

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР
ім. Б. І. Веркіна**

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР
ім. Б. І. Веркіна**

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Ільїнська Ольга Олександрівна

УДК 538.93

ДИСЕРТАЦІЯ

**КВАНТОВІ ЕЛЕКТРОМЕХАНІЧНІ ТА ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ ЕФЕКТИ
У НАНОСИСТЕМАХ ЗІ СПІН-ПОЛЯРИЗОВАНИМИ ЕЛЕКТРОНАМИ**

01.04.02 – теоретична фізика

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело _____ О.О. Ільїнська
(підпис здобувача)

**Науковий керівник: Криве Ілля Валентинович,
доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник**

Всі примірники дисертації ідентичні за змістом.

Учений секретар спеціалізованої вченої ради Д64.175.02 _____ Богдан М.М.

Харків 2018

АНОТАЦІЯ

Ільїнська О.О. Квантові електромеханічні та термоелектричні ефекти у наносистемах зі спін-поляризованими електронами. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. – Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН України, Харків, 2018.

Дисертація присвячена теоретичному вивченню нових ефектів у таких наноелектромеханічних системах як електричний і магнітний одноелектронні шатли з частковою поляризацією електронів в електродах і термоіндуктований одноелектронний шатл, а також побудові теорії термоелектричних ефектів у спітронних молекулярних транзисторах.

Методом матриці густини в теорії збурень за параметром $\Gamma / (|e|V)$, де Γ – ширина рівня, V – напруга, прикладена до електродів, e – заряд електрона, знайдені області шатлівської нестійкості електричного і магнітного одноелектронних шатлів з частковою поляризацією електронів в електродах. Розглянута наступна наноелектромеханічна система. Вібруюча квантова точка тунельно зв'язана з двома магнітними електродами – виток і сток електронів. Електрони в електродах не взаємодіють і є частково поляризованими за спіном. Квантова точка в запропонованій моделі має один вироджений за спіном енергетичний рівень. Зовнішнє магнітне поле направлено перпендикулярно намагніченостям електродів. Силами, що діють на електрон на квантовій точці, в електричному шатлі є кулонівські сили між електроном на точці та електродами, а в магнітному шатлі – обмінні сили між спіном електрона на точці та намагніченостями електродів. Коливання центру мас квантової точки моделюється потенціалом гармонічного осцилятора. Амплітуди тунелювання між квантовою точкою і електродами експоненціально залежать від відстані між ними.

Для електричного шатлу досліджений вплив зовнішнього магнітного поля, перпендикулярного напрямку намагніченості електродів, на можливість переходів з вібронної області електронного транспорту (області параметрів, у якій будь-яке

початкове коливання квантової точки згасає) в шатлівському (область параметрів, у якій початкове коливання експоненціально зростає) і навпаки. Показано, що в режимі кулонівської блокади електронного транспорту (тобто за умови $|e|V \ll U$, де U – енергія міжелектронної взаємодії) зі зменшенням ступеня поляризації вібронна область поступово зменшується і, в кінці кінців, зникає. Таким чином, переходити з вібронної області в шатлівський і назад за допомогою магнітного поля можна лише при достатньо високому ступені поляризації, вище певного критичного значення. Чисельно показано, що це критичне значення дорівнює 64%. Неможливість переходу між шатлівською і вібронною областями за допомогою магнітного поля при малих значеннях ступеня поляризації ми пояснюємо відкриттям (при неповній поляризації електронів в електродах) додаткового каналу транспорту – без перевертання спіну. Цей додатковий канал транспорту електронів забезпечує появу шатлівської нестійкості без зовнішнього магнітного поля. Розрахований інкремент експоненціального зростання амплітуди коливань шатлу для випадку, коли кулонівську блокаду знято ($|e|V \gg U$). Цей інкремент завжди додатний, тобто за відсутності кулонівської блокади шатлівська нестійкість розвивається при довільних значеннях параметрів системи (магнітного поля та парціальних ширин рівня). Показано, що контролювати шатлівську нестійкість (тобто змінювати інкремент) за допомогою магнітного поля можна лише для ступенів поляризації, близьких до стовідсоткової.

Знайдено, що область нестійкості одноелектронного магнітного шатлу з неповною поляризацією електронів в електродах якісно відрізняється від області нестійкості шатлу з повною поляризацією електронів, у якому намагніченості електродів протилежні за напрямком. А саме, показано, що в випадку неповної поляризації з'являється нижня гілка на залежності критичного магнітного поля, що розділяє вібронну і шатлівську області, від ширини рівня (енергії тунельного зв'язку). Виникнення нижньої гілки критичного магнітного поля можна пояснити якісно. При частковій поляризації і достатньо малих магнітних полях електрон тунелює з квантової точки в стік в середньому раніше, ніж перевернеться його спін. Оскільки сили відштовхування, що призводять до розвитку шатлівської

нестійкості, виникають лише при перевероті спіну, в малих полях нестійкості немає.

Показана принципова можливість створення одноелектронного термоіндуктованого магнітного шатлу. У такій наноелектромеханічній системі за розвиток шатлівської нестійкості відповідають обмінні сили, а джерелом енергії є не електрична напруга, а різниця температур між електродами. Розглянуто термоіндуктований шатл з повністю поляризованими в протилежних напрямках за спіном електродами і нульовою температурою в стоці. Методом матриці густини в теорії збурень за параметром Γ/T , де Γ – ширина рівня, T – температура виток, знайдена область шатлівської нестійкості в параметрах «магнітне поле – температура» (у даній моделі середня температура в системі і різниця температур не є незалежними величинами).

Запропонований новий механізм тертя в наноелектромеханічних системах. Розглянута система з електродом, що підтримується при температурі T і тунельно зв'язаний з вібруючою квантовою точкою. Сили взаємодії між електроном на точці та електродом можуть бути кулонівські або обмінні. Показано, що наявність цих сил, поряд із зворотним тунелюванням електронів з квантової точки в електрод, призводить до виникнення внутрішнього тертя з немонотонно залежним від температури коефіцієнтом тертя. Коефіцієнт тертя прямує до нуля як в границі низьких, так і в границі високих температур, і досягає максимуму при проміжних температурах. На основі температурної залежності коефіцієнту тертя знайдена температурна залежність нижнього критичного магнітного поля термоіндуктованого одноелектронного шатлу.

Вперше вивчені термоелектричні ефекти в спітронному молекулярному транзисторі на основі квантової точки. Розглянута наносистема, в якій квантова точка тунельно зв'язана з витком і стоком електронів, які знаходяться при різних хімічних потенціалах і температурах. Квантова точка має один вироджений за спіном рівень, електроди повністю поляризовані за спіном у протилежних напрямках. Зовнішнє магнітне поле, що направлене перпендикулярно намагніченостям електродів, знімає спінову блокаду електричного струму.

Термоелектричні ефекти розраховані в наближенні лінійного відгуку за напругою і різницею температур. Для випадку електронів на квантовій точці, які не взаємодіють, методом рівнянь руху отриманий коефіцієнт проходження даного спітронного транзистора. Для знаходження термоелектричних коефіцієнтів (електрокондуктанс, теплокондуктанс, термоелектрорушійна сила) за відомим коефіцієнтом проходження використаний підхід Ландауера—Бюттікера. Максимальна потужність і потужність при максимальній ефективності оптимізовані чисельно за такими параметрами системи як середня температура, параметр відхилення від резонансу ($\Delta \equiv \varepsilon_0 - \varepsilon_F$, де ε_0 – енергія рівня електрона на квантовій точці, ε_F – енергія Фермі) і магнітне поле. Вивчена основна характеристика твердотільного термоелектрика – термоелектрична добротність ZT . Знайдена залежність від магнітного поля відношення термоелектричної добротності спітронного транзистора до термоелектричної добротності транзистора на основі однорівневої квантової точки з неполяризованими електронами. Ця залежність показує, що термоелектрична добротність спітронного транзистора в певному інтервалі магнітних полів перевищує термоелектричну добротність аналогічного транзистора з неполяризованими електронами. Зокрема, вона в декілька разів вища для оптимального магнітного поля, що відповідає максимізованій потужності. Вплив електрон-електронної взаємодії на квантовій точці врахований методом матриці густини в теорії збурень за параметром Γ/T , де T – середня температура в системі. Показано, що помірна електрон-електронна взаємодія незначно знижує термоелектричну добротність, а оптимальне значення термоелектричної добротності, що характерне для електронів без взаємодії, відновлюється в режимі кулонівської блокади. Даний результат отриманий в області, де може бути застосована теорія збурень, тобто при високих у порівнянні з шириною рівня температурах. Також наведений аналогічний графік залежності термоелектричної добротності від енергії електрон-електронної взаємодії при температурах, близьких до оптимальної; цей графік показує, що якісних відмінностей випадку оптимальних температур від випадку високих температур немає.

Вивчені термоелектричні ефекти при хіральному тунелюванні електронів через молекулярний транзистор на основі пружно деформованої хіральної одностінної металічної вуглецевої нанотрубки. Для моделі кусково-постійних електростатичних і псевдомагнітних потенціалів за допомогою точного розв'язування рівняння Дірака отриманий коефіцієнт проходження. Показано, що така особливість коефіцієнта проходження як наявність «провалу» в його залежності від енергії призводить до порушення закону Відемана—Франца і появи піків у термоелектрорушійній силі. Чисельні розрахунки дозволили знайти оптимальне значення хімічного потенціалу, при якому обидва ці ефекти діють конструктивно та підвищують термоелектричну добротність. Знайдене оптимальне значення «електронної» термоелектричної добротності (близько 5), а також оцінений множник, пов'язаний з наявністю фононного теплокондуктансу, що зменшує термоелектричну добротність.

Результати дисертаційної роботи мають фундаментальне значення, оскільки розширюють і поглиблюють знання про електромеханічні і термоелектричні властивості наноструктур на основі квантових точок і вуглецевих нанотрубок. Практичне значення результаті полягає в можливості їх використання при створенні нового типу транзисторів з шатлівським характером електронного транспорту і спінтронних термоелектриків нанорозмірів. Зокрема, розрахунки областей шатлівської нестійкості для систем з неповною поляризацією важливі, оскільки створювати напівметалеві електроди в експерименті складніше, ніж феромагнітні. Термоіндуктований шатл можна використовувати в наноструктурах, коли потрібно уникнути появи високого температурного градієнту.

Ключові слова: наноелектромеханічні системи, хіральне тунелювання, термоелектричні ефекти, одноелектронний шатл, квантова точка, молекулярний транзистор, термоелектрична добротність.

ABSTRACT

Ilinskaya O.A. Quantum electromechanical and thermoelectric effects in nanosystems with spin-polarized electrons. – Manuscript.

Thesis for a candidate's degree in physics and mathematics on speciality 01.04.02 – theoretical physics. – B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering, NAS of Ukraine, Kharkiv, 2018.

The thesis comprises a theoretical investigation of novel effects in nanoelectromechanical systems such as electric and magnetic single-electron shuttle with partially polarized electrons in the electrodes and thermo-induced single-electron shuttle, as well as the construction of the theory of thermoelectric effects in spintronic molecular transistors.

Using density matrix method and perturbation theory over the parameter $\Gamma/(|e|V)$, where Γ is the level width, V is the bias voltage, e is electron charge, the shuttle instability domains of electric and magnetic single-electron shuttles with partial polarization of electrons in the electrodes have been found. The following nanoelectromechanical system has been considered. A movable quantum dot is tunnel coupled to two magnetic electrodes – the source and drain of the electrons. Electrons in the electrodes are non-interacting and partially spin-polarized. The quantum dot in this model has one spin-degenerate energy level. An external magnetic field is oriented perpendicular to the electrodes magnetization. In an electric shuttle Coulomb forces between the electron in the dot and the electrodes act on the electron in the dot, and in a magnetic shuttle exchange forces act between electron spin in the dot and electrodes magnetization. The vibration of the dot center of mass is modeled by a harmonic oscillator potential. Tunnelling amplitudes between the dot and electrodes are exponentially dependent on the distance between them.

For the electric shuttle, it has been investigated the influence of external magnetic field, perpendicular to the electrodes magnetization, on the possibility of transition between a vibronic domain of electron transport (the parameter domain where any initial oscillation of the quantum dot is damped) and a shuttle domain (the parameter domain where the initial oscillation grows exponentially). It has been shown that in the

Coulomb blockade regime of electron transport ($|e|V \ll U$, where U is electron-electron interaction energy) the vibronic domain gradually decreases with the decrease of the degree of spin polarization and at last it vanishes. Therefore we can move from the vibronic regime to the shuttle one and back by changing magnetic field only for the high enough degree of spin polarization (larger than the certain critical value). It has been shown numerically that this critical value approximately equals 64%. We explain the impossibility of transition between the shuttle and vibronic domains by changing magnetic field for small values of the degree of spin polarization as follows. For small values of the degree of spin polarization and partially spin-polarized electrons in the electrodes an extra channel of electron transport (without spin flip) appears. This extra channel of electron transport ensures the appearance of shuttle instability without external magnetic field. It has been calculated the increment of the exponential growth of the shuttle oscillations amplitude for the case when the Coulomb blockade is lifted ($|e|V \gg U$). This increment is always positive, i.e. in the absence of the Coulomb blockade the shuttle instability is developed for arbitrary values of the system parameters (magnetic field and partial level widths). It has been shown that it is possible to control the shuttle instability (i.e. to change the increment) by changing magnetic field only for the degrees of spin polarization close to 100%.

It has been shown that the shuttle instability domain of single-electron magnetic shuttle with partially spin-polarized electrons in the electrodes qualitatively differs from the shuttle instability domain of the shuttle with fully spin-polarized electrodes with their magnetizations pointing in opposite directions. Namely, it has been shown that in the case of partial spin polarization the lower branch on the dependence of the critical magnetic field that separates the vibronic and shuttle domains on the level width (tunnel coupling energy) appears. The appearance of the lower branch of critical magnetic field can be easily explained. For partial polarization and small enough magnetic fields an electron tunnels from the quantum dot to the drain on the average earlier than its spin is flipped. As repulsion forces which lead to the shuttle instability development appear only as a result of spin-flip process, there is no shuttle instability in small magnetic fields.

