explains the negative slope of the phase transition line in parameter space.

To conclude this section, we consider the application of magnet arrays for the engineering of MBS in materials with strong intrinsic spin-orbit coupling. The interplay between magnetic textures and spin-orbit coupling has been predicted to yield a complicated phase diagram that includes fractionalized fermions [31, 32], as well as MBS if superconductivity is induced. Here, we focus on the case where the magnetic texture and the spin-orbit coupling act in cooperation. This is the case when the helical texture is in the plane perpendicular to the intrinsic spin-orbit interaction. In such a case, magnet arrays could be used to boost the effective spin-orbit coupling of the device and locally increase the Zeeman energy.

To illustrate this point, Fig. 6 presents the topological gap for the parameters of an InAs nanowire covered by a partial shell of aluminium [5] and compares the case of a standard uniform wire (dashed curves) to the case where a magnet array is added to the device following geometry I. For all superconducting gap amplitudes considered, the magnets allow to lower the external

magnetic field amplitude needed to reach the topological phase. This could be particularly useful in the context of hybrid nanocircuits involving, on the same chip, both Majorana-based qubits [13, 14] and superconducting circuits [51, 52].

VI. DISCUSSION

In summary, our results indicate that it is possible to reach robust Majorana zero modes in low g -factor materials using magnet arrays. Materials with small effective masses appear to be promising for the realization of such Majorana devices.

An optimal Majorana device should exhibit the following main characteristics: (i) a large topological gap, (ii) well localized MBS (small wave function overlap) characterized by a small energy splitting between the zero energy modes, and (iii) robustness of the MBS characteristics to variations in parameters with respect to optimized nominal values. In the case of a magnet array, there is an additional criterion: (iv) robustness to variations in the dimension and position of micromagnets that are caused by unavoidable microfabrication errors. While none of the three geometries considered in this work are ideal with regards to all of those criteria, the following assessment of their strengths and weaknesses can help guide the design of devices.

First, our results show that geometry III is optimal with respect to criteria (i-iii). It exhibits the largest topological gap at optimized parameters, which is stable over a range of parameters around the optimized values. However, for 2DEGs of depth $d \leq 50 \text{ nm}$, this geometry is the most sensitive to microfabrication errors and does not perform as well as geometries I and II when it comes to criterion (iv). Therefore, depending on the expected fabrication precision and the tolerable device yield, one might prefer geometry I where the optimal topological gap is slightly smaller, but the resilience to microfabrication errors is larger. Second, for heterostructures in which the channel depth is over 50 nm , geometry III appears to be most suited since its topological gap exceeds 40 mK , while for the other two geometries $\Delta_0 < 20 \text{ mK}$.

Overall, our work demonstrates the advantage of automated optimization as a tool for the design of Majorana devices based on magnetic textures. Using a simple nanowire model, our results provide design guidelines for Majorana devices based on simple periodic micromagnet arrays, and allow to explore a large parameter space of magnet and material parameters. Our approach could be augmented to carry out a more precise optimization for specific geometries and materials by using recent developments in the advanced modeling of hybrid semiconductor-superconductor devices [53, 54].

ACKNOWLEDGMENTS

This work was funded by the Canada First Research Excellence Fund, the National Science and Engineer-

ing Research Council, and the Fonds de Recherche du Québec – Nature et Technologies. Numerical calculations were done with computer resources from Calcul Québec and Compute Canada.

-
- [1] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1083 (2008).
- [2] S. D. Sarma, M. Freedman, and C. Nayak, *npj Quantum Information* **1**, 15001 EP (2015).
- [3] Y. Oreg, G. Refael, and F. von Oppen, Felix, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 177002 (2010).
- [4] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 077001 (2010).
- [5] R. M. Lutchyn, E. P. A. M. Bakkers, L. P. Kouwenhoven, P. Krogstrup, C. M. Marcus, and Y. Oreg, *Nature Reviews Materials* **3**, 52 (2018).
- [6] R. Aguado, *La Rivista del Nuovo Cimento* **40**, 523–593 (2017).
- [7] S. Albrecht, A. Higginbotham, M. Madsen, F. Kuemmeth, T. Jespersen, J. Nygård, P. Krogstrup, and C. Marcus, *Nature* **531**, 206 (2016).
- [8] M. T. Deng, S. Vaitiekenas, E. B. Hansen, J. Danon, M. Leijnse, K. Flensberg, J. Nygård, P. Krogstrup, and C. M. Marcus, *Science* **354**, 1557 (2016).
- [9] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. Plissard, E. Bakkers, and L. Kouwenhoven, *Science* **336**, 1003 (2012).
- [10] J. Chen, P. Yu, J. Stenger, M. Hocevar, D. Car, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, T. D. Stanescu, and S. M. Frolov, *Science Advances* **3**, e1701476 (2017).
- [11] H. Zhang, C.-X. Liu, S. Gazibegovic, D. Xu, J. A. Logan, G. Wang, N. van Loo, J. D. S. Bommer, M. W. A. de Moor, D. Car, R. L. M. Op het Veld, P. J. van Veldhoven, S. Koelling, M. A. Verheijen, M. Pendharkar, D. J. Pennachio, B. Shojaei, J. S. Lee, C. J. Palmstrøm, E. P. A. M. Bakkers, S. D. Sarma, and L. P. Kouwenhoven, *Nature* **556**, 74 (2018).
- [12] J. Alicea, Y. Oreg, G. Refael, F. von Oppen, and M. P. Fisher, *Nature Physics* **7**, 412 (2011).
- [13] T. Karzig, C. Knapp, R. M. Lutchyn, P. Bonderson, M. B. Hastings, C. Nayak, J. Alicea, K. Flensberg, S. Plugge, Y. Oreg, C. M. Marcus, and M. H. Freedman, *Phys. Rev. B* **95**, 235305 (2017).
- [14] S. Plugge, A. Rasmussen, R. Egger, and K. Flensberg, *New Journal of Physics* **19**, 012001 (2017).
- [15] H. J. Suominen, M. Kjaergaard, A. R. Hamilton, J. Shabani, C. J. Palmstrøm, C. M. Marcus, and F. Nichele, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 176805 (2017).
- [16] J. Shabani, M. Kjaergaard, H. J. Suominen, Y. Kim, F. Nichele, K. Pakrouski, T. Stankevic, R. M. Lutchyn, P. Krogstrup, R. Feidenhans'l, S. Kraemer, C. Nayak, M. Troyer, C. M. Marcus, and C. J. Palmstrøm, *Phys. Rev. B* **93**, 155402 (2016).
- [17] S. Vaitiekėnas, A. M. Whiticar, M.-T. Deng, F. Krizek, J. E. Sestoft, C. J. Palmstrøm, S. Marti-Sanchez, J. Arbiol, P. Krogstrup, L. Casparis, and C. M. Marcus, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 147701 (2018).
- [18] J. Alicea, *Reports on Progress in Physics* **75**, 076501 (2012).
- [19] F. A. Zwanenburg, A. S. Dzurak, A. Morello, M. Y. Simmons, L. C. L. Hollenberg, G. Klimeck, S. Rogge, S. N. Coppersmith, and M. A. Eriksson, *Rev. Mod. Phys.* **85**, 961 (2013).
- [20] F. Chiodi, J.-E. Duvauchelle, C. Marcenat, D. Débarre, and F. Lefloch, *Phys. Rev. B* **96**, 024503 (2017).
- [21] Z. Wan, A. Kazakov, M. J. Manfra, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and L. P. Rokhinson, *Nature communications* **6**, 7426 (2015).
- [22] H. B. Heersche, P. Jarillo-Herrero, J. B. Oostinga, L. M. K. Vandersypen, and A. F. Morpurgo, *Nature* **446**, 56 (2007).
- [23] T.-P. Choy, J. M. Edge, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. B* **84**, 195442 (2011).
- [24] S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, *Phys. Rev. B* **88**, 020407 (2013).
- [25] M. Kjaergaard, K. Wölms, and K. Flensberg, *Phys. Rev. B* **85**, 020503 (2012).
- [26] L. Maurer, J. Gamble, L. Tracy, S. Eley, and T. Lu, *Phys. Rev. Applied* **10**, 054071 (2018).
- [27] M. M. Desjardins, L. C. Contamin, M. R. Delbecq, M. C. Dartiaill, L. E. Bruhat, T. Cubaynes, J. J. Viennot, F. Mallet, S. Rohart, A. Thiaville, A. Cottet, and T. Kontos, arXiv e-prints (2019), 1902.07479.
- [28] T. Zhou, N. Mohanta, J. E. Han, A. Matos- Abiague, and I. Zutic, arXiv e-prints, arXiv:1901.02506 (2019).
- [29] G. L. Fatin, A. Matos-Abiague, B. Scharf, and I. Žutić, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 077002 (2016).
- [30] A. Matos-Abiague, J. Shabani, A. D. Kent, G. L. Fatin, B. Scharf, and I. Žutić, *Solid State Communications* **262**, 1 (2017).
- [31] J. Klinovaja, P. Stano, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 236801 (2012).
- [32] D. Rainis, A. Saha, J. Klinovaja, L. Trifunovic, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 196803 (2014).
- [33] S. Boutin, J. Camirand Lemyre, and I. Garate, *Phys. Rev. B* **98**, 214512 (2018).
- [34] D. Lachance-Quirion, J. Camirand Lemyre, L. Bergeron, C. Sarra-Bournet, and M. Pioro-Ladrière, *Applied Physics Letters* **107**, 223103s (2015).
- [35] R. Engel-Herbert and T. Hesjedal, *Journal of Applied Physics* **97**, 074504 (2005).
- [36] Using e.g. the RADIA *Wolfram Mathematica* package <http://www.esrf.eu/Accelerators/Groups/InsertionDevices/Software/Radia>.
- [37] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity: Second Edition*, Dover Books on Physics (Dover Publications, 2004).
- [38] D. J. Thouless and S. Kirkpatrick, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **14**, 235 (1981).
- [39] N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet, T. Schulte-Herbrüggen, and S. J. Glaser, *Journal of Magnetic Resonance* **172**, 296 (2005).
- [40] S. Das Sarma, A. Nag, and J. D. Sau, *Phys. Rev. B* **94**, 035143 (2016).
- [41] C.-K. Chiu, J. C. Y. Teo, A. P. Schnyder, and S. Ryu, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 035005 (2016).

Chapitre 5

Jonction Josephson topologique en présence d'interactions

À la section 2.4.2, nous avons introduit l'effet Josephson 4π , où la présence de modes de Majorana double la périodicité du potentiel de Josephson lorsque la parité fermionique locale est préservée. Dans ce chapitre, on considère une extension de ce problème où, dans une jonction Josephson longue et en présence d'interactions coulombiennes fortes, il est possible d'observer un effet Josephson de période 8π (ou \mathbb{Z}_4), résultant d'une fractionnalisation des modes de Majorana due aux interactions. Le courant traversant la jonction résulte alors d'un déplacement de quasi-particules de charges $e/2$. Cet effet a d'abord été prédit dans une jonction Josephson formée au bord d'un isolant de Hall quantique de spin, à l'aide de la méthode de bosonisation et d'arguments basés sur le groupe de renormalisation [109–111].

Le projet présenté dans ce chapitre vise d'abord à utiliser des méthodes de l'électrodynamique quantique en circuit afin de proposer de nouvelles signatures expérimentales de l'effet Josephson 8π . Cette approche a été inspirée par d'autres travaux récents [112–116] où un supraconducteur topologique est couplé à un résonateur afin d'observer des signatures de la transition de phase topologique et des modes de Majorana. Notre analyse se distingue de ces références par la considération d'interactions électroniques fortes et leur traitement par le biais d'une diagonalisation numérique exacte du hamiltonien à plusieurs particules. Un autre aspect de ce travail est la démonstration que, dans un régime de paramètre particulier, il est possible de réaliser l'effet Josephson

8π dans un système unidimensionnel basé sur la chaîne de Kitaev plutôt qu'à la frontière d'un isolant topologique. Ce résultat repose sur l'émergence d'une symétrie de renversement du temps effective T_- avec $T_-^2 = -1$ dans la physique à basse énergie de la chaîne de Kitaev.

En complément de ce chapitre, l'annexe B présente quelques détails plus techniques des travaux présentés dans ce chapitre. En particulier, suivant l'approche des matrices de transfert [117], nous démontrons les expressions générales pour les opérateurs de parité des modes de Majorana d'une chaîne de Kitaev [5]. De plus, nous discutons de la définition de la base du hamiltonien utilisée en diagonalisation exacte.

5.1 Publication 4

On reproduit dans cette section la publication

- P. L. S. Lopes, **S. Boutin**, P. Karan, U. C. Mendes, I. Garate. *Microwave signatures of \mathbb{Z}_2 and \mathbb{Z}_4 fractional Josephson effects*, **Phys. Rev. B** **99** 045103 (2019). [26]

Contribution

Pour cette publication, mes principales contributions sont les suivantes :

- À partir des résultats préliminaires obtenus par P. Karan durant son stage sous la supervision de P. Lopes, j'ai développé les outils numériques de diagonalisation exacte ayant permis d'obtenir les résultats numériques de la publication.
- J'ai analysé les données, fait la mise en correspondance des résultats analytiques et numériques, ainsi que préparé les figures en collaboration avec P. Lopes.
- J'ai contribué au calcul du couplage entre la jonction Josephson et la cavité avec les autres coauteurs.
- J'ai contribué à la rédaction du manuscrit, dont la première version a été écrite par P. Lopes, en effectuant des commentaires et en suggérant des modifications.

Microwave signatures of \mathbb{Z}_2 and \mathbb{Z}_4 fractional Josephson effects

P. L. S. Lopes, S. Boutin, P. Karan, U. C. Mendes, and I. Garate
*Institut Quantique and Département de Physique,
Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec, Canada J1K 2R1*

We present a many-body exact diagonalization study of the \mathbb{Z}_2 and \mathbb{Z}_4 Josephson effects in circuit quantum electrodynamics architectures. Numerical simulations are conducted on Kitaev chain Josephson junctions hosting nearest-neighbor Coulomb interactions. The low-energy effective theory of highly transparent Kitaev chain junctions is shown to be identical to that of junctions created at the edge of a quantum spin-Hall insulator. By capacitively coupling the interacting junction to a microwave resonator, we predict signatures of the fractional Josephson effects on the cavity frequency and on time-resolved reflectivity measurements.

I. INTRODUCTION

Josephson junctions (JJs) built at the edges of quantum spin Hall (QSH) insulators have been predicted to display a rich variety of phenomena, which emerge from the interplay between time-reversal (TR) symmetry and the conservation of a local fermion parity. In the presence of a dc voltage bias, three theoretical scenarios have been proposed, with distinct periodicities of the Josephson current on the superconducting phase difference across the junction.¹⁻⁵

In the first scenario, concerning non-interacting and TR-symmetric JJs, an ac 2π -periodic Josephson effect takes place, together with a dissipative dc current.^{1,2} This is the ordinary Josephson effect for perfectly transparent weak links. In the second scenario, involving JJs with broken TR symmetry, the current is dissipationless and its period doubles to 4π . Such doubling is the hallmark of hybridized Majorana zero-modes (MZMs) at the edges of the weak link.³ In the third scenario, entailing TR-symmetric JJs with short-range interactions, the current is non-dissipative and 8π -periodic.^{4,5} This effect has been attributed to TR-protected \mathbb{Z}_4 parafermions, fractionalized quasiparticles of conceptual and practical interest.⁴ The 4π -periodic (\mathbb{Z}_2) and 8π -periodic (\mathbb{Z}_4) Josephson effects are known as “fractional”, as opposed to the “integer” 2π -periodic Josephson effect.

The experimental realization of fractional Josephson effects constitutes an active research topic in topological condensed matter physics. Unexpectedly, recent experiments on QSH JJs have reported Shapiro steps and Josephson radiation consistent with a 4π -periodic Josephson effect,⁶⁻⁸ instead of the 2π -periodic or 8π -periodic effects that would have been anticipated for such a TR-symmetric system. Consistent explanations for this phenomenon have been put forward in terms of exchange interactions between QSH edge states and nearby charge puddles, which can act as magnetic impurities,⁹ as well as in terms of two-particle inelastic scattering.¹⁰

The 8π Josephson effect remains experimentally elusive to this day. Its observation requires weak links of lengths comparable to, or larger than, the superconducting (SC) coherence length. In addition, a many-body energy gap produced by TR-preserving interactions

is needed. For umklapp interactions, such a gap develops only in the strong coupling limit.^{4,5} To date, it is unclear whether the condition of strong interactions may be satisfied in real QSH JJs. In contrast, spin-flip interactions with magnetic impurities can generate 8π -periodicity both at strong and weak coupling.^{2,9,11} Nevertheless, in the weak coupling regime, interactions with magnetic impurities give a dominant 4π periodicity.⁹ In addition, for magnetic impurities of spin higher than $1/2$, particularities of the single-ion anisotropies can give rise to 2π and 4π periodicities.

In view of the aforementioned challenges, it would be of interest to (i) identify alternative systems where the 8π -periodic Josephson effect can occur, and (ii) develop alternative ways to measure it. The main objective of the present work is to make theoretical progress along these lines. Concerning (i), we establish that the 8π -periodic Josephson effect can take place in JJs built out of Kitaev chains,¹² i.e. one-dimensional lattices of spinless fermions with p -wave superconductivity. The proposals for physical realizations of Kitaev chains are numerous and under intense experimental investigation (see [13] and references therein). Concerning (ii), we propose signatures of the 8π Josephson effect in circuit quantum electrodynamics (cQED) architectures.

Our study begins in Sec. II, where we show that a Kitaev chain JJ has the same low-energy effective field theory as the QSH JJ. This equivalence holds provided that the lattice model is tuned to the regime of a perfectly transparent junction (Sec. II A). In this regime, the lattice model is endowed with an effective low-energy TR symmetry operator squaring to -1 , which mimics that of the QSH JJ.

Because the low-energy states of the junction are localized within the weak link, finite-sized superconducting electrodes suffice to achieve a good agreement between the continuum and lattice theories (Secs. II B and II C). Therefore, we can access physical observables of strongly interacting QSH JJs via exact diagonalization of the Kitaev chain JJ. Specifically, we carry out a lattice analysis of the \mathbb{Z}_2 and \mathbb{Z}_4 Josephson effects (Secs. II D, II E and II F). Here, the main advantage over the recent studies of fractional Josephson effects based on bosonization and perturbation theory^{2,4,9,11,14} is that we have access to

the many-body energies *and* wavefunctions, which then allow us to compute physical observables for an arbitrary interaction strength.

In Sec. III, we apply our theory to determine the influence of strong interactions and quasiparticle fractionalization in cQED measurements of topological JJs. Recently, cQED architectures¹⁵ have been explored, both theoretically and experimentally, as promising venues to probe and characterize topological superconductivity in JJs.^{16–22} In cQED, a microwave cavity is utilized to monitor, in an efficient and non-invasive way, the discrete energy level dynamics of quantum circuits.²² Thus far, all cQED studies of topological junctions have neglected the effect of short-range electron-electron interactions. Accordingly, little is known about the cQED signatures of the 8π -periodic Josephson effect. By investigating the response of a microwave resonator coupled to a topological JJ (Sec. III A), we find that the cavity frequency inherits the anomalous Josephson periodicities and displays a series of kinks and peaks (Sec. III B) that can be resolved in the phase-shift of the reflected signal (Sec. III D). In contrast, the cavity linewidth is unaffected by the presence of the junction, as long as (i) the broadening of the electronic states is small compared to the cavity frequency, and (ii) the cavity frequency is smaller than the energy gaps that protect the fractional Josephson effects (Sec. III C). Finally, Sec. IV presents the conclusions, and the appendices contain extra details on the calculations.

II. FRACTIONAL JOSEPHSON EFFECTS IN KITAEV CHAIN JUNCTIONS

The objective of this section is to establish an equivalence between the Kitaev chain JJ and the QSH JJ at low energies. We begin by demonstrating that the low-energy continuum expansion of the lattice model exhibits an effective TR symmetry which allows mapping to the QSH JJ. Then, we proceed with a pedagogical discussion of the fractional Josephson effects that arise when the effective TR symmetry is broken or many-body interactions are turned on. After that, many-body spectra and wavefunctions for the 4π - and 8π -periodic scenarios are obtained by exact diagonalization of the lattice model. One important conclusion from this section is that the 8π Josephson effect can occur in Kitaev chains. This statement complements that of Ref. 14, where the authors considered an interacting Rashba nanowire with “true” TR symmetry (i.e., no magnetic fields). Here, we demonstrate that the 8π -periodic Josephson effect is also possible in Rashba nanowires placed under magnetic fields, because of an effective TR symmetry that emerges at low energies when the JJ has a high transparency.

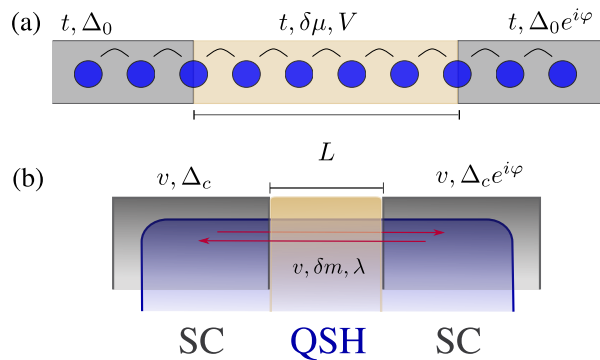


Figure 1: (a) Cartoon of a Kitaev chain Josephson junction containing N sites (blue). A pair of p-wave superconducting regions (gray) of pairing strength Δ_0 are separated by a normal weak link (yellow) containing N_L sites. The superconducting phase difference is φ . When the hopping amplitude t and the onsite potential for the spinless fermions are uniform throughout the system, an effective TR symmetry squaring to -1 emerges at low energies. Local onsite potentials ($\delta\mu$) break this symmetry, whereas first-neighbor extended Hubbard interactions (V) do not. (b) Cartoon of a quantum spin-Hall Josephson junction, with a pair of helical edge modes (red arrows) of velocity v . At low energies, the Kitaev chain JJ can emulate a QSH JJ. Local onsite potentials and first-neighbour repulsive interactions of the Kitaev JJ map onto magnetic perturbations (δm) and TR-preserving interactions (λ) in QSH JJs, respectively.

A. Lattice and continuum models

Figure 1(a) illustrates a Kitaev chain of N sites, whose Hamiltonian reads

$$H_{JJ} = - \sum_l \left[\left(t c_l^\dagger c_{l+1} + \Delta_l c_l c_{l+1} + h.c. \right) + \mu c_l^\dagger c_l \right]. \quad (1)$$

Here, c_l 's are fermion operators at site $l \in \{-N/2, \dots, N/2 - 1\}$, μ is a uniform chemical potential, $t > 0$ is the hopping parameter, and Δ_l is the complex pairing potential at site l . To obtain a Josephson junction with a weak link of length $N_L - 1$, we consider

$$\Delta_l = \begin{cases} \Delta_0 & , l < -N_L/2 \\ 0 & , -N_L/2 \leq l < N_L/2 \\ \Delta_0 e^{i\varphi} & , l \geq N_L/2 \end{cases}, \quad (2)$$

where φ is the superconducting phase difference across the junction, and Δ_0 is taken to be real. For simplicity, we take N and N_L to be even. In this spinless model, the TR operation is simply the complex conjugation K . For the JJs studied in this work, the charging energy is assumed to be much smaller than the Josephson energy and thus φ is regarded as a c-number.

Assuming that the chemical potential is well within the bandwidth ($|\mu| \ll 2t$), namely that the chain is well within the topologically nontrivial phase, we can make a low-energy expansion of the fermionic lattice modes

close to the two normal-phase Fermi points: $a^{-1/2}c_l \approx [e^{ik_F x}\psi_R + e^{-ik_F x}\psi_L]$, where a is the lattice constant ($x = la$), $\hbar = 1$, and $\psi_{R,L}$ are slowly fluctuating right- and left-mover fields. The Fermi wavevector k_F is defined through $\mu = -2t \cos k_F a$. To leading order in a gradient expansion of a , and neglecting fast oscillating terms, Eq. (1) becomes

$$H_{JJ}(\varphi) \approx v \int dx \left(\psi_R^\dagger(-i\partial_x)\psi_R - \psi_L^\dagger(-i\partial_x)\psi_L \right) \quad (3)$$

$$+ \int dx \left(\Delta_c \Theta(|x| - L/2) e^{i\Theta(x)\varphi} \psi_L \psi_R + h.c. \right),$$

where $\Theta(x)$ is the step function, $v = 2at \sin(k_F a)$ is a velocity, $\Delta_c = 2\Delta_0 \sin(k_F a)$ is the effective pairing potential, $L = (N_L - 1)a$ is the length of the weak link, and the superconducting phase was globally shifted by $\pi/2$. As illustrated in Fig. 1(b), the same Hamiltonian describes a JJ at the edge of a spin-momentum-locked QSH insulator with proximitized s-wave superconductivity.^{3,4} Next, we consider possible antiunitary TR operators, which commute with our low-energy description of $H_{JJ}(\varphi)$.

The lattice level TR operator \mathcal{T}_+ acts on the continuum basis by exchanging L and R modes up to a gauge-dependent phase. For Eq. (3), TR acts on the operators as $\mathcal{T}_+\psi_L\mathcal{T}_+^{-1} = i\psi_R$, $\mathcal{T}_+\psi_R\mathcal{T}_+^{-1} = i\psi_L$, and the lattice level symmetry is preserved such that $[H_{JJ}(n\pi), \mathcal{T}_+] = 0$, for $n \in \mathbb{Z}$. Defining a spinor (ψ_R, ψ_L) with the left- and right-moving modes, and a set of Pauli matrices τ_i ($i = x, y, z$) acting on this space, the so-called *first-quantized* description of this TR operator is $T_+ = i\tau_x K$, with $T_+^2 = +1$. In addition, we can define a second antiunitary operator \mathcal{T}_- which also commutes with Eq. (3) at $\varphi = n\pi$ ($n \in \mathbb{Z}$) and with first-quantized representation $T_- = i\tau_y K$. Since $T_-^2 = -1$, this additional symmetry enforces Kramers degeneracies at TR-invariant superconducting phase differences.

Even though the fermions ψ_R and ψ_L carry no spin degrees of freedom, their Hamiltonian displays the same symmetries and behavior as that of a QSH edge state. Unlike in the case of the QSH edge, however, this $T_- = i\tau_y K$ TR symmetry is only effective. First, it crucially relies on the validity of neglecting the fast oscillating terms in the low-energy expansion leading to Eq. (3). In order to be valid, this approximation requires the superconducting coherence length $\xi_0 = \hbar v / \Delta_c = ta / \Delta_0$ to obey $\xi_0 \gg 2\pi / k_F$, which will be satisfied for lattice parameters such that $t \gg \Delta_0$ ($\xi_0 \gg a$). Second, certain perturbations of the lattice Hamiltonian (1), such as local spatial inhomogeneities in the hopping parameter or in the chemical potential, produce terms in the continuum approximation that do not commute with \mathcal{T}_- , leading to single-body backscattering terms between left- and right-movers. In short, \mathcal{T}_- is a low-energy symmetry of the Kitaev chain JJ only when the transparency of the junction is unity. Extended Hubbard interactions – the simplest two-body terms in the Kitaev chain – preserve \mathcal{T}_- at low

energies. For now, we proceed with the non-interacting and fine-tuned TR-preserving scenario.