The operation principle of the single-electron thermo-induced magnetic shuttle has been shown. In such nanoelectromechanical system exchange forces are responsible for the shuttle instability development, and an energy source is a temperature difference between the electrodes, not a bias voltage. Thermo-induced shuttle system with fully spin-polarized electrodes with their magnetizations pointing in opposite directions and zero temperature in the drain has been considered. Using density matrix method and perturbation theory over the parameter Γ/T , where Γ is the level width, T is the source temperature, the shuttle instability domain in parameters magnetic field – temperature has been found (in the present model the average temperature in the system and the temperature difference are not independent quantities).

A new friction mechanism in nanoelectromechanical systems is suggested. The system with an electrode, held at temperature T , which is tunnel coupled to a movable quantum dot has been considered. The forces, acting between an electron in the dot and the electrode, are Coulomb or exchange ones. It has been shown that these forces, as well as back-tunneling of electrons from the quantum dot to the electrode, lead to the appearance of intrinsic friction with a friction coefficient non-monotonically dependent on temperature. The friction coefficient vanishes in the limit of low and high temperatures and has its maximum at intermediate temperatures. Knowing the friction coefficient temperature dependence, it has been found the temperature dependence of the lower critical magnetic field of the thermo-induced single-electron shuttle.

For the first time thermoelectric effects in spintronic molecular transistor based on quantum dot have been studied. A nanosystem with a quantum dot tunnel coupled to the source and drain electrodes, held at different chemical potentials and temperatures, has been considered. The quantum dot has one spin-degenerate electron level, and the electrodes are fully spin-polarized in opposite directions. An external magnetic field, oriented perpendicular to the magnetization direction, lifts the spin blockade of the electric current. Thermoelectric effects have been investigated in the linear response regime over bias voltage and temperature difference. For non-interacting electrons, using the equation of motion method, the transmission coefficient of the spintronic transistor has been obtained. The Landauer—Buttiker approach has been used to find

thermoelectric coefficients (electric conductance, thermal conductance, thermopower). Maximal power and power at maximal efficiency have been optimized numerically over such system parameters as average temperature, detuning parameter ($\Delta \equiv \varepsilon_0 - \varepsilon_F$, where ε_0 is electron level energy, ε_F is the Fermi energy) and magnetic field. The main characteristic of a solid-state thermoelectric, figure of merit ZT , has been studied. It has been plotted the ratio of figure of merit of spintronic thermoelectric to the figure of merit of thermoelectric based on single-level quantum dot with unpolarized electrons versus magnetic field. This dependence shows that the figure of merit of the spintronic thermoelectric is higher than the figure of merit of analogous thermoelectric with unpolarized electrons for certain interval of magnetic field values. In particular, it is several times higher for optimal magnetic field, corresponding to maximized power. The influence of electron-electron correlation has been taken into account using density matrix method in perturbation theory over the parameter Γ/T , where T is the average temperature in the system. It has been shown that moderate electron-electron interaction suppresses the figure of merit insignificantly, and the optimal value of figure of merit, corresponding to the case of non-interacting electrons, is restored in the Coulomb blockade regime. This result has been obtained in the range of application of the perturbation theory, i.e. for temperatures large as compared to the level width. The analogous graph, showing the dependence of the figure of merit on electron-electron interaction energy, for the temperatures, close to optimal, is given. This graph shows that there is no qualitative distinction between the cases of optimal temperatures and high temperatures.

Thermoelectric effects in chiral tunneling of electrons through a molecular transistor based on elastically deformed chiral single-wall metallic carbon nanotube have been studied. For the model of piece-constant electrostatic and pseudomagnetic potentials the transmission coefficient has been obtained by finding the exact solution of the Dirac equation. It has been shown that the existence of a “gap” in energy dependence of transmission coefficient leads to violation of the Wiedemann—Franz law and to the appearance of peaks in the thermopower. These two phenomena considered together lead to the high values of “electronic” figure of merit (of the order 5) at optimal

value of chemical potential. The factor dealing with phonon thermal conductance and lowering the “electronic” figure of merit has been estimated.

The results of the thesis are fundamental as they extend and make deeper the knowledge about electromechanical and thermoelectric properties of nanostructures based on quantum dots and carbon nanotubes. The results can be used for creation of a new type of transistors with shuttle character of electron transport and nanoscopic spintronic thermoelectric devices. In particular, the calculations of shuttle instability domain for systems with partial spin polarization are important because it is easier to use ferromagnetic electrodes in the experiment rather than half-metallic. Thermo-induced shuttle system can be used in nanostructures when it is necessary to avoid the appearance of high temperature gradient.

Keywords: nanoelectromechanical systems, chiral tunneling, thermoelectric effects, single-electron shuttle, quantum dot, molecular transistor, figure of merit.

Список публікацій здобувача

Основні результати дисертаційної роботи опубліковані в 14 наукових працях, серед яких 6 статей у провідних спеціалізованих наукових журналах [1—6]:

1. Magnetically controlled single-electron shuttle / **О.А. Пинская**, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, and M. Jonson // ФНТ. – 2015. – Т. 41, № 1. – С. 90–95.
2. Shuttling of spin-polarized electrons in molecular transistors / **О.А. Пинская**, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, Y.W. Park, and M. Jonson // Synthetic Metals. – 2016. – V. 216. – P. 83–87.
3. Mechanically induced thermal breakdown in magnetic shuttle structures / **О.А. Пинская**, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, H.C. Park, and M. Jonson // New J. Phys. – 2018. – V. 20. – P. 063036-1–063036-11, <https://doi.org/10.1088/1367-2630/aac75e>.
4. **Ильинская О.А.** О новом механизме трения в наноэлектромеханических системах / **О.А. Ильинская** // ФНТ. – 2018. – Т. 44, № 8. – С. 1041–1044.
5. Transport properties and enhanced figure of merit of quantum dot-based spintronic thermoelectric device / Yu.D. Zubov, **О.А. Пинская**, I.V. Krive, and A.A. Krokhin // J. Phys. Condens. Matter. – 2018. – V. 30, No. 31. – P. 315303-1–315303-11.
6. Thermoelectric effects in electron chiral tunneling in metallic carbon nanotubes / A.V. Parafilo, **О.А. Пинская**, I.V. Krive, and Y.W. Park // Superlattices and Microstructures. – 2015. – V. 88. – P. 72–79.
7. **Пинская О.А.** The influence of spin polarization on single-electron shuttle instability in the Coulomb blockade regime / **О.А. Пинская** // VI International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 2 – 5, 2015: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2015. – P. 112.
8. **Ильинская О.А.** Термоиндуцированный одноэлектронный магнитный шаттл / **О.А. Ильинская**, С.И. Кулинич, И.В. Криве // XII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах», 1 – 4 грудня, 2015: тези доповідей. – Україна, Харків, 2015. – С. 31.

9. **Ilinskaya O.A.** Shuttle instability induced by temperature gradient / **O.A. Ilinskaya** // VII International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 6 – 10, 2016: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2016. – P. 182.
10. Zubov Yu.D. Optimal efficiency of thermoelectrics based on thermomagnetic effect in tunneling of spin-polarized electrons through a quantum dot in external magnetic field / Yu.D. Zubov, **O.A. Ilinskaya** // VII International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 6 – 10, 2016: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2016. – P. 183.
11. Zubov Yu.D. Optimal performance of magnetically controlled spintronic thermoelectrics / Yu.D. Zubov, **O.A. Ilinskaya**, I.V. Krive // Международный юбилейный семинар «Современные проблемы физики твердого тела», посвященный памяти Э.А. Канера, 22 – 23 ноября, 2016: тезисы докл. – Украина, Харьков, 2016. – С. 19.
12. Zubov Yu.D. Optimal thermoelectric performance of nanodevices based on single wall carbon nanotubes and single molecule transistors / Yu.D. Zubov, **O.A. Ilinskaya**, I.V. Krive // V Наукова конференція «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології», 1 – 2 грудня, 2016: тези доповідей. – Україна, Київ, 2016. – С. 32.
13. **Ilinskaya O.A.** Influence of electron-electron correlation on figure of merit of spintronic thermoelectrics controlled by magnetic field / **O.A. Ilinskaya**, Yu.D. Zubov // VIII International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, May 29 – June 2, 2017: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2017. – P. 193.
14. **Ilinskaya O.A.** Temperature dependent friction in a single-electron shuttle / **O.A. Ilinskaya** // IX International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 4 – 8, 2018: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2018. – P. 184.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	16
РОЗДІЛ 1. ШАТЛІВСЬКИЙ І ТЕПЛОВИЙ ТРАНСПОРТ	
ЕЛЕКТРОНІВ У НАНОСТРУКТУРАХ.....	22
1.1. Шатлівський електронний транспорт і шатлівська нестійкість у наносистемах	22
1.2. Термоелектричні ефекти в наноструктурах у наближенні лінійного відгуку	33
РОЗДІЛ 2. ШАТЛІВСЬКА НЕСТІЙКІСТЬ У ТРАНСПОРТІ ПОЛЯРИЗОВАНИХ ЗА СПІНОМ ЕЛЕКТРОНІВ У НАНОЕЛЕКТРОМЕХАНІЧНИХ СТРУКТУРАХ.....	
2.1. Одноелектронний шатл, керований магнітним полем	39
2.1.1. Модель системи, гамільтоніан і рівняння руху	39
2.1.2. Області шатлівської нестійкості.....	45
2.1.3. Аналіз шатлівської динаміки в режимі кулонівської блокади та за відсутності кулонівської блокади.....	47
2.2. Шатлювання поляризованих за спіном електронів у молекулярних транзисторах.....	51
2.2.1. Гамільтоніан і рівняння руху	51
2.2.2. Вплив спінової поляризації на магнітну шатлівську нестійкість	53
Висновки	59
РОЗДІЛ 3. ТЕРМОІНДУКТОВАНИЙ ОДНОЕЛЕКТРОННИЙ ШАТЛ ...	
3.1. Модель термоіндукованого шатлу	62
3.2. Адіабатичний режим коливань квантової точки	65
3.3. Область нестійкості. Залежне від температури тертя та нижнє критичне магнітне поле.....	69
3.4. Шатлівська нестійкість при високих частотах.....	72
3.5. Внутрішнє тертя в електричному шатлі	74
Висновки	75

РОЗДІЛ 4. ОПТИМАЛЬНА ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНА ДОБРОТНІСТЬ І	
ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ ЕФЕКТИ В СПІНТРОННОМУ ТРАНЗИСТОРІ	76
4.1. Транспортні властивості та підвищена термоелектрична	
добротність спітронного термоелектричного пристрою на основі	
квантової точки.....	76
4.1.1. Гамільтоніан спітронного термоелектричного пристрою	77
4.1.2. Коефіцієнт проходження для випадку електронів без	
взаємодії. Максимізація потужності та термоелектрична добротність.....	78
4.1.3. Вплив електрон-електронної взаємодії на	
термоелектричну добротність.....	87
4.1.4. Обчислення термоелектричних коефіцієнтів.....	94
4.2. Термоелектричні ефекти в хіральному тунелюванні	
електронів у металічних вуглецевих нанотрубках	100
4.2.1. Коефіцієнт проходження.....	100
4.2.2. Немонотонна температурна залежність кондуктансу	
та піки термоелектрорушійної сили.....	104
4.2.3. Сильне підвищення термоелектричної добротності	107
Висновки	112
ВИСНОВКИ.....	114
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	116
ДОДАТОК А. Список публікацій здобувача за темою дисертації	125
ДОДАТОК Б. Відомості про апробацію результатів дисертації.....	127

ВСТУП

Актуальність теми. У зв'язку з мініатюризацією електроніки в останній час у фізиці твердого тіла активно вивчаються квантові електромеханічні системи та транзистори нанорозмірів. Зокрема, важливою проблемою теоретичної фізики твердого тіла є створення термоелектричних елементів на основі квантових точок і молекулярних транзисторів. Інтерес до цих систем значно підвищився після появи розрахунків, які показали, що низьковимірні термоелектрики більш ефективні, ніж їх тривимірні аналоги, виготовлені з того самого матеріалу.

Один з найпростіших прикладів нанотранзистора – транзистор на основі квантової точки, тунельно зв'язаної з електродами. Термоелектричні характеристики такого транзистора добре вивчені. Однак його термоелектрична ефективність невелика і залишається питання, чи можна її підвищити не ускладнюючи суттєво прилад. Слід очікувати, що для поляризованих в протилежних напрямках за спіном електронів в електродах величина зовнішнього магнітного поля, яке не колінеарне намагніченості електродів, є додатковим параметром у системі, що суттєво впливає на електричний струм (ненульове магнітне поле знімає, зокрема, спінову блокаду). Можна очікувати, що, варіюючи магнітне поле H , можна знайти оптимальні значення H , які суттєво підвищують термоелектричну ефективність спітронного пристрою.

Ще одним цікавим маловивченим до цього часу питанням, що стосується термоелектричних ефектів у наноструктурах, є використання металічної вуглецевої нанотрубки в якості базового елемента термоелектричної системи. Загальновідомо, що метали мають низьку термоелектричну ефективність, проте слід очікувати підвищення ефективності в тому разі, якщо вдасться створити умови, за яких з'являється різка залежність коефіцієнту проходження від енергії.

Перевага одноелектронних наноелектромеханічних систем перед стандартним одноелектронним транзистором полягає, зокрема, в тому, що в наноелектромеханічній системі в кожний момент часу «відкритий» лише один тунельний бар'єр, таким чином, одночасне тунелювання двох електронів

заборонене та точність транспортних вимірювань підвищена. Крім того, якщо наноелектромеханічна система працює в шатлівському режимі (тобто перенос електронів здійснюється рухомою гранулою при періодичному механічному русі), то електричний струм визначається частотою механічних коливань гранули, а не частотою тунельних переходів і може бути на декілька порядків вищий тунельного струму.