B. Single-particle states

In this subsection, we validate the continuum expansion of the lattice model by calculating and comparing the spectra of Eqs. (1) and (3). This exercise will set the notation for the following sections. Since Eq. (3) has been previously solved,^{2-4,23} here we review the main results rapidly but pause on some intricacies that are rarely discussed in the literature.

Measuring energies and lengths in units of Δ_c and ξ_0 respectively, Eq. (3) can be recast in the Bogoliubov de Gennes (BdG) form

$$H_{JJ}(\varphi) \approx \frac{1}{2} \int dx \Psi^\dagger h(\varphi) \Psi, \quad (4)$$

where $\Psi = (\psi_R, \psi_L, \psi_L^\dagger, -\psi_R^\dagger)^T$. In this basis, the single-particle BdG Hamiltonian reads

$$h(\varphi) = [-i\tau_z \partial_x] \rho_z + \Theta(|x| - L/2) \rho_x e^{i\rho_z \Theta(x)\varphi}, \quad (5)$$

where $L/\xi_0 \rightarrow L$, Pauli matrices ρ_i act in the Nambu particle-hole space, and, as mentioned above, τ_i matrices act in the ψ_L, ψ_R space.

Using $[h, \tau_z] = 0$, we decompose the Hilbert space in two τ_z eigensectors and solve

$$h_\tau(\varphi) \psi_\tau = E_\tau \psi_\tau \quad (6)$$

with wavefunctions of the form $\psi_+ = (u_+, 0, v_+, 0)^T$ and $\psi_- = (0, u_-, 0, v_-)^T$ obeying continuous boundary conditions at $x = \pm L/2$.

1. Energy spectrum of Eq. (6)

Let us concentrate on the Andreev bound state (ABS) spectrum, i.e. states with discrete energies inside the bulk SC gap ($|E_\tau| < 1$). The ABS energies are determined by the solutions of the transcendental equation

$$\tan(\tau L E_\tau) = \frac{\sqrt{1 - E_\tau^2} - \tau E_\tau \tan\left(\frac{\varphi}{2}\right)}{\tau E_\tau + \sqrt{1 - E_\tau^2} \tan\left(\frac{\varphi}{2}\right)}, \quad (7)$$

which reduces to an earlier result⁴ at $\varphi = \pi$. For each value of φ , the solutions $E_{n,\tau}(\varphi)$ are discrete and labelled with the indices n and τ . The latter index characterizes the slope of the energy eigenvalue as a function of φ : $\tau = +1$ for negative slope, $\tau = -1$ for positive slope.

Figure 2 displays the solutions of Eq. (7) (full black) and a single-particle diagonalization of Eq. (1) (red dots). A good agreement is obtained between the two sets of curves for energies well inside the bulk SC gap. The

agreement can be made even better by increasing the ratio ξ_0/a , which further suppresses the \mathcal{T}_- -breaking fast oscillating terms.

The structure of the energy eigenvalues in Fig. 2 is constrained by the Nambu particle-hole operator $C = \rho_y \tau_y K$ and the TR operator $T_- = i\tau_y K$, which impose

$$\begin{aligned} \tau_y \rho_y h(\varphi) \rho_y \tau_y &= -h^*(\varphi) \\ \tau_y h(\varphi) \tau_y &= h^*(-\varphi). \end{aligned} \quad (8)$$

These relations in turn enforce

$$\begin{aligned} E_\tau(\varphi) &= -E_{-\tau}(\varphi) \\ E_\tau(\varphi) &= E_{-\tau}(-\varphi), \end{aligned} \quad (9)$$

where the left- and right-hand-sides need not correspond to the same value of n . As a consequence of TR symmetry and the 2π -periodicity of the Hamiltonian, different ABS cross at values of φ that are multiples of π . The index n can be used to identify these crossings, with $n > 0$ if the crossing happens at positive energies, $n = 0$ if the crossing is at vanishing energy, $n < 0$ for crossings at negative energies. The number M of positive-energy ABS crossings at $\varphi = \pi$ depends on the length of the weak link and is fixed by $-\frac{\pi}{2} < L - M\pi \leq \frac{\pi}{2}$, as can be concluded from Eq. (7). With the parameter values of Fig. 2 we have $M = 1$, which is the minimum necessary for the \mathbb{Z}_4 Josephson effect to be discussed below. For concreteness, we will keep this number of crossings for the remainder of this paper.

To gain some analytical insight the characteristic energy scale of the ABS modes, we take an approach of replacing the SC electrodes by point-like SC leads. In this case, following the standard procedure of effective field theories, we fit for an effective SC pairing strength that returns the correct energy spectrum (see Ref. [24] for an illuminating discussion). After putting back the units, this exercise results in²³

$$E_{n,\tau} = \frac{\Delta_{\text{eff}} \xi_0}{2L} [\pi(2n + \tau) - \tau\varphi], \quad (10)$$

thereby uncovering the scaling of ABS energies with the Thouless energy $E_T = \Delta_c \xi_0 / L = v/L$. Fitting an effective SC pairing of $\Delta_{\text{eff}} \approx 0.77\Delta_c$, one recovers the blue dashed curves in Fig. 2, which again match the numerical data at low energies, as expected for an effective field theory.

2. Wavefunctions of Eq. (6)

The nonzero components of the $\psi_{n>0,\tau}$ bound states are^{2,4}

$$\begin{aligned} u_{n,\tau} &= A_{n,\tau} e^{-\sqrt{1-E_{n,\tau}^2}|x-l(x)|} (-1)^n e^{i\tau E_{n,\tau} l(x)} \\ v_{n,\tau} &= -\tau A_{n,\tau} e^{-\sqrt{1-E_{n,\tau}^2}|x-l(x)|} e^{i(\frac{\varphi}{2})} e^{-i\tau E_{n,\tau} l(x)}, \end{aligned} \quad (11)$$

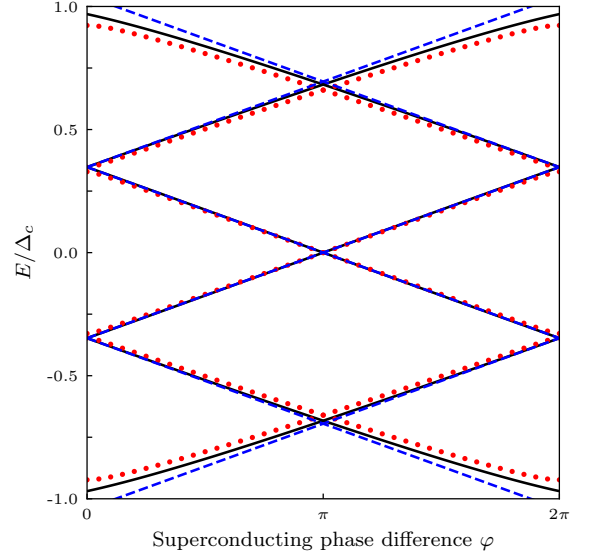


Figure 2: Non-interacting QSH JJ single-particle spectrum obtained for $\mu = 0$, $\Delta_0 = t/2$ ($\xi_0 = 2a$). Red dots are obtained from numerical diagonalization of the Kitaev chain JJ ($N_L = 8$, $N = 200$), black full curves are obtained from solving the continuum effective theory (cf. Eq. (7), with $L = 3.5\xi_0$). No adjustment of parameters are made. Blue dashed curves are obtained by an effective model where the superconducting banks of the junction are substituted by point-like leads and an effective pairing $\Delta_{\text{eff}} \approx 0.77\Delta_0$.

where

$$l(x) = \begin{cases} x & \text{if } |x| < L/2 \\ \text{sgn}(x) \frac{L}{2} & \text{if } |x| > L/2 \end{cases} \quad (12)$$

and the normalization factor reads $|A_{n,\tau}| = \{2[L + (1 - E_{n,\tau}^2)^{-1/2}]\}^{-1/2}$. To access the $\psi_{n<0,\tau}$ states, it suffices to apply the Nambu particle-hole transformation $C = \rho_y \tau_y K$. The eigenstates obey the orthogonality relations

$$\int dx \psi_{n,\tau}^\dagger(x, \varphi) \psi_{n',\tau}(x, \varphi) = \delta_{\tau,\tau'} \delta_{n,n'} \quad (13)$$

and, if supplemented with the continuum of scattering states, the completeness relation

$$\sum_{n,\tau} \psi_{n,\tau}(x, \varphi) \otimes \psi_{n,\tau}^\dagger(x', \varphi) = \mathbb{I}_{4 \times 4} \delta(x - x') \quad (14)$$

is respected, where $\mathbb{I}_{4 \times 4}$ is the 4×4 identity matrix.

For later discussion on the transformation properties of the many-body states under TR, it is convenient to consider the action of \mathcal{T}_- on the above wavefunctions. The transformation rules may be written as

$$\begin{aligned} i\tau_y \psi_{n,\tau}^*(x, \varphi) &= \tau \psi_{n+\tau, -\tau}(x, -\varphi) \\ &= -\tau \psi_{n, -\tau}(x, 2\pi - \varphi). \end{aligned} \quad (15)$$

C. Non-interacting many-particle states

The single-particle wavefunctions and energies from the previous subsection allow us to construct non-interacting many-particle states in the continuum approximation. This construction will be useful for later discussion on interacting JJs. The starting point is to expand the field operators in terms of ABS as

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= \sum_{n,\tau} \psi_{n,\tau}(x, \varphi) a_{n,\tau}(\varphi) \\ a_{n,\tau}(\varphi) &= \int dx \psi_{n,\tau}^\dagger(x, \varphi) \Psi(x),\end{aligned}\quad (16)$$

where the operator $a_{n,\tau}$ annihilates the ABS labeled with (n, τ) . For the junction length $L \approx \pi\xi_0$ chosen above, we may limit ourselves to the six lowest-energy states,

$$|j; \varphi\rangle, \quad j = 0, \dots, 5, \quad (17)$$

which are plotted in Fig. 3 and presented in more detail in Appendix A. These states are built from fixing $|0; \varphi = 0\rangle$ with all negative energy single-particle states filled. The excitations over the ground state involve “particle-hole” pairs composed of positive energy quasiparticles, together with their Nambu conjugate quasiholes. The total number of BdG quasiparticles is the same in all states.

With the states in Eq. (17) and the single-particle energies from the previous subsection, one can build the low-energy many-body spectrum. Alternatively, one can perform a brute-force exact diagonalization of the lattice Hamiltonian in the full many-body Fock space, without any reference to single-particle states. The results of both approaches are depicted in Fig. 3.

On the one hand, we find an excellent agreement between the single-body lattice diagonalization (red dots), where we use $N = 200$ sites, and the many-body numerics (green dashes), where we use $N = 26$. This indicates that the finite size effects originating from the superconducting leads are not significant. On the other hand, only a fair agreement is obtained between the continuum (black curves) and the lattice numerics. This discrepancy can be tracked down to the φ -dependent contribution of the continuum of scattering states to the ground state energy,²⁵ which is not captured in the continuum analysis. A better comparison between the effective theory and the exact diagonalization of the lattice model can be achieved by subtracting off the ground state energy at each value of φ separately. The obtained excitation energies are physically observable e.g. in the tunneling density of states⁴ or in the cQED response functions evaluated in the next section. When comparing these excitation energies, a much improved agreement is found between the exact diagonalization results and the analytical results (see Fig. 11 in Appendix A).

On a related note, the avoided crossings at $\varphi = 0, 2\pi$ between the states $|1\rangle$ and $|2\rangle$ (cf. the green dashes and red dots in Fig. 3) result from the finite ratio of ξ_0/a

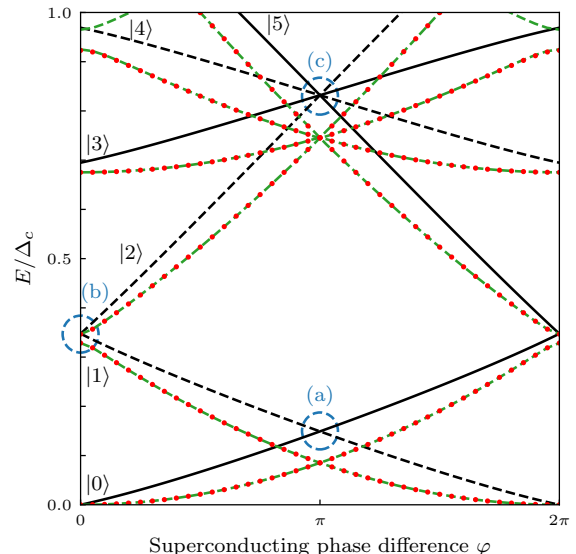


Figure 3: Many-body energy spectrum in the absence of interactions. The parameter values are the same as in Fig. 2. Black curves are obtained by solving the transcendental equation (7) and by thereafter building many-body energies from Eq. (17); see Appendix A for further details. Full versus dashed black lines correspond to different eigenvalues of the parity operator (22). Contributions from single-particle scattering states are ignored, which generates a mismatch with the remaining data. Red dots correspond to a single-body exact diagonalization of Eq. (1) for chains of $N = 200$ sites, with many-body energies built in a similar way as the black lines from Eq. (17), but scattering states taken into account. Green dashes are also obtained from the lattice Hamiltonian, but from a brute force diagonalization in the many-body Fock space for a chain with $N = 26$ sites. Avoided crossings labeled (b) are due to \mathcal{T}_- -breaking terms in the lattice Hamiltonian which become negligible in the $\xi_0 \gg a$ limit (see Fig. 11 of Appendix A).

leading to the continuum Hamiltonian being only approximately equivalent to the lattice model, with small fast-oscillating \mathcal{T}_- -breaking terms lifting Kramers degeneracy. We have verified that these anticrossings are eliminated by increasing the ratio of ξ_0/a , which is easily done for single-particle diagonalizations, but not for the many-body case (due to system size limitations).

For the remainder of this subsection, we study the rich structure of crossings in Fig. 3 from a symmetry point of view. We begin by recalling that TR acting in the second-quantized operators yields²⁶

$$\mathcal{T}_- \Psi(x) \mathcal{T}_-^{-1} = i\tau_y \Psi(x). \quad (18)$$

Combining Eqs. (15), (18) and (16), we get

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_- a_{n,\tau}(\varphi) \mathcal{T}_-^{-1} &= \tau a_{n+\tau, -\tau}(-\varphi) \\ &= -\tau a_{n, -\tau}(2\pi - \varphi).\end{aligned}\quad (19)$$

Consequently, the action of \mathcal{T}_- on the many-body states

of Eq. (A1) at $\varphi = 0$ returns (up to phase factors)

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_- |0; 0\rangle &\sim |0; 0\rangle \\ \mathcal{T}_- |1; 0\rangle &\sim |2; 0\rangle \\ \mathcal{T}_- |3; 0\rangle &\sim |3; 0\rangle,\end{aligned}\quad (20)$$

with the other states being either invariant or having partners at higher energies. At $\varphi = \pi$, one gets

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_- |0; \pi\rangle &\sim |1; \pi\rangle \\ \mathcal{T}_- |2; \pi\rangle &\sim |5; \pi\rangle \\ \mathcal{T}_- |3; \pi\rangle &\sim |4; \pi\rangle.\end{aligned}\quad (21)$$

These transformations demonstrate that many of the crossings in the spectrum of Fig. 3 are protected by the effective TR invariance of the low-energy physics (or the true TR invariance of the QSH edge modes, in the case of a QSH JJ). Yet, some of the crossings therein are protected by another symmetry as well, namely the local fermion parity. The local fermion-parity operator counts the parity of the number of ABS excitations in the many-body state. It can be written as

$$P_{\text{in}}(\varphi) \equiv (-1)^{\left(a_{0,+}^\dagger + a_{0,+} + \sum_{n>0,\tau} a_{n,\tau}^\dagger a_{n,\tau}\right)}, \quad (22)$$

where the sum over n is done among the discrete-energy bound-states only ($n = 1$ only, for our parameter values).³⁵ An application of this operator over the many-body states written explicitly in Eq. (A1) returns the pattern of full and dashed black curves displayed in Fig. 3. Importantly, P_{in} is conserved at every φ as long as the total fermion parity of the system is conserved.

The conservation of P_{in} and TR allows to understand the various crossings in Fig. 3. At $\varphi = 0$, $|1; 0\rangle$ and $|2; 0\rangle$ have the same parity and are related by TR symmetry; they constitute Kramers partners. At $\varphi = \pi$, TR operation connects states of opposite parity. Accordingly, the degeneracy between $|0; \pi\rangle$ and $|1; \pi\rangle$ (two states of opposite parity) is protected by both TR symmetry and the conservation of P_{in} . Indeed, in the topological phase, the parity eigenvalues of the two lowest-energy many-body states are inverted when going from $\varphi = 0$ to $\varphi = 2\pi$, which requires a band crossing in between.

The higher energy 4-fold crossing at $\varphi = \pi$ is only partly protected. On the one hand, the degeneracy between $|2; \pi\rangle$ and $|5; \pi\rangle$, as well as the degeneracy between $|3; \pi\rangle$ and $|4; \pi\rangle$ are enforced by both TR symmetry and the conservation of P_{in} . On the other hand, the degeneracy between $|2; \pi\rangle$ and $|3; \pi\rangle$ is “accidental” and guaranteed only at the non-interacting level. Indeed, we will show below that TR- and parity-preserving interactions introduced at the lattice level break the 4-fold degeneracy into a pair of 2-fold crossings, as previously proposed in the context of QSH JJ.¹⁻⁵

D. Fractional Josephson effects: phenomenology

Having understood the low-energy spectrum of the non-interacting junction, it is useful to embark on a ped-

agogical discussion of the different fractional Josephson effects listed in the Introduction. The different effects can be distinguished by focusing on the several crossings that take place in the energy spectrum of Fig. 3, at $\varphi = n\pi$ ($n \in \mathbb{Z}$). To guide the explanation, we use the labels “(a)” for the lowest 2-fold crossing at $\varphi = \pi$, “(b)” for the lowest 2-fold crossings at $\varphi = 0$ and “(c)” for the 4-fold crossing at $\varphi = \pi$.

When all (a), (b) and (c) crossings are preserved (like in Fig. 3), the ABS energy levels are continuously connected, as a function of φ , with the continuum of scattering states of energies greater than Δ_c . As a consequence, dc-voltage biasing the junction leads to a time-dependent evolution of the states that eventually connects the ground state with the continuum of scattering states, thereby generating a dissipative dc contribution on top of a 2π -periodic Josephson current.^{1,2} In order to have only the purely ac component of the Josephson current, it is necessary to disconnect the ABS from the continuum by opening a gap either at (a), (b) or (c).

The crossing at (a) is gapped in topologically trivial JJs, which lack MZMs and do not have the corresponding conserved local-fermion-parity. Accordingly, the lowest curve in Fig. 3 fully separates from the rest. The evolution of this state as function of φ is 2π -periodic, corresponding to a standard, dissipationless, Josephson effect.

A second possible scenario involves lifting the crossing (b). Since this crossing is protected by TR symmetry alone, it can be gapped by applying a magnetic perturbation on the QSH JJ,³ or by adding a potential barrier (which breaks \mathcal{T}_- symmetry) in the Kitaev chain JJ. The gap scales with the strength of the TR-breaking perturbation, which is responsible for localizing the Majorana modes at the boundaries of the weak link. Due to this gap, a doublet of states (the crossing at (a) being protected by P_{in} conservation) becomes disconnected from the remaining states, including the scattering ones, and the 4π -periodic fractional Josephson effect arises. This effect is characteristic of weakly hybridized MZMs allowing for single-electron tunneling through the junction.

The third and last scenario arises from lifting the 4-fold degeneracy at (c). This crossing, composed of states with one- and two-quasiparticle excitations, exists only if the JJ can accommodate at least three discrete ABS levels with energies smaller than Δ_c , cf. Fig. 2. TR- and P_{in} -conserving interactions can lift this 4-fold crossing in two pairs of TR- and parity-protected crossings. In a QSH JJ, umklapp interactions (at half-filling) or interactions with magnetic impurities (at any filling) are known to lift the 4-fold degeneracy.^{2,4,5,9,11,14}

The case of an interacting Kitaev chain JJ will be discussed below. The consequence of the gap opening at (c) is an 8π -periodic fractional Josephson effect characterized by transport of charges $e/2$ through the junction.

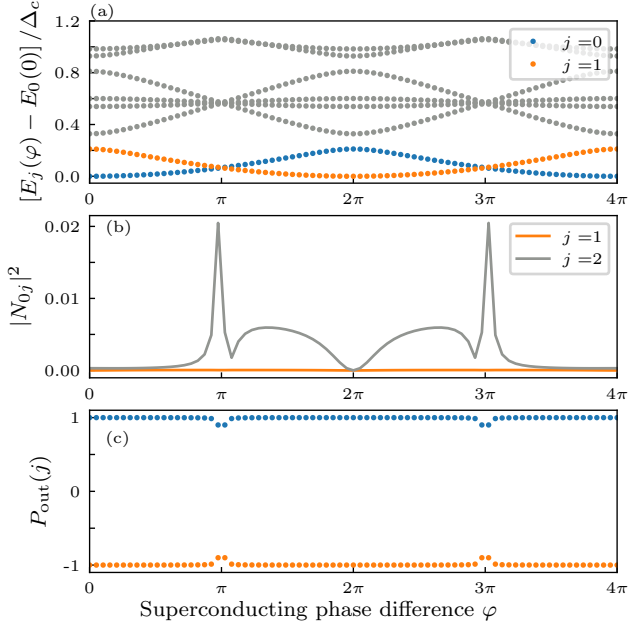


Figure 4: Exact diagonalization of a non-interacting Kitaev chain JJ with broken effective TR. The parameter values are $\mu = 0$, $\Delta_0 = t/2$, $N_L = 8$, $N = 26$, $\delta\mu/t = 1.3$. (a) Many-body spectrum. The blue and orange curves form the ground state multiplet. Grey states are excited states. (b) Off-diagonal matrix elements of the total number operator \hat{N} for the lowest many-body states. The vanishing of $N_{01}(\varphi)$ follows the conservation of the local fermion-parity in panel (c). (c) The parity of occupation of the non-local fermion in Eq. (24) for the states forming the ground state multiplet. Parity conservation protects the crossings in the ground state doublet and enforces the 4π periodicity of the blue and orange states in panel (a).

E. T-breaking perturbations

In this subsection, we consider a junction where the effective TR symmetry \mathcal{T}_- is broken and the 4π -periodic Josephson effect arises. This can be achieved in several ways but, to keep the analogy with the QSH JJ interrupted by a magnetic insulator, we choose to implement a potential barrier inside the junction,

$$H_{SB} = \delta\mu \sum_{l > -N_L/2}^{N_L/2-2} c_l^\dagger c_l. \quad (23)$$

For more appreciable effects, we take the perturbation to be larger than the bandwidth ($\delta\mu > t$). This term transforms the normal weak link into a trivial insulator and thereby localizes Majorana modes at the edges of each SC bank, which hybridize perturbatively. From the point of view of our continuum theory, H_{SB} leads to single-body backscattering between the left- and right-movers, violating the effective TR symmetry.

In order to make a seamless connection with the interacting case discussed in the next subsection, we per-

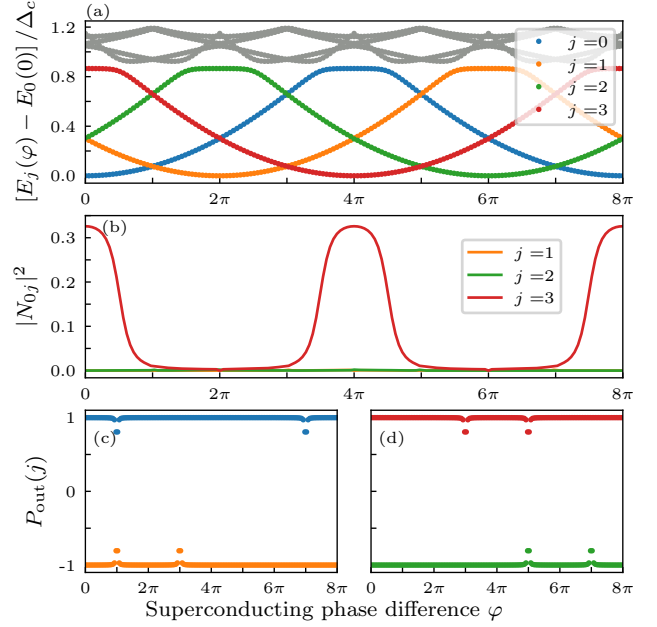


Figure 5: Exact diagonalization of the interacting Kitaev chain JJ. The parameter values are $\mu = 0$, $\Delta_0 = t/2$, $N_L = 8$, $V = 2t$ and $N = 26$. (a) Many-body spectrum. Colored states form the 4-fold ground state multiplet. Grey states are excited states. (b) Off-diagonal matrix elements of the total number operator \hat{N} between the $i = 0$ (blue) band and the rest of the states forming the ground state multiplet. The matrix elements between states of opposite local fermion parity vanish. The matrix elements between states of the same parity are nonzero, except when they cross. At the crossing points, the effective TR symmetry enforces the vanishing of the matrix element of \hat{N} . (c) Parity of occupation of the non-local fermion in Eq. (24) for the states forming the ground state multiplet.

form an exact diagonalization of the non-interacting TR-broken junction in the many-body Fock space. As the lattice Hamiltonian preserves the total fermion parity, we project the Fock space into the subspace of an even total number of fermions. As seen in Fig. 4(a), the subgap part of the spectrum is disconnected from the scattering states, leaving the blue and orange bands as the ground state doublet. As expected, the avoided crossing happens at the crossing (b) of the spectrum of Fig. 3.

The continuation of the colouring through the crossings at $\varphi = \pi$ and 3π in Fig. 4(a) is justified by the conservation of P_{in} (cf. Eq. (22)). This form of the parity operator cannot be easily accessed from the many-body exact diagonalization, which circumvents the single-particle energy levels.

To verify the protection of the crossings, we consider instead the parity of occupation of a non-local state built out of the MZMs Γ_L and $\Gamma_R(\varphi)$ located respectively at the left and right *outer* ends of the chain.¹² Since the parity of the total number of fermions has been fixed, the parity of this non-local outer mode, with operator

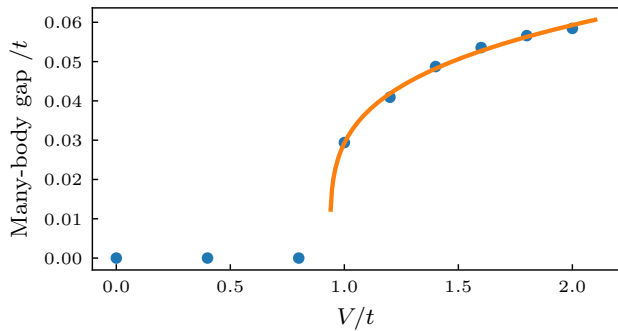


Figure 6: Many-body gap of the interacting Kitaev chain JJ, calculated by exact diagonalization (blue disks). The parameter values are $\mu = 0$, $\Delta_0 = t/2$, $N_L = 8$ and $N = 26$. The gap scales as $\sim (V - V_c)^\gamma$, where V_c is the critical interaction strength for the gap opening. $V_c \simeq (0.94 \pm 0.02)t$, and $\gamma \simeq (0.25 \pm 0.03)$ are obtained from a power-law fit of the numerical data (orange solid curve).

corresponding to³⁶

$$P_{\text{out}}(\varphi) = i\Gamma_L\Gamma_R(\varphi), \quad (24)$$

is locked to the value of P_{in} in Eq. (22). In the thermodynamic limit, where each superconducting bank is sufficiently long, the MZM operators are well localized and commute with the lattice Hamiltonian (1) even when the JJ is strongly interacting. Thus, for N sufficiently large, the states $|j; \varphi\rangle$ are eigenstates of $P_{\text{out}}(\varphi)$.

The computation of the expectation value $P_{\text{out},i}(\varphi) \equiv \langle i, \varphi | P_{\text{out}} | i, \varphi \rangle$ returns Fig. 4(c), showing that the parity is conserved and continuously defined for the blue and orange ground doublet across the full 4π evolution. The small kinks close to $\varphi = \pi, 3\pi$ are finite-size effects that should vanish for larger values of N . Consequently, the

crossings are protected and the 4π Josephson effect develops.

From the many-body spectrum and wavefunctions, we can obtain matrix elements of physical observables. With the cQED applications of the next section in mind, let us consider $N_{ij}(\varphi) \equiv \langle i, \varphi | \hat{N}^j | j, \varphi \rangle$, the matrix elements of the total number of particles $\hat{N} = \sum_i c_i^\dagger c_i$. Figure 4(b) displays N_{0j} , where the state $i = 0$ corresponds to the blue state in Fig. 4(a). Since the total number of particles is a sum over local operators, it cannot connect states with different values of the non-local operator P_{out} . This is why $N_{01}(\varphi)$ and $N_{02}(\varphi)$ vanish.³⁷ In contrast, N_{03} is nonzero because the state $j = 3$ has the same parity as $j = 0$ and can thus be connected by a local and parity-preserving operator such as \hat{N} .

F. Short-range Coulomb interactions

The previous subsections have established the equivalence between the low-energy properties of the QSH JJ and the Kitaev chain JJ at the non-interacting level. Here, we incorporate to the Hamiltonian (1) the simplest possible interaction term, a first neighbor extended Hubbard interaction inside the normal region of the junction

$$H_{EH} = V \sum_{l=-N_L/2}^{N_L/2-2} n_l n_{l+1}. \quad (25)$$

Outside the junction, the proximity coupling to a three dimensional superconductor is assumed to screen away the interactions.

In the continuum approximation, the extended Hubbard interactions decompose into

$$\begin{aligned} \frac{c_n^\dagger c_n}{a} \frac{c_{n+1}^\dagger c_{n+1}}{a} &\approx \rho(x) \rho(x+a) + \left[e^{i2k_F a} \left(\psi_R^\dagger \psi_L \right) (x) \left(\psi_L^\dagger \psi_R \right) (x+a) + h.c. \right] \\ &+ \left[e^{-i2k_F (2x+a)} \left(\psi_R^\dagger \psi_L \right) (x) \left(\psi_R^\dagger \psi_L \right) (x+a) + h.c. \right] \\ &+ \left[e^{-i2k_F x} \left(e^{-i2k_F a} \rho(x) \left(\psi_R^\dagger \psi_L \right) (x+a) + \left(\psi_R^\dagger \psi_L \right) (x) \rho(x+a) \right) + h.c. \right], \end{aligned} \quad (26)$$

where $\rho(x) =: \psi_R^\dagger \psi_R : (x) +: \psi_L^\dagger \psi_L : (x)$ and the colons indicate normal ordering. The terms in Eq. (26) coincide with the ones one would write for an interacting QSH edge with TR symmetry. This establishes the equivalence between the QSH JJ and the Kitaev chain JJ at the interacting level. The first non-oscillating terms on the right hand side of Eq. (26) are known to renormalize the velocities of left- and right-moving fermions,²⁷ with-

out opening spectral gaps. The second line of Eq. (26) (umklapp/pair-backscattering terms) and the third line (Friedel oscillating terms) are rapidly oscillating away from $\mu = 0$ and $\mu = \pm 2t$, respectively. In perturbative renormalization group analyses, only the umklapp terms at half-filling ($\mu = 0$) are seen to lead to a strong-coupling flow that indicates a gap opening in the low energy degrees of freedom.

Figure 5(a) displays the energy dispersion as a function of φ for the 8 lowest-energy many-body states, obtained from exact diagonalization. The blue, orange, green and red curves form the ground state multiplet, separated from the excited states (in grey) by a many-body gap. This gap develops at the 4-fold crossing of Fig. 3 and scales as $\sim (V - V_c)^\gamma$, with $V_c/t \simeq 0.94$ and $\gamma \simeq 0.25$ obtained by a power-law fit of the numerical data (see Fig. 6).

We remark that $V/t > 1$ is a strong interaction regime, likely hard to achieve in real systems. Also, even in this strong coupling regime, the many-body gap is a small fraction of the bandwidth. We have checked numerically that the many-body gap is not reduced when $\mu \neq 0$. At first sight, this finding is surprising from the point of view of a perturbative analysis. One possible explanation is that the gap may be originating from oscillatory umklapp or Friedel terms, because these oscillations are not sufficiently fast to average out in our weak links of mesoscopic size. Another possible explanation is that the perturbative arguments arguing for the irrelevance of the oscillatory Friedel and umklapp terms break down in the strong coupling regime, where the interaction strength exceeds the bandwidth.

The colors in Fig. 5(a) are in one-to-one correspondence with the mean values of P_{out} in Figs. 5(c) and (d). This parity conservation protects the band crossings at $\varphi = \pi \bmod 2\pi$, while the crossings at $\varphi = 0 \bmod 2\pi$ are preserved by TR symmetry. Thus, the ground state multiplet is 8π -periodic and so is the Josephson effect. In anticipation to the next section, let us once again consider the off-diagonal elements of the total number operator \hat{N} for the states belonging to the ground state multiplet, as displayed in Fig. 5(b). The fact that $N_{01}(\varphi) \simeq N_{02}(\varphi) \simeq 0$ for all values of φ can be attributed to the conservation of the local fermion parity. Indeed, the extended Hubbard interactions, which act again locally and only inside the weak-link, commute with P_{out} . In contrast, $N_{03}(\varphi)$ is finite for all values of φ away from $\varphi = 2\pi \bmod 4\pi$ because the states $j = 0$ and $j = 3$ carry the same parity. The crossings between $j = 0$ and $j = 3$ are, however, still protected by the effective low-energy TR symmetry \mathcal{T}_- , and that translates into the vanishing of $N_{03}(\varphi)$ at $\varphi = 2\pi, 6\pi$.

III. FRACTIONAL JOSEPHSON EFFECTS IN CQED ARCHITECTURES

Due to their high sensitivity, flexibility and non-invasive probing, cQED platforms have been proposed for the study and detection of topological phases in Josephson junctions.^{16–18} The general approach of cQED, as illustrated in Fig. 7, consists of two steps: (i) the placement of the circuit one wishes to study inside a cavity resonator and (ii) the measurement of reflectances and transmittances between in-/out-signal microwave modes inserted in the cavity through a waveguide. The in-/out-

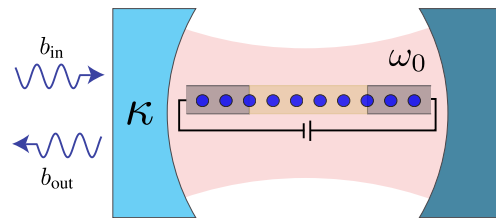


Figure 7: Cartoon of a cQED architecture. A cavity resonator of frequency ω_0 and linewidth κ_0 contains an interacting topological JJ. The cavity is partially transmitting on a single side, so that it can be probed by input/output fields.

modes couple to the cavity photons, whose dynamics is in turn influenced by the dynamics of the circuit of interest.

In this section, we present an exact diagonalization calculation of certain cQED observables in a topological JJ. Our study goes beyond earlier theoretical works by incorporating strong short-range Coulomb interactions, crucial for the emergence of the 8π -periodic Josephson effect.

A. Input/output formalism

We consider a Hamiltonian with three components: probing fields, a cavity and a topological Josephson junction,

$$H = H_S + H_I + \omega_0 a^\dagger a + \sum_n \Omega_n b_n^\dagger b_n - i \sum_n \lambda_n (a^\dagger b_n - a b_n^\dagger). \quad (27)$$

Here, $a^{(\dagger)}$ and $b_n^{(\dagger)}$ are the annihilation (creation) operators for cavity photons and the mode n of the probing field, respectively; Ω_n and λ_n are the frequencies of the probe fields and the cavity-probe coupling constants, respectively; ω_0 is the resonance frequency of the empty cavity. The Hamiltonian H_S describes the JJ,

$$H_S = H_{JJ}(\varphi) + H_\alpha, \quad (28)$$

where $\alpha = SB$ (cf. Eq. (23)) or EH (cf. Eq. (25)), depending on whether we are dealing with the \mathbb{Z}_2 or \mathbb{Z}_4 fractional Josephson effect. Also, we consider a capacitive coupling between the junction and cavity,

$$H_I = g \hat{N} (a + a^\dagger), \quad (29)$$

where g is a coupling constant, and $\hat{N} = \sum_i c_i^\dagger c_i$ is the total number operator.

The dynamics of the cavity fields can be obtained by the standard input/output formalism,²⁸ yielding

$$\dot{\tilde{a}}(t) = -i [\tilde{a}(t), \tilde{H}_I] - \left(i\omega_0 + \frac{\kappa_0}{2} \right) \tilde{a}(t) + \sqrt{\kappa_0} \tilde{b}_{\text{in}}(t). \quad (30)$$

Here, tildes denote operators written in the Heisenberg picture, κ_0 is the cavity damping constant due to the coupling with the probe and

$$\tilde{b}_{\text{in}}(t) \equiv \sum_n \lambda_n \tilde{b}_n(t_0) e^{-i\Omega_n(t-t_0)} \quad (31)$$

is the input field with t_0 a reference time. In Eq. (31), the sum over the modes is constrained to $\Omega_n \approx \omega_0$. The input field is related to the output field b_{out} by the boundary condition

$$\tilde{b}_{\text{in}}(t) + \tilde{b}_{\text{out}}(t) = \sqrt{\kappa_0} \tilde{a}(t). \quad (32)$$

When b_{in} is used to drive the cavity, the readout of b_{out} enables to measure the cavity frequency and linewidth. The commutator in Eq. (30) forecasts that the dynamics of the junction will be intertwined with that of the cavity. To second order in g and in the rotating-wave approximation, Eq. (30) becomes (cf. Appendix B)

$$\dot{\tilde{a}}(t) = -\left(i\omega_R + \frac{\kappa_R}{2}\right) \tilde{a}(t) + \sqrt{\kappa_0} \tilde{b}_{\text{in}}(t) - igN^i(t), \quad (33)$$

where $\omega_R = \omega_0 + \bar{\omega}(\varphi)$ and $\kappa_R = \kappa_0 + \bar{\kappa}(\varphi)$ are the renormalized cavity frequency and linewidth, whereas $N^i(t)$ is the number operator in the interaction picture. Thus, the junction induces a φ -dependent pull $\bar{\omega}(\varphi)$ in the resonance frequency of the cavity, in addition to a φ -dependent change $\bar{\kappa}(\varphi)$ in the cavity linewidth.¹⁸ The explicit expressions for $\bar{\omega}(\varphi)$ and $\bar{\kappa}(\varphi)$ are shown below. The last term in Eq. (33) is an extra driving term for the cavity which, as shown in Appendix B, may be ignored because it contributes only at zero frequency.

The fractional Josephson effects manifest themselves in the φ -dependence of ω_R and κ_R . If the rate at which φ is varied is faster than all the energy relaxation rates of the quasiparticles but smaller than the topological energy gap, ω and κ are 4π - (8π -) periodic functions of φ when the junction hosts a \mathbb{Z}_2 (\mathbb{Z}_4) Josephson effect. One way to realize this condition is through the application of an appropriate dc voltage bias V across the junction, under which $\varphi = \varphi_0 + 2eVt/\hbar$ evolves with time t . In the remainder of this section, we compute $\bar{\omega}(\varphi)$ and $\bar{\kappa}(\varphi)$ and propose an experiment to capture their anomalous periodicities via the input/output fields.

B. Cavity frequency pull

At zero temperature, the expression for the cavity frequency pull reads (cf. Appendix B)

$$\bar{\omega}(\varphi) = 2g^2 \sum_{j \neq 0} |N_{0j}(\varphi)|^2 \frac{\Delta E_{0j}(\varphi)}{(\Delta E_{0j}(\varphi))^2 - \omega_0^2}, \quad (34)$$

where $\Delta E_{0j}(\varphi) = E_0(\varphi) - E_j(\varphi)$, $N_{0j}(\varphi) = \langle 0; \varphi | \hat{N} | j; \varphi \rangle$, and $|0; \varphi\rangle$ is the many-body state whose energy is the lowest of all when $\varphi = 0$ (the blue band in

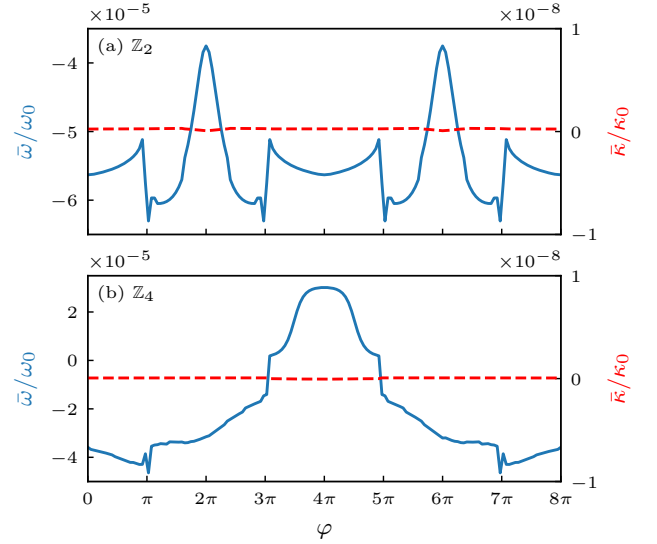


Figure 8: Renormalization of the cavity resonance frequency (blue, full lines) and linewidth (red, dashed lines), calculated by exact diagonalization of the Kitaev chain JJ. (a) Non-interacting JJ with broken time-reversal symmetry. (b) Interacting JJ with time-reversal symmetry. The bare cavity resonance frequency is chosen as $\omega_0 = 4 \times 10^{-3} \Delta_c$, parametrically smaller than the energy gaps separating the ground state multiplets from the excited states. The broadening of the delta functions in Eq. (35) is taken to be of the order of the bare cavity linewidth $\kappa_0 \simeq 10^{-3} \omega_0$. For the cavity-junction coupling strength, we use $g = \omega_0/10$.²⁹ The periodicity of the cavity pull in the superconducting phase difference follows that of many-body wavefunctions of the problem. When ω_0 is large compared to the disorder broadening of the ABS, but smaller than the energy gaps separating the ground state multiplet from the excited states, the conservation of the local-fermion-parity (as well as time-reversal symmetry, in the case of the \mathbb{Z}_4 Josephson effect) results in a negligible renormalization of the cavity linewidth.

either Fig. 4a or Fig. 5a). Replacing the state $|0; \varphi\rangle$ by any other states in the ground state multiplet amounts to an inconsequential shift of φ by a multiple of 2π in Eq. (34). The sum in j is over all other states, scattering states included. In our numerical calculations, we truncate the sum to the 8 lowest-energy many-body states.

Figure 8 displays $\bar{\omega}(\varphi)$ for JJs hosting \mathbb{Z}_2 and \mathbb{Z}_4 Josephson effects. The cavity frequency pull is either 4π - or 8π -periodic in φ . For the 8π scenario, $\bar{\omega}$ can actually become positive, in contrast with the 4π periodic case. The origin of this difference comes from transition matrix elements between states of the same local fermion parity. In JJs hosting the \mathbb{Z}_4 Josephson effect, the fact that $N_{03}(\varphi) \neq 0$ for generic φ and $\Delta E_{03}(\varphi) > 0$ for certain intervals of φ (cf. Fig. 5) is responsible for $\bar{\omega}(\varphi) > 0$ in those intervals. This situation is not realized in JJs that host the \mathbb{Z}_2 Josephson effect, where the conservation of the local fermion parity forbids transitions with $\Delta E_{0j} > 0$.

C. Cavity linewidth renormalization

At zero temperature, the renormalization of the cavity linewidth is given by

$$\bar{\kappa}(\varphi) = 4\pi g^2 \sum_{j \neq 0} |N_{0j}(\varphi)|^2 \times [\delta(\Delta E_{0j}(\varphi) + \omega_0) - \delta(\Delta E_{0j}(\varphi) - \omega_0)]. \quad (35)$$

The Dirac deltas are to be broadened into Lorentzians by effects such as disorder and feedback of the cavity dynamics into the junction energies, which will be considered here only phenomenologically.³⁸

The values of $\bar{\kappa}$ calculated by exact diagonalization are presented in Fig. 8 (red dashed lines). Importantly, when ω_0 is large compared to the disorder broadening of the ABS but smaller than the TR-breaking gap from $\delta\mu$ or the TR-preserving gap due to interactions (a circumstance believed to be realistic), we find $\bar{\kappa} \simeq 0$. This null result has a simple explanation. Because ω_0 is small compared to typical ABS energy scales, the Dirac delta functions in Eq. (35) are satisfied only very close to the crossings. But the matrix elements of $N_{0j}(\varphi)$ are vanishingly small at the crossings, due to the conservation of either the local-fermion-parity or time-reversal.

D. Phase shift

Having found how the topological JJ influences key physical properties of the cavity, we now focus on how to access these. The Fourier transform of Eq. (33) and the boundary conditions in Eq. (32) allow to relate the outgoing signal and incoming signals in a single-sided partially transparent cavity. Neglecting zero-frequency contributions, we obtain

$$\langle \tilde{b}_{\text{out}}(\omega) \rangle = r e^{i\alpha} \langle \tilde{b}_{\text{in}}(\omega) \rangle, \quad (36)$$

where r is the reflection coefficient obeying

$$r^2 = \frac{(\omega - \omega_R)^2 + \left(\frac{\kappa_0 - \bar{\kappa}}{2}\right)^2}{(\omega - \omega_R)^2 + \left(\frac{\kappa_B}{2}\right)^2} \quad (37)$$

and

$$\alpha = \arg \left[(\kappa_0^2 - \bar{\kappa}^2)/4 - (\omega - \omega_R)^2 + i\kappa_0(\omega - \omega_R) \right] \quad (38)$$

is the phase shift. The quantities r and α are directly measurable in experiments. As $\bar{\kappa} = 0$ (cf. preceding subsection), $r^2 = 1$ for all values of φ . Hereafter, we concentrate on α .

Figure 9 shows the behaviour of α as function of φ at frequencies around ω_0 . The phase shift changes sign as the frequency of the probe crosses the resonance frequency. This enables a precise determination of ω_R and its anomalous periodicity through reflectrometry measurements.

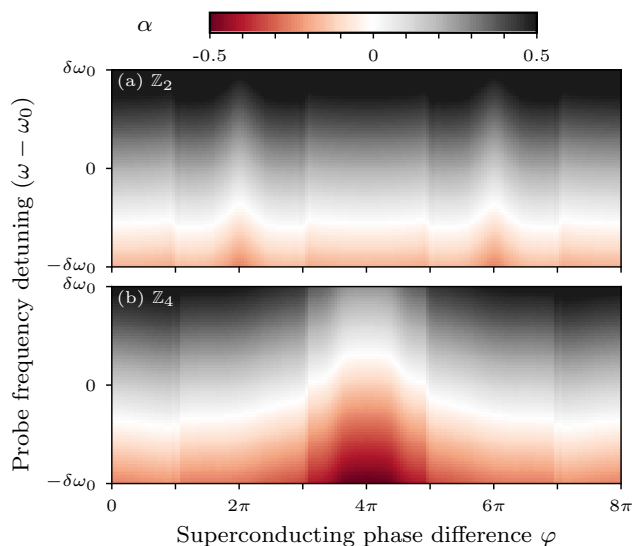


Figure 9: Phase-shift $\alpha(\omega)$ between input and output signals for a single-sided cavity containing a Kitaev chain JJ. We show α for $\omega \in (\omega_0 - \delta\omega_0, \omega_0 + \delta\omega_0)$, where ω_0 is the resonance frequency of the empty cavity and $\delta\omega_0 = 10^{-1}\kappa_0$. Top panel: non-interacting JJ with broken time-reversal symmetry. Bottom panel: interacting JJ with time-reversal symmetry.

One approach to carry out the experimental verification of Fig. 9 consists of the following steps: (1) Measure α as a function of the probing frequency ω in the absence of current and bias voltages. The value of ω at which α changes sign constitutes ω_R at $\varphi = 0$. (2) Choose a window of frequency $\delta\omega_0$ around the $\varphi = 0$ value of ω_R . For each value of frequency inside this window, let φ evolve in time while continuously measuring α . The phase evolution is best accomplished by a dc voltage bias V , under which $\dot{\varphi} = 2eV/\hbar$ is constant. This has the advantage of knowing how much φ has wound in a given measurement time, thereby allowing to extract the periodicity of α in φ .

In order to observe the anomalous periodicities, the measurement time in step (2) must be shorter than the energy relaxation rate, longer than $4\pi\hbar/(eV)$ (so that the phase winds at least by 8π), and much longer than the inverse of the data acquisition rate (which is $\simeq 1$ ns in state of the art experiments³⁰). In addition, $2eV$ must be smaller than (i) the energy gap separating the ground state multiplet from the excited states (to avoid Landau-Zener tunneling away from the ground state), and (ii) $\hbar\omega_0$ (to prevent that the inelastic tunneling of Cooper pairs generates photons at the cavity's frequency). These conditions are simultaneously satisfiable in view of recent reports¹⁹ of long ($\simeq 0.1$ ms) energy relaxation times in Al-coated InAs nanowires.

IV. SUMMARY AND CONCLUSIONS

We have presented an exact diagonalization study of fractional Josephson effects in interacting topological Josephson junctions (JJs). By a careful comparison with a continuum low-energy version of the problem, we have established that JJs created out of Kitaev chains can be used to simulate JJs created at the edges of quantum spin-Hall insulators. Central to this equivalence is an emergent time-reversal symmetry squaring to -1 in the low-energy description of the lattice problem. The existence of this effective symmetry is contingent on having a perfect transparency in the Kitaev chain JJ.

The use of Kitaev chain JJs to simulate quantum spin-Hall JJs offers two advantages. First, it extends the 8π -periodic Josephson effect to systems other than quantum spin Hall insulators, where it was originally proposed. In this regard, the ongoing advances towards the engineering of Kitaev chains,^{31–33} together with gate-tuned transparencies of up to 98% reported in Al-coated InAs nanowires,¹⁹ presage the realization of Kitaev chain JJs of high transparency.

Another advantage of our lattice simulations is that they give access to physical observables that are difficult to compute using continuum analytical approaches from earlier works. To illustrate this point, we have considered an interacting Josephson junction coupled to a microwave resonator and have calculated the renormalizations of the cavity's resonance frequency and linewidth. We have found that the cavity linewidth is approximately unchanged by the presence of the junction for a reasonable range of physical parameters, while the cavity frequency displays 4π - and 8π -periodic features that may be accessed by measuring the phase shift between incoming and outgoing signals.

For future work, it will be interesting to investigate signatures of the \mathbb{Z}_2 and \mathbb{Z}_4 Josephson effects in higher-order photon correlation functions.

Acknowledgments

We thank D. Sénéchal, V. L. Quito, J. Teo, B. Douçot, P. Ghaemi, R. Pereira, J.O. Simoneau, B. Reulet, and F. Zhang for insightful discussions and suggestions. This research has been financed by the Canada First Research Excellence Fund, the Natural Science and Engineering Council of Canada, and the Fonds de Recherche du Québec Nature et Technologies. Numerical calculations were done with computer resources from Calcul Québec and Compute Canada.

Appendix A: Single-particle many-body states

The knowledge of the single-particle Andreev-bound-states allows for an explicit construction of non-interacting low-energy many-body states. Without ap-

plying the Nambu constraint, these many body states are obtained by the introduction of positive energy particles and destruction of their corresponding negative energy particle-hole symmetric partners. The first six states read

$$\begin{aligned} |0; \varphi\rangle &= \left[\prod_{n<0} a_{n,+}^\dagger \right] \left[\prod_{n<0} a_{n,-}^\dagger \right] [a_{0,-}^\dagger] |\Omega_e\rangle \\ |1; \varphi\rangle &= a_{0,+}^\dagger a_{0,-} |0; \varphi\rangle \\ |2; \varphi\rangle &= a_{1,-}^\dagger a_{-1,+} |0; \varphi\rangle \\ |3; \varphi\rangle &= a_{1,-}^\dagger a_{0,+}^\dagger a_{-1,+} a_{0,-} |0; \varphi\rangle \\ |4; \varphi\rangle &= a_{1,+}^\dagger a_{-1,-} |0; \varphi\rangle \\ |5; \varphi\rangle &= a_{1,+}^\dagger a_{0,+}^\dagger a_{-1,-} a_{0,-} |0; \varphi\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A1})$$

where $|\Omega_e\rangle$ is the non-superconducting electron Fermi sea and the φ dependence of the operators has been omitted. These states are pictorially represented in Fig. 10.

To incorporate the Nambu constraint, we have to define a reference set of operators and enforce the particle-hole operation

$$\mathcal{C}\Psi(x)\mathcal{C}^{-1} = \rho_y \tau_y [\Psi^\dagger(x)]^T = \Psi(x). \quad (\text{A2})$$

$$(\text{A3})$$

The excitations can then be constructed as

$$\begin{aligned} |0; \varphi\rangle &= \left[\prod_{n>0} a_{n,+} \right] \left[\prod_{n>0} a_{n,-} \right] [a_{0,+}] |\Omega_e\rangle \\ |1; \varphi\rangle &= a_{0,+}^\dagger |0; \varphi\rangle \\ |2; \varphi\rangle &= a_{1,-}^\dagger |0; \varphi\rangle \\ |3; \varphi\rangle &= a_{1,-}^\dagger a_{0,+}^\dagger |0; \varphi\rangle \\ |4; \varphi\rangle &= a_{1,+}^\dagger |0; \varphi\rangle \\ |5; \varphi\rangle &= a_{1,+}^\dagger a_{0,+}^\dagger |0; \varphi\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

Enforcing the Nambu constraint, the normal ordered Hamiltonian for the junction reads

$$\begin{aligned} :H_{JJ}(\varphi): &= E_{0,+}(\varphi) a_{0,+}^\dagger a_{0,+} + \sum_{n>0,\tau} E_{n,\tau}(\varphi) a_{n,\tau}^\dagger a_{n,\tau} \\ &- \frac{1}{2} \left[E_{0,+}(\varphi) + \sum_{n>0,\tau} E_{n,\tau}(\varphi) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \left[E_{0,+}(0) + \sum_{n>0,\tau} E_{n,\tau}(0) \right], \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

which means that one first has to choose a reference state (here $|0; \varphi=0\rangle$), normal order with respect to it, and then consider the evolution of the phase φ to other values.