У той час як електричний і магнітний шатл з повною поляризацією за спіном електронів в електродах добре вивчені, не вирішене питання щодо впливу часткової поляризації на області нестійкості та можливість керування шатлівською нестійкістю за допомогою зовнішнього магнітного поля. Також цікаво дослідити можливість створення шатлівської системи з тепловим, а не електричним джерелом енергії.

Описане вище коло невирішених питань, що стосуються дослідження одноелектронних наноелектромеханічних систем і термоелектричних ефектів в одномолекулярних транзисторах, визначає **актуальність** даної дисертаційної роботи.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана у Фізико-технічному інституті низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН України в рамках тематичного плану ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАНУ за відомчими тематиками: «Теоретичні дослідження нелінійних та квантових явищ в наноструктурах і нових матеріалах» (номер державної реєстрації 0112U002642, шифр 1.4.10.26.3, термін виконання 2012 – 2016 рр.), «Теоретичні дослідження колективних явищ у квантових конденсованих структурах та наноматеріалах» (номер державної реєстрації 0117U002292, шифр 1.4.10.26.4, термін виконання 2017 – 2021 рр.).

Мета і завдання досліджень. *Метою* дисертаційної роботи є теоретичний опис квантових ефектів в транспорті спин-поляризованих електронів у наноелектромеханічних системах, які побудовані на базі молекулярних транзисторів.

Для досягнення поставленої мети в роботі необхідно було вирішити наступні **завдання**:

- отримати області шатлівської нестійкості для електричного та магнітного шатлу з частково поляризованими за спіном електронами;
- отримати область шатлівської нестійкості для термоіндуктованого одноелектронного шатлу з повністю поляризованими за спіном електронами;
- дослідити новий механізм дисипації в наноелектромеханічній системі з рухомою квантовою точкою, яка тунельно зв'язана з електродом, що підтримується при постійній температурі;
- розрахувати термоелектричні характеристики спітронного транзистора на основі квантової точки, а саме, максимізувати потужність, знайти відповідну їй термоелектричну добротність і вивчити вплив електрон-електронної взаємодії на термоелектричну добротність цього транзистора;
- знайти оптимальну термоелектричну добротність молекулярного транзистора на основі пружно деформованої одностінної металічної вуглецевої нанотрубки.

Об'єктом дослідження дисертаційної роботи є квантовий транспорт спінополяризованих електронів у молекулярних транзисторах.

Предметом дослідження є процеси тунелювання електронів у молекулярних транзисторах, а також електромеханічні та термоелектричні ефекти, що супроводжують тунелювання.

Методи дослідження. Результати дисертаційної роботи отримані з використанням аналітичних методів теоретичної фізики конденсованого стану. Для знаходження областей шатлівської нестійкості та врахування впливу електрон-електронної взаємодії на термоелектричну добротність спітронного транзистора використаний метод матриці густини та теорія збурень. Для отримання коефіцієнту проходження спітронного транзистора використаний метод рівнянь руху Гейзенберга. Метод зшивки хвильових функцій при

розв'язанні рівняння Дірака використаний для розрахунку коефіцієнта проходження електронів при їх хіральному тунелюванні через одностінну металічну вуглецеву нанотрубку. Для знаходження термоелектричних коефіцієнтів за відомим коефіцієнтом проходження застосований підхід Ландауера—Бюттікера.

Наукова новизна отриманих результатів.

1. Вперше виявлено принципову можливість існування термоіндуктованого шатлу – одноелектронного човникового транспорту через квантову точку, яка розташована між електродами з різними температурами, – на прикладі моделі магнітного шатлу з повною поляризацією електронів.
2. Вперше знайдено області нестійкості магнітного і електричного шатлів з частковою поляризацією електронів в електродах в залежності від параметрів магнітного поля та енергії тунельного зв'язку. Для магнітного шатлу з неповною поляризацією встановлено нижній поріг нестійкості по магнітному полю. Для електричного шатлу показано, що керування шатлівською нестійкістю за допомогою магнітного поля можливе лише при достатньо високому ступені поляризації електронів.
3. Вперше виявлено новий механізм тертя в наноелектромеханічних системах, який зумовлений тунельним зв'язком та дією обмінних або кулонівських сил між віброуючою квантовою точкою та електродом з ненульовою температурою. Показано, що відповідний коефіцієнт тертя має немонотонну температурну залежність та прямує до нуля в границі високих температур.
4. Вперше в наближенні лінійного відгуку розраховано термоелектричні характеристики для спітронного транзистора на основі квантової точки та для молекулярного транзистора на основі металічної пружно деформованої вуглецевої нанотрубки.
5. Вперше знайдено оптимальні параметри для добротності молекулярного та спітронного транзисторів. Для транзистора на основі нанотрубки знайдено максимум термоелектричної добротності за хімічним потенціалом, а для спітронного транзистора розраховано термоелектричну добротність при

максимальній потужності, що оптимізована за магнітним полем. Показано, що термоелектричні характеристики спінтронного транзистора значно кращі, ніж у аналогічному пристрої з неполяризованими електронами.

Практичне значення результатів дисертації. Результати досліджень, які представлені в дисертаційній роботі, мають фундаментальне значення, оскільки поглиблюють і поширюють знання щодо транспорту електронів у наноелектромеханічних системах. Передбачені в роботі ефекти, такі як зникнення вібронної області механічних коливань при зменшенні ступеня поляризації електронів у електричному шатлі, поява нижнього критичного магнітного поля в магнітному шатлі з неповною поляризацією електронів, спостереження шатлівської нестійкості в наноелектромеханічній системі з тепловим джерелом енергії, можуть бути виявлені в експерименті. На основі досліджень термоелектричних властивостей нанотранзисторів можуть бути розроблені одноелектронні термоелектричні пристрої – спінтронні та на основі металічних вуглецевих нанотрубок.

Особистий внесок здобувача. У всіх роботах, які були виконані в співавторстві та увійшли до складу дисертації, автор виконала всі аналітичні розрахунки, брала активну участь у трактовці та обговоренні отриманих результатів, формулюванні висновків і написанні статей. Зокрема, автором самостійно розраховані області нестійкості електричного і магнітного шатлів з неповною поляризацією електронів в електродах, термоіндуктованого одноелектронного шатлу; виявлено виникнення нижнього критичного магнітного поля в магнітному шатлі. Здобувач особисто виконала розрахунки, необхідні для врахування впливу кулонівського відштовхування електронів на квантовій точці на термоелектричну добротність спінтронного термоелектричного пристрою. Дисертант самостійно виконала та опублікувала роботу, в якій розглянутий новий механізм тертя в наноелектромеханічних системах, розрахована та проаналізована температурна залежність відповідного коефіцієнта тертя. Таким чином, особистий внесок здобувача в вирішення поставлених теоретичних задач, які розглянуті в дисертації, є визначальним.

Апробація результатів дисертації. Матеріали, що містять основні результати дисертації, доповідались на наступних міжнародних наукових конференціях:

- VI International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, June 2 – 5, 2015);
- XII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» (Харків, Україна, 1 – 4 грудня, 2015);
- VII International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, June 6 – 10, 2016);
- Международный юбилейный семинар «Современные проблемы физики твердого тела», посвященный памяти Э.А. Канера (Харьков, Украина, 22 – 23 ноября, 2016);
- International School & Conference on Nanoscience and Quantum Transport (Kyiv, Ukraine, October 8 – 14, 2016);
- V Наукова конференція «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології» (Київ, Україна, 1 – 2 грудня, 2016);
- VIII International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, May 29 – June 2, 2017);
- IX International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, June 4 – 8, 2018).

Публікації. Результати дисертаційної роботи опубліковані в 6 статтях у провідних наукових виданнях [1 – 6] і в 8 тезах доповідей конференцій [7 – 14].

Структура і обсяг дисертації. Дисертація складається з анотацій, вступу, оглядового розділу, трьох оригінальних розділів з рисунками, висновків і списку використаних джерел. Загальний обсяг дисертації становить 127 сторінок, містить 25 рисунків і список використаних джерел з 94 найменувань на 9 сторінках.

РОЗДІЛ 1

ШАТЛІВСЬКИЙ І ТЕПЛОВИЙ ТРАНСПОРТ ЕЛЕКТРОНІВ У НАНОСТРУКТУРАХ

1.1. Шатлівський електронний транспорт і шатлівська нестійкість у наносистемах.

У складних наноструктурах, які містять механічно «м'які» частини, взаємовплив механічного руху і тунелювання заряду може призвести до суттєвого підсилення електричного струму в системі. Одна з найпростіших моделей такої наноструктури містить металеву гранулу (квантову точку), що зв'язана з двома електродами (витоком і стоком електронів) за допомогою гнучких органічних молекул (див. піонерську теоретичну роботу [15]). До електродів підключена електрична напруга. Органічні молекули діелектричні, і електронний транспорт у системі (між квантовою точкою і електродами) тунельний. Гранула має достатньо малі розміри, так що енергія зарядки (енергія, необхідна для того, щоб «посадити» на неї додатковий електрон) велика. Наслідком цього є те, що електрон, який тунелює на гранулу, суттєво підвищує її електростатичну енергію, і ця енергія викликає суттєву деформацію гнучких молекул. Таким чином, гранула близько «підходить» до одного з електродів (для визначеності, до витоку). Амплітуда тунелювання між витоком і гранулою, що сильно залежить від відстані між ними, підвищується, і на гранулу з від'ємно зарядженого витоку тунелює N додаткових електронів. Пружні сили і сила кулонівської взаємодії відштовхують гранулу від витока до стоку, і додаткові електрони тунелюють з гранули в стік. Гранула знову змінює напрямок руху, і сценарій повторюється. Було показано, що при певних умовах на параметри системи відбувається експоненціальне «розгойдування» гранули. Із зростанням амплітуди її коливань зростає і електричний струм. Коли енергія, що надходить у систему, врівноважиться енергією, що дисипується, коливання гранули вийдуть на певний граничний цикл. Такий електронний транспорт називають *шатлюванням* електронів (механічним їх переносом від одного «берега» до іншого за допомогою квантової точки, що коливається), а

саму квантову точку в такій системі називають *шатлом*. Електричний струм у режимі шатлювання може на декілька порядків перевищувати звичайний тунельний струм [16]. Тому шатл можна використовувати як перемикач між режимами «струм є» – «струму немає». Експоненціальне зростання амплітуди коливань точки, яке призводить до шатлювання електронів, називається *шатлівською нестійкістю*. Коли взаємозв'язок між параметрами такий, що система знаходиться в *шатлівській області*, будь-яке початкове коливання буде експоненціально зростати, а якщо система знаходиться в *вібронній області* – початкове коливання згасне.

Середній струм I у режимі шатлювання, за умови що в кожному циклі коливань переноситься $2N$ електронів, дорівнює $I = eN\omega/\pi$, де e – заряд електрона, ω – циклічна частота коливань квантової точки. Оскільки тунельний струм визначається шириною рівня Γ , то очевидно, що шатлівський пристрій є ефективним з точки зору підвищення струму в антиадіабатичному випадку $\Gamma \ll \hbar\omega$.

Шатлівський пристрій, що описаний вище, є аналогом давно відомого «електричного дзвоника» (electric bell), або електричного маятника, який був винайдений шотландським монахом, фізиком і винахідником Ендрю Гордоном у 1742 році (див. книгу [17]). Цей маятник складається з двох заряджених металевих дисків і металевої кулі, що підвішені на шовкових нитках недалеко один від одного. Припустимо, диск зліва заряджений додатно, а диск справа – від'ємно. Заряджаємо кулю від'ємно. Вона притягнеться до лівого диска, вдариться об нього, зарядиться додатно; притягнеться до правого диска, вдариться об нього, зарядиться від'ємно; знова відштовхнеться до лівого диску і так далі. Відмінність електромеханічного пристрою нанорозмірів від маятника Гордона полягає в наявності в першому випадку таких квантовомеханічних ефектів як тунелювання і кулонівська блокада.

Якщо при кожному наближенні до електрода на гранулу (або з неї) тунелює один електрон, відповідний електронний транспорт називається *одноелектронним шатлом*. Теоретична можливість існування одноелектронного шатлу пов'язана з

явищем кулонівської блокади [18] (див. також [19]). Вище вже було відзначено, що малі розміри квантової точки обумовлюють її велику енергію зарядки. (Так, для сферичної гранули радіусом 1 мкм енергія зарядки порядку 1 К [20].) Якщо енергія зарядки суттєво перевищує електричну напругу і середню температуру в системі, то в кожний момент часу на точці може знаходитись лише один електрон. Таким чином, наступний електрон може протунелювати на точку лише після тунелювання з неї в електрод попереднього. Заборона двом електронам одночасно перебувати на точці і називається *кулонівською блокадою* електронного транспорту. Зауважимо, що для молекули фулерену (радіусом порядку 4 Å) енергія зарядки досягає десятків тисяч кельвін. Тоді для спостереження кулонівської блокади достатньо кімнатних температур [21].

Екранування електрон-електронної взаємодії на точці можна здійснити за допомогою третього електроду – керуючого електроду, або гейту (затвору). Подавання відповідної напруги на затвор призводить до зняття кулонівської блокади, отже, виникає багатоелектронний шатл.

Ми відзначали вище, що для розвитку шатлівської нестійкості є необхідним виконання певних умов, які зв'язують параметри системи. У літературі були розглянуті різні варіації шатлівських систем з різними параметрами і умовами на них. Найпростіша модель – це електричний шатл з однорівневою квантовою точкою [22]. Тут силами, що розгойдують точку, є сили кулонівського відштовхування, а необхідна для механічного розгойдування енергія черпається з різниці потенціалів, яка підтримується між електродами. У цій моделі шатлівська нестійкість розвивається при напругах, вище певного критичного значення. Для симетричної ситуації з потенціалами в лівом/правом електродах, що дорівнюють $V_{L/R} = \mp V / 2$, порогова напруга визначається формулою [22]

$$eV_c = 2(\varepsilon_0 + \hbar\omega), \quad (1.1)$$

де ε_0 – енергія рівня електрона на точці, ω – циклічна частота коливань центру мас точки.