Figure 11 compares the results from the lattice and continuum models for the low-energy many-body spectrum. For each value of φ , we plot the excitation energies with respect to the ground state. For the continuum

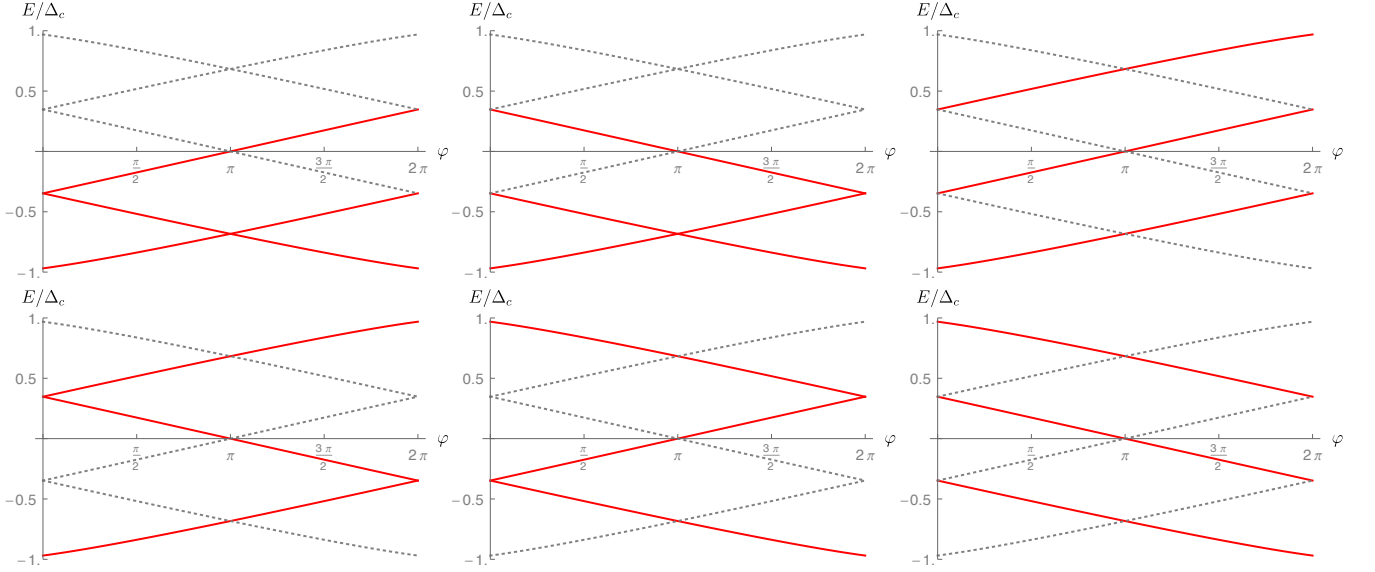


Figure 10: Pictorial representation of the non-interacting many-body states in Eq. (A1). The first row displays states $|0; \varphi\rangle$, $|1; \varphi\rangle$, $|2; \varphi\rangle$ and second row displays states $|3; \varphi\rangle$, $|4; \varphi\rangle$, $|5; \varphi\rangle$, from left to right in both cases. The dashed grey lines (red full lines) correspond to empty (occupied) single-particle Andreev bound states. Scattering states are not shown.

model, this is equivalent to normal ordering at each value of φ separately. This has the merit of cancelling out the contribution from the scattering states. Consequently, the agreement between the lattice and continuum models is better than in Fig. 3. It is also worth noting that Fig. 11 corresponds to the energy peaks in the tunneling density of states of the junction,⁴ up to a selection rule that bars transitions to excited states with the same total fermion parity as the ground-state.

Appendix B: Cavity renormalization and input-output calculation

In this Appendix, we show the derivation leading to Eqs. (33) and (36). The starting point is the Hamiltonian

$$H = H_S(\varphi) + H_{\text{cav}} + H_I, \quad (\text{B1})$$

where H_S is the JJ Hamiltonian with many-body eigenstates $|j; \varphi\rangle$ and many-body eigenvalues $E_j(\varphi)$,

$$H_{\text{cav}} = \omega_0 a^\dagger a \quad (\text{B2})$$

is the cavity Hamiltonian, and

$$H_I = g \hat{N} (a + a^\dagger) \quad (\text{B3})$$

is the junction-cavity interaction.

The equation of motion for the cavity field reads

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{a}}(t) &= -i[\tilde{a}(t), H] \\ &= -i(\omega_0 \tilde{a}(t) + g \tilde{N}(t)), \end{aligned} \quad (\text{B4})$$

where tildes denote operators in the Heisenberg representation ($\tilde{a}(t) = e^{iHt} a e^{-iHt}$ and $\tilde{N}(t) = e^{iHt} \hat{N} e^{-iHt}$). It is convenient to introduce the interaction picture via

$$\tilde{N}(t) = U^\dagger(t) N^i(t) U(t), \quad (\text{B5})$$

where

$$U(t) = \exp\left[-i \int_{-\infty}^t dt' H_I^i(t')\right]. \quad (\text{B6})$$

Assuming weak interactions, we expand

$$\tilde{N}(t) \approx N^i(t) + i \int_{-\infty}^t dt' [H_I^i(t'), N^i(t)]. \quad (\text{B7})$$

Consequently, Eq. (B4) becomes

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{a}}(t) &\approx -i \left(\omega_0 \tilde{a}(t) + g N^i(t) + g i \int_{-\infty}^t dt' [H_I^i(t'), N^i(t)] \right) \\ &= -i\omega_0 \tilde{a}(t) - ig N^i(t) \\ &\quad + g^2 \int_{-\infty}^t dt' (a^i(t') + a^{i\dagger}(t')) [N^i(t'), N^i(t)] \\ &\approx -i\omega_0 \tilde{a}(t) - ig N^i(t) \\ &\quad + g^2 \int_{-\infty}^t dt' (\tilde{a}(t') + \tilde{a}^\dagger(t')) [N^i(t'), N^i(t)], \end{aligned} \quad (\text{B8})$$

where we neglected higher order terms in g in the last line.

Next, we write $\tilde{a}(t) = \tilde{a}_s(t) e^{-i\omega_0 t}$, where $\tilde{a}_s(t)$ evolves slowly in time. Also, to lowest order in g , we replace $[N^i(t'), N^i(t)]$ by its ground state average. Then,

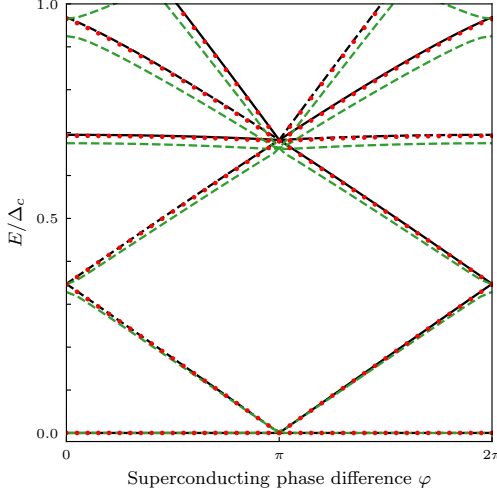


Figure 11: Comparison between the analytical and exact diagonalization results for the non-interacting many-body spectrum. Only energy differences with respect to the lowest-energy states are considered at each φ . Black solid lines come from the continuum theory, red dots from the single-body lattice diagonalization and green dashes from the many-body exact diagonalization; parameters are the same as used in the main text. The absence of the contributions from the continuum of scattering states leads to a better matching between both approaches, in comparison with Fig. 3. Splittings at $\varphi = 0, \pi$ due to \mathcal{T}_- -breaking terms are reduced for the single-particle calculation by considering scaled parameters such that ξ_0/a is scaled by a factor of 3.

Eq. (B8) can be approximated as

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{a}}_s(t) &\approx -igN^i(t)e^{i\omega_0 t} \\ &- g^2 [C_-(t, \varphi)\tilde{a}_s(t) + C_+(t, \varphi)\tilde{a}_s^\dagger(t)], \end{aligned} \quad (\text{B9})$$

where

$$C_\pm(t, \varphi) = \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_0(t \pm t')} \langle 0; \varphi | [N^i(t), N^i(t')] | 0; \varphi \rangle. \quad (\text{B10})$$

The correlation functions C_\pm can be computed explicitly. First, we consider

$$\begin{aligned} C_-(t, \varphi) &= \int_0^\infty d\tau \int \frac{d\omega_1 d\omega_2}{(2\pi)^2} e^{i(\omega_0 - \omega_2)\tau} e^{i(\omega_1 + \omega_2)t} \\ &\times \langle 0, \varphi | [N^i(\omega_1), N^i(\omega_2)] | 0, \varphi \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B11})$$

As usual, one writes

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d\tau e^{i(\omega_0 - \omega_2)\tau} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty d\tau e^{i(\omega_0 - \omega_2 + i\epsilon)\tau} \\ &= P \frac{i}{(\omega_0 - \omega_2)} + \pi \delta(\omega_0 - \omega_2). \end{aligned} \quad (\text{B12})$$

Therefore,

$$\begin{aligned} C_-(t, \varphi) &= iP \int \frac{d\omega_1 d\omega_2}{(2\pi)^2} \frac{e^{i(\omega_1 + \omega_2)t}}{\omega_0 - \omega_2} \langle 0; \varphi | [N^i(\omega_1), N^i(\omega_2)] | 0; \varphi \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} e^{i(\omega_1 + \omega_0)t} \langle 0; \varphi | [N^i(\omega_1), N^i(\omega_0)] | 0; \varphi \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B13})$$

Using $\sum_j |j; \varphi\rangle \langle j; \varphi| = \mathbf{1}$ and recognizing that

$$\begin{aligned} \langle 0; \varphi | N^i(t) | j; \varphi \rangle &= e^{-i(E_0(\varphi) - E_j(\varphi))t} \langle 0; \varphi | \hat{N}^i | j; \varphi \rangle \\ &\equiv e^{-i\Delta E_{0j} t} N_{0j}, \end{aligned} \quad (\text{B14})$$

we obtain

$$\begin{aligned} \langle 0, \varphi | [N^i(t), N^i(t')] | 0, \varphi \rangle &= -2i \sum_j \sin[\Delta E_{0j}(\varphi)(t - t')] |N_{0j}(\varphi)|^2. \end{aligned} \quad (\text{B15})$$

Fourier transforming to frequency space, this gives

$$\begin{aligned} \langle 0, \varphi | [N^i(\omega_1), N^i(\omega_2)] | 0, \varphi \rangle &= (2\pi)^2 \delta(\omega_1 + \omega_2) \\ &\times \sum_j |N_{0j}(\varphi)|^2 [\delta(\Delta E_{0j}(\varphi) - \omega_1) - \delta(\Delta E_{0j}(\varphi) + \omega_1)]. \end{aligned} \quad (\text{B16})$$

Substituting Eq. (B16) in Eq. (B13), we get

$$\begin{aligned} C_-(t, \varphi) &= -2i \sum_j |N_{0j}(\varphi)|^2 \frac{\Delta E_{0j}(\varphi)}{\omega_0^2 - (\Delta E_{0j}(\varphi))^2} \\ &+ \pi \sum_j |N_{0j}(\varphi)|^2 [\delta(\Delta E_{0j}(\varphi) + \omega_0) - (\omega_0 \rightarrow -\omega_0)]. \end{aligned} \quad (\text{B17})$$

Proceeding similarly for C_+ , we find

$$\begin{aligned} C_+(t, \varphi) &= -2ie^{i2\omega_0 t} \sum_j |N_{0j}(\varphi)|^2 \frac{\Delta E_{0j}(\varphi)}{\omega^2 - (\Delta E_{0j}(\varphi))^2} \\ &+ \pi e^{i2\omega_0 t} \sum_j |N_{0j}(\varphi)|^2 \\ &\times [\delta(\Delta E_{0j}(\varphi) - \omega_0) - \delta(\Delta E_{0j}(\varphi) + \omega_0)]. \end{aligned} \quad (\text{B18})$$

The fact that $C_+(t)$ varies rapidly in time ($\propto e^{2i\omega_0 t}$) means that it can be discarded in the rotating wave approximation. We finally obtain, back in the original time frame,

$$\dot{\tilde{a}}(t) \approx -i\omega_0 \tilde{a}(t) - igN^i(t) - g^2 C_-(t, \varphi) \tilde{a}(t). \quad (\text{B19})$$

The imaginary part of C_- renormalizes the cavity resonance frequency, $\omega_0 \rightarrow \omega_0 + \bar{\omega}$, where

$$\bar{\omega} = 2g^2 \sum_j |N_{0j}(\varphi)|^2 \frac{\Delta E_{0j}(\varphi)}{(\Delta E_{0j}(\varphi))^2 - \omega_0^2}. \quad (\text{B20})$$

The real part of C_+ describes the junction-induced decay of cavity photons, with rate

$$\bar{\kappa} \equiv 2\pi g^2 \sum_j |N_{0j}(\varphi)|^2 \times [\delta(\Delta E_{0j}(\varphi) + \omega_0) - \delta(\Delta E_{0j}(\varphi) - \omega_0)]. \quad (\text{B21})$$

Therefore,

$$\dot{\tilde{a}}(t) \approx - \left(i(\omega_0 + \bar{\omega}) + \frac{\bar{\kappa}}{2} \right) \tilde{a}(t) - igN^i(t). \quad (\text{B22})$$

In the presence of input fields, their coupling with the cavity induces an additional damping κ_0 for the cavity photons,²⁸ so that

$$\dot{\tilde{a}}(t) = - \left(i\omega_R + \frac{\kappa_R}{2} \right) \tilde{a}(t) - igN^i(t) + \sqrt{\kappa_0} \tilde{b}_{\text{in}}(t), \quad (\text{B23})$$

where $\omega_R = \omega_0 + \bar{\omega}$ and $\kappa_R = \kappa_0 + \bar{\kappa}$. This completes the derivation of Eq. (33) of the main text.

From Eq. (B23), one can readily derive Eq. (36) of the main text. First, recall that the output field can be

related to the input field by the boundary condition

$$\tilde{b}_{\text{out}}(t) = \sqrt{\kappa_0} \tilde{a}(t) - \tilde{b}_{\text{in}}(t). \quad (\text{B24})$$

Combining the Fourier transforms of Eqs. (B24) and (B23), we obtain

$$\tilde{b}_{\text{out}}(\omega) = \frac{-[\omega - \omega_R - i\frac{\kappa_0 - \bar{\kappa}}{2}] \tilde{b}_{\text{in}}(\omega) + g\sqrt{\kappa_0} N^i(\omega)}{\omega - \omega_R + i\kappa_R/2}. \quad (\text{B25})$$

Noting that $\langle 0; \varphi | N^i(\omega) | 0; \varphi \rangle \propto \delta(\omega)$, and recalling that we are interested in the response at frequencies close to ω_0 , we write

$$\langle \tilde{b}_{\text{out}}(\omega) \rangle = \frac{-[\omega - \omega_R - i\frac{\kappa_0 - \bar{\kappa}}{2}] \langle \tilde{b}_{\text{in}}(\omega) \rangle}{\omega - \omega_R + i\kappa_R/2}. \quad (\text{B26})$$

From here, the expressions for the reflection coefficient and phase shift quoted in the main text can be recovered.

-
- ¹ D. Averin and A. Bardas, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1831 (1995).
² H.-Y. Hui and J. D. Sau, *Phys. Rev. B* **95**, 014505 (2017).
³ L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* **79**, 161408 (2009).
⁴ F. Zhang and C. L. Kane, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 036401 (2014).
⁵ C. P. Orth, R. P. Tiwari, T. Meng, and T. L. Schmidt, *Phys. Rev. B* **91**, 081406 (2015).
⁶ R. S. Deacon, J. Wiedenmann, E. Bocquillon, F. Domínguez, T. M. Klapwijk, P. Leubner, C. Brüne, E. M. Hankiewicz, S. Tarucha, K. Ishibashi, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, *Phys. Rev. X* **7**, 021011 (2017).
⁷ E. Bocquillon, R. S. Deacon, J. Wiedenmann, P. Leubner, T. M. Klapwijk, C. Brune, K. Ishibashi, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, *Nature Nanotechnology* **12**, 137 EP (2016).
⁸ J. Wiedenmann, E. Bocquillon, R. S. Deacon, S. Hartinger, O. Herrmann, T. M. Klapwijk, L. Maier, C. Ames, C. Brüne, C. Gould, A. Oiwa, K. Ishibashi, S. Tarucha, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, *Nature Communications* **7**, 10303 EP (2016).
⁹ Y. Peng, Y. Vinkler-Aviv, P. W. Brouwer, L. I. Glazman, and F. von Oppen, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 267001 (2016).
¹⁰ D. Sticlet, J. D. Sau, and A. Akhmerov, ArXiv e-prints (2018), [arXiv:1805.01137](https://arxiv.org/abs/1805.01137) [[cond-mat.mes-hall](https://arxiv.org/archive/mat)].
¹¹ Y. Vinkler-Aviv, P. W. Brouwer, and F. von Oppen, *Phys. Rev. B* **96**, 195421 (2017).
¹² A. Y. Kitaev, *Physics Uspekhi* **44**, 131 (2001), [cond-mat/0010440](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0010440).
¹³ R. Aguado, *Riv. Nuovo Cimento* **40**, 523-593 (2017).
¹⁴ C. J. Pedder, T. Meng, R. P. Tiwari, and T. L. Schmidt, *Phys. Rev. B* **96**, 165429 (2017).
¹⁵ A. Blais, R.-S. Huang, A. Wallraff, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, *Phys. Rev. A* **69**, 062320 (2004).
¹⁶ A. Cottet, T. Kontos, and B. Douçot, *Phys. Rev. B* **88**, 195415 (2013).
¹⁷ O. Dmytruk, M. Trif, and P. Simon, *Phys. Rev. B* **92**, 245432 (2015).
¹⁸ O. Dmytruk, M. Trif, and P. Simon, *Phys. Rev. B* **94**, 115423 (2016).
¹⁹ M. Hays, G. de Lange, K. Serniak, D. J. van Woerkom, D. Bouman, P. Krogstrup, J. Nygård, A. Geresdi, and M. H. Devoret, ArXiv e-prints (2017), [arXiv:1711.01645](https://arxiv.org/abs/1711.01645) [[cond-mat.supr-con](https://arxiv.org/archive/cond-mat)].
²⁰ C. Müller, J. Bourassa, and A. Blais, *Phys. Rev. B* **88**, 235401 (2013).
²¹ M. C. Dartiailh, T. Kontos, B. Douçot, and A. Cottet, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 126803 (2017).
²² J. I. Väyrynen, G. Rastelli, W. Belzig, and L. I. Glazman, *Phys. Rev. B* **92**, 134508 (2015).
²³ P. L. e. S. Lopes, J. C. Y. Teo, and S. Ryu, *Phys. Rev. B* **95**, 235134 (2017).
²⁴ D. B. Kaplan, Lectures on effective field theory - ICTP-SAIFR (unpublished) ((2016)).
²⁵ C. W. J. Beenakker and H. van Houten, [arXiv:0512610](https://arxiv.org/abs/0512610) (2005).
²⁶ S. Ryu, A. P. Schnyder, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *New Journal of Physics* **12**, 065010 (2010).
²⁷ T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension* (Oxford Press, 2004).
²⁸ D. F. Walls and G. F. Milburn, *Quantum Optics* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008).
²⁹ S. J. Bosman, M. F. Gely, V. Singh, A. Bruno, D. Bothner, and G. A. Steele, *npj Quantum Information* **3**, 46 (2017).
³⁰ T. Walter, P. Kurpiers, S. Gasparinetti, P. Magnard, A. Potočnik, Y. Salathé, M. Pechal, M. Mondal, M. Oppliger, C. Eichler, and A. Wallraff, *Phys. Rev. Applied* **7**, 054020 (2017).
³¹ H. Zhang, C.-X. Liu, S. Gazibegovic, D. Xu, J. A. Logan, G. Wang, N. van Loo, J. D. S. Bommer, M. W. A. de Moor, D. Car, R. L. M. Op het Veld, P. J. van Veld-

- hoven, S. Koelling, M. A. Verheijen, M. Pendharkar, D. J. Pennachio, B. Shojaei, J. S. Lee, C. J. Palmstrøm, E. P. A. M. Bakkers, S. D. Sarma, and L. P. Kouwenhoven, *Nature* **556**, 74 EP (2018).
- ³² W. Chang, S. M. Albrecht, T. S. Jespersen, F. Kuemmeth, P. Krogstrup, J. Nygård, and C. M. Marcus, *Nature Nanotechnology* **10**, 232 EP (2015).
- ³³ R. M. Lutchyn, E. P. A. M. Bakkers, L. P. Kouwenhoven, P. Krogstrup, C. M. Marcus, and Y. Oreg, *Nature Reviews Materials* **3**, 52 (2018).
- ³⁴ W. DeGottardi, D. Sen, and S. Vishveshwara, *New Journal of Physics* **13**, 065028 (2011).
- ³⁵ This definition of the parity operator is not unique. The modes contributing to it must be spatially localized in the weak-link and the number of such modes depends on the length of the link. Also, in the absence of TR breaking perturbations, the connection of the ABS modes with the continuum of scattering dictates that a cutoff must be introduced, in a rather arbitrary way, in the mode sum, depending on φ . Finally, the definition is sensitive to the choice of the reference ground state. The form displayed in this work is in accordance with our conventions, but may be straightforwardly adjusted to other conventions.
- ³⁶ In the particular case of a perfectly dimerized fine-tuned Kitaev chain ($\mu = 0$, $\Delta_0 = t$), MZMs are localized on single sites and the parity operator is simply $P_{\text{out}} = (c_{N/2-1}e^{i\varphi/2} + c_{N/2-1}^\dagger e^{-i\varphi/2})(c_{-N/2}^\dagger - c_{-N/2})$. Away from this point, MZMs extend over several lattice sites (see eq. (14) from Ref. 12, and also Ref. 34) and the expression for P_{out} becomes less simple.
- ³⁷ The computed values of $N_{01}(\varphi)$ are $\mathcal{O}(10^{-3})$ for our parameters of choice. We performed a finite-size scale analysis of this quantity and found that it decreases in an oscillatory way, enveloped by a monotonically decaying function. This suggests that, in the thermodynamic limit (where there is no overlap between the well-localized inner and outer MZMs), $N_{01}(\varphi)$ vanishes, with the local-fermion-parity a fully well-defined quantum number at low energies.
- ³⁸ More sophisticated treatments of disorder have been employed recently, but only for noninteracting junctions; see e.g. M. Trif, O. Dmytruk, H. Bouchiat, R. Aguado and P. Simon, *Phys. Rev. B* **97**, 041415(R) (2018).

Chapitre 6

Dynamique non linéaire d'une jonction Josephson topologique

Une direction de recherche importante pour le développement du calcul quantique basé sur les modes de Majorana est de considérer des circuits formés d'îlots supraconducteurs isolés de leur environnement [21, 92, 93]. Le risque d'empoisonnement par des quasi-particules est alors réduit en raison d'un blocage de Coulomb, c'est-à-dire que l'ajout ou le retrait d'une particule chargée a un coût en énergie proportionnel à l'énergie de charge du système. De façon plus générale, il est possible de réaliser en laboratoire des circuits supraconducteurs topologiques très similaires aux circuits supraconducteurs conventionnels. Ces derniers sont des circuits non dissipatifs formés d'inductances, de capacités et de jonctions Josephson 2π et ont permis le développement de nombreuses technologies quantiques dont les qubits supraconducteurs et les amplificateurs paramétriques Josephson [22, 118–121]. Dans le cas d'une jonction conventionnelle en parallèle d'une résistance et d'un condensateur, la dynamique du système en présence d'une excitation oscillante (pompe de courant) peut mener à une dynamique non linéaire. En effet, dans un régime de paramètres approprié, le système admet deux solutions stationnaires d'amplitudes très différentes en raison de la nonlinéarité de la jonction. Cet effet est à la base de l'amplificateur Josephson par bifurcation (ou JBA pour *Josephson bifurcation amplifier*) qui permet une mesure à forte fidélité de qubits supraconducteurs [119, 122].

Les modes de Majorana ajoutent deux nouveaux éléments à la boîte à outils des

circuits supraconducteurs : la dégénérescence de l'état fondamental et l'effet Josephson fractionnaire (4π). Le projet présenté dans ce chapitre se veut un premier pas vers une compréhension plus large de la modélisation de circuits supraconducteurs topologiques et de l'étude de leur dynamique. Nous nous intéressons ci-dessous à la compétition entre l'effet Josephson conventionnel et l'effet Josephson fractionnaire (lors de la présence d'états de Majorana) sur la dynamique de bifurcation d'un *JBA topologique* et les possibles signatures expérimentales associées.¹ À plus long terme, la compréhension et la modélisation de ce type de circuits topologiques pourraient permettre d'une part de mieux caractériser les modes de Majorana et, d'autre part, de développer de nouvelles méthodes de mesure et de contrôle de qubits de Majorana dans une perspective de calcul quantique.

Après une mise en contexte à la section 6.1 décrivant le JBA conventionnel, nous présenterons une description « semi-classique » du JBA en présence de modes de Majorana. En effet, à la section 6.2, nous considérons un modèle microscopique de la jonction, mais une énergie de charge faible. Il est alors possible de traiter la phase supraconductrice de manière classique en négligeant les fluctuations quantiques dues à l'énergie de charge. Nous concluons finalement le chapitre avec quelques perspectives pour la poursuite de ce projet. En particulier, nous présenterons brièvement à la section 6.3 les perspectives pour une description quantique du JBA topologique. Cette approche vise à traiter l'énergie de charge et l'énergie Josephson sur un pied d'égalité dans un formalisme similaire à celui utilisé dans le domaine des circuits supraconducteurs et de l'optique quantique. La phase supraconductrice est alors un opérateur conjugué à l'opérateur de charge.

6.1 Bifurcation d'un circuit Josephson

Avant de considérer l'effet de modes de Majorana, résumons d'abord le phénomène de bifurcation dans un circuit supraconducteur conventionnel. Nous suivons ici une discussion similaire aux références [119, 123], mais les notations et les approximations seront différentes en prévision de l'ajout de modes de Majorana au problème. Nous

1. Les travaux présentés dans ce chapitre sont toujours en cours et les résultats sont préliminaires. Les travaux présentés résultent d'une collaboration avec Anqi Mu, Pedro Lopes, Udson Mendes et Ion Garate.

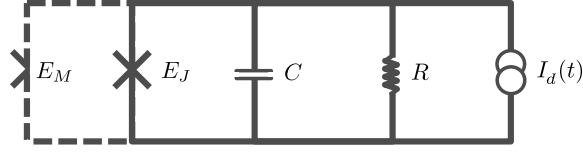


FIGURE 6.1 – Schémas représentant un circuit supraconducteur dans le modèle RCSJ. La branche pointillée et, suivant la notation de la référence [124], le symbole ">" indique une jonction Josephson 4π .

présenterons une solution basée sur le modèle de la jonction en parallèle d'une résistance et d'une capacité (modèle RCSJ de l'anglais *Resistively and Capacitively Shunted Junction model*) [74]. Après avoir introduit l'équation du mouvement, nous obtiendrons les solutions stationnaires du système et démontrerons l'existence d'un régime de bistabilité. Nous étudierons par la suite la dynamique du système afin de démontrer que le régime de bistabilité offre la possibilité de créer un dispositif sensible à de faibles variations de paramètres.

6.1.1 Jonction 2π et modèle RCSJ : États stationnaires

La figure 6.1 présente un circuit représentant une jonction Josephson dans le modèle RCSJ. En présence d'une différence de phase $\phi(t)$ entre les deux supraconducteurs, la relation de Josephson indique qu'un courant $I_J(t) = I_0 \sin \phi(t)$ traversera la jonction, avec I_0 le courant critique. À partir des lois de Kirchhoff (conservation du courant), la dynamique de la différence de phase dans le modèle RCSJ est décrite par l'équation différentielle du second ordre

$$C\varphi_0 \frac{d^2\phi(t)}{dt^2} + \frac{\varphi_0}{R} \frac{d\phi(t)}{dt} + I_0 \sin \phi(t) = I(t), \quad (6.1)$$

où nous avons utilisé que la différence de potentiel aux bornes d'une jonction Josephson est $V(t) = \varphi_0 \frac{d\phi}{dt}$, où $\varphi_0 \equiv \hbar/2e$ est le quantum de flux réduit. En introduisant la fréquence plasma du circuit $\omega_p = \sqrt{I_0/\varphi_0 C}$, l'équation du mouvement prend la forme

$$\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} + \kappa \frac{d\phi(t)}{dt} + \omega_p^2 \sin \phi(t) = \omega_p^2 \frac{I(t)}{I_0}, \quad (6.2)$$

où nous avons également introduit le taux de relaxation $\kappa = 1/RC$.

Puisque nous souhaitons considérer un circuit non dissipatif, nous considérerons dans ce chapitre la situation où le courant traversant la jonction est inférieur au courant critique ($I_J \ll I_0$). Par la relation de Josephson, cela signifie que la différence de phase aux bornes de la jonction sera également petite ($\phi \ll 1$). Nous considérerons donc un développement du potentiel Josephson et conserverons uniquement la première correction non linéaire :

$$\sin \phi(t) \approx \phi(t) - \lambda \phi^3(t), \quad (6.3)$$

où nous avons introduit la nonlinéarité λ . Dans la cas d'une jonction Josephson standard, nous aurons simplement $\lambda = 1/6$, alors que, lors de l'ajout d'un effet Josephson 4π , l'amplitude de cette nonlinéarité sera renormalisée.

Considérons maintenant l'équation du mouvement de la jonction dans le cas où la pompe de courant est harmonique avec $I(t) = I_d \cos \omega_d t$. Puisqu'une portion importante de la dynamique du système sera à la fréquence de la force harmonique, nous introduisons la décomposition [120, 123]

$$\phi(t) = \frac{\phi_z(t)e^{-i\omega_d t} + \phi_z^*(t)e^{+i\omega_d t}}{2}, \quad (6.4)$$

où $\phi_z(t)$ est une variable complexe définie dans un référentiel tournant à la fréquence ω_d . En introduisant cette décomposition dans l'équation (6.2) et en regroupant séparément les termes proportionnels à $e^{i\omega_d t}$ et $e^{-i\omega_d t}$, nous obtenons l'équation différentielle complexe

$$\ddot{\phi}_z + (\kappa - 2i\omega_d)\dot{\phi}_z + \left[\omega_p^2 - \omega_d^2 - i\kappa\omega_d - \frac{3\lambda\omega_p^2}{4}|\phi_z|^2 \right] \phi_z = \beta_d^2 \quad (6.5)$$

où nous avons introduit la puissance de pompe effective $\beta_d^2 = \omega_p^2 I_d / I_0$. De plus, nous avons effectué une approximation séculaire (ou en anglais *rotating wave approximation*) en négligeant les termes oscillants rapidement ($\propto e^{i3\omega_d t}$), de sorte que

$$\phi^3(t) \approx \frac{3|\phi_z|^2}{4} \left[\frac{\phi_z(t)e^{-i\omega_d t} + \phi_z^*(t)e^{+i\omega_d t}}{2} \right]. \quad (6.6)$$

Cette approximation sera valide dans la limite où l'amplitude des termes négligés est petite face à leur fréquence de rotation. En d'autres mots, dans le cas où la dynamique de $\phi_z(t)$ est beaucoup plus lente que ces termes oscillants, seule leur

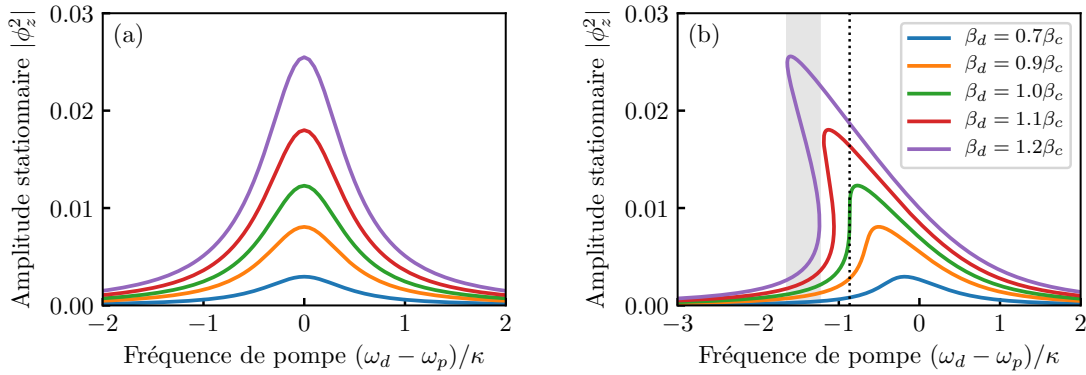


FIGURE 6.2 – (a) Réponse d’un oscillateur linéaire ($\lambda = 0$) et (b) réponse d’un oscillateur non linéaire pour différentes amplitudes de pompe. La ligne verticale pointillée indique la fréquence de pompe critique $\omega_c = \omega_p - \sqrt{3}\kappa/2$. La région ombragée grise indique le régime de bistabilité de la courbe de plus grande amplitude.

moyenne contribuera à la dynamique. Cette dernière étant nulle, nous laissons donc tomber ces termes oscillants rapidement.

Solution stationnaire et multi-stabilité

La dynamique générée par l’équation (6.5) étant plutôt complexe, considérons d’abord le régime stationnaire dans le référentiel tournant. Sans même considérer la dynamique, cela sera suffisant pour obtenir le diagramme de phase du système. Ainsi, une solution stationnaire doit obéir à l’équation

$$\left[\omega_p^2 - \omega_d^2 - i\omega_d\kappa - \frac{3\lambda\omega_p^2}{4}|\phi_z|^2 \right] \phi_z = \beta_d^2. \quad (6.7)$$

En multipliant cette équation par son complexe conjugué, nous obtenons une équation cubique en $|\phi_z|^2$:

$$\left[\omega_p^2 \left(1 - \frac{3\lambda|\phi_z|^2}{4} \right) - \omega_d^2 \right]^2 |\phi_z|^2 + (\omega_d\kappa)^2 |\phi_z|^2 = \beta_d^4. \quad (6.8)$$

Cette équation correspond bien à un oscillateur anharmonique forcé et amorti. L’anharmonicité λ peut être interprétée comme un décalage de la fréquence de résonance variant avec l’amplitude d’oscillation.

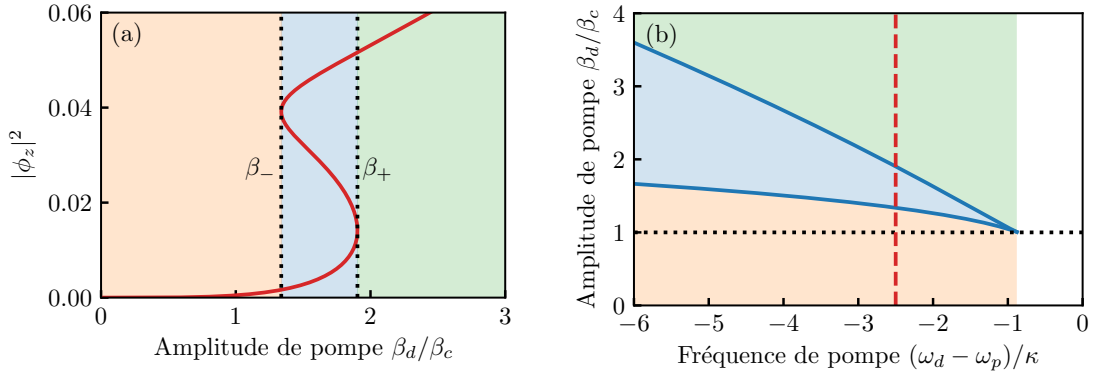


FIGURE 6.3 – (a) Amplitude de la réponse de l’oscillateur en fonction de la puissance de pompe. De gauche à droite la courbe se sépare en trois régions : régime de réponse de faible amplitude (jaune), régime de bistabilité (bleu) et régime de réponse de forte amplitude (vert). (b) Diagramme de phase de la bistabilité. La coupe indiquée par la ligne pointillée rouge correspond au panneau (a).

Afin de mieux comprendre l’origine du phénomène de multi-stabilité, la figure 6.2 présente la réponse $|\phi_z|^2$ de l’oscillateur en fonction de la fréquence de pompe ω_d pour différentes amplitudes de pompe β_d . La figure 6.2(a) présente d’abord la réponse d’un oscillateur harmonique ($\lambda = 0$). Tel qu’attendu dans ce cas, la réponse est une lorentzienne centrée à la fréquence de résonance. La réponse d’un oscillateur anharmonique ($\lambda \neq 0$) est illustrée à la figure 6.2(b). Dans ce cas, la réponse est approximativement lorentzienne pour une pompe de faible amplitude (courbe bleue). Par contre, au fur et à mesure que l’amplitude de pompe augmente la fréquence de résonance (réponse maximale) se voit diminuée. Éventuellement, le régime de multi-stabilité, indiqué par la zone ombragée grise est atteint (courbe violette). Il existe alors trois solutions stationnaires. Nous verrons ci-dessous que seul deux de ces solutions sont stationnaires (celles de plus faible et de plus forte amplitude) et on parle donc d’un régime de bistabilité.

Diagramme de phase et bistabilité

Afin de mieux comprendre le régime de bistabilité, la figure 6.3(a) présente la réponse de l’oscillateur en fonction de la puissance de pompe pour une fréquence fixe $\omega_d = \omega_p - 5\kappa/2$. De la gauche vers la droite, on y constate trois régimes de

réponse : faible amplitude, bistable et forte amplitude. En prenant le point de vue où l'amplitude de pompe est une fonction de $|\phi_z|^2$ [rotation de 90 degrés de la figure 6.3(a)], la région de multi-stabilité peut être obtenue par un calcul simple, mais fastidieux, en solutionnant l'équation

$$\frac{d\beta_d^2}{d|\phi_z|^2} = 0. \quad (6.9)$$

En réintroduisant la solution de cette équation quadratique en $|\phi_z|^2$ dans l'équation (6.8), on obtient les bornes de la région bistable que l'on nomme parfois points de bifurcation

$$\beta_{\pm}^4 = \frac{8}{81\lambda} \left\{ \left(2\omega_\delta\omega_\Sigma \pm \sqrt{r(\omega_d)} \right) \left[(3\kappa^2\omega_d^2 + \omega_\delta^2\omega_\Sigma^2) \mp \omega_\delta\omega_\Sigma\sqrt{r(\omega_d)} \right] \right\}, \quad (6.10)$$

où afin d'alléger la notation, nous avons introduit le décalage en fréquence $\omega_\delta = \omega_p - \omega_d$, la fréquence somme $\omega_\Sigma = \omega_p + \omega_d$, ainsi que la fonction

$$r(\omega_d) = (\omega_d^2 - \omega_p^2)^2 - 3\kappa^2\omega_d^2. \quad (6.11)$$

L'équation (6.10) permet alors de calculer, en fonction des paramètres du système et de la fréquence de pompe, l'amplitude de pompe minimale et maximale bornant la région de bistabilité [lignes pointillées de la figure 6.3(a)].

Le régime de bistabilité est également borné par les contraintes sur la fréquence de pompe correspondant au régime de paramètres où l'équation (6.10) est réelle, c'est-à-dire où $r(\omega_d) > 0$. On introduit donc les zéros de $r(\omega_d)$

$$\omega_{\pm}^2 = \omega_p^2 + \frac{3\kappa^2}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{4\omega_p^2}{3\kappa^2}} \right), \quad (6.12)$$

de sorte que $r(\omega_{\pm}) = 0$. En considérant également que β_{\pm}^4 doit être positif, le régime de bistabilité est contraint par la condition sur la fréquence de pompe $\omega_d < \omega_-$ dans le cas d'intérêt où $\lambda > 0$.

Notons que les expressions ci-dessus décrivant le régime de bistabilité diffèrent des expressions que l'on retrouve généralement dans la littérature [119]. En effet, ces expressions sont généralement écrites suite à l'approximation d'un circuit ayant un grand facteur de qualité, c'est-à-dire où $\omega_p/\kappa \gg 1$. De plus, on considère généralement

un régime de paramètre où $\omega_d/\omega_0 \approx 1$. Dans cette limite, la condition sur la fréquence de pompe permettant d’atteindre le régime de bistabilité devient simplement $\omega_\delta > \sqrt{3}\kappa/2$ et l’équation (6.10) prend la forme

$$\beta_\pm^4 \approx \frac{64\omega_p}{81\lambda} \left\{ \omega_\delta (\omega_\delta^2 + 3\omega_c^2) \pm (\omega_\delta^2 - \omega_c^2)^{3/2} \right\}. \quad (6.13)$$

À partir de ces résultats, la figure 6.3(b) présente le régime de bistabilité de l’oscillateur dans l’espace des paramètres. La région bistable est bornée à droite par le point critique (ω_c, β_c) , où l’amplitude de pompe critique est définie par l’équation $\beta_c \equiv \beta_\pm(\omega_d = \omega_c)$.

6.1.2 Dynamique de l’amplificateur Josephson par bifurcation

Maintenant que nous connaissons les solutions stationnaires du JBA, considérons sa dynamique dans le régime de bistabilité. Remarquons que, l’équation du mouvement (6.5) étant non linéaire, elle ne possède pas de solution analytique générale. Nous considérons donc pour la suite une solution numérique de l’équation du mouvement.²

Bassins d’attraction

Lorsqu’il n’existe qu’une seule solution stationnaire, la solution de l’équation (6.5) convergera vers cette solution indépendamment des conditions initiales. Par contre, dans le régime de bistabilité, la résolution de l’équation du mouvement convergera vers l’une des solutions stationnaires discutées à la section précédente en fonction des conditions initiales. La figure 6.4(a) présente l’amplitude de la différence de phase après un temps d’intégration $T = 20/\kappa$ suffisamment long pour que le système ait atteint le régime stationnaire. Les paramètres ont été choisis afin que le système soit dans un régime de bistabilité. Il existe alors des régions de l’espace des paramètres menant de manière déterministe vers l’une ou l’autre des solutions stationnaires. Ces régions correspondent au *bassin d’attraction* des solutions stationnaires (aussi appelés *attracteurs*).

2. La résolution numérique est obtenue à l’aide de l’implémentation de la méthode de Runge-Kutta Prince-Dormand à pas adaptatif de la librairie GSL (*GNU Scientific library*) [125].

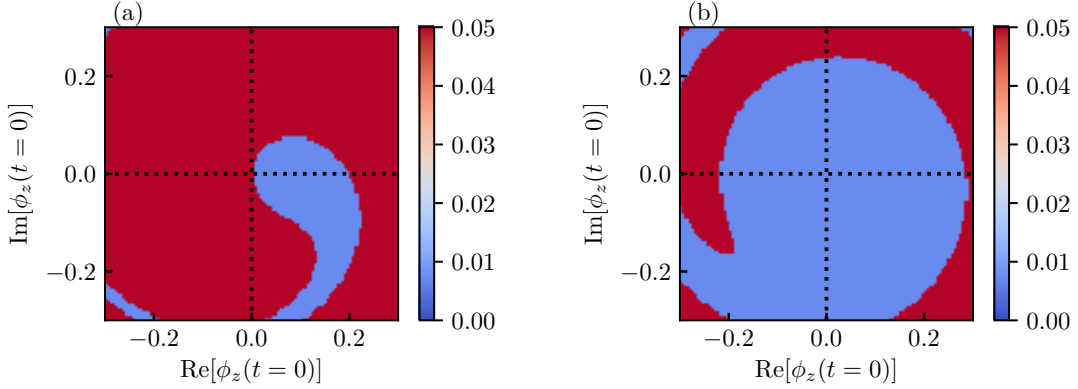


FIGURE 6.4 – Solution stationnaire de l'équation (6.5) en fonction de la condition initiale $\phi_z(t = 0)$. (a) Solution pour une amplitude de pompe uniforme après une évolution $t = 20/\kappa$. (b) Solution pour une amplitude de pompe augmentant graduellement $\beta^2(t) = \beta_d^2 \tanh(\kappa t/3)$. L'aire du bassin d'attraction de la solution de faible amplitude y est beaucoup plus grande. Nous considérons les paramètres $\dot{\phi}_z(t = 0) = 0$, $\kappa = \omega_p/1000$, $\omega_d = \omega_p - 2.25\kappa$, $\beta_d = 0.95\beta_+$.

Il peut sembler surprenant que le bassin d'attraction de la solution de grande amplitude couvre une large portion de l'espace des phases et qu'il inclue même des régions où l'amplitude initiale est très faible. Cet effet est un résultat de l'ouverture abrupte de la pompe $\beta(t) = \beta_p \Theta(t)$ (où $\Theta(t)$ est la fonction Heaviside) au début de l'intégration numérique à $t = 0$. Dans le cas où la pompe est ouverte de manière graduelle, l'aire du bassin d'attraction de la solution de faible amplitude sera beaucoup plus grande et inclura la région à proximité de $|\phi_z(t = 0)| = 0$. Cette situation est illustrée à la figure 6.4(b), où la puissance de pompe correspond à $\beta^2(t) = \beta_d^2 \tanh(\kappa t/3) \Theta(t)$.

Probabilité de transition et fluctuations thermiques

Maintenant que nous connaissons le diagramme de bistabilité, essayons de justifier son intérêt pour la mesure et l'amplification de signaux de faible amplitude. Pour ce faire, considérons la dynamique du circuit non linéaire en présence de faibles fluctuations thermiques. Ainsi, on considère une pompe ayant un courant

$$I(t) = I_d \cos(\omega_d t) + I_T(t), \quad (6.14)$$

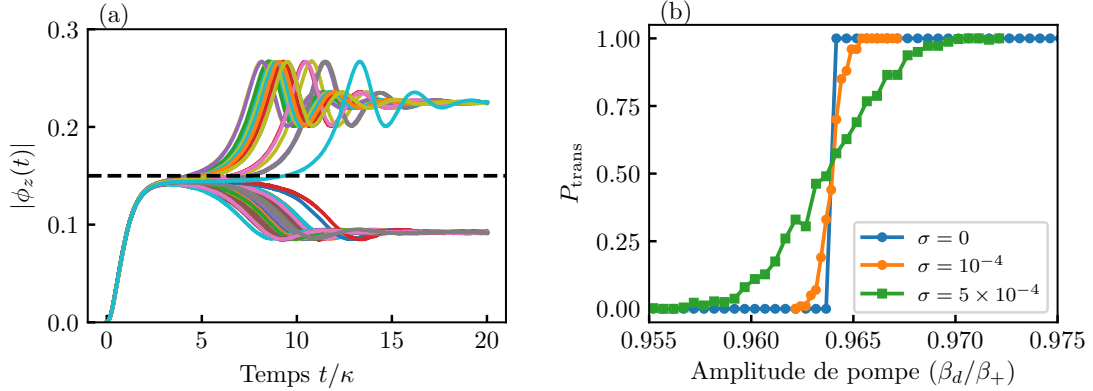


FIGURE 6.5 – Solution de l'équation du mouvement stochastique du JBA en présence de fluctuations thermiques. (a) $N = 50$ intégrations de l'équation différentielle stochastique soumise à un bruit gaussien d'amplitude $\sigma^2 = 10^{-8}\omega_p$ et une puissance de pompe $\beta = 0.964\beta_+$. (b) Courbe de probabilité de transition pour différentes amplitudes de fluctuations thermiques. Nous considérons la condition initiale $\phi_z(t = 0) = 0$. Voir la figure 6.4(b) pour les autres paramètres de la simulation.

où $I_T(t)$ est une fonction fluctuante de moyenne nulle représentant le bruit thermique de courant défini par la fonction de corrélation [126]

$$\langle I_T(t + \tau)I_T(t) \rangle_t = \lim_{P \rightarrow \infty} \frac{1}{P} \int_{-P/2}^{P/2} [I_T(t + \tau)I_T(t)] dt = \frac{4k_B T}{R} \delta(\tau). \quad (6.15)$$

Ainsi, $I_T(t)/I_0$ est un bruit blanc aléatoire sélectionné à partir d'une distribution gaussienne de variance $\sigma^2 = 4k_B T/R I_0^2$. Il s'agit d'un bruit de Johnson Nyquist d'une résistance à température finie [126].

En termes de l'équation différentielle (6.5), cela signifie d'ajouter au membre de droite le terme

$$\xi_T(t) = \frac{\omega_p^2}{I_0} I_T(t) e^{i\omega_d t}. \quad (6.16)$$

L'équation différentielle résultante sera alors stochastique. Dans ce cas, en raison des fluctuations, il n'y aura plus formellement de solutions stationnaires. Par contre, dans le cas où l'amplitude des fluctuations est faible par rapport à l'aire des bassins d'attractions, l'intégration de l'équation différentielle stochastique convergera vers une solution fluctuant autour d'une des solutions stationnaires définies précédemment.

À titre d'exemple, la figure 6.5(a) présente l'évolution de l'amplitude $|\phi_z(t)|$ pour

$N = 50$ réalisations différentes de la fonction fluctuante $\xi_T(t)$. En établissant une amplitude seuil (indiquée par la ligne horizontale pointillée), il est possible de compter le nombre d'intégrations n_H menant à la solution de grande amplitude. En répétant l'expérience numérique à un grand nombre N de reprises, il devient possible de définir la probabilité de transition

$$P_{\text{trans}}(\beta, \sigma) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n_H}{N}, \quad (6.17)$$

représentant la probabilité qu'une évolution de $\phi_z(t)$ converge vers la solution de grande amplitude. La figure 6.5(b) présente la probabilité de transition en fonction de l'amplitude de pompe. En l'absence de fluctuations, $P_{\text{trans}}(\beta, 0)$ sera simplement une fonction marche (courbe bleue). Plus les fluctuations thermiques seront importantes, plus la marche sera arrondie. Remarquons que, même en l'absence de fluctuations, la courbe $P_{\text{trans}}(\beta, \sigma)$ n'est pas centrée en $\beta = \beta_+$, mais plutôt à une valeur légèrement inférieure. Tout comme pour la discussion de la figure 6.4, il s'agit d'une conséquence de l'ouverture rapide de l'amplitude de pompe. Nous avons vérifié que, dans le cas où la pompe est ouverte de manière adiabatique $P_{\text{trans}}(\beta, \sigma = 0) = \Theta(\beta - \beta_+)$ pour la condition initiale $\phi_z(t = 0) = 0$.

À basse température, la courbe de la probabilité de transition $P_{\text{trans}}(\beta, \sigma)$ sera très abrupte et une légère variation des paramètres du système mènera à une renormalisation des paramètres et donc au déplacement de la courbe. Cette idée est à la base de l'utilisation de la bistabilité pour la mesure d'un qubit. En concevant les paramètres du système correctement, il est possible d'obtenir une situation où la probabilité de transition est faible si le qubit est dans l'état $|0\rangle$, alors qu'elle sera grande dans le cas où le qubit est dans l'état $|1\rangle$ [119, 122]. Nous expliciterons davantage ce protocole de mesure dans le contexte du JBA topologique à la section suivante.

Effet des fluctuations quantiques

Dans un circuit supraconducteur à basse température, les fluctuations thermiques peuvent devenir négligeables face à l'effet des fluctuations quantiques. Dans ce cas, il est nécessaire de remplacer le modèle RCSJ utilisé dans cette section par un formalisme incluant les effets des fluctuations quantiques de la phase dues à la présence d'une

énergie de charge. Ces effets ont été considérés en détail dans le contexte de la mesure par bifurcation d'un qubit supraconducteur [127, 128]. En raison de sa simplicité, nous débutons par considérer le modèle RCSJ en présence de modes de Majorana. Nous mentionnerons quelques perspectives pour le développement d'une théorie incluant les fluctuations de phase à la section 6.3.

6.2 Circuit topologique : Modèle RCSJ

Considérons maintenant l'effet de l'ajout d'une jonction Josephson topologique au circuit de la figure 6.1 et son effet sur les paramètres du JBA. Nous traiterons d'abord le système de manière phénoménologique en ajoutant simplement une jonction 4π à l'équation du mouvement du modèle RCSJ [129, 130]. Par la suite, nous étudierons la relation courant-phase de la jonction topologique à l'aide d'un modèle microscopique [65].

6.2.1 Description phénoménologique

Dans la limite d'une jonction Josephson courte, c'est-à-dire dans la limite où la taille de la jonction est petite par rapport à la longueur de cohérence du supraconducteur, seuls les états d'Andreev dispersent en fonction de la différence de phase [80]. Dans le cas d'une jonction Josephson topologique, la relation courant-phase sera alors décrite par le modèle de basse énergie obtenu à la section 2.4.2

$$I_M(t) = p_{23} \frac{E_M}{2\varphi_0} \sin \frac{\phi(t)}{2} \quad (6.18)$$

où $p_{23} = \pm 1$ est la parité intérieure et E_M est un paramètre dépendant du recouvrement entre les modes de Majorana de chaque côté de la jonction. Nous débutons par traiter E_M de manière phénoménologique.

Considérons donc l'ajout d'une jonction topologique courte au circuit étudié à la section précédente. L'équation du mouvement est alors

$$C\varphi_0 \frac{d^2\phi(t)}{dt^2} + \frac{\varphi_0}{R} \frac{d\phi(t)}{dt} + I_0 \sin \phi(t) + p_{23} \frac{E_M}{2\varphi_0} \sin \frac{\phi(t)}{2} = I(t). \quad (6.19)$$

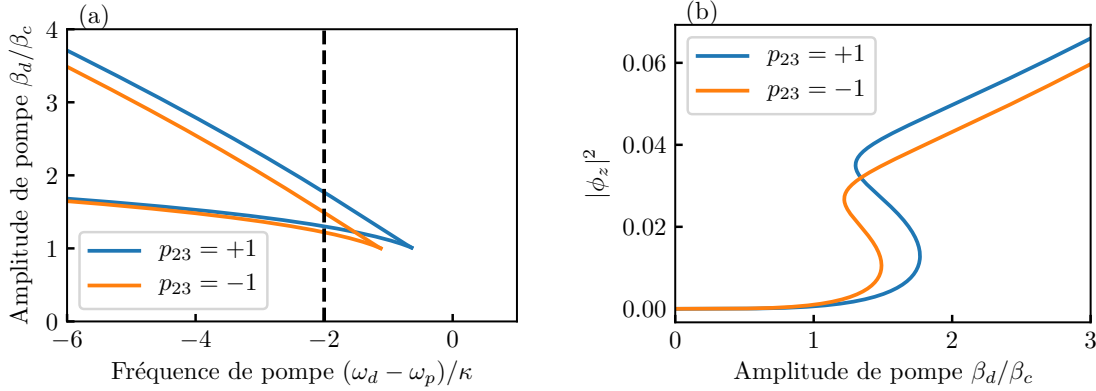


FIGURE 6.6 – (a) Effet de la parité intérieure p_{23} sur le diagramme de phase du JBA topologique [voir la figure 6.3(b) pour le cas d'un JBA conventionnel]. La zone intérieure du triangle formé par les courbes correspond à la région de bistabilité. (b) Réponse de l'oscillateur en fonction de la parité intérieure p_{23} et de l'amplitude de pompe. On considère une fréquence de pompe fixe $\omega_d = \omega_p - 2\kappa$ [courbe pointillée noire de la sous-figure (a)]. On considère pour cette figure $E_M = E_J/500$ et $\kappa = \omega_p/1000$.