Отже, переходити з шатлівського режиму електронного транспорту в протилежний йому вібронний режим і назад можна змінюючи величину електричної напруги. Однак з експериментальної точки зору це може бути незручно, оскільки надмірне підвищення напруги викликає електричний пробій у наносистемі. Виявляється можливим управління переходом між шатлівським і вібронним режимами електронного транспорту за допомогою зовнішнього магнітного поля. Для цього в теоретичній роботі [23] було запропоновано використовувати електроди, повністю поляризовані за спіном (напівметалеві). (Спіновий) напівметал – це матеріал, який має відмінну від нуля електричну провідність при нульовій температурі лише для електронів з певним напрямком спіну (для електронів з протилежним напрямком спіну існує заборонена зона). Приклади напівметалів – оксид хрому IV (CrO_2), з поляризацією 98.4% (одне з найбільших досягнутих в експерименті значень), а також магнетит (Fe_3O_4). Магнетит, який є напівметалом при кімнатній температурі, використаний, наприклад, в роботі [24] як один з електродів при створенні спінового фільтра. Існування напівметалів було передбачено в теоретичній роботі [25]; їх незвичайні властивості автори цієї роботи виявили при проведенні чисельних розрахунків зонної структури сплавів Гейслера.

У роботі [23] запропонована модель спітронного транзистора. Ця модель, а також її модифікації та узагальнення використовуються в усіх розділах даної дисертаційної роботи, тому зупинимося на роботі [23] детально. Наслідком повної поляризації електродів у протилежних напрямках є спінова блокада [26] електронного транспорту – неможливість проходження електричного струму в системі. Електрон зі спіном, для визначеності «вгору», може протунелювати з витоку на квантову точку, але не може протунелювати з точки в стік (оскільки в стоку дозволені електронні стани – зі спіном «вниз», а стани зі спіном «вгору» відокремлені від них великою щілиною). Зняти спінову блокаду можна, якщо прикласти зовнішнє магнітне поле, не паралельне спіновій поляризації електродів. Тоді вироджений за спіном рівень електрона на точці розщепиться на два і магнітне поле викликати перевероти спіну електрона на точці: «спін вгору» –

«спін вниз» і назад. Електрон зі спіном «вниз» може протунелювати з точки в стік, і в системі протікає струм.

Автори статті [23] вивчають вплив зовнішнього магнітного поля як на шатлівську нестійкість, так і на величину електричного струму в режимі шатлювання. Гамільтоніан системи, яку вони розглядають, наступний: $\hat{H} = \hat{H}_l + \hat{H}_d + \hat{H}_v + \hat{H}_{tun}$, де гамільтоніан електродів \hat{H}_l (leads – береги) є

$$\hat{H}_l = \sum_{k,j} \varepsilon_{k,j} a_{k,j}^\dagger a_{k,j}, \quad (1.2)$$

гамільтоніан квантової точки \hat{H}_d (dot – точка) є

$$\hat{H}_d = (\varepsilon_0 - eE\hat{x}) \sum_{\sigma} c_{\sigma}^\dagger c_{\sigma} - \frac{g\mu_B H}{2} (c_{\uparrow}^\dagger c_{\downarrow} + c_{\downarrow}^\dagger c_{\uparrow}) + U c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} c_{\downarrow}^\dagger c_{\downarrow}, \quad (1.3)$$

гамільтоніан механічної підсистеми \hat{H}_v (квантовий гармонічний осцилятор, vibronic – вібронний) є

$$\hat{H}_v = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}, \quad (1.4)$$

тунельний гамільтоніан \hat{H}_{tun} є

$$\hat{H}_{tun} = t_L(x) \sum_k c_{\uparrow}^\dagger a_{k,L} + t_R(x) \sum_k c_{\downarrow}^\dagger a_{k,R} + \text{H.c.} \quad (1.5)$$

У формулі (1.2) $a_{k,j}^\dagger$ – оператор народження електронного стану в електроді j (в лівому електроді всі електрони мають спін «вгору», а в правому – спін «вниз»), $\varepsilon_{k,j}$ – відповідна енергія електронів. У формулі (1.3) c_{σ} – оператор знищення електронного стану зі спіном σ на квантовій точці, ε_0 – енергія електронного рівня на точці, E і H – напруженості зовнішнього електричного і магнітного поля (μ_B – магнетон Бора, g – гіромагнітне відношення); U – енергія міжелектронної взаємодії. Коливання точки біля положення рівноваги описуються гамільтоніаном гармонічного осцилятора (1.4), де \hat{x} і \hat{p} – канонічно спряжені оператори координати та імпульсу центру мас точки, $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$; m і ω – маса точки і частота коливань її центру мас. У тунельному гамільтоніані (1.5)

$t_j(\hat{x}) = t_j \exp(j\hat{x} / \lambda)$ – тунельна амплітуда, залежність якої від координати вважається експоненціальною (λ – тунельна довжина, $j = -1$ для лівого електрода і $j = 1$ для правого електрода).

Один з основних отриманих у роботі [23] результатів полягає в наступному. При магнітних полях вище певного критичного ($H > H_c$, причому $g\mu_B H_c = \sqrt{3}\Gamma$, де Γ – ширина рівня) на «фазовій діаграмі» в змінних магнітне поле – електричне поле, окрім шатлівської і вібронної області, є третя область – змішана, або бістабільна. У кожній точці змішаної області і шатлівський, і вібронний стани локально стабільні з певними ймовірностями. Перехід системи з вібронної області безпосередньо в шатлівську, який відбувається при $H < H_c$, автори називають «м'яким» режимом переходу. У цьому режимі амплітуда граничного циклу є однозначною функцією магнітного поля. «Жорсткий» режим переходу відповідає переходу системи з вібронної області в шатлівську через бістабільну область. У «жорсткому» режимі амплітуда і струм характеризуються петлею гістерезису.

У роботі [27] знайдена шатлівська область для системи [23] в змінних магнітне поле H – ширина рівня Γ . (Ширина рівня визначається як $\Gamma_j = 2\pi v t_j$, де v – густина станів в електродах; тут вважаємо, що тунельний контакт є симетричним: $\Gamma_L = \Gamma_R \equiv \Gamma$.) У режимі кулонівської блокади ($U \rightarrow \infty$) і при $\Gamma < (4/3)\hbar\omega$ шатл розвивається при будь-яких значеннях магнітного поля. При $\Gamma > (4/3)\hbar\omega$ є певна вібронна область, яка в адіабатичному режимі $\Gamma \gg \hbar\omega$ визначається нерівністю $g\mu_B H < \Gamma / \sqrt{2}$ (тут і далі ми для визначеності вважаємо, що $H > 0$).

Досі ми говорили про шатлівську систему, нестійкість в якій виникає за рахунок електричних (кулонівських) сил. Таку систему називають електричним шатлом. Однак якщо електроди зроблені з феромагнітного (або антиферомагнітного) матеріалу, окрім електричних сил між електронами на точці і в електродах, в системі діють обмінні сили між спіном електрона на точці і намагніченостями електродів [28, 24]. Обмінні сили мають тунельну природу,

тому є короткодійними на відміну від кулонівських сил. Однак у наносистемах обмінні сили можуть бути порядку кулонівських за величиною [29]. Це пов'язано з тим, що кулонівські сили діють лише на електрони поблизу поверхні Фермі, а обмінні – на увесь «підвал» електронів. Шатлівську систему з нестійкістю за рахунок обмінних сил називають *магнітним шатлом*. Область нестійкості для магнітного шатлу з повністю поляризованими за спіном електронами в електродах у режимі кулонівської блокади знайдена в роботі [30]. Для симетричного тунельного контакту вона така:

$$g\mu_B H < \sqrt{3[\Gamma^2 + (\hbar\omega)^2]}. \quad (1.6)$$

Відсутність шатлівської нестійкості у великих магнітних полях пояснюється авторами наступним чином. Швидка прецесія спіну електрона на точці в перпендикулярному зовнішньому магнітному полі призводить до того, що середній спін і середня обмінна сила дорівнюють нулю.

Експериментально тунельна система з квантовою точкою і магнітними електродами була досліджена в роботі [29]. Роль квантової точки грала молекула фулерену, а нікелеві електроди мали ступінь поляризації 31%. Електроди були виготовлені таким чином, що їх намагніченості із збільшенням зовнішнього магнітного поля ставали паралельними напрямку магнітного поля при різних значеннях поля. Таким чином можна було дослідити як майже антипаралельну, так і паралельну намагніченості витоку і стоку електронів. У роботі досліджувався вплив обмінної взаємодії між локалізованим спіном електрона на квантовій точці і феромагнітними електродами на ефект Кондо. Характерний для ефекту Кондо пік на залежності диференціального кондуктансу dI/dV від напруги V для системи з фулереном і немагнітними (золотими) електродами розщеплювався на два під дією зовнішнього магнітного поля. Для системи з нікелевими електродами у випадку, коли їх намагніченості паралельні, замість одного піку Кондо спостерігаються два. Величина їх розщеплення відповідає магнітному полю порядку 70 Тл, тому це розщеплення не може бути пов'язане з локальним магнітним полем (0.6 Тл), що створюється магнітними електродами в

щілині. Додаткові дослідження температурної і польової залежності функції dI/dV показують, що розщеплення пов'язане з обмінною взаємодією. При антипаралельній намагніченості електродів розщеплення піків суттєво знижується, в деяких зразках – практично до нуля. Це пов'язано з частковою компенсацією обмінних взаємодій від лівого і правого електродів.

Зауважимо, що проблема експериментального створення електродів з колінеарними намагніченостями й досі цікавить експериментаторів, дивись, наприклад, статтю [31].

Напівметали використовують в експерименті, в основному, для спінової інжекції [24, 32, 33]. Для вивчення впливу обмінної взаємодії на транспортні характеристики наносистем в якості електродів вже були використані феромагнітні матеріали (наприклад, нікель у роботі [29]). Тому дослідження шатлівських систем з частково поляризованими за спіном електронами є важливою задачею. Вище було зазначено, що в системі з повністю поляризованими за спіном електронами можна контролювати шатлівську нестійкість за допомогою зовнішнього магнітного поля. Виникає природне питання, чи можна і при неповній поляризації електронів в електродах здійснювати такий контроль. Ще одне питання – як впливає неповна поляризація на область нестійкості електричного і магнітного шатлу. Також цікаво дослідити, чи може джерелом енергії в шатлівській системі слугувати різниця температур, тому що такий термоіндуктований шатл можна використовувати для зняття небажаних температурних градієнтів, що виникають в наносистемах. Усі ці питання вирішуються в даній дисертаційній роботі.

Зазначимо, що вплив квантових та термодинамічних флуктуацій на шатлівську нестійкість в даній дисертаційній роботі не вивчається. Це питання для електричного шатлу з неполяризованими електронами було розглянуте в роботі [34], де було показано, що інкремент експоненціального зростання амплітуди коливань шатлу немонотонно залежить від напруги (і при достатньо високих напругах поляронна блокада пригнічує шатлівську нестійкість).

Експериментально створити одноелектронний шатл складно через проблему депінінгу квантової точки. Проте багатоелектронний шатл був створений у багатьох експериментах. Усі ці експерименти можна підрозділити на два типи – з квантовою точкою, що коливається під дією зовнішніх сил, і з квантовою точкою, коливання якої викликані внутрішнім електромеханічним зв'язком. Зупинимося на деяких експериментах другої групи.

Перша робота, в якій був експериментально виявлений електромеханічний зв'язок при транспорті електронів через квантову точку, була опублікована в 2000 році в Nature [35]. У цій роботі досліджується електронний транспорт через молекулу фулерену C_{60} , що знаходиться в щілині розміром порядку 1 нм між золотими електродами. На залежності диференціального кондуктансу від напруги на гейті і напруги, прикладеної до електродів, спостерігаються піки. Непрямі методи перевірки підтверджують, що транспорт у випадку спостереження піків іде через молекулу фулерену (причому саме через одну молекулу, а не через декілька). Автори пояснюють виникнення кожного наступного піка тим, що стає доступним чергове квантоване збудження. Показано, що це збудження не є електронним, а також не пов'язане з внутрішніми коливальними рухами. Збудження пов'язане з коливаннями центру мас молекули. Взаємодія фулерену з золотим електродом моделюється потенціалом Ленард-Джонса. Обчислення показують, що ця взаємодія поблизу положення рівноваги добре моделюється гармонічним потенціалом. Коли на молекулу тунелює додатковий електрон, вона притягується до електроду (приблизно на 4 пм) внаслідок притягання між отриманим іоном і зарядом-зображенням в електроді. У даній системі один електрон, що тунелює, народжує один вібронний квант.

Спроби теоретично пояснити експеримент [35] з молекулою фулерену були зроблені в роботах [22] і [36]. У статті [22] експериментальна вольт-амперна характеристика пояснюється механічною нестійкістю, а в статті [36] – непружним тунелюванням електронів (у першій роботі пояснення якісне, а в другій – кількісне). Для того щоб з'ясувати, який з цих механізмів працює, потрібно було би провести додаткові дослідження, наприклад, шуму (дивись огляд [37]).

Виникнення дробового шуму пов'язано з випадковістю тунелювання електронів. Під час шатлівського транспорту електронів низькочастотний дробовий шум пригнічений, тому що електрони тунелюють не випадково, а через кожні півперіоду руху квантової точки [38]. Оскільки вимірювання шуму в експерименті [35] не проводилися, не можна стверджувати, що автори цього експерименту спостерігали шатлівський транспорт.