En considérant le régime de paramètre où le courant est inférieur au courant critique, nous pouvons à nouveau développer en série de Taylor le potentiel Josephson en ne conservant que le premier terme non linéaire. Remarquons que, de manière équivalente, le développement peut être effectué à proximité du point $\phi = 0$ ou $\phi = 2\pi$. Ces deux situations se distingueront uniquement par un changement de signe de la parité p_{23} . En considérant une pompe harmonique, nous retrouvons alors l'équation (6.5), mais avec des paramètres renormalisés par l'ajout de la jonction 4π . Ainsi, nous obtenons une nouvelle fréquence plasma

$$\omega_p(p_{23}) = \omega_p(0) \sqrt{1 + \frac{p_{23} E_M}{4E_J}}, \quad (6.20)$$

ainsi que la nonlinéarité effective

$$\lambda(p_{23}) = \lambda(0) \left(1 + p_{23} \frac{E_M}{16E_J} \right), \quad (6.21)$$

où $\omega_p(0)$ et $\lambda(0)$ correspondent aux paramètres du circuit en l'absence de la jonction topologique. Notons que la fréquence de résonance du circuit dépendra de la parité intérieure p_{23} et sera donc sensible à l'état des modes de Majorana dans le système. En particulier, pour un régime de paramètres où $E_M < 4E_J$ (on considère $E_M, E_J > 0$),

il existe deux fréquences de résonance.

De manière similaire à la mesure d'un qubit supraconducteur, la renormalisation des paramètres du JBA en fonction de la parité p_{23} permet une mesure de cette dernière, et ce même dans une situation où $E_M \ll E_J$, c'est-à-dire une situation où la jonction 4π mène à une faible renormalisation des paramètres du JBA. La figure 6.6(a) présente la région de bistabilité dans l'espace des paramètres de la pompe du JBA topologique. En fonction de la parité d'occupation p_{23} , les frontières de la région de bistabilité seront légèrement renormalisées. Tel qu'illustré à la figure 6.6(b), il devient alors possible de choisir des paramètres de pompe ($\beta_d \approx 1.5\beta_c$ pour cette figure) de sorte que, en fonction de la parité p_{23} , l'état stationnaire du JBA converge vers une solution de faible ou de forte amplitude. Si les courbes de transitions $P_{\text{trans}}(\beta, \sigma)$ sont suffisamment abruptes (faibles fluctuations), il sera alors possible de mesurer avec une grande fidélité la parité p_{23} . Le calcul détaillé de ces courbes de probabilité de transition est toujours en cours et il sera exposé dans le cadre d'un travail futur.

6.2.2 Signatures de la transition de phase topologique

Afin d'obtenir l'effet de la transition de phase topologique sur les propriétés du JBA, nous devons aller au-delà du modèle phénoménologique utilisé à la section précédente. Ainsi, de manière similaire aux chapitres précédents, on modélise une jonction Josephson topologique à l'aide d'un modèle de liaison forte. Ceci nous permettra d'obtenir la dépendance de E_J et E_M , traités de manière phénoménologique à la section précédente, en termes des paramètres microscopiques du système (par exemple le champ magnétique).

Modèle de liaison forte

On considère dans cette section un nanofil semiconducteur à fort couplage spin-orbite tel qu'introduit à la section 2.3. En discrétisant le modèle sur un réseau ayant un paramètre de maille a , l'hamiltonien de l'équation (2.36) devient

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{j=1}^N \hat{\Psi}_j^\dagger h_j \hat{\Psi}_j + \sum_{j=1}^{N-1} \left(\hat{\Psi}_{j+1}^\dagger u_j \hat{\Psi}_j + \hat{\Psi}_j^\dagger u_j^\dagger \hat{\Psi}_{j+1} \right), \quad (6.22)$$

où nous avons utilisé la base de spineur $\hat{\Psi}_j^\dagger = (\hat{\psi}_{j,\uparrow}^\dagger, \hat{\psi}_{j,\downarrow}^\dagger, -\hat{\psi}_{j,\downarrow}, \hat{\psi}_{j,\uparrow})$ et les opérateurs fermioniques $\psi_{j,\sigma} \equiv \psi_\sigma(x = ja)$. L'hamiltonien local sur chaque site est alors

$$h_j = (2t - \mu)\tau_z + V_Z\sigma_z + \text{Re}\{\Delta_j\}\tau_x + \text{Im}\{\Delta_j\}\tau_y, \quad (6.23)$$

avec $t = \hbar^2/(2m^*a^2)$ le paramètre de saut. De plus, les termes de saut entre les sites voisins sont décrits à l'aide de la matrice

$$u_j = -t\tau_z - i\alpha_R\sigma_y\tau_z, \quad (6.24)$$

avec $\alpha_R = \alpha/2a$ le paramètre spin-orbite. De manière similaire au chapitre précédent, la jonction Josephson de type *SNS* est définie à l'aide d'un paramètre d'ordre supraconducteur dépendant de la position

$$\Delta_j = \begin{cases} |\Delta|e^{-i\phi/2} & j \leq N_S \\ 0 & N_S < j \leq N_S + N_N \\ |\Delta|e^{i\phi/2} & j > N_S + N_N, \end{cases} \quad (6.25)$$

où N_S est le nombre de sites formant chacun des îlots supraconducteurs et N_N le nombre de sites formant la région normale. Le nombre total de sites formant le système est donc $N = 2N_S + N_N$. Finalement, suivant la référence [131] par exemple, nous modélisons la transparence de l'interface *NS*, en introduisant un paramètre $\gamma \in (0, 1)$ de sorte que $u_{N_S} \rightarrow \gamma u_{N_S}$ et de même $u_{N_S+N_N} \rightarrow \gamma u_{N_S+N_N}$. Pour la suite, on obtient donc le spectre de la jonction Josephson en diagonalisant numériquement la matrice de dimension $4N \times 4N$ définie par l'équation (6.22).

Spectre de la jonction Josephson topologique

La figure 6.7 présente la dispersion des niveaux d'énergie $\epsilon_n(\phi)$ de la jonction en fonction de la différence de phase. Les états d'Andreev menant à l'effet Josephson 4π et contribuant à E_M sont indiqués en orange ($p_{23} = +1$) et en vert ($p_{23} = -1$), alors que les états de volume, de période 2π sont indiqués en bleu. De plus, les niveaux d'énergie correspondant à l'occupation des modes de Majorana extérieurs, associés à la parité d'occupation p_{14} (voir la section 2.4.2), correspondent aux états $\epsilon_{\pm 1}(\phi) \approx 0$.

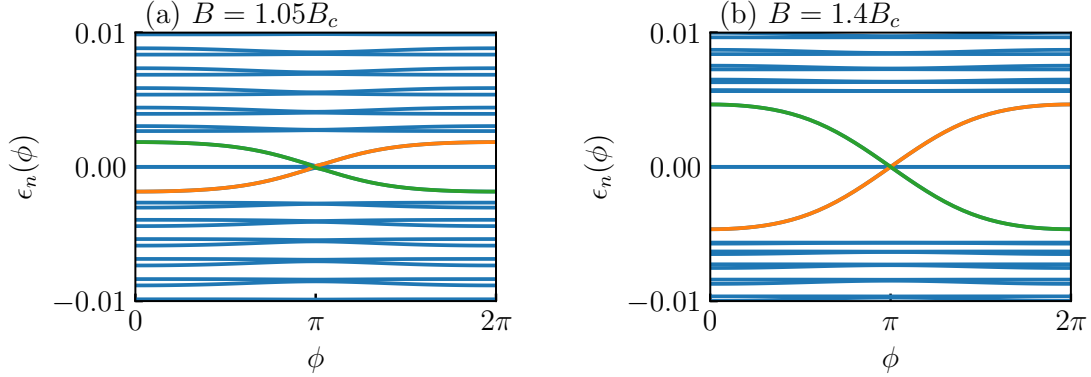


FIGURE 6.7 – Spectre du hamiltonien à une particule d’une jonction Josephson topologique (a) près de la transition de phase topologique avec un champ magnétique $B = 1.05B_c$ et (b) loin de la transition de phase ($B = 1.4B_c$). Les courbes oranges (vertes) correspondent à $p_{23} = +1$ (-1). Les paramètres de la jonction sont tirés de la référence [132] qui s’inspire elle-même d’expériences récentes. Pour cette section, on considère donc les paramètres $N_S = 400$, $N_N = 2$, $a = 10$ nm, $\Delta = 0.036t$, $\alpha_R = 0.1t$, $\mu = 0$ et $\gamma = 0.9$.

Remarquons que, même pour la figure 6.7(a) qui se trouve à proximité de la transition de phase topologique, ces états ne dispersent pas en fonction de la différence de phase ϕ en raison de la grande taille des supraconducteurs ($N_S \gg \xi/a$ où ξ est la longueur de cohérence du supraconducteur).

Puisque le modèle considéré ne contient pas d’interactions coulombiennes, contrairement au chapitre 5, il n’est pas nécessaire de diagonaliser numériquement l’hamiltonien à plusieurs particules afin d’en obtenir le spectre. En effet, le spectre des états à plusieurs particules $E_n(\phi)$ est obtenu directement de l’énergie des états à une particule. En particulier, en suivant la notation de la section 2.1 (où $\epsilon_{-n} = -\epsilon_n$ en raison de la contrainte particule-trou) l’énergie de l’état fondamental est simplement

$$E_0(\phi) = \frac{1}{2} \sum_{n < 0} \epsilon_n(\phi), \quad (6.26)$$

où nous effectuons une somme sur les $2N$ valeurs propres négatives obtenues en diagonalisant l’hamiltonien BdG défini par l’équation (6.22). L’énergie des états excités est alors obtenue en additionnant différentes combinaisons de l’énergie d’états à une particule. Plutôt que de considérer uniquement l’état fondamental, pour la suite nous nous intéresserons aux quatre états de plus basse énergie formés par les modes

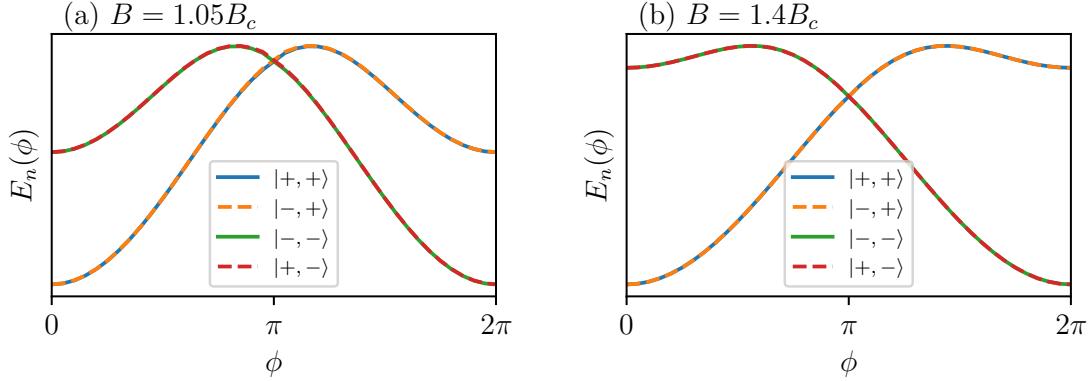


FIGURE 6.8 – Dispersion de l'énergie des états à plusieurs particules d'une jonction Josephson topologique. On considère les quatre niveaux de plus basse énergie décrits dans la légende en termes des nombres quantiques $|p_{14}, p_{23}\rangle$. Voir la légende de la figure 6.7 pour les paramètres de la simulation.

de Majorana du système. En fonction des parités p_{14} et p_{23} définies à la section 2.4.2, nous définissons les énergies

$$\begin{aligned}
 E_{+,+} &= E_0, \\
 E_{-,+} &= E_0 + \epsilon_1 = E_1, \\
 E_{+,-} &= E_0 + \epsilon_2 = E_2, \\
 E_{-,-} &= E_{-,+} + \epsilon_2 = E_3,
 \end{aligned} \tag{6.27}$$

et nous noterons $|p_{14} = \pm, p_{23} = \pm\rangle$ les états propres associés.

La figure 6.8 présente la dispersion des quatre états définis à l'équation (6.27) en fonction de la phase supraconductrice. On y observe que la dispersion de tous ces états possède un minimum local à $\phi = 0$ et 2π . Pour une valeur fixe de la phase, la différence de courbure de ces minima en fonction de la parité p_{23} correspond à la renormalisation de la fréquence plasma introduite à l'équation (6.20). En effet, à température nulle, la relation courant-phase est obtenue de l'énergie de l'état à plusieurs particules par la relation (voir par exemple la référence [80])

$$I_n(\phi) = \frac{e}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \phi} E_n(\phi). \tag{6.28}$$

La fréquence plasma et la nonlinéarité du JBA sont donc obtenues en considérant

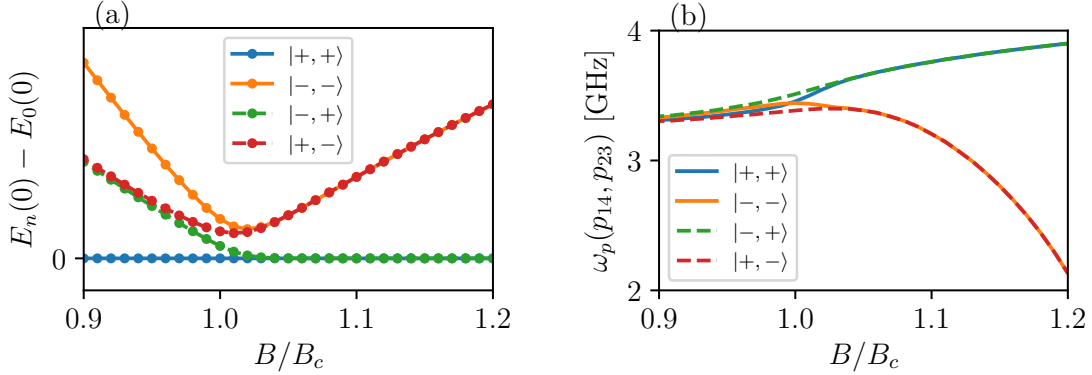


FIGURE 6.9 – (a) Dispersion de l'écart entre les niveaux d'énergie des états à plusieurs particules à proximité de la transition de phase topologique pour $\phi = 0$. (b) Dispersion de la fréquence plasma d'une jonction Josephson topologique en fonction du champ magnétique pour une énergie de charge $E_C/h = 500$ MHz. La légende indique à nouveau les états à plusieurs particules en termes des nombres quantiques p_{14} et p_{23} . Voir la légende de la figure 6.7 pour les paramètres de la simulation.

respectivement la dérivée seconde et la dérivée quatrième de l'énergie de l'état fondamental du système.

Balayage du champ magnétique

À l'aide du modèle et du formalisme introduits ci-dessus, on considère maintenant l'effet de la variation du champ magnétique près de la transition de phase sur quelques paramètres du JBA topologique. La figure 6.9(a) présente d'abord l'évolution des énergies définies à l'équation (6.27) pour $\phi = 0$. Il est possible d'y observer la transition de phase à $B = B_c$ menant à la dégénérescence de l'état fondamental en raison de l'apparition de modes de Majorana pour $B > B_c$. Tel que mentionné précédemment, la fréquence plasma du JBA sera alors

$$\omega_p^2(p_{14}, p_{23}) = \frac{4E_C}{\hbar^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} E_{p_{14}, p_{23}}(\phi) \right]_{\phi=0}, \quad (6.29)$$

où nous avons introduit l'énergie de charge $E_C = e^2/2C$. Il est également possible d'obtenir $\omega_p(p_{14}, p_{23})$ à l'aide d'un développement autour des minima à $\phi = 2\pi$ plutôt qu'à $\phi = 0$. Les fréquences obtenues seront alors les mêmes à l'exception d'un

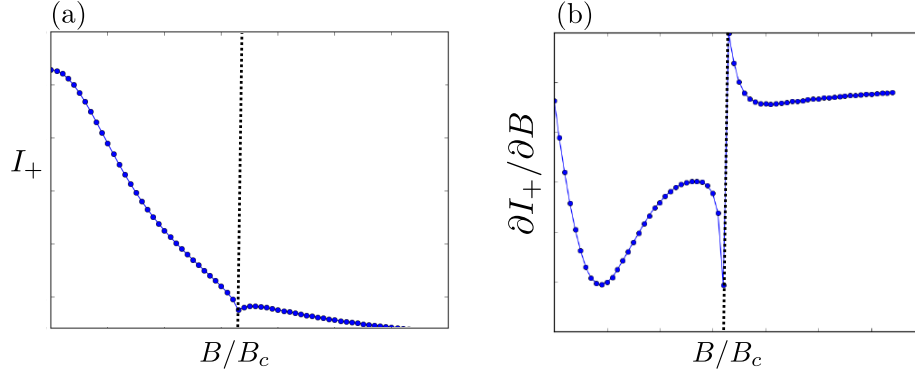


FIGURE 6.10 – (a) Variation du courant de bifurcation $I_+ = I_0\beta_+^2/\omega_p^2(0)$ à proximité d’une transition de phase topologique. (b) Dérivée de courant de bifurcation en fonction du champ magnétique. La ligne pointillée noire indique la transition de phase topologique ($B = B_c$). Figure reproduite du rapport de stage d’Anqi Mu (août 2018, Université de Sherbrooke). Voir la légende de la figure 6.7 pour les paramètres de la simulation.

changement de signe $p_{23} \rightarrow -p_{23}$ (voir la figure 6.8). La figure 6.9(b) présente la fréquence plasma du circuit en fonction du champ magnétique. À proximité de la transition de phase, on observe une séparation des fréquences plasma en fonction de la parité d’occupation des modes de Majorana. Remarquons que, dans la limite $B \gg B_c$, le ratio E_M/E_J devient grand et le mode de résonance associé à $p_{23} = -1$ devient instable, puisque la courbure $\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} E(\phi)$ change alors de signe.

Pour conclure cette section, on considère à la figure 6.10 la dispersion du courant de bifurcation,

$$I_+ = \frac{I_0\beta_+^2}{\omega_p^2}, \quad (6.30)$$

en fonction du champ magnétique pour l’état fondamental ($p_{14} = p_{23} = +1$). Il est possible d’y observer une anomalie à proximité de la transition de phase topologique. Cette anomalie est mise en évidence en considérant la dérivée du courant de bifurcation en fonction du champ magnétique [figure 6.10(b)]. Bien que cette anomalie ne semble pas tout à fait universelle, elle est observée sur une large plage de paramètre correspondant au régime d’opérations des expériences du domaine. Notons également qu’une anomalie similaire a été prédite dans le courant critique d’une jonction Josephson topologique [65].

6.3 Perspectives

Dans ce chapitre, nous avons présenté quelques résultats préliminaires concernant la théorie d'un amplificateur Josephson par bifurcation où une jonction Josephson topologique est ajoutée au circuit d'un JBA conventionnel. Concluons avec quelques perspectives pour la suite de ce projet.

6.3.1 Dynamique des modes de Majorana

Nous avons démontré pour un modèle de type RCSJ que, même dans la limite où $E_M \ll E_J$, il existe un régime de paramètres où il est possible d'utiliser une mesure par bifurcation afin d'obtenir la parité intérieure p_{23} de la jonction. D'autres travaux sont toujours nécessaires afin de caractériser la fidélité de cette mesure dans la situation où p_{23} n'est pas un bon nombre quantique. En effet, comme discuté à la section 2.4.2, p_{23} ne sera en général pas un bon nombre quantique en raison de l'empoisonnement par des quasi-particules ou bien en raison du recouvrement entre les modes de Majorana à l'intérieur d'un même îlot supraconducteur. De façon générale, il est donc nécessaire de remplacer le nombre quantique p_{23} par une variable dynamique correspondant à la valeur moyenne de l'opérateur parité $\langle \hat{P}_{23}(t) \rangle$ [133].

À mi-chemin du traitement purement quantique suggéré ci-dessous, il est également possible de considérer la dynamique des modes de Majorana à l'aide de l'équation de Schrödinger, tout en considérant la phase ϕ comme une variable classique. C'est l'approche utilisée par les auteurs de la référence [133], où ils considèrent la solution de l'équation de Schrödinger pour une fonction d'onde $|\psi(\phi, t)\rangle$ qui est donc couplée à l'équation du mouvement pour $\phi(t)$. La dynamique du système est alors obtenue en solutionnant les équations différentielles couplées. Remarquons qu'il est aussi possible de remplacer l'équation de Schrödinger par une équation maîtresse (équation de Lindblad) afin de prendre en compte l'effet de l'environnement sur les modes de Majorana [133].

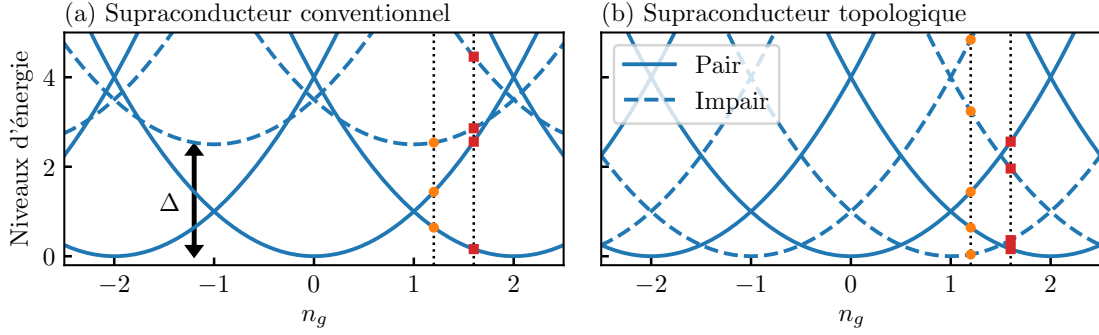


FIGURE 6.11 – Niveaux d'énergie du hamiltonien de charge d'un supraconducteur (a) conventionnel et (b) topologique. Pour un supraconducteur conventionnel, un nombre de particules impair implique la création d'une quasi-particule d'énergie Δ . Dans ce graphique $\Delta = 2.5E_C$ afin de faciliter la comparaison entre les figures (a) et (b). Les points orange (rouges) indiquent les niveaux d'énergies discrets pour les valeurs $n_g = 1.2$ (1.6).

6.3.2 Énergie de charge et modèle quantique

Dans les chapitres précédents, nous avons à plusieurs reprises mentionné que le nombre de particules dans un supraconducteur n'est pas préservé. En réalité, il s'agit plutôt d'une approximation valide dans la limite d'un système de très grande taille [74]. En effet, l'environnement d'un supraconducteur mésoscopique mènera plutôt à l'existence d'un nombre optimal n_g de particules sur l'île minimisant l'énergie d'interaction électrostatique. Une autre avenue afin de raffiner le modèle étudié dans ce chapitre est donc de considérer un formalisme où le nombre de particules est conservé. Puisque la phase supraconductrice est une variable conjuguée au nombre de paires de Cooper [74], elle ne pourra plus être traitée de manière classique. Il est alors plutôt nécessaire d'introduire l'opérateur phase $\hat{\phi}$ et l'opérateur charge \hat{n} obéissant à la relation de commutation

$$\left[\hat{\phi}, \hat{N} \right] = i. \quad (6.31)$$

Un tel formalisme est généralement utilisé pour la description de circuits supraconducteurs conventionnels [22, 134]. Nous mentionnons quelques mots ci-dessous sur les modifications au formalisme nécessaire au traitement de circuits topologiques.

L'interaction d'un îlot supraconducteur avec son environnement électrostatique

peut être décrite par l'hamiltonien [135]

$$H_C = E_C \left(\hat{N} - n_g \right)^2, \quad (6.32)$$

où $E_C = e^2/2C$ est l'énergie de charge. Pour un supraconducteur conventionnel, les états propres $\{|n\rangle\}$ de l'opérateur \hat{N} correspondent à des états ayant un nombre pair (n) d'électrons. En effet, un nombre impair d'électrons nécessite la création d'une quasi-particule non appariée, ce qui a un coût en énergie $\Delta \gg E_C$. Pour un circuit supraconducteur conventionnel, $\Delta \gg E_C$ et il est donc possible de complètement négliger les états impairs. Cet effet est illustré à la figure 6.11(a), où chaque parabole correspond à la dispersion en énergie en fonction du paramètre n_g d'un état $|n\rangle$ comportant un nombre entier n d'électrons. Pour une valeur fixe de n_g , les niveaux d'énergie discrets du hamiltonien de l'équation (6.32) correspondent aux valeurs obtenues en prenant une coupe de ce graphique.

Dans le contexte des circuits supraconducteurs topologiques, la dégénérescence de l'état fondamental due aux modes de Majorana enlève la distinction entre les états pairs et impairs indépendamment du ratio Δ/E_C [136]. Cette situation est illustrée à la figure 6.11(b). Contrairement au cas précédent, pour un circuit topologique, le système sera alors décrit à l'aide d'une base d'état de charge où n compte le nombre d'électrons sur l'îlot supraconducteur plutôt que le nombre de paires de Cooper. De manière similaire aux références [79, 137], il sera alors possible de décrire le JBA topologique en fonction d'états de charge. Dans cette description, la résistance du modèle RCSJ considérée dans ce chapitre sera plutôt remplacée par une ligne à transmission semi-infinie. De manière similaire au chapitre 5, le circuit pourra alors être décrit à l'aide du formalisme entrée-sortie.

À priori simple, le formalisme préservant la charge comporte un certain nombre de subtilités. En particulier, il n'est pas simple d'inclure l'effet de quasi-particules dans ce modèle. Davantage de travail est donc toujours nécessaire afin de décrire correctement le JBA topologique dans ce formalisme. À terme, cette approche permettra d'inclure l'effet des fluctuations quantiques sur la dynamique du JBA dans le régime de bistabilité.

Conclusion et perspectives

Dans cette thèse, nous avons étudié quelques problèmes reliés à l'ingénierie et à la caractérisation de modes de Majorana dans un circuit supraconducteur mésoscopique. Suite à une mise en contexte et une revue de la littérature aux chapitres 1 et 2, des résultats de recherche ont été présentés aux chapitres 3 à 6. Ces travaux ont été réalisés dans une perspective à long terme d'utiliser les propriétés topologiques de modes de Majorana afin d'effectuer un calcul quantique robuste. Ci-dessous, nous résumons les résultats obtenus et offrons quelques perspectives de travaux futurs.