На відміну від експерименту [35] вольт-амперна характеристика в експерименті [16] пояснюється лише механічною нестійкістю. У роботі [16] роль квантової точки грає золота гранула, що знаходиться в зазорі між золотими електродами. Гранула є сферичною і має діаметр 20 нм. Електроди плоскі і мають округлені кінці. Гранула зв'язана з електродами моношаром з діелектричних гнучких органічних молекул (1,8-octanedithiol). Наносистема знаходиться на підкладці з оксиду кремнію. Гранула вводиться в зазор за допомогою антиферромагнітного наконечника. При достатньо низьких напругах між електродами гранула є пінінгованою силами Ван-дер-Ваальса в певній точці між електродами, як теоретично показано в роботі [39]. Із зростанням напруги підвищується електричне поле і кількість електронів на гранулі. Обидва ці фактори підвищують електричну силу, що діє на наночастинку. В кінці кінців, потенціал пінінгу переборюється електричними силами і гранула починає коливатися. Амплітуда коливань спочатку зростає, а потім (коли енергія, що дисипується, стає рівною енергії, що надходить до механічної підсистеми) виходить на певне оптимальне значення. Було знайдено, що порогова напруга, вище якої виникає шатлівська нестійкість, є на порядок більшою передбаченої теоретично в роботі [15]. Для пояснення цієї відмінності автори висувають наступну гіпотезу. В експерименті гранулу відокремлює від електрода моношар гнучких молекул, у той час як у роботі [15] є лише дві такі молекули (одна біля кожного електрода). Щілина між електродом і гранулою в експерименті є неоднорідною за шириною. У зв'язку з цим деякі з молекул «витагнені» більше, ніж інші, так що наночастинка «застрягає» в певній точці. Додаткова електрична напруга розриває занадто витягнені молекули, і гранула починає осцилювати.

Незважаючи на те, що характерні для шатлівського транспорту сходинки на вольт-амперній характеристиці в експерименті спостерігались, автори перевірили, що струм дійсно проходив через гранулу. По-перше, було показано, що струм через органічні молекули малий у порівнянні із спостережуваним струмом. По-друге, за допомогою наконечника гранулу вилучали із щілини, і тоді струм опускався до рівня шуму. Друга і наступні сходинки на вольт-амперній характеристиці пояснюються флуктуаціями заряду на наночастинці. Якщо кількість електронів на гранулі опускається нижче певного мінімального, вона «застрягає» в деякій точці, і потрібно підвищити напругу, щоб зрушити її з місця.

В експерименті [40] також спостерігалось самозбудження гранули під дією постійної напруги. Вимірювання проводилися при температурі 4.2 К. Золота наночастинка була поміщена в центр нитки з нітрида кремнію, яка має велику повертальну силу, що не дає частинці «прилипнути» до електродів. Для зняття гранули з пінінгу використовувався високочастотний акустичний тригер. Після його відключення струм, що встановлюється, зберігався до 2000 с, це відповідає приблизно 10^{10} коливальним циклам. Після припинення шатлівського струму його можна було відтворити новим акустичним сигналом. За відсутності механічного шатлювання вольт-амперна характеристика показувала, що виконується закон Ома, а величина струму була порядку пікоампера. У випадку шатлівського транспорту на вольт-амперній характеристиці з'являлася сходинка, гранула коливалася з частотою в декілька мегагерц, а величина порогового струму (порядку 0.5 нА) відповідає мінімальному числу $N \sim 200$ електронів, необхідних для підтримки осциляцій.

Експерименти, в яких шатл збуджувався змінним зовнішнім сигналом, такі як [41, 42], а також деякі інші експерименти описані, наприклад, в оглядах [43, 44].

1.2. Термоелектричні ефекти в наноструктурах у наближенні лінійного відгуку.

Термоелектричні явища – це явища, пов’язані з потоками носіїв заряду, викликаними градієнтом температури, і переносом тепла електричним струмом. Їх використовують при створенні теплових машин і холодильних установок. Теплові машини на основі термоелектриків мають нижчу ефективність, ніж машини з механічними рухомими частинами, але в них є і очевидні переваги, такі як надійність, безшумність.

У 1993 році вийшли одна за іншою дві роботи [45, 46], розрахунки яких показали, що термоелектричні характеристики низьковимірних структур вище, ніж тривимірних систем, виготовлених з того самого матеріалу. З того часу інтерес дослідників до нанотермоелектриків значно підвищився.

Основними характеристиками термоелектричного пристрою, як і будь-якої теплової машини, є його ефективність і потужність. Ще однією важливою характеристикою твердотільного термоелектрика, що працює в режимі лінійного відгуку за напругою V і різницею температур δT між нагрівачем і холодильником, є термоелектрична добротність ZT (figure of merit) [47, 48]:

$$ZT = \frac{GS^2T}{K_e + K_{ph}}, \quad (1.7)$$

де G – електричний кондуктанс, S – термоерс (коефіцієнт Зеєбека), T – середня температура в системі, K_e і K_{ph} – електронний і фононний внески в тепловий кондуктанс. Величина K_e – це теплокондуктанс, визначений за умови рівності нулю електричного струму. Таке визначення теплокондуктансу пов’язано зі стандартним визначенням теплокондуктансу K (при рівній нулю напрузі) простою формулою:

$$K_e = K - GS^2T. \quad (1.8)$$

Термоелектричні коефіцієнти G , S , K – це коефіцієнти, що пов’язують у наближенні лінійного відгуку струми заряду і тепла з напругою і різницею температур. Так,

$$\begin{aligned} I &= GV + L\delta T, \\ J &= \tilde{L}V + K\delta T, \end{aligned} \quad (1.9)$$

де L і \tilde{L} – перехресні коефіцієнти, що зв'язані за відсутності магнітного поля співвідношенням Кельвіна: $\tilde{L} = TL$. (У магнітному полі перехресні коефіцієнти зв'язані співвідношенням Казимира—Онсагера [49]: $\tilde{L}(-\vec{H}) = TL(\vec{H})$.) Коефіцієнт Зеєбека визначається як напруга, що генерується різницею температур в 1 К на кінцях розімкненого електричного ланцюга:

$$S = \left. \frac{V}{\delta T} \right|_{I=0} = -\frac{L}{G}. \quad (1.10)$$

У випадку електронів без взаємодії термоелектричні коефіцієнти G , L і K можна знайти за допомогою підходу Ландауера—Бюттікера (див. [50], а також [51]), і вони виражаються через коефіцієнт проходження $D(\varepsilon)$ таким чином:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right), \quad (1.11)$$

$$L = \frac{ek_B}{2\pi\hbar} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \frac{\varepsilon - \mu}{T} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right), \quad (1.12)$$

$$K = \frac{k_B}{2\pi\hbar} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \frac{(\varepsilon - \mu)^2}{T} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right), \quad (1.13)$$

де $f(\varepsilon)$ – функція розподілу Фермі—Дірака, k_B – стала Больцмана. У випадку електронів, що взаємодіють, для знаходження термоелектричних коефіцієнтів необхідно розрахувати струми заряду і тепла і представити їх у вигляді (1.9).

У наближенні лінійного відгуку термоелектрична ефективність твердотілого термоелектрика повністю визначається двома величинами: термоелектричною добротністю ZT , яка може приймати значення $0 \leq ZT < \infty$, і ефективністю Карно η_c . Термоелектричній добротності, що прямує до нескінченності, відповідає ефективність, що прямує до максимально можливої. Ефективність дорівнювала б ефективності Карно, якщо термоелектричний цикл

був би повністю оборотним. На практиці ефективність сильно обмежена необоротними втратами тепла, що пов'язані з джоулевым нагріванням і теплопровідністю.

Поряд з ефективністю, важливою характеристикою термоелектричного пристрою є його потужність. У статті [52] було показано, що для транзистора на основі квантової точки термоелектрична добротність обернено пропорційна ширині рівня Γ , отже, прямує до нескінченності при $\Gamma \rightarrow 0$. Однак, оскільки електричний струм пропорційний Γ , потужність пристрою в такому граничному випадку прямує до нуля. Тому має сенс якимсь чином максимізувати потужність. (У реальних теплових машинах, що використовують у промисловості, знаходять деякий компроміс – оптимальні зовнішні параметри, при яких і ефективність, і потужність достатньо високі.)

У 1975 році вийшла робота [53] (див. також більш ранню роботу [54] про ефективність атомних станцій і книгу [55]), в котрій було знайдено максимум потужності ендоборотного теплового двигуна, в якому необоротним вважається лише переніс тепла. Відповідна цій потужності ефективність

$$\eta_{CA} = 1 - \sqrt{\frac{T_{low}}{T_{high}}} \quad (1.14)$$

називається ефективністю Кьорзона—Алборна (Curzon—Ahlborn efficiency).

Коли досліджують потужність твердотільного термоелектрика в наближенні лінійного відгуку, розрізняють максимальну потужність і потужність при максимальній ефективності. Максимізація потужності $P = VI$ за напругою призводить до формули (див., наприклад, огляд [56])

$$P_m = \frac{1}{4} GS^2 (\delta T)^2 \quad (1.15)$$

Підставлення оптимальної напруги в формулу для ефективності $\eta = P/J$ дає вираз для ефективності при максимальній потужності [57]:

$$\eta_{mp} = \frac{\eta_C}{2} \frac{ZT}{ZT + 2}. \quad (1.16)$$

Аналогічно можна спочатку оптимізувати за напругою ефективність, отримавши максимальну ефективність (див., наприклад, книгу [58])

$$\eta_m = \eta_c \frac{\sqrt{ZT+1}-1}{\sqrt{ZT+1}+1}, \quad (1.17)$$

а потім підставити оптимальну напругу в формулу для потужності і отримати вираз для потужності при максимальній ефективності [39]:

$$P_{me} = \eta_c^2 \frac{TK}{\sqrt{ZT+1}} \frac{\sqrt{ZT+1}-1}{\sqrt{ZT+1}+1}. \quad (1.18)$$

Зазначимо, що в даній дисертаційній роботі термоелектричні ефекти вивчаються лише в наближенні лінійного відгуку. Нелінійному відгуку присвячений, наприклад, огляд [59].

З формули (1.7) очевидно, що для підвищення термоелектричної добротності необхідно зменшити теплокондуктанс, а також підвищити термоерс і електрокондуктанс. У тунельних структурах, які розглянуто в даній дисертації, фононний теплокондуктанс можна суттєво зменшити, завдяки акустичній неузгодженості на границі. Що стосується електронних характеристик, то електро- і теплокондуктанс звичайно зв'язані законом Відемана—Франца

$$\frac{K}{GT} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \equiv \mathcal{L}_0 \quad (1.19)$$

а термоерс визначається формулою Мотта

$$S \approx \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B}{e} k_B T \frac{d}{d\mu} \ln G(\mu) \quad (1.20)$$

(μ – хімічний потенціал). Високих значень термоерс можна досягти, якщо створити умови, за яких залежність коефіцієнта проходження від енергії сильна (при низьких температурах електрокондуктанс – це коефіцієнт проходження в точці μ). Порушення закону Відемана—Франца в необхідний бік

$$\frac{K(T)}{G(T)T} = \mathcal{L}_0(T) \ll \mathcal{L}_0 \quad (1.21)$$

також призводить до підвищення термоелектричної добротності. З математичної точки зору найбільшу термоелектричну добротність при заданому фононному теплокондуктансі має система з дельта-образною залежністю коефіцієнта проходження від енергії [60].

Одна з нанотермоелектричних систем – транзистор на основі квантової точки – була розглянута в статті [52]. Ця система має невелику ефективність. У підрозділі 4.1 даної дисертаційної роботи досліджений спітронний транзистор на основі квантової точки з одним виродженим за спіном рівнем і напівметалевими електродами, який знаходиться під дією зовнішнього магнітного поля, що управляє електронним транспортом. Показано, що спітронний транзистор має кращі термоелектричні характеристики в порівнянні з системою [52]. Зазначимо, що взаємодію спінового ступеня свободи з електричним транспортом та транспортом тепла вивчають спітроніка [61] і спінова калоритроніка [62].

Слід зазначити, що гамільтоніан спітронного транзистора формально співпадає з гамільтоніаном системи з подвійною квантовою точкою і неполяризованими електронами [63, 64]. У роботі [63] отримані екстремально високі значення термоелектричної добротності (до 10^3) для слабкого тунельного зв'язку між квантовими точками і сильної асиметрії тунельного зв'язку між точками та електродами. Однак потужність у цьому випадку далека від максимуму.

Термоелектричні властивості наноматеріалів, зокрема на основі квантових точок, інтенсивно досліджуються не лише теоретично (див., наприклад, огляд [65]), а й експериментально. Так, надрешітка на основі квантових точок була використана для охолодження при кімнатних температурах [66], а при низьких температурах були проведені вимірювання термоерс в системі з квантовими точками з декількома десятками електронів [67]. У роботі [68] експериментально знайдені ефективність і потужність теплового двигуна на основі квантової точки і показано, що в режимі максимальної потужності ефективність співпадає з ефективністю Кьорзона—Алборна [53]. У роботі [69] для системи з молекулою фулерену, розміщеної між графеновими електродами, був виміряний так званий

фактор потужності (GS^2) і було показано, що він є максимальним для симетричного тунельного контакту.

Роль квантової точки може виконувати вуглецева нанотрубка (див., наприклад, статтю [70], а також огляд [71]). У підрозділі 4.2 даної дисертаційної роботи досліджуються термоелектричні характеристики транзистора на основі пружно деформованої металічної вуглецевої нанотрубки. Знайдені умови, за яких такий транзистор має високу термоелектричну добротність.

РОЗДІЛ 2

ШАТЛІВСЬКА НЕСТІЙКІСТЬ У ТРАНСПОРТІ ПОЛЯРИЗОВАНИХ ЗА СПІНОМ ЕЛЕКТРОНІВ У НАНОЕЛЕКТРОМЕХАНІЧНИХ СТРУКТУРАХ

У даному розділі вивчається транспорт поляризованих за спіном електронів у наноелектромеханічних системах під дією кулонівських (підрозділ 2.1) і обмінних (підрозділ 2.2) сил. На відміну від раніше розглянутого випадку повністю поляризованих за спіном електронів в електродах, намагніченість електродів у цьому розділі вважається частковою. Вивчається вплив неповної поляризації на область шатлівської нестійкості та обговорюється, які якісні відмінності вносить часткова поляризація в порівнянні із стовідсотковою. Отримання області шатлівської нестійкості для системи з частково поляризованими за спіном електронами означає, що в експерименті можна використовувати побудовану теорію та використовувати в якості електродів феро- або антиферомагнетики, а не спінові напівметали зі стовідсотковою поляризацією, з яких складно зробити контакти.