Dans la première partie de cette thèse, aux chapitres 3 et 4, nous avons développé de nouvelles méthodes numériques d'ingénierie optimale. D'abord, au chapitre 3, nous avons démontré une nouvelle implémentation de l'algorithme open GRAPE. Cette méthode permet l'optimisation du profil temporel d'impulsions afin de contrôler la dynamique d'un système quantique dissipatif. Notre implémentation permet un gain de complexité polynomial dans la taille de l'espace de Hilbert sur les ressources nécessaires à l'exécution de l'algorithme (temps de calcul et mémoire) par rapport à l'implémentation la plus courante. Pour démontrer l'intérêt de cette méthode, nous l'avons appliquée à la réinitialisation active d'un résonateur suite la mesure d'un qubit dans l'architecture cQED. Nos résultats démontrent la possibilité d'une réinitialisation active très rapide et de grande qualité. Au-delà des qubits supraconducteurs, notre implémentation d'open GRAPE offrent de manière plus générale la possibilité d'optimiser la mesure et le contrôle de qubits de Majorana [103].

Au chapitre 4, inspiré par le chapitre précédent, nous avons étendu l'approche du contrôle optimal à l'optimisation du profil spatial de paramètres. Ainsi, à l'aide d'une analogie entre l'algorithme GRAPE et la méthode des fonctions de Green récursives, nous avons développé un nouvel algorithme. Nommée RGF-GRAPE, cette méthode

permet l'optimisation efficace du profil spatial de paramètres dans le but de faire l'ingénierie de modes de Majorana robustes. Nous avons appliqué RGF-GRAPE à l'optimisation de textures magnétiques permettant l'ingénierie de modes de Majorana dans un nanofil sans couplage spin-orbite intrinsèque. En particulier, l'optimisation de réseaux de microaimants nous a permis de proposer de nouvelles nanostructures permettant l'émergence de modes de Majorana, et ce, même dans des semiconducteurs où le facteur g est faible.

Plusieurs directions de recherche restent ouvertes afin d'étendre les résultats obtenus dans ce premier volet de la thèse. D'une part, les méthodes d'optimisation utilisées reposent sur une descente de gradient. L'utilisation de méthodes inspirées de l'apprentissage machine [138] pourrait permettre le développement de nouvelles méthodes numériques encore plus efficaces [139]. D'autre part, la méthode RGF-GRAPE est très générale et elle peut donc être étendue bien au-delà de ce qui a été considéré dans cette thèse. En effet, à priori rien ne limite le coeur de la méthode aux modes de Majorana et il serait donc possible de l'étendre à l'optimisation d'autres phases topologiques. De plus, bien que les modèles utilisés dans cette thèse soient suffisants pour décrire la physique essentielle à l'existence de modes de Majorana, plusieurs extensions sont possibles. En particulier, plusieurs travaux récents ont cherché à raffiner ce modèle [64, 140–142]. La combinaison de ces méthodes numériques à la méthode RGF-GRAPE pourrait permettre de guider de manière encore plus précise la conception de nouveaux qubits de Majorana.

Dans la seconde partie de cette thèse, aux chapitres 5 et 6, nous avons considéré les signatures dans le domaine micro-ondes de circuits supraconducteurs incluant des jonctions Josephson topologiques. D'abord, au chapitre 5, nous avons considéré l'effet d'interactions coulombiennes dans une jonction Josephson longue. À l'aide d'une diagonalisation numérique exacte du hamiltonien à plusieurs particules, nous avons étudié l'effet des interactions sur le spectre d'Andreev de la jonction. En particulier, nous avons démontré qu'il existe un régime de paramètres où, en raison d'une symétrie émergente, une jonction formée de chaînes de Kitaev reproduit la physique de l'isolant de Hall quantique de spin. Une signature de ce régime est un effet Josephson fractionnaire de périodicité 8π . En couplant la jonction capacitivement à un résonateur supraconducteur, nous avons proposé de nouvelles signatures micro-ondes de cet effet Josephson fractionnaire. Une question laissée ouverte dans ce chapitre est

la robustesse de la symétrie de renversement du temps émergente (et donc de l'effet Josephson 8π) face au désordre et à la dissipation.

Finalement, au chapitre 6, nous avons présenté quelques résultats préliminaires concernant l'étude de la dynamique d'un circuit supraconducteur topologique. Après un rappel du fonctionnement d'un amplificateur Josephson par bifurcation conventionnel, nous avons considéré l'impact de l'ajout d'une jonction Josephson topologique au circuit. Nos résultats démontrent que l'étude de la dynamique du circuit dans le régime de bistabilité pourrait permettre la caractérisation de modes de Majorana. En particulier, nous avons démontré que, dans un régime de paramètres approprié, il est possible d'utiliser le régime de bistabilité du circuit afin de mesurer la parité d'occupation des modes de Majorana à proximité de la jonction (parité intérieure). Comme mentionné dans ce chapitre, plusieurs extensions de nos calculs sont envisagées afin de raffiner nos prédictions et d'évaluer la fidélité de cette mesure de parité.

Annexe A

Formalisme de Bogoliubov-de Gennes

En complément de la section 2.1, cet annexe introduit quelques informations utiles à l'utilisation du formalisme BdG, mais dont l'inclusion au chapitre 2 aurait mené à une trop longue digression.

Relations de fermeture et d'orthogonalité

Comme à l'habitude, les états propres de H_{BdG} obéissent à une relation de fermeture et d'orthogonalité. Dans cette section nous explicitons ces relations en terme des spineurs u_n et v_n définis aux équations (2.11) et (2.12). Les indices α, β sont utilisés pour indiquer une somme sur les indices de la base d'un spineur de Nambu (utilisée pour $\hat{\Psi}$ et ϕ_n), alors que les indices σ, σ' indiquent une somme sur la base des spineurs originaux (utilisée pour $\hat{\psi}$, u_n et v_n).

Débutons par considérer la relation de fermeture

$$\sum_{n \neq 0} \phi_{n,\alpha}(x) \phi_{n,\beta}^*(y) = \delta(x-y) \delta_{\alpha,\beta}, \quad (\text{A.1})$$

où nous avons suivi la convention établie à la section 2.1 où nous excluons l'indice $n = 0$. Cette relation peut être réécrite en terme des composantes $u_n(x)$ et $v_n(x)$ du spineur sous la forme

$$\sum_{n \neq 0} u_{n,\sigma}(x) u_{n,\sigma'}^*(y) = \delta(x-y) \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (\text{A.2})$$

$$\sum_{n \neq 0} u_{n,\sigma}(x) v_{n,\sigma'}^*(y) = 0. \quad (\text{A.3})$$

À l'aide de la contrainte particule-trou, réécrivons ces relations uniquement en terme de n positifs (modes indépendants)

$$\sum_{n>0} [u_{n,\sigma}(x)u_{n,\sigma'}^*(y) + v_{n,\sigma}^*(x)v_{n,\sigma'}(y)] = \delta(x-y)\delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (\text{A.4})$$

$$\sum_{n>0} [u_{n,\sigma}(x)v_{n,\sigma'}^*(y) + v_{n,\sigma}^*(x)u_{n,\sigma'}(y)] = 0 \quad (\text{A.5})$$

De manière similaire, considérons maintenant la relation d'orthogonalité

$$\sum_{\alpha} \int dx \phi_{n,\alpha}^*(x)\phi_{m,\alpha}(x) = \delta_{n,m} \quad (\text{A.6})$$

ce qui implique

$$\sum_{\sigma} \int dx [u_{n,\sigma}^*(x)u_{m,\sigma}(x) + v_{n,\sigma}^*(x)v_{m,\sigma}(x)] = \delta_{n,m}. \quad (\text{A.7})$$

Expansion des modes fermioniques en terme de quasiparticules

Les opérateurs de création et d'annihilation des quasiparticules peuvent être reliés aux opérateurs de champ fermionique par la relation

$$\hat{\Gamma}_n = \sum_{\alpha} \int dx \phi_{n,\alpha}^*(x)\Psi_{\alpha}(x) = \sum_{\sigma} \int dx [u_{n,\sigma}^*(x)\psi_{\sigma}(x) + v_{n,\sigma}^*(x)\psi_{\sigma}^{\dagger}(x)]. \quad (\text{A.8})$$

Vérifions la relation d'anticommutation des opérateurs

$$\{\hat{\Gamma}_n, \hat{\Gamma}_m\} = \sum_{\sigma,\sigma'} \int dx dy [u_{n,\sigma}^*(x)v_{m,\sigma'}^*(y) + v_{n,\sigma}^*(x)u_{m,\sigma'}^*(y)] \delta_{\sigma,\sigma'}\delta(x-y) \quad (\text{A.9})$$

$$= \sum_{\sigma} \int dx [u_{n,\sigma}^*(x)u_{-m,\sigma}(x) + v_{n,\sigma}^*(x)v_{-m,\sigma}(x)] \quad (\text{A.10})$$

$$= \sum_{\lambda} \int dx \phi_{n,\lambda}^*(x)\phi_{-m,\lambda}(x) = \delta_{n,-m}, \quad (\text{A.11})$$

où le delta de Kronecker provient de la relation $\hat{\Gamma}_n = \hat{\Gamma}_{-n}^{\dagger}$. Finalement, à partir de ces résultats, nous pouvons décomposer l'opérateur d'annihilation du champ fermionique en terme des états propres du hamiltonien BdG:

$$\psi_{\sigma}(x) = \sum_{n>0} u_{n,\sigma}(x)\hat{\Gamma}_n + v_{n,\sigma}^*(x)\hat{\Gamma}_n^{\dagger}. \quad (\text{A.12})$$

Annexe B

Complément de la publication 4

Cette section présente quelques informations techniques qui n'ont pas été incluses au chapitre 5. On débute par présenter une dérivation des modes de Majorana dans la chaîne de Kitaev en terme des opérateurs du réseau. Par la suite, on discute de certaines considérations numériques utiles à la réalisation des calculs de diagonalisation exacte d'un hamiltonien à plusieurs particules.

B.1 Chaîne de Kitaev : Modes de Majorana

Les figures 4 et 5 de la publication de la section 5.1 présentent la valeur moyenne de l'opérateur de parité d'occupation des majoranas aux extrémités du système. Cet opérateur $\hat{P}_{\text{out}} = i\hat{\Gamma}_L\hat{\Gamma}_R$ est constitué du produit des opérateurs des modes de Majorana à chaque extrémité du système considéré. Ce calcul a été effectué à l'aide d'une expression analytique pour $\hat{\Gamma}_{L,R}$, dû à Kitaev [5]. Nous présentons ici une dérivation de ces expressions à l'aide du formalisme des matrices de transfert tel qu'utilisé dans ce contexte dans la référence [117] par exemple.

Nous débutons par considérer une chaîne de Kitaev (sans jonction). Dans ce cas, le système de N sites est décrit par l'hamiltonien de l'équation (2.18). Dans la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$), on cherche des modes de Majorana localisés en considérant les deux ansatz suivants :

$$\Gamma_A = \sum_{j=1} \alpha_j \gamma_{j,A}, \quad \Gamma_B = \sum_{j=1} \beta_j \gamma_{j,B}, \quad (\text{B.1})$$

où α_j et β_j sont des nombres réels. Pour que ces modes soient des **MZM**, ils doivent : i) être des constantes du mouvement i.e. $[H, \Gamma_{A,B}] = 0$, et ii) être normalisables, c'est-à-dire que $\sum_j \alpha_j^2 = 1$ et $\sum_j \beta_j^2 = 1$.

Matrice de transfert

À l'aide de l'identité $[AB, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B$ et la relation d'anticommutation des opérateurs de Majorana [cf. équation (1.11)], on obtient les commutateurs

$$[H, \Gamma_A] = \frac{i}{2} \sum_{j=1}^N [\mu\alpha_j + (\Delta + t)\alpha_{j+1} - (\Delta - t)\alpha_{j-1}] \gamma_{j,B}, \quad (\text{B.2})$$

$$[H, \Gamma_B] = \frac{i}{2} \sum_{j=1}^N [-\mu\beta_j + (\Delta - t)\beta_{j+1} - (\Delta + t)\beta_{j-1}] \gamma_{j,A}, \quad (\text{B.3})$$

où afin de respecter les conditions frontières $\alpha_{0,N+1} = \beta_{0,N+1} = 0$. L'existence de **MZM** dépendra donc de la solution des équations récursives

$$\mu\alpha_j + (\Delta + t)\alpha_{j+1} - (\Delta - t)\alpha_{j-1} = 0, \quad (\text{B.4})$$

$$-\mu\beta_j + (\Delta - t)\beta_{j+1} - (\Delta + t)\beta_{j-1} = 0. \quad (\text{B.5})$$

Ainsi, $\Gamma_{A(B)}$ est un mode de Majorana de la chaîne de Kitaev s'il existe une solution normalisable de l'équation B.4(B.5). Notons que les équations (B.4) et (B.5) sont équivalentes lors de l'échange $\mu \rightarrow -\mu$ et de $t \rightarrow -t$. Nous nous concentrerons donc sur le mode Γ_A pour l'instant.

En supposant $|t| \neq |\Delta|$, nous suivons l'approche de DeGottardi *et al.* [117] et réécrivons le système d'équations récursives (B.4) sous la forme

$$\begin{pmatrix} \alpha_{j+1} \\ \alpha_j \end{pmatrix} = M_A \begin{pmatrix} \alpha_j \\ \alpha_{j-1} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.6})$$

où nous avons défini la matrice de transfert

$$M_A = \begin{pmatrix} \frac{-\mu}{\Delta+t} & \frac{\Delta-t}{\Delta+t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.7})$$

Remarquons que dans la limite $\mu = 0$ et $t = \Delta$, $\alpha_1 = 1$ et $\alpha_{j>1} = 0$, ce qui correspond bien à la solution du **MZM** parfaitement localisé obtenu à la section 2.2.1. De plus, dans la limite $\mu = 0$ et $t = -\Delta$, nous obtenons un **MZM** localisé à l'autre extrémité de la chaîne, avec la solution $\alpha_N = 1$ et $\alpha_{j<N} = 0$.

De manière similaire à la méthode des fonctions de Green récursives utilisée au chapitre 4, il est alors possible de résoudre le système d'équations à l'aide des conditions frontières $\alpha_0 = \alpha_{N+1} = 0$. Ainsi, en considérant la frontière gauche nous

obtenons l'équation

$$\begin{pmatrix} \alpha_{j+1} \\ \alpha_j \end{pmatrix} = M_A^j \begin{pmatrix} \mathcal{N}_G \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.8})$$

où \mathcal{N}_G est un coefficient de normalisation assurant que $\sum_j \alpha_j^2 = 1$. De même, en considérant la frontière droite

$$\begin{pmatrix} \alpha_{j+1} \\ \alpha_j \end{pmatrix} = M_A^{j-N} \begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{N}_D \end{pmatrix}, \quad (\text{B.9})$$

où \mathcal{N}_D est à nouveau un coefficient de normalisation.¹

La matrice de transfert est diagonalisable et nous pouvons donc définir l'équation aux valeurs propres

$$M_A \psi_{\pm}^A = \lambda_{\pm}^A \psi_{\pm}^A, \quad (\text{B.10})$$

avec les valeurs et vecteurs propres

$$\lambda_{\pm}^A = \frac{-\mu \pm \sqrt{\mu^2 + 4(\Delta^2 - t^2)}}{2(t + \Delta)}, \quad \text{et} \quad \psi_{\pm}^A = \begin{pmatrix} \lambda_{\pm}^A \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.11})$$

Notons que M n'est pas symétrique et que les vecteurs ψ_{\pm} ne sont donc pas orthonormaux. En insérant les relations

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\psi_+ - \psi_-}{\lambda_+ - \lambda_-} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\lambda_- \psi_+ - \lambda_+ \psi_-}{\lambda_- - \lambda_+}, \quad (\text{B.12})$$

et à l'aide de l'équation (B.10), on obtient d'une part la solution à l'équation (B.8)

$$\alpha_j^G = \mathcal{N}_G \begin{pmatrix} \lambda_+^j - \lambda_-^j \\ \lambda_+ - \lambda_- \end{pmatrix}, \quad (\text{B.13})$$

et d'autre part la solution à l'équation (B.9)

$$\alpha_j^D = \mathcal{N}_D \begin{pmatrix} \lambda_- \lambda_+^{N-j} - \lambda_+ \lambda_-^{N-j} \\ \lambda_- - \lambda_+ \end{pmatrix}. \quad (\text{B.14})$$

Pour déterminer si ces solutions correspondent à des modes de Majorana, il faut

1. Les coefficients de normalisation ne sont pas indépendants et doivent obéir à la relation

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{N}_D \end{pmatrix} = M_A^N \begin{pmatrix} \mathcal{N}_G \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Par contre, cette contrainte est sans importance dans le cas d'intérêt où les modes sont localisés. Dans ce cas, $\mathcal{N}_D = 0$ pour un mode localisé à gauche ou inversement $\mathcal{N}_G = 0$ pour un mode localisé à droite.

maintenant vérifier la possibilité de les normaliser. En raison de leur structure, les coefficients \mathcal{N}_G et \mathcal{N}_D peuvent être calculés aisément à l'aide de propriétés des séries géométriques. Ainsi, la solution gauche sera normalisable pour $|\lambda_{\pm}| < 1$, alors que la solution droite sera normalisable pour $|\lambda_{\pm}| > 1$.

Afin d'obtenir les conditions de convergence de la normalisation, on utilise d'abord le polynôme caractéristique de M_A [117]

$$f_A(z) = \det[M_A - z\mathbb{1}_2] = (t + \Delta)z^2 + \mu z + (t - \Delta), \quad (\text{B.15})$$

où les valeurs propres correspondent aux zéros de l'équation quadratique $f_A(\lambda_{\pm}^A) = 0$. Si $f_A(1)$ et $f_A(-1)$ n'ont pas le même signe, un seul zéro de $f_A(z)$ se situe entre -1 et 1 et donc $|\lambda_+| > 1$ et $|\lambda_-| < 1$ ou vice-versa et les constantes de normalisations seront divergentes. Ces considérations nous permettent d'obtenir les points critiques de la transition de phase

$$f_A(1)f_A(-1) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad (\mu + 2t)(2t - \mu) = 0 \quad (\text{B.16})$$

et donc il existe un mode de Majorana $\hat{\Gamma}_A$ uniquement pour $|\mu| < 2|t|$. En considérant $\mu \rightarrow -\mu$ et $t \rightarrow -t$, on note que la même condition s'applique pour l'existence du mode $\hat{\Gamma}_B$. La considération de l'existence de **MZM** nous permet donc de retrouver à partir des conditions frontières d'un système de taille finie le même diagramme de phase que celui défini à partir de l'invariant de volume à la section 2.2.3. Finalement, remarquons que dans le cas $t > 0$, nous avons $f_A(\pm 1) > 0$ dans la phase topologique et les modes $\hat{\Gamma}_A^G$ et $\hat{\Gamma}_B^D$ seront donc normalisables [5]. Au contraire, pour $t < 0$, les modes de Majorana dans la phase topologiques seront $\hat{\Gamma}_B^G$ et $\hat{\Gamma}_A^D$. La figure B.1 résume le diagramme de phase de la chaîne de Kitaev.

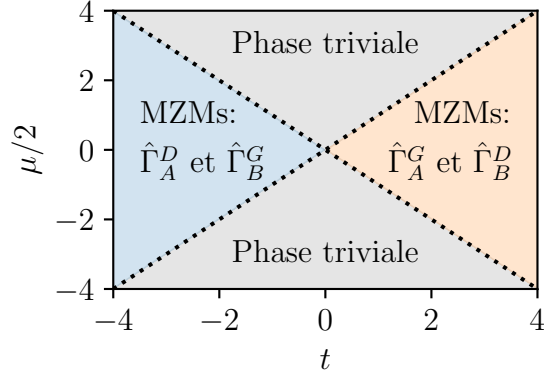


FIGURE B.1 – Diagramme de phase de la chaîne de Kitaev. À l’intérieur de la phase topologique, nous distinguons le cas où $2t > |\mu|$ (en orange) et $-2t > |\mu|$ (en bleu) correspondant à des solutions analytiques différentes pour les modes de Majorana.

B.2 Transformation de Jordan-Wigner

Bien que ce ne soit pas essentiel, il est utile de réécrire le hamiltonien fermionique originale en terme d’une chaîne de spin à l’aide d’une transformation de Jordan-Wigner. Une telle approche sera particulièrement utile pour l’évaluation de l’opérateur de parité d’occupation des modes de Majorana.

Suivant la référence [5], il est possible de réécrire les opérateurs de Majorana sous la forme

$$\gamma_{j,A} = X_j \prod_{k=1}^{j-1} Z_k \quad \text{et} \quad \gamma_{j,B} = Y_j \prod_{k=1}^{j-1} Z_k, \quad (\text{B.17})$$

où nous suivons ici la notation standard d’informatique quantique en notant X_j , Y_j , Z_j les matrices de Pauli agissant sur l’espace du spin j .

Dans cette base, le hamiltonien de la chaîne de Kitaev est

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{N-1} \mu Z_j - \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{N-2} [(t + \Delta) X_j X_{j+1} + (t - \Delta) Y_j Y_{j+1}]. \quad (\text{B.18})$$

À titre de référence, notons que l’opérateur nombre et l’opérateur de parité fermionique deviennent dans cette base

$$\hat{N} = \sum_j c_j^\dagger c_j = \frac{1}{2} \sum_j (1 + i\gamma_{j,A}\gamma_{j,B}) = \frac{1}{2} \sum_j (1 - Z_j), \quad (\text{B.19})$$

$$\mathcal{P} = \exp \left[i\pi \hat{N} \right] = \prod_j \exp \left[i\frac{\pi}{2} (1 - Z_j) \right] = i \prod_j \exp \left[-i\frac{\pi}{2} Z_j \right] = \prod_j Z_j. \quad (\text{B.20})$$

Finalement, afin de démontrer l'intérêt de cette base, notons la parité d'occupation du mode de Majorana dans la limite des majoranas parfaitement localisés :

$$P_{AB} = i\gamma_{0,A}\gamma_{N-1,B} = Y_0 \left(\prod_{j=1}^{N-2} Z_j \right) Y_{N-1}. \quad (\text{B.21})$$

Puisque cet opérateur inclut le produit d'opérateurs fermioniques séparés spatialement, le calcul de ces éléments de matrice dans une base fermionique requiert de suivre en détail plusieurs signes et parités. Dans la base de spin, ces signes sont suivis de manière systématique à l'aide de la chaîne d'opérateurs Z_j .

Bibliographie

- [1] X.-G. Wen. Colloquium: Zoo of quantum-topological phases of matter. *Rev. Mod. Phys.* **89**, 041004 (2017). [cf. p. 1, 6]
- [2] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman et S. Das Sarma. Non-abelian anyons and topological quantum computation. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1083 (2008). [cf. p. 1, 21, 22, 28]
- [3] S. D. Sarma, M. Freedman et C. Nayak. Majorana zero modes and topological quantum computation. *npj Quantum Information* **1**, 15001 (2015). [cf. p. 1, 17, 21, 27]
- [4] A. Stern et N. H. Lindner. Topological quantum computation—from basic concepts to first experiments. *Science* **339**(6124), 1179 (2013). [cf. p. 1, 21, 28]
- [5] A. Y. Kitaev. Unpaired majorana fermions in quantum wires. *Physics-Uspokhi* **44**(10S), 131 (2001). [cf. p. 1, 34, 36, 41, 56, 108, 152, 155, 156]
- [6] N. Read et D. Green. Paired states of fermions in two dimensions with breaking of parity and time-reversal symmetries and the fractional quantum hall effect. *Phys. Rev. B* **61**, 10267 (2000). [cf. p. 1, 23]
- [7] D. A. Ivanov. Non-abelian statistics of half-quantum vortices in p -wave superconductors. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 268 (2001). [cf. p. 1, 23]
- [8] M. Z. Hasan et C. L. Kane. *Colloquium* : Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010). [cf. p. 1, 10]
- [9] X.-L. Qi et S.-C. Zhang. Topological insulators and superconductors. *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011). [cf. p. 1, 10]
- [10] B. A. Bernevig et T. L. Hughes. *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton University Press, (2013). [cf. p. 1, 10]

- [11] L. Fu et C. L. Kane. Superconducting proximity effect and majorana fermions at the surface of a topological insulator. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 096407 (2008). [cf. p. 1]
- [12] L. Fu et C. L. Kane. Josephson current and noise at a superconductor/quantum-spin-hall-insulator/superconductor junction. *Phys. Rev. B* **79**, 161408 (2009). [cf. p. 1]
- [13] Y. Oreg, G. Refael et F. von Oppen, Felix. Helical liquids and majorana bound states in quantum wires. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 177002 (2010). [cf. p. 1, 43]
- [14] R. M. Lutchyn, J. D. Sau et S. Das Sarma. Majorana fermions and a topological phase transition in semiconductor-superconductor heterostructures. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 077001 (2010). [cf. p. 1, 43]
- [15] M. Leijnse et K. Flensberg. Introduction to topological superconductivity and majorana fermions. *Semiconductor Science and Technology* **27**(12), 124003 (2012). [cf. p. 1, 29]
- [16] J. Alicea. New directions in the pursuit of majorana fermions in solid state systems. *Reports on Progress in Physics* **75**(7), 076501 (2012). [cf. p. 1, 29, 40, 46]
- [17] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. Plissard, E. Bakkers et L. Kouwenhoven. Signatures of majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices. *Science* **336**(6084), 1003 (2012). [cf. p. 1, 54]
- [18] R. Aguado. Majorana quasiparticles in condensed matter. *La Rivista del Nuovo Cimento* **40**(11), 523 (2017). [cf. p. 2, 16, 29, 34, 48]
- [19] R. M. Lutchyn, E. P. A. M. Bakkers, L. P. Kouwenhoven, P. Krogstrup, C. M. Marcus et Y. Oreg. Majorana zero modes in superconductor-semiconductor heterostructures. *Nature Reviews Materials* **3**(5), 52 (2018). [cf. p. 2, 29, 34, 55]
- [20] H. Zhang, C.-X. Liu, S. Gazibegovic, D. Xu, J. A. Logan, G. Wang, N. van Loo, J. D. S. Bommer, M. W. A. de Moor, D. Car, R. L. M. Op het Veld et al. Quantized majorana conductance. *Nature* **556**(7699), 74 (2018). [cf. p. 2, 55]
- [21] T. Karzig, C. Knapp, R. M. Lutchyn, P. Bonderson, M. B. Hastings, C. Nayak, J. Alicea, K. Flensberg, S. Plugge, Y. Oreg, C. M. Marcus et M. H. Freedman. Scalable designs for quasiparticle-poisoning-protected topological quantum computation with majorana zero modes. *Phys. Rev. B* **95**, 235305 (2017). [cf. p. 2, 62, 125]
- [22] S. M. Girvin. Circuit qed: superconducting qubits coupled to microwave photons. *Quantum Machines: Measurement and Control of Engineered Quantum Systems* , 113 (2011). [cf. p. 2, 125, 145]