2.1. Одноелектронний шатл, керований магнітним полем.

У даному підрозділі знайдена область шатлівської нестійкості для електричного шатлу з частково поляризованими за спіном електронами в електродах. Вивчена можливість переходу з шатлівського режиму коливань квантової точки в вібронний режим за допомогою зовнішнього магнітного поля.

2.1.1. Модель системи, гамільтоніан і рівняння руху.

Модель електричного шатлу з частковою поляризацією за спіном електронів в електродах зображена на рис. 2.1. Рухома квантова точка з одним виродженим за спіном електронним рівнем тунельно зв'язана з двома частково поляризованими за спіном електродами. Γ і γ – частоти тунельних переходів (в енергетичних одиницях) для двох проекцій спіна (ми припускаємо, що $\gamma \leq \Gamma$). Різниця хімічних потенціалів $\mu_L - \mu_R = e|V$ між електродами створена

електричною напругою V . Зовнішнє магнітне поле H викликає перевороти спіну між станами «спін вгору» та «спін вниз» на квантовій точці.

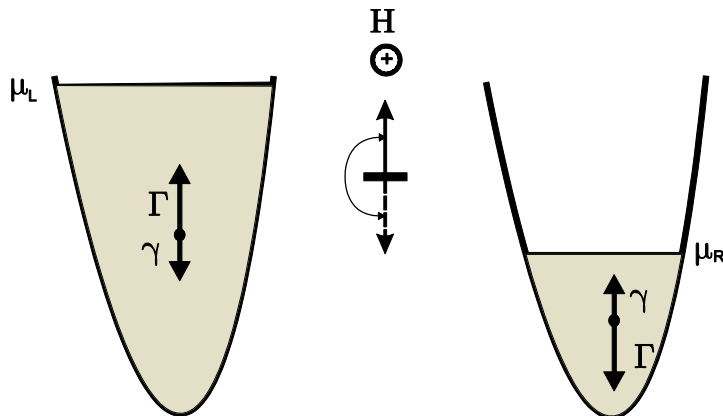


Рис 2.1. Ескіз моделі наноманітного пристрою, який вивчається: рухома квантова точка з одним виродженням за спіном електронним рівнем зв'язана з двома частково поляризованими за спіном електродами. Γ і γ – тунельні зв'язки для двох спінових проекцій (вважаємо $\gamma \leq \Gamma$). Різниця потенціалів $\mu_L - \mu_R = |e|V$ між електродами створюється напругою V . Зовнішнє магнітне поле H викликає перевороти спінів із стану «спін вгору» в стан «спін вниз» та навпаки.

Гамільтоніан $\hat{H} = \hat{H}_l + \hat{H}_d + \hat{H}_v + \hat{H}_{tun}$ системи, що розглядається, складається з чотирьох доданків. Перший доданок, \hat{H}_l (leads – береги), описує електрони (без взаємодії) в електродах, або берегах,

$$\hat{H}_l = \sum_{k,\sigma,j} \varepsilon_{k,\sigma,j} a_{k,\sigma,j}^\dagger a_{k,\sigma,j}. \quad (2.1)$$

Тут $a_{k,\sigma,j}^\dagger$ ($a_{k,\sigma,j}$) – оператор народження (знищення) електронного стану з імпульсом k і проекцією спіну $\sigma = \uparrow, \downarrow$ в електроді j : $j = L, j = R$ (ми використовуємо також позначення -1 та 1 замість L та R відповідно); $\varepsilon_{k,\sigma,j}$ – енергія електрона.

Другий доданок – гамільтоніан квантової точки, \hat{H}_d , – має вигляд

$$\hat{H}_d = (\varepsilon_0 - eE\hat{x}) \sum_{\sigma} c_{\sigma}^\dagger c_{\sigma} - \frac{g\mu_B H}{2} (c_{\uparrow}^\dagger c_{\downarrow} + c_{\downarrow}^\dagger c_{\uparrow}) + U c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} c_{\downarrow}^\dagger c_{\downarrow}. \quad (2.2)$$

Він описує одноелектронний стан на квантовій точці (з енергією ε_0) та його зв'язок з електричним полем E ($e < 0$ – заряд електрона) і магнітним полем H (μ_B – магнетон Бора, g – гіромагнітне відношення). У формулі (2.2) c_σ^\dagger (c_σ) – оператор народження (знищення) електронного стану на точці. Взаємодія електронів на точці характеризується кулонівською енергією U .

Коливання точки описуються гамільтоніаном гармонічного осцилятора

$$\hat{H}_v = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}, \quad (2.3)$$

де \hat{x} – оператор зсуву точки, \hat{p} – канонічно спряжений імпульс ($[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$), m – маса і ω – частота коливань центру мас квантової точки. Останній доданок у гамільтоніані системи описує тунелювання (із збереженням спіну) електронів між точкою та електродами,

$$\hat{H}_{tun} = \sum_{k,\sigma,j} t_j(\hat{x}) a_{k,\sigma,j}^\dagger c_\sigma + H.c. \quad (2.4)$$

Тут $t_j(\hat{x}) = t_j \exp(j\hat{x}/\lambda)$ – залежна від координати тунельна амплітуда, λ – тунельна довжина. Електрони в кожному електроді підтримуються при постійному електрохімічному потенціалі $\mu_{L,R} = \pm |e|V/2$ (відносно рівня Фермі), де $V > 0$ – електрична напруга. Припускається, що електронна густина станів $\nu_{j,\sigma} = \nu_\sigma$ не залежить від енергії.

Для вирішення задачі необхідно знайти еволюцію зведеної матриці густини ρ , яка описує коливальний ступінь свободи, пов'язаний з одноелектронним станом точки. Електронний стан натягнений на чотири базисні вектори $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle = c_\uparrow^\dagger |0\rangle$, $|\downarrow\rangle = c_\downarrow^\dagger |0\rangle$, $|2\rangle = c_\uparrow^\dagger c_\downarrow^\dagger |0\rangle$. Спочатку ми розглядаємо режим кулонівської блокади, $|e|V, T \ll U$, коли тунелювання другого електрона на точку заблоковане кулонівською взаємодією ($\rho_2 \rightarrow 0$, де ρ_2 – елемент зведеної матриці густини квантової точки, який відповідає подвійному її заповненню).

Зручно ввести безрозмірні змінні для часу, $t\omega \rightarrow t$, координати зсуву точки, $\hat{x}/x_0 \rightarrow \hat{x}$ (де $x_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ – амплітуда нульових коливань), імпульсу,

$\hat{p}x_0 / \hbar \rightarrow \hat{p}$, та характерних енергій, $\hbar\omega \rightarrow 1$, $g\mu_B H / \hbar\omega \rightarrow h$, $eEx_0 / \hbar\omega \rightarrow d$, $\Gamma_j^\sigma(\hat{x}) / \hbar\omega \rightarrow \Gamma_j^\sigma(\hat{x})$ (де

$$\Gamma_j^\sigma(\hat{x}) = 2\pi\nu_\sigma |t_j(\hat{x})|^2 = \Gamma_j^\sigma \exp(2j\hat{x} / \lambda) \quad (2.5)$$

– частоти тунельних переходів в енергетичних одиницях).

Рівняння руху для операторів $\rho_0 = \langle 0 | \rho | 0 \rangle$, $\rho_\uparrow = \langle \uparrow | \rho | \uparrow \rangle$, $\rho_\downarrow = \langle \downarrow | \rho | \downarrow \rangle$, $\rho_{\uparrow\downarrow} = \langle \uparrow | \rho | \downarrow \rangle$ зведеної матриці густини

$$\begin{pmatrix} \rho_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_\uparrow & \rho_{\uparrow\downarrow} & 0 \\ 0 & \rho_{\uparrow\downarrow}^* & \rho_\downarrow & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_2 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

можна отримати так само, як це було зроблено в статті [23]. А саме, з рівняння Ліувілля—фон Неймана (в одиницях з $\hbar = 1$) $i\partial_t \hat{\sigma}(t) = [\hat{H}, \hat{\sigma}(t)]$ переходимо до інтегро-диференціального рівняння для зведеної матриці густини квантової точки в представленні взаємодії:

$$\partial_t \hat{\rho}(t) = -\text{Tr}_{leads} \left\{ \int_{-\infty}^t dt_1 \left[\hat{H}_{tun}(t), \left[\hat{H}_{tun}(t_1), \hat{\sigma}(t_1) \right] \right] \right\}. \quad (2.7)$$

Тут перехід від шредінгерівського представлення оператора $\hat{*}$ до представлення взаємодії цього оператора дається формулою:

$$\hat{*}(t) = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{*} e^{-i\hat{H}_0 t}, \quad (2.8)$$

а оператор зведеної матриці густини визначається формулою $\hat{\rho}(t) \equiv \text{Tr}_{leads} \{ \hat{\sigma}(t) \}$. У формулі (2.8) $\hat{H}_0 = \hat{H}_l + \hat{H}_d + \hat{H}_v$ – незбурений гамільтоніан. При обчисленні сліду в правій частині рівняння (2.7) ми, як і автори роботи [23], використовуємо припущення про факторизацію матриці густини на зведену матрицю густини квантової точки та рівноважну матрицю густини електродів:

$$\hat{\sigma}(t) \approx \hat{\rho}(t) \otimes \hat{\sigma}_l. \quad (2.9)$$

Це припущення означає, що тунелювання електронів з точки до електродів і в зворотному напрямку не порушує рівноважного стану електродів, електрони в яких описуються функцією розподілу Фермі—Дірака. Формула (2.9) є

справедливою, зокрема, за умови виконання нерівності $\Gamma / (|e|V) \ll 1$ (тобто в теорії збурень за шириною рівня). У загальному випадку рівняння (2.7) є інтегродиференціальним. Однак за умови високої напруги (порівняно з усіма іншими енергетичними параметрами) це рівняння стає локальним за часом, бо відповідне ядро в функції під знаком інтегралу перетворюється на дельта-функцію. Обчислення сліду за електронними ступенями свободи в електродах, повернення до шредінгерівського представлення операторів і перехід від рівняння для $\hat{\rho}(t)$ до рівнянь для матричних елементів, що характеризують електронний стан квантової точки, дозволяють отримати наступну систему рівнянь:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_0}{\partial t} = & -i[\hat{H}_v + \hat{x}d, \rho_0] - \\ & -\frac{1}{2}\{\Gamma_L^\uparrow(\hat{x}) + \Gamma_L^\downarrow(\hat{x}), \rho_0\} + \sqrt{\Gamma_R^\uparrow(\hat{x})}\rho_\uparrow\sqrt{\Gamma_R^\uparrow(\hat{x})} + \sqrt{\Gamma_R^\downarrow(\hat{x})}\rho_\downarrow\sqrt{\Gamma_R^\downarrow(\hat{x})}; \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial \rho_\uparrow}{\partial t} = -i[\hat{H}_v, \rho_\uparrow] - i\frac{\hbar}{2}(\rho_{\uparrow\downarrow} - \rho_{\downarrow\uparrow}^\dagger) + \sqrt{\Gamma_L^\uparrow(\hat{x})}\rho_0\sqrt{\Gamma_L^\uparrow(\hat{x})} - \frac{1}{2}\{\Gamma_R^\uparrow(\hat{x}), \rho_\uparrow\}; \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial \rho_\downarrow}{\partial t} = -i[\hat{H}_v, \rho_\downarrow] + i\frac{\hbar}{2}(\rho_{\uparrow\downarrow} - \rho_{\downarrow\uparrow}^\dagger) + \sqrt{\Gamma_L^\downarrow(\hat{x})}\rho_0\sqrt{\Gamma_L^\downarrow(\hat{x})} - \frac{1}{2}\{\Gamma_R^\downarrow(\hat{x}), \rho_\downarrow\}; \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial \rho_{\uparrow\downarrow}}{\partial t} = -i[\hat{H}_v, \rho_{\uparrow\downarrow}] - i\frac{\hbar}{2}(\rho_\uparrow - \rho_\downarrow) - \frac{1}{2}\rho_{\uparrow\downarrow}\Gamma_R^\downarrow(\hat{x}) - \frac{1}{2}\Gamma_R^\uparrow(\hat{x})\rho_{\uparrow\downarrow}, \quad (2.13)$$

де квадратні дужки позначають комутатор, а фігурні – антикомутатор.

Легко перевірити, що для випадку повністю поляризованих за спіном електронів в електродах рівняння (2.10)—(2.13) зводяться до рівнянь, отриманих у статті [23]. Нижче ми обмежимося симетричним випадком, $\Gamma_L^\uparrow(0) = \Gamma_R^\downarrow(0) \equiv \Gamma$, $\Gamma_L^\downarrow(0) = \Gamma_R^\uparrow(0) \equiv \gamma$.

Нас цікавить класичний рух квантової точки. Використовуючи рівняння (2.10)—(2.13), легко отримати класичні рівняння руху для координати та імпульсу:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \text{Tr} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\hat{x}\rho) \right\} = p, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \text{Tr} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\hat{p} \rho) \right\} = -x - d \text{Tr} \rho_0. \quad (2.15)$$

Тому необхідно знайти рівняння руху для нульових моментів, $\text{Tr} \rho_i$ (індекс i пробігає всі значення індексів у рівняннях (2.10)—(2.13)).

Динаміка нульових моментів пов'язана з динамікою перших моментів, які, в свою чергу, виражаються через вищі моменти. Ми розірвемо цей зв'язок на рівні перших моментів, використовуючи правило $\text{Tr} \{ \hat{x} \rho_i \} \rightarrow x \text{Tr} \rho_i$, де x – класична координата шатлу. Окрім обмеження вібраційною динамікою поблизу основного стану, ми будемо вважати параметри d , $1/\lambda$ малими та лінеаризуємо всі рівняння за класичним зсувом x . Зауважимо, що таку саму систему рівнянь (2.10)—(2.13) ми б отримали, якщо одразу в гамільтоніані (2.3) вважали координату та імпульс квантової точки класичними змінними. Зазначимо також, що, хоча рух точки ми вважаємо класичним, спінова динаміка електронів у даній задачі (а також у підрозділі 2.2, розділі 3 та підрозділі 4.1) враховується точним квантовомеханічним чином.

Зручно ввести наступні лінійні комбінації величин $R_i \equiv \text{Tr} \rho_i$,

$$R_0 = \text{Tr} \rho_0, \quad R_1 = 1 - \text{Tr} \rho_{\uparrow}, \quad R_2 = i \text{Tr} (\rho_{\uparrow\downarrow} - \rho_{\downarrow\uparrow}^{\dagger}), \quad R_3 = \text{Tr} (\rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\downarrow\uparrow}^{\dagger}), \quad (2.16)$$

де сліди беруться лише за вібронним ступенем свободи (слід за всіма електронними ступенями свободи – берігів і точки – ми вже взяли). З використанням описаних наближень (теорія збурень за частотою тунельних переходів і лінеаризація за класичною координатою квантової точки) рівнянням руху для нульових моментів можна надати наступний вигляд:

$$\frac{\partial R_0}{\partial t} = - \left(2\Gamma + \gamma - \gamma \frac{2x}{\lambda} \right) R_0 + (\Gamma - \gamma) \left(1 + \frac{2x}{\lambda} \right) R_1 + \gamma \left(1 + \frac{2x}{\lambda} \right), \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial R_1}{\partial t} = -\Gamma \left(1 - \frac{2x}{\lambda} \right) R_0 - \gamma \left(1 + \frac{2x}{\lambda} \right) R_1 + \frac{h}{2} R_2 + \gamma \left(1 + \frac{2x}{\lambda} \right), \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial R_2}{\partial t} = h(1 + R_0 - 2R_1) - \frac{\Gamma + \gamma}{2} \left(1 + \frac{2x}{\lambda} \right) R_2. \quad (2.19)$$

(Зауважимо, що функція R_3 входить лише в рівняння для $\partial R_3 / \partial t$, тому це рівняння відокремлене від інших рівнянь і не потрібне для знаходження області шатлівської нестійкості: як видно з рівнянь (2.14)—(2.15), нам потрібно знайти R_0 .)

2.1.2. Область шатлівської нестійкості.

Для малих коливань аналітичний розв'язок системи (2.17)—(2.19) може бути знайдений за допомогою теорії збурень за малими параметрами $\vec{\varepsilon} = (d, 1/\lambda)$.

Ми розв'язуємо цю систему розкладанням у ряд

$$R_i(t) = R_i^{(0)} + R_i^{(1)}(t) + \dots, \quad (2.20)$$

де функція $R_i^{(n)}$ має n -й порядок малості за $\vec{\varepsilon}$. З рівнянь (2.17)—(2.19) видно, що функції $R_i^{(0)}$ не залежать від часу. Отже,

$$R_0^{(0)} = \frac{\Gamma\gamma + h^2}{\Delta_1}, \quad R_1^{(0)} = \frac{\Gamma\gamma + \gamma^2 + 2h^2}{\Delta_1}, \quad R_2^{(0)} = \frac{2(\Gamma - \gamma)h}{\Delta_1}, \quad (2.21)$$

де $\Delta_1 = \Gamma^2 + \Gamma\gamma + \gamma^2 + 3h^2$.

Зручно ввести вектор-функцію $|R\rangle = (R_0^{(1)}, R_1^{(1)}, R_2^{(1)})^T$. Тоді в першому порядку теорії збурень система (2.17)—(2.19) матиме вигляд:

$$\frac{\partial |R\rangle}{\partial t} = \hat{A}_1 |R\rangle + \frac{2}{\lambda} x(t) |e_1\rangle, \quad (2.22)$$

де

$$\hat{A}_1 = \begin{pmatrix} -(2\Gamma + \gamma) & \Gamma - \gamma & 0 \\ -\Gamma & -\gamma & h/2 \\ h & -2h & -(\Gamma + \gamma)/2 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

і вектор $|e_1\rangle$ визначається так:

$$|e_1\rangle = \frac{1}{\Delta_1} \begin{pmatrix} 2(\Gamma + \gamma)(\Gamma\gamma + h^2) \\ 2\Gamma^2\gamma + (\Gamma + \gamma)h^2 \\ (\gamma^2 - \Gamma^2)h \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Використовуючи класичні рівняння руху (2.14)—(2.15) для координати та імпульсу точки та матричне рівняння (2.22) для перших поправок до нульових

моментів, можна отримати рівняння для класичної координати зсуву точки:

$$\frac{\partial^2 x(t)}{\partial t^2} + x(t) = -\frac{2d}{\lambda} \int_{-\infty}^t dt' x(t') \langle e_0 | e^{\hat{A}_1(t-t')} | e_1 \rangle, \quad (2.25)$$

де $|e_0\rangle = (1, 0, 0)^T$.

Розв'язок цього рівняння шукаємо в вигляді $x = A \exp(i\Omega_1 t)$, де Ω_1 – власна частота коливань шатлу. Нас цікавить знак уявної частини поправки $\tilde{\omega}$ до частоти $\Omega_1 = 1 + (d/\lambda)\tilde{\omega}$, оскільки інкремент експоненціального зростання амплітуди коливань шатлу дорівнює $r = -\text{Im}\Omega_1 > 0$. З рівняння (2.25) випливає, що поправка дорівнює

$$\tilde{\omega} = \frac{1}{\Delta_1} \frac{D_1}{D_0}, \quad (2.26)$$

де

$$D_1 = (\Gamma + \gamma) \left[2(\Gamma\gamma + h^2) - 2h^2(h^2 + 2\Gamma\gamma) - \Gamma\gamma(\Gamma^2 + \gamma^2) \right] - i \left[3\Gamma\gamma(\Gamma^2 + \gamma^2) + 2\Gamma^2\gamma^2 + 2h^2(\Gamma + \gamma)^2 \right] \quad (2.27)$$

і

$$D_0 = \frac{1}{2}(\Gamma + \gamma)(5 - \Gamma^2 - \Gamma\gamma - \gamma^2 - 3h^2) + i(1 - 2\Gamma^2 - 3\Gamma\gamma - 2\gamma^2 - h^2). \quad (2.28)$$

Звідси знаходимо нерівність, що задає область шатлівської нестійкості:

$$h^6 + C_{14}h^4 + C_{12}h^2 + C_{10} > 0. \quad (2.29)$$

Тут коефіцієнти C_{1i} дорівнюють

$$C_{14} = \frac{1}{2}(\Gamma^2 + \gamma^2) + 2(\Gamma\gamma - 1), \quad (2.30)$$

$$C_{12} = \frac{3}{4}\Gamma\gamma(\Gamma^2 + \gamma^2) - \frac{1}{2}(\Gamma^4 + \gamma^4 - \Gamma^2 - \gamma^2) + 5\Gamma^2\gamma^2 - \Gamma\gamma + 1, \quad (2.31)$$

$$C_{10} = \frac{1}{4}\Gamma\gamma(\Gamma^4 + \gamma^4) + \frac{1}{4}(\Gamma^2\gamma^2 + 5\Gamma\gamma)(\Gamma^2 + \gamma^2) - \frac{1}{2}\Gamma^2\gamma^2 + \Gamma\gamma. \quad (2.32)$$

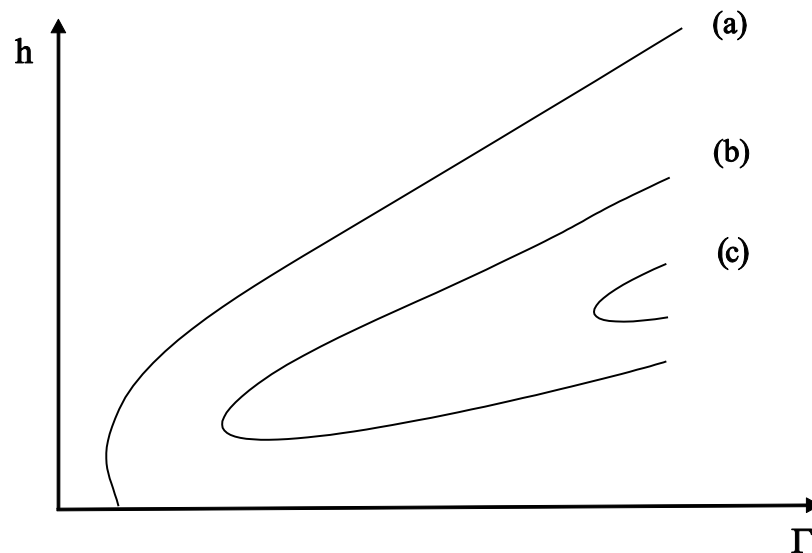


Рис 2.2. Схематична залежність магнітного поля h від ширини рівня Γ (суцільні криві) на границі між шатлівською та вібронною областями для (a) $\gamma = 0$ (повна поляризація за спіном), (b) $\gamma = \gamma_b$ і (c) $\gamma = \gamma_c$, де $\gamma_c > \gamma_b$. У кожному випадку вібронна область знаходиться нижче верхньої та вище нижньої гілки граничної кривої. Із зростанням γ шатлівська область розширюється і в кінці кінців вібронна область зникає.

2.1.3. Аналіз шатлівської динаміки в режимі кулонівської блокади та за відсутності кулонівської блокади.

Проаналізуємо нерівність (2.29), щоб знайти характерні особливості області шатлівської нестійкості. На рис. 2.2 ця область зображена в (Γ, h) -площині для трьох значень γ . Випадок повністю поляризованих за спіном електронів в електродах ($\gamma = 0$) був детально розглянутий у статті [27]. А саме, коли $\Gamma < (4/3)\hbar\omega$ (тут ми повертаємося до розмірних змінних), тільки «фаза шатлу» є стабільною (для довільних значень h). Коли $(4/3)\hbar\omega < \Gamma < \sqrt{2}\hbar\omega$, є певний інтервал магнітних полів h , у якому стабільна «вібронна фаза». Коли $\Gamma > \sqrt{2}\hbar\omega$, вібронна область переходить у шатлівську при пороговому (threshold), або критичному, магнітному полі $h_{th} \propto \Gamma$ (при $\Gamma \gg 1$). Із зростанням γ шатлівська область електронного транспорту розширюється, а вібронна область стає вузькою

і повністю зникає при $(\gamma / \Gamma)_m \approx 0.22$ (див. рис. 2.3). Відповідне критичне значення спінової поляризації,

$$\eta = \frac{1 - \gamma / \Gamma}{1 + \gamma / \Gamma}, \quad (2.33)$$

є $\eta_m \approx 64\%$. Зауважимо, що справедливість формули (2.33) для спінової поляризації η впливає з її визначення:

$$\eta = \frac{|N_{\uparrow} - N_{\downarrow}|}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} \quad (2.34)$$

(тут N_{σ} – число електронів зі спіною проекцією σ в електроді), з визначення (2.5) частот переходів, а також з припущення, що тунельні амплітуди $t_j(\hat{x})$ не залежать від спіну (зокрема, не залежить від проекції спіну тунельна довжина λ). Якщо спінова поляризація нижча за η_m , магнітне поле перестає викликати перехід між вібронною та шатлівською «фазами».

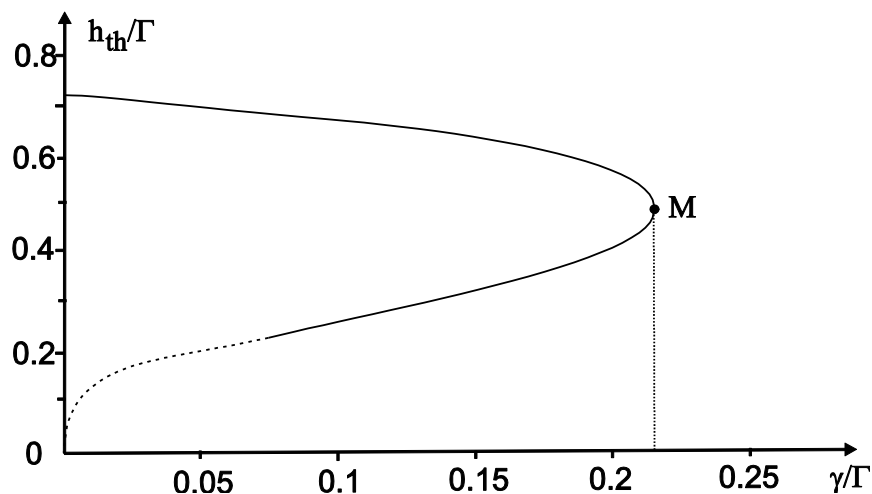


Рис. 2.3. Залежність порогового магнітного поля h_{th} від відношення ширин рівня γ / Γ . Частина «нижньої» гілки зображена пунктиром, тому що для малих магнітних полів інкремент малий і дисипація перешкоджає розвитку шатлівської нестійкості. Точка M визначає максимальне значення γ / Γ , вище якого за допомогою магнітного поля не може бути здійснений перехід між шатлівським і вібронним режимами електронного транспорту.

Залежність порогового магнітного поля h_{th} від γ зображена на рис. 2.3. Графік цієї залежності має вертикальну дотичну в точці M , яка визначає критичне відношення ширин рівня $(\gamma/\Gamma)_m$. Точка M розділяє криву на рис. 2.3 на верхню та нижню гілки. Частина нижньої гілки зображена пунктиром. Це показує, що при заданій дисипації шатлівської нестійкості в достатньо малих магнітних полях не буде. Причина в тому, що інкремент r експоненціального зростання амплітуди коливань шатлу (інкремент шатлівської нестійкості) є малим ($r \propto h^2$) за відсутності дисипації. Тому в достатньо малих магнітних полях тертя перешкоджає розвитку шатлівської нестійкості.