- [23] S. Boutin, C. K. Andersen, J. Venkatraman, A. J. Ferris et A. Blais. Resonator reset in circuit QED by optimal control for large open quantum systems. *Phys. Rev. A* **96**, 042315 (2017). [cf. p. 2, 66]
- [24] S. Boutin, J. Camirand Lemyre et I. Garate. Majorana bound state engineering via efficient real-space parameter optimization. *Phys. Rev. B* **98**, 214512 (2018). [cf. p. 3, 80]
- [25] S. Turcotte, S. Boutin, J. Camirand Lemyre, I. Garate et M. Pioro-Ladrière. Optimized micromagnet geometries for Majorana zero modes in low g-factor materials . *Prépublication arXiv* (2019). [cf. p. 3, 97]
- [26] P. L. S. Lopes, S. Boutin, P. Karan, U. C. Mendes et I. Garate. Microwave signatures of the F_2 and F_4 fractional josephson effects. *Phys. Rev. B* **99**, 045103 (2019). [cf. p. 3, 108]
- [27] X. Wen. *Quantum Field Theory of Many-Body Systems: From the Origin of Sound to an Origin of Light and Electrons*. Oxford Graduate Texts. OUP Oxford, (2004). [cf. p. 6]
- [28] J. M. Kosterlitz. Nobel lecture: Topological defects and phase transitions. *Rev. Mod. Phys.* **89**, 040501 (2017). [cf. p. 7]
- [29] F. D. M. Haldane. Nobel lecture: Topological quantum matter. *Rev. Mod. Phys.* **89**, 040502 (2017). [cf. p. 7]
- [30] C.-K. Chiu, J. C. Y. Teo, A. P. Schnyder et S. Ryu. Classification of topological quantum matter with symmetries. *Rev. Mod. Phys.* **88**, 035005 (2016). [cf. p. 7, 11, 12, 14, 15, 31]
- [31] A. W. W. Ludwig. Topological phases: classification of topological insulators and superconductors of non-interacting fermions, and beyond. *Physica Scripta* **2016(T168)**, 014001 (2016). [cf. p. 8, 9, 11, 12, 13, 14, 15]
- [32] P. Bonderson et C. Nayak. Quasi-topological phases of matter and topological protection. *Phys. Rev. B* **87**, 195451 (2013). [cf. p. 8]
- [33] F. D. M. Haldane. Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1988). [cf. p. 9]
- [34] L. Fu. Topological crystalline insulators. *Phys. Rev. Lett.* **106**, 106802 (2011). [cf. p. 11]
- [35] Y. Tanaka, Z. Ren, T. Sato, K. Nakayama, S. Souma, T. Takahashi, K. Segawa et Y. Ando. Experimental realization of a topological crystalline insulator in SnTe. *Nat Phys* **8(11)**, 800 (2012). [cf. p. 11]

- [36] Y. Ando et L. Fu. Topological crystalline insulators and topological superconductors: From concepts to materials. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **6(1)**, 361 (2015). [cf. p. 11]
- [37] A. Altland et M. R. Zirnbauer. Nonstandard symmetry classes in mesoscopic normal-superconducting hybrid structures. *Phys. Rev. B* **55**, 1142 (1997). [cf. p. 15]
- [38] S. Ryu, A. P. Schnyder, A. Furusaki et A. W. W. Ludwig. Topological insulators and superconductors: tenfold way and dimensional hierarchy. *New J. Phys.* **12(6)**, 065010 (2010). [cf. p. 15]
- [39] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki et A. W. W. Ludwig. Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions. *Phys. Rev. B* **78**, 195125 (2008). [cf. p. 15]
- [40] A. Kitaev. Periodic table for topological insulators and superconductors. *AIP Conference Proceedings* **1134(1)**, 22 (2009). [cf. p. 15]
- [41] F. Wilczek. Majorana returns. *Nat. Phys.* **5(9)**, 614 (2009). [cf. p. 15]
- [42] T. E. X. O.-. Collaboration, J. B. Albert, D. J. Auty, P. S. Barbeau, E. Beauchamp, D. Beck, V. Belov, C. Benitez-Medina, J. Bonatt, M. Breidenbach, T. Brunner et al. Search for majorana neutrinos with the first two years of exo-200 data. *Nature* **510**, 229 (2014). [cf. p. 16]
- [43] S. R. Elliott et M. Franz. *Colloquium* : Majorana fermions in nuclear, particle, and solid-state physics. *Rev. Mod. Phys.* **87**, 137 (2015). [cf. p. 16]
- [44] M. Freedman, A. Kitaev, M. Larsen et Z. Wang. Topological quantum computation. *Bulletin of the American Mathematical Society* **40(1)**, 31 (2003). [cf. p. 21]
- [45] A. Kitaev. Fault-tolerant quantum computation by anyons. *Annals of Physics* **303(1)**, 2 (2003). [cf. p. 21]
- [46] J. Alicea, Y. Oreg, G. Refael, F. von Oppen et M. P. Fisher. Non-abelian statistics and topological quantum information processing in 1d wire networks. *Nat. Phys.* **7(5)**, 412 (2011). [cf. p. 21, 23]
- [47] P. Bonderson, M. Freedman et C. Nayak. Measurement-only topological quantum computation. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 010501 (2008). [cf. p. 23, 63]
- [48] P. Bonderson, M. Freedman et C. Nayak. Measurement-only topological quantum computation via anyonic interferometry. *Annals of Physics* **324(4)**, 787 (2009). [cf. p. 23, 63]

- [49] S. B. Bravyi et A. Y. Kitaev. Fermionic quantum computation. *Annals of Physics* **298**(1), 210 (2002). [cf. p. 25]
- [50] M. Nielsen et I. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge Series on Information and the Natural Sciences. Cambridge University Press, (2000). [cf. p. 26, 27, 28]
- [51] J. Alicea et P. Fendley. Topological phases with parafermions: Theory and blueprints. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **7**(1), 119 (2016). [cf. p. 28]
- [52] C. Beenakker. Search for majorana fermions in superconductors. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **4**(1), 113 (2013). [cf. p. 29]
- [53] T. D. Stanescu et S. Tewari. Majorana fermions in semiconductor nanowires: fundamentals, modeling, and experiment. *Journal of Physics: Condensed Matter* **25**(23), 233201 (2013). [cf. p. 29]
- [54] F. von Oppen, Y. Peng et F. Pientka. Topological superconducting phases in one dimension. *Lecture Notes of the Les Houches Summer School: Topological Aspects of Condensed Matter Physics* , 387 (2017). [cf. p. 29, 42, 51]
- [55] C. W. J. Beenakker. Random-matrix theory of majorana fermions and topological superconductors. *Rev. Mod. Phys.* **87**, 1037 (2015). [cf. p. 31, 34, 52]
- [56] S. Tewari et J. D. Sau. Topological invariants for spin-orbit coupled superconductor nanowires. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 150408 (2012). [cf. p. 41]
- [57] A. R. Akhmerov, J. P. Dahlhaus, F. Hassler, M. Wimmer et C. W. J. Beenakker. Quantized conductance at the majorana phase transition in a disordered superconducting wire. *Phys. Rev. Lett.* **106**, 057001 (2011). [cf. p. 42, 51, 53]
- [58] I. C. Fulga, F. Hassler, A. R. Akhmerov et C. W. J. Beenakker. Scattering formula for the topological quantum number of a disordered multimode wire. *Phys. Rev. B* **83**, 155429 (2011). [cf. p. 42, 51, 53]
- [59] I. C. Fulga, F. Hassler et A. R. Akhmerov. Scattering theory of topological insulators and superconductors. *Phys. Rev. B* **85**, 165409 (2012). [cf. p. 42, 53]
- [60] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, (1997). [cf. p. 44, 52]
- [61] R. M. Lutchyn, T. D. Stanescu et S. Das Sarma. Search for majorana fermions in multiband semiconducting nanowires. *Phys. Rev. Lett.* **106**, 127001 (2011). [cf. p. 44]

- [62] A. C. Potter et P. A. Lee. Multichannel generalization of kitaev's majorana end states and a practical route to realize them in thin films. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 227003 (2010). [cf. p. 44]
- [63] A. C. Potter et P. A. Lee. Majorana end states in multiband microstructures with rashba spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B* **83**, 094525 (2011). [cf. p. 44]
- [64] A. E. G. Mikkelsen, P. Kotetes, P. Krogstrup et K. Flensberg. Hybridization at superconductor-semiconductor interfaces. *Phys. Rev. X* **8**, 031040 (2018). [cf. p. 46, 148]
- [65] J. Cayao, P. San-Jose, A. M. Black-Schaffer, R. Aguado et E. Prada. Majorana splitting from critical currents in josephson junctions. *Phys. Rev. B* **96**, 205425 (2017). [cf. p. 48, 136, 143]
- [66] M. Kjaergaard, K. Wölms et K. Flensberg. Majorana fermions in superconducting nanowires without spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B* **85**, 020503 (2012). [cf. p. 49, 79]
- [67] L. Maurer, J. Gamble, L. Tracy, S. Eley et T. Lu. Designing nanomagnet arrays for topological nanowires in silicon. *Phys. Rev. Appl.* **10**, 054071 (2018). [cf. p. 49, 79]
- [68] S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, B. A. Bernevig et A. Yazdani. Proposal for realizing majorana fermions in chains of magnetic atoms on a superconductor. *Phys. Rev. B* **88**, 020407 (2013). [cf. p. 49, 79]
- [69] T.-P. Choy, J. M. Edge, A. R. Akhmerov et C. W. J. Beenakker. Majorana fermions emerging from magnetic nanoparticles on a superconductor without spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B* **84**, 195442 (2011). [cf. p. 49, 79]
- [70] B. Braunecker et P. Simon. Interplay between classical magnetic moments and superconductivity in quantum one-dimensional conductors: Toward a self-sustained topological majorana phase. *Phys. Rev. Lett.* **111**, 147202 (2013). [cf. p. 49, 79]
- [71] K. T. Law, P. A. Lee et T. K. Ng. Majorana fermion induced resonant andreev reflection. *Phys. Rev. Lett.* **103**, 237001 (2009). [cf. p. 51]
- [72] C. W. J. Beenakker. Quantum transport in semiconductor-superconductor microjunctions. *eprint arXiv:cond-mat/9406083* (1994). [cf. p. 52]
- [73] G. E. Blonder, M. Tinkham et T. M. Klapwijk. Transition from metallic to tunneling regimes in superconducting microconstrictions: Excess current, charge imbalance, and supercurrent conversion. *Phys. Rev. B* **25**, 4515 (1982). [cf. p. 53]

- [74] M. Tinkham. *Introduction to Superconductivity: Second Edition*. Dover Books on Physics. Dover Publications, (2004). [cf. p. 53, 56, 58, 61, 127, 145]
- [75] S. Das Sarma, A. Nag et J. D. Sau. How to infer non-abelian statistics and topological visibility from tunneling conductance properties of realistic majorana nanowires. *Phys. Rev. B* **94**, 035143 (2016). [cf. p. 54]
- [76] M. Wimmer, A. R. Akhmerov, J. P. Dahlhaus et C. W. J. Beenakker. Quantum point contact as a probe of a topological superconductor. *New J. Phys.* **13**(5), 053016 (2011). [cf. p. 54]
- [77] C.-H. Lin, J. D. Sau et S. Das Sarma. Zero-bias conductance peak in majorana wires made of semiconductor/superconductor hybrid structures. *Phys. Rev. B* **86**, 224511 (2012). [cf. p. 55]
- [78] J. M. Martinis et K. Osborne. Course 13 - superconducting qubits and the physics of josephson junctions. Dans *Quantum Entanglement and Information Processing*, D. Estève, J.-M. Raimond et J. Dalibard, tome 79 de *Les Houches*, 487 - 520. Elsevier (2004). [cf. p. 56, 58]
- [79] M. Hell, J. Danon, K. Flensberg et M. Leijnse. Time scales for majorana manipulation using coulomb blockade in gate-controlled superconducting nanowires. *Phys. Rev. B* **94**, 035424 (2016). [cf. p. 59, 146]
- [80] C. W. J. Beenakker, D. I. Pikulin, T. Hyart, H. Schomerus et J. P. Dahlhaus. Fermion-parity anomaly of the critical supercurrent in the quantum spin-hall effect. *Phys. Rev. Lett.* **110**, 017003 (2013). [cf. p. 59, 136, 141]
- [81] D. Rainis et D. Loss. Majorana qubit decoherence by quasiparticle poisoning. *Phys. Rev. B* **85**, 174533 (2012). [cf. p. 60]
- [82] M. Hays, G. de Lange, K. Serniak, D. J. van Woerkom, D. Bouman, P. Krogstrup, J. Nygård, A. Geresdi et M. H. Devoret. Direct microwave measurement of andreev-bound-state dynamics in a semiconductor-nanowire josephson junction. *Phys. Rev. Lett.* **121**, 047001 (2018). [cf. p. 61]
- [83] D. Laroche, D. Bouman, D. J. van Woerkom, A. Proutski, C. Murthy, D. I. Pikulin, C. Nayak, R. J. van Gulik, J. Nygård, P. Krogstrup et others. Observation of the 4π -periodic josephson effect in indium arsenide nanowires. *Nature communications* **10**(1), 245 (2019). [cf. p. 61]
- [84] L. P. Rokhinson, X. Liu et J. K. Furdyna. The fractional a.c. josephson effect in a semiconductor-superconductor nanowire as a signature of majorana particles. *Nat Phys* **8**(11), 795 (2012). [cf. p. 61]

- [85] J. Wiedenmann, E. Bocquillon, R. S. Deacon, S. Hartinger, O. Herrmann, T. M. Klapwijk, L. Maier, C. Ames, C. Brüne, C. Gould, A. Oiwa et al. 4π -periodic josephson supercurrent in hgte-based topological josephson junctions. *Nat. Commun.* **7**, 10303 (2016). [cf. p. 61]
- [86] R. S. Deacon, J. Wiedenmann, E. Bocquillon, F. Domínguez, T. M. Klapwijk, P. Leubner, C. Brüne, E. M. Hankiewicz, S. Tarucha, K. Ishibashi, H. Buhmann et L. W. Molenkamp. Josephson radiation from gapless andreev bound states in hgte-based topological junctions. *Phys. Rev. X* **7**, 021011 (2017). [cf. p. 61]
- [87] E. Bocquillon, R. S. Deacon, J. Wiedenmann, P. Leubner, T. M. Klapwijk, C. Brüne, K. Ishibashi, H. Buhmann et L. W. Molenkamp. Gapless andreev bound states in the quantum spin hall insulator hgte. *Nature Nanotechnology* **12**, 137 (2016). [cf. p. 61]
- [88] S. Vaitiekėnas, A. M. Whiticar, M.-T. Deng, F. Krizek, J. E. Sestoft, C. J. Palmstrøm, S. Marti-Sanchez, J. Arbiol, P. Krogstrup, L. Casparis et C. M. Marcus. Selective-area-grown semiconductor-superconductor hybrids: A basis for topological networks. *Phys. Rev. Lett.* **121**, 147701 (2018). [cf. p. 62]
- [89] H. J. Suominen, M. Kjaergaard, A. R. Hamilton, J. Shabani, C. J. Palmstrøm, C. M. Marcus et F. Nichele. Zero-energy modes from coalescing andreev states in a two-dimensional semiconductor-superconductor hybrid platform. *Phys. Rev. Lett.* **119**, 176805 (2017). [cf. p. 62]
- [90] J. Shabani, M. Kjaergaard, H. J. Suominen, Y. Kim, F. Nichele, K. Pakrouski, T. Stankevic, R. M. Lutchyn, P. Krogstrup, R. Feidenhans'l, S. Kraemer et al. Two-dimensional epitaxial superconductor-semiconductor heterostructures: A platform for topological superconducting networks. *Phys. Rev. B* **93**, 155402 (2016). [cf. p. 62]
- [91] M. Kjaergaard, F. Nichele, H. J. Suominen, M. P. Nowak, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, J. A. Folk, K. Flensberg, J. Shabani, C. J. Palmstrøm et C. M. Marcus. Quantized conductance doubling and hard gap in a two-dimensional semiconductor-superconductor heterostructure. *Nat. Commun.* **7**, 12841 (2016). [cf. p. 62]
- [92] D. Aasen, M. Hell, R. V. Mishmash, A. Higginbotham, J. Danon, M. Leijnse, T. S. Jespersen, J. A. Folk, C. M. Marcus, K. Flensberg et J. Alicea. Milestones toward majorana-based quantum computing. *Phys. Rev. X* **6**, 031016 (2016). [cf. p. 62, 125]
- [93] S. Plugge, A. Rasmussen, R. Egger et K. Flensberg. Majorana box qubits. *New J. Phys.* **19**(1), 012001 (2017). [cf. p. 62, 125]

- [94] D. J. Egger et F. K. Wilhelm. Optimal control of a quantum measurement. *Phys. Rev. A* **90**, 052331 (2014). [cf. p. 64]
- [95] C. P. Koch. Controlling open quantum systems: tools, achievements, and limitations. *Journal of Physics: Condensed Matter* **28**(21), 213001 (2016). [cf. p. 64]
- [96] N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet, T. Schulte-Herbrüggen et S. J. Glaser. Optimal control of coupled spin dynamics: design of nmr pulse sequences by gradient ascent algorithms. *Journal of Magnetic Resonance* **172**(2), 296 (2005). [cf. p. 65]
- [97] T. Schulte-Herbrüggen, A. Spoerl, N. Khaneja et S. Glaser. Optimal control for generating quantum gates in open dissipative systems. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44**, 154013 (2011). [cf. p. 65]
- [98] A. Blais, R.-S. Huang, A. Wallraff, S. M. Girvin et R. J. Schoelkopf. Cavity quantum electrodynamics for superconducting electrical circuits: An architecture for quantum computation. *Phys. Rev. A* **69**, 062320 (2004). [cf. p. 65]
- [99] A. G. Fowler, M. Mariantoni, J. M. Martinis et A. N. Cleland. Surface codes: Towards practical large-scale quantum computation. *Phys. Rev. A* **86**(3), 032324 (2012). [cf. p. 65]
- [100] D. T. McClure, H. Paik, L. S. Bishop, M. Steffen, J. M. Chow et J. M. Gambetta. Rapid driven reset of a qubit readout resonator. *Phys. Rev. Appl.* **5**, 011001 (2016). [cf. p. 65]
- [101] A. J. Landig, J. V. Koski, P. Scarlino, U. Mendes, A. Blais, C. Reichl, W. Wegscheider, A. Wallraff, K. Ensslin et T. Ihn. Coherent spin–photon coupling using a resonant exchange qubit. *Nature* **560**(7717), 179 (2018). [cf. p. 65]
- [102] N. Samkharadze, G. Zheng, N. Kalhor, D. Brousse, A. Sammak, U. Mendes, A. Blais, G. Scappucci et L. Vandersypen. Strong spin-photon coupling in silicon. *Science* **359**(6380), 1123 (2018). [cf. p. 65]
- [103] A. L. Grimsmo et T. Smith. Majorana Qubit Readout Using Longitudinal Qubit-Resonator Interaction. *Prépublication arXiv* (2018). [cf. p. 65, 147]
- [104] C. Ohm et F. Hassler. Microwave readout of majorana qubits. *Phys. Rev. B* **91**, 085406 (2015). [cf. p. 65]
- [105] S. Puri, S. Boutin et A. Blais. Engineering the quantum states of light in a kerr-nonlinear resonator by two-photon driving. *npj Quantum Information* **3**(1), 18 (2017). [cf. p. 66]
- [106] D. J. Thouless et S. Kirkpatrick. Conductivity of the disordered linear chain. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **14**(3), 235 (1981). [cf. p. 80]

- [107] C. H. Lewenkopf et E. R. Mucciolo. The recursive green's function method for graphene. *Journal of Computational Electronics* **12**(2), 203 (2013). [cf. p. 80]
- [108] M. Wimmer. *Quantum transport in nanostructures: From computational concepts to spintronics in graphene and magnetic tunnel junctions*. Thèse de Doctorat, Universität Regensburg, (2008). [cf. p. 80]
- [109] C. P. Orth, R. P. Tiwari, T. Meng et T. L. Schmidt. Non-abelian parafermions in time-reversal-invariant interacting helical systems. *Phys. Rev. B* **91**, 081406 (2015). [cf. p. 107]
- [110] F. Zhang et C. L. Kane. Anomalous topological pumps and fractional josephson effects. *Phys. Rev. B* **90**, 020501 (2014). [cf. p. 107]
- [111] Y. Peng, Y. Vinkler-Aviv, P. W. Brouwer, L. I. Glazman et F. von Oppen. Parity anomaly and spin transmutation in quantum spin hall josephson junctions. *Phys. Rev. Lett.* **117**, 267001 (2016). [cf. p. 107]
- [112] O. Dmytruk, M. Trif et P. Simon. Josephson effect in topological superconducting rings coupled to a microwave cavity. *Phys. Rev. B* **94**, 115423 (2016). [cf. p. 107]
- [113] M. Trif et Y. Tserkovnyak. Resonantly tunable majorana polariton in a microwave cavity. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 257002 (2012). [cf. p. 107]
- [114] M. Trif, O. Dmytruk, H. Bouchiat, R. Aguado et P. Simon. Dynamic current susceptibility as a probe of majorana bound states in nanowire-based josephson junctions. *Phys. Rev. B* **97**, 041415 (2018). [cf. p. 107]
- [115] O. Dmytruk, M. Trif et P. Simon. Cavity quantum electrodynamics with mesoscopic topological superconductors. *Phys. Rev. B* **92**, 245432 (2015). [cf. p. 107]
- [116] A. Cottet, T. Kontos et B. Douçot. Squeezing light with majorana fermions. *Phys. Rev. B* **88**, 195415 (2013). [cf. p. 107]
- [117] W. DeGottardi, D. Sen et S. Vishveshwara. Topological phases, majorana modes and quench dynamics in a spin ladder system. *New J. Phys.* **13**(6), 065028 (2011). [cf. p. 108, 152, 153, 155]
- [118] J. Koch, T. M. Yu, J. Gambetta, A. A. Houck, D. I. Schuster, J. Majer, A. Blais, M. H. Devoret, S. M. Girvin et R. J. Schoelkopf. Charge-insensitive qubit design derived from the cooper pair box. *Phys. Rev. A* **76**, 042319 (2007). [cf. p. 125]
- [119] R. Vijay. *Josephson Bifurcation Amplifier: Amplifying quantum signals using a dynamical bifurcation*. Thèse de Doctorat, Yale University, (2008). [cf. p. 125, 126, 131, 135]

- [120] M. Hatridge, R. Vijay, D. H. Slichter, J. Clarke et I. Siddiqi. Dispersive magnetometry with a quantum limited squid parametric amplifier. *Phys. Rev. B* **83**, 134501 (2011). [cf. p. 125, 128]
- [121] S. Boutin, D. M. Toyli, A. V. Venkatramani, A. W. Eddins, I. Siddiqi et A. Blais. Effect of higher-order nonlinearities on amplification and squeezing in josephson parametric amplifiers. *Phys. Rev. Appl.* **8**, 054030 (2017). [cf. p. 125]
- [122] F. Mallet, F. R. Ong, A. Palacios-Laloy, F. Nguyen, P. Bertet, D. Vion et D. Esteve. Single-shot qubit readout in circuit quantum electrodynamics. *Nat Phys* **5**(11), 791 (2009). [cf. p. 125, 135]
- [123] D. H. Slichter. *Quantum Jumps and Measurement Backaction in a Superconducting Qubit*. Thèse de Doctorat, Berkeley, (2011). [cf. p. 126, 128]
- [124] T. Morel et C. Mora. Double-periodic josephson junctions in a quantum dissipative environment. *arXiv preprint arXiv:1904.04678* (2019). [cf. p. 127]
- [125] M. Galassi, J. Davies, J. Theiler, B. Gough, G. Jungman, P. Alken, M. Booth et F. Rossi. Gnu Scientific Library: Reference Manual, (2011). [cf. p. 132]
- [126] C. Gardiner. *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry, and the natural sciences*. Springer series in synergetics. Springer, (1994). [cf. p. 134]
- [127] M. Boissonneault. *Mesure et rétroaction sur un qubit multi-niveaux en électrodynamique quantique en circuit non-linéaire*. Thèse de Doctorat, Université de Sherbrooke, (2011). [cf. p. 136]
- [128] P. Bertet, F. R. Ong, M. Boissonneault, A. Bolduc, F. Mallet, A. Doherty, A. Blais, D. Vion et D. Esteve. *Circuit quantum electrodynamics with a nonlinear resonator*, chapitre 1. Oxford University Press (2011). [cf. p. 136]
- [129] F. Domínguez, F. Hassler et G. Platero. Dynamical detection of majorana fermions in current-biased nanowires. *Phys. Rev. B* **86**, 140503 (2012). [cf. p. 136]
- [130] F. Domínguez, O. Kashuba, E. Bocquillon, J. Wiedenmann, R. S. Deacon, T. M. Klapwijk, G. Platero, L. W. Molenkamp, B. Trauzettel et E. M. Hankiewicz. Josephson junction dynamics in the presence of 2π - and 4π -periodic supercurrents. *Phys. Rev. B* **95**, 195430 (2017). [cf. p. 136]
- [131] M. Gibertini, F. Taddei, M. Polini et R. Fazio. Local density of states in metal-topological superconductor hybrid systems. *Phys. Rev. B* **85**, 144525 (2012). [cf. p. 139]
- [132] C.-K. Chiu et S. Das Sarma. Fractional Josephson Effect with and without Majorana Zero Modes. *Prépublication arXiv* (2018). [cf. p. 140]

- [133] J.-J. Feng, Z. Huang, Z. Wang et Q. Niu. Hysteresis from nonlinear dynamics of majorana modes in topological josephson junctions. *Phys. Rev. B* **98**, 134515 (2018). [cf. p. 144]
- [134] M. H. Devoret. Quantum fluctuations in electrical circuits. *Les Houches, Session LXIII* (1995). [cf. p. 145]
- [135] Y. V. Nazarov et B. M. Yaroslav. *Quantum transport: introduction to nanoscience*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, (2009). [cf. p. 146]
- [136] L. Fu. Electron teleportation via majorana bound states in a mesoscopic superconductor. *Phys. Rev. Lett.* **104**, 056402 (2010). [cf. p. 146]
- [137] R. Rodríguez-Mota, S. Vishveshwara et T. Pereg-Barnea. Revisiting 2π phase slip suppression in topological josephson junctions. *Phys. Rev. B* **99**, 024517 (2019). [cf. p. 146]
- [138] P. Mehta, M. Bukov, C.-H. Wang, A. r. G. R. Day, C. Richardson, C. K. Fisher et D. J. Schwab. A high-bias, low-variance introduction to Machine Learning for physicists. *arXiv e-prints* , arXiv:1803.08823 (2018). [cf. p. 148]
- [139] A. G. R. Day, M. Bukov, P. Weinberg, P. Mehta et D. Sels. Glassy phase of optimal quantum control. *Phys. Rev. Lett.* **122**, 020601 (2019). [cf. p. 148]
- [140] G. W. Winkler, A. E. Antipov, B. van Heck, A. A. Soluyanov, L. I. Glazman, M. Wimmer et R. M. Lutchyn. A unified numerical approach to semiconductor-superconductor heterostructures. *Prépublication arXiv* (2018). [cf. p. 148]
- [141] A. E. Antipov, A. Bargerbos, G. W. Winkler, B. Bauer, E. Rossi et R. M. Lutchyn. Effects of gate-induced electric fields on semiconductor majorana nanowires. *Phys. Rev. X* **8**, 031041 (2018). [cf. p. 148]
- [142] A. Vuik, D. Eeltink, A. R. Akhmerov et M. Wimmer. Effects of the electrostatic environment on the majorana nanowire devices. *New J. Phys.* **18**(3), 033013 (2016). [cf. p. 148]