Зазначимо, що при $\gamma \rightarrow 0$ нижня гілка критичного магнітного поля прямує до нуля: $h_{th} \propto \sqrt{\Gamma\gamma} \rightarrow 0$. Верхня гілка при $\gamma/\Gamma \ll 1$ і $\Gamma \gg 1$ визначається формулою

$$\frac{h_{th}}{\Gamma} \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{3\gamma}{2\Gamma} \right). \quad (2.35)$$

Тобто при $\Gamma \gg 1$ порогове магнітне поле, нормоване на Γ , залежить лише від однієї змінної. Саме ця залежність зображена на рис. 2.3. Максимальному значенню $(\gamma/\Gamma)_m \approx 0.22$ відповідає мінімальний ступінь спінової поляризації, $\eta_m \approx 0.64$ (див. формулу (2.33)), нижче якого магнітне поле не може викликати перехід з вібронної «фази» в шатлівську і навпаки. Цікаво зазначити, що існує скінченний інтервал ступенів поляризації, в якому зі збільшенням магнітного поля спочатку відбувається перехід з шатлівської «фази» в вібронну, а потім повернення в шатлівську «фазу» (вібронна область на рис. 2.3 – «всередині» кривої).

Якщо $|e|V \gg U$, то кулонівську блокаду знято та електрони з ненульовою ймовірністю можуть займати енергетичний рівень $2\varepsilon_0 + U$, який відповідає двочастинковому стану на квантовій точці. Шатлівська динаміка для повністю поляризованих електронів в електродах (тобто коли електроди напівметалеві) була розглянута в статті [23], де було показано, що шатлівська «фаза» за відсутності дисипації в механічній підсистемі стабільна при довільних значеннях зовнішнього магнітного поля. Єдина умова реалізації шатлювання електронів – це

направити зовнішнє магнітне поле не паралельно до напрямку намагніченості електродів. Однак інкремент шатлівської нестійкості суттєво залежить від величини магнітного поля [23].

За відсутності кулонівської блокади система рівнянь руху для елементів матриці густини схожа з рівняннями (2.10)—(2.13) та має вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_0}{\partial t} = & -i \left[\hat{H}_v + \hat{x}d, \rho_0 \right] - \\ & - \frac{1}{2} \left\{ \Gamma_L^\uparrow(\hat{x}) + \Gamma_L^\downarrow(\hat{x}), \rho_0 \right\} + \sqrt{\Gamma_R^\uparrow(\hat{x})} \rho_\uparrow \sqrt{\Gamma_R^\uparrow(\hat{x})} + \sqrt{\Gamma_R^\downarrow(\hat{x})} \rho_\downarrow \sqrt{\Gamma_R^\downarrow(\hat{x})}; \end{aligned} \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_2}{\partial t} = & -i \left[\hat{H}_v - \hat{x}d, \rho_2 \right] - \\ & - \frac{1}{2} \left\{ \Gamma_R^\uparrow(\hat{x}) + \Gamma_R^\downarrow(\hat{x}), \rho_2 \right\} + \sqrt{\Gamma_L^\uparrow(\hat{x})} \rho_\downarrow \sqrt{\Gamma_L^\uparrow(\hat{x})} + \sqrt{\Gamma_L^\downarrow(\hat{x})} \rho_\uparrow \sqrt{\Gamma_L^\downarrow(\hat{x})}; \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_\uparrow}{\partial t} = & -i \left[\hat{H}_v, \rho_\uparrow \right] - i \frac{\hbar}{2} (\rho_{\uparrow\downarrow} - \rho_{\downarrow\uparrow}^\dagger) + \\ & + \sqrt{\Gamma_L^\uparrow(\hat{x})} \rho_0 \sqrt{\Gamma_L^\uparrow(\hat{x})} + \sqrt{\Gamma_R^\downarrow(\hat{x})} \rho_2 \sqrt{\Gamma_R^\downarrow(\hat{x})} - \frac{1}{2} \left\{ \Gamma_L^\downarrow(\hat{x}) + \Gamma_R^\uparrow(\hat{x}), \rho_\uparrow \right\}; \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_\downarrow}{\partial t} = & -i \left[\hat{H}_v, \rho_\downarrow \right] + i \frac{\hbar}{2} (\rho_{\uparrow\downarrow} - \rho_{\downarrow\uparrow}^\dagger) + \\ & + \sqrt{\Gamma_L^\downarrow(\hat{x})} \rho_0 \sqrt{\Gamma_L^\downarrow(\hat{x})} + \sqrt{\Gamma_R^\uparrow(\hat{x})} \rho_2 \sqrt{\Gamma_R^\uparrow(\hat{x})} - \frac{1}{2} \left\{ \Gamma_L^\uparrow(\hat{x}) + \Gamma_R^\downarrow(\hat{x}), \rho_\downarrow \right\}; \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{\uparrow\downarrow}}{\partial t} = & -i \left[\hat{H}_v, \rho_{\uparrow\downarrow} \right] - i \frac{\hbar}{2} (\rho_\uparrow - \rho_\downarrow) - \\ & - \frac{1}{2} \rho_{\uparrow\downarrow} \left(\Gamma_L^\uparrow(\hat{x}) + \Gamma_R^\downarrow(\hat{x}) \right) - \frac{1}{2} \left(\Gamma_L^\downarrow(\hat{x}) + \Gamma_R^\uparrow(\hat{x}) \right) \rho_{\uparrow\downarrow}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Аналіз нової системи рівнянь повністю аналогічний аналізу системи (2.10)—(2.13) і призводить до наступного аналітичного виразу для інкременту:

$$r(h) = \frac{d}{\lambda} \frac{\Gamma_+}{\Gamma_+^2 + 1} \left(1 - \frac{\Gamma_-^2}{\Gamma_+^2 + h^2} \right), \quad (2.41)$$

де позначено $\Gamma_\pm = \Gamma \pm \gamma$. Бачимо, що при всіх магнітних полях $r(h) \geq 0$, оскільки $\Gamma_+^2 + h^2 \geq \Gamma_-^2$. У граничному випадку $\gamma = 0$ (повністю поляризовані електрони в електродах) формула (2.41) зводиться до відповідної формули, отриманої в статті [23], яка в наших позначеннях має вигляд:

$$r(h) = \frac{d}{\lambda} \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + 1} \frac{h^2}{\Gamma^2 + h^2}. \quad (2.42)$$

У протилежному випадку неполяризованих електронів ($\gamma = \Gamma$) маємо

$$r = \frac{2d}{\lambda} \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + 1}. \quad (2.43)$$

Ми бачимо, що, коли електрони неполяризовані, магнітне поле не входить у вираз для інкремента (як і має бути).

Один з основних висновків статті [23] в тому, що за умови слабкої дисипації (що вводиться як феноменологічне тертя в рівняння руху, γ_0 – коефіцієнт тертя) слабке магнітне поле може викликати перехід з вібронної області в шатлівську, якщо $r(h) > \gamma_0$. Для $\Gamma \gg 1$ відповідне критичне магнітне поле $h_{th} \propto (\gamma_0 \Gamma^3 \lambda / d)^{1/2}$ і ми припускаємо, що $\gamma_0 \rightarrow 0$ (в протилежному разі за допомогою магнітного поля не можна контролювати шатлівську нестійкість).

Для частково поляризованих електронів зовнішнє магнітне поле впливає на інкремент, коли $h^2 \gtrsim \Gamma_+^2 - \Gamma_-^2 \propto \Gamma \gamma$ (див. формулу (2.41)). У реалістичній ситуації $\Gamma \gg 1$ контролювати шатлівську нестійкість можна за допомогою зовнішніх магнітних полів, які задовольняють нерівності $\sqrt{\gamma/\Gamma} \ll h/\Gamma \ll 1$, тобто лише для ступенів поляризації, близьких до 100%.

2.2. Шатлювання поляризованих за спіном електронів у молекулярних транзисторах.

У даному підрозділі знайдена область шатлівської нестійкості магнітного шатла з частково поляризованими за спіном електронами в електродах. Зроблені оцінки оптимального для спостереження нестійкості магнітного поля, і результати порівняні з експериментом, що вивчає транзистор на основі молекули фулерену з феромагнітними електродами.

2.2.1. Гамільтоніан і рівняння руху.

Структура гамільтоніану системи така сама, як у випадку електричного

шатлу (див. підрозділ 2.1). Гамільтоніан електродів описується формулою

$$\hat{H}_l = \sum_{k,\sigma,j} \varepsilon_{k,\sigma,j} a_{k,\sigma,j}^\dagger a_{k,\sigma,j} \quad (2.44)$$

(співпадає з формулою (2.1)), вібронний і тунельний гамільтоніани – формулами

$$\hat{H}_v = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}, \quad (2.45)$$

$$\hat{H}_{tun} = \sum_{k,\sigma,j} t_j(\hat{x}) a_{k,\sigma,j}^\dagger c_\sigma + H.c. \quad (2.46)$$

(співпадають з формулами (2.3), (2.4)). Гамільтоніан квантової точки має вигляд

$$\hat{H}_d = \left(\varepsilon_0 - \frac{J(\hat{x})}{2} \right) c_\uparrow^\dagger c_\uparrow + \left(\varepsilon_0 + \frac{J(\hat{x})}{2} \right) c_\downarrow^\dagger c_\downarrow - \frac{g\mu_B H}{2} (c_\uparrow^\dagger c_\downarrow + c_\downarrow^\dagger c_\uparrow) + U c_\uparrow^\dagger c_\uparrow c_\downarrow^\dagger c_\downarrow, \quad (2.47)$$

де $J(\hat{x}) = J_L(\hat{x}) - J_R(\hat{x})$ – обмінна взаємодія. ($J_L(\hat{x})$, $J_R(\hat{x})$ – це обмінна взаємодія між спіном електрона на точці та лівим/правим електродом.)

У режимі кулонівської блокади $|e|V, T \ll U$ елементи зведеної матриці густини квантової точки визначаються наступною системою рівнянь:

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} = -i [\hat{H}_v, \rho_0] - \frac{1}{2} \{ \Gamma_L^\uparrow(\hat{x}) + \Gamma_L^\downarrow(\hat{x}), \rho_0 \} + \sqrt{\Gamma_R^\uparrow(\hat{x})} \rho_\uparrow \sqrt{\Gamma_R^\uparrow(\hat{x})} + \sqrt{\Gamma_R^\downarrow(\hat{x})} \rho_\downarrow \sqrt{\Gamma_R^\downarrow(\hat{x})}; \quad (2.48)$$

$$\frac{\partial \rho_\uparrow}{\partial t} = -i [\hat{H}_v, \rho_\uparrow] + \frac{i}{2} [J(\hat{x}), \rho_\uparrow] + \frac{ih}{2} (\rho_{\uparrow\downarrow} - \rho_{\downarrow\uparrow}^\dagger) + \sqrt{\Gamma_L^\uparrow(\hat{x})} \rho_0 \sqrt{\Gamma_L^\uparrow(\hat{x})} - \frac{1}{2} \{ \Gamma_R^\uparrow(\hat{x}), \rho_\uparrow \}; \quad (2.49)$$

$$\frac{\partial \rho_\downarrow}{\partial t} = -i [\hat{H}_v, \rho_\downarrow] - \frac{i}{2} [J(\hat{x}), \rho_\downarrow] - \frac{ih}{2} (\rho_{\uparrow\downarrow} - \rho_{\downarrow\uparrow}^\dagger) + \sqrt{\Gamma_L^\downarrow(\hat{x})} \rho_0 \sqrt{\Gamma_L^\downarrow(\hat{x})} - \frac{1}{2} \{ \Gamma_R^\downarrow(\hat{x}), \rho_\downarrow \}; \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial \rho_{\uparrow\downarrow}}{\partial t} = -i [\hat{H}_v, \rho_{\uparrow\downarrow}] + \frac{i}{2} \{ J(\hat{x}), \rho_{\uparrow\downarrow} \} + \frac{ih}{2} (\rho_\uparrow - \rho_\downarrow) - \frac{\rho_{\uparrow\downarrow}}{2} \Gamma_R^\downarrow(\hat{x}) - \Gamma_R^\uparrow(\hat{x}) \frac{\rho_{\uparrow\downarrow}}{2}. \quad (2.51)$$

Ці рівняння ми отримуємо так само, як у підрозділі 2.1. Так само, як у підрозділі 2.1, ми вводимо безрозмірні змінні для часу, координати, імпульсу та характерних енергій.

2.2.2. Вплив спінової поляризації на магнітну шатлівську нестійкість.

Нашою метою є знайти область шатлівської нестійкості. Тому достатньо розкласти тунельні амплітуди та обмінні енергії до лінійних за оператором координати \hat{x} членів:

$$J(\hat{x}) = J_0 - \alpha \hat{x}, \quad \Gamma_{L/R}^\sigma(\hat{x}) = \Gamma_{L/R}^\sigma \left(1 \mp \frac{2\hat{x}}{\lambda} \right), \quad (2.52)$$

де характерна тунельна довжина λ – порядку 1 Å. Зауважимо, що амплітуда x_0 нульових коливань молекули фулерену поблизу мінімуму потенціалу Ленард-Джонса значно менша ніж тунельна довжина [35]. Оскільки просторовий масштаб обмінної взаємодії також визначається тунельною довжиною, можна розглядати координату як класичну змінну. Рівняння руху для класичної координати x набуває вигляду:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + x = -\frac{\alpha}{2} \text{Tr}(\rho_\uparrow - \rho_\downarrow). \quad (2.53)$$

Права частина рівняння (2.53) може бути знайдена з системи лінійних рівнянь (2.48)—(2.51), в яких оператор \hat{x} можна замінити на x .

Для спрощення аналітичних розрахунків розглянемо симетричний контакт, для якого $J_0 = 0$, $\Gamma_L^\uparrow(0) = \Gamma_R^\downarrow(0) = \Gamma$, $\Gamma_L^\downarrow(0) = \Gamma_R^\uparrow(0) = \gamma$. У першому порядку за малим безрозмірним параметром $\alpha/\lambda \sim (J/\hbar\omega)(x_0/\lambda)^2 \ll 1$ рівняння (2.53) зводиться до лінійного рівняння. Для залежної від часу координати зсуву квантової точки $x_1 = x_1(t)$ це рівняння наступне:

$$\frac{d^2x_1}{dt^2} + x_1 = -\frac{\alpha}{\lambda} \int_{-\infty}^t dt' \langle e_0 | e^{\hat{A}_2(t-t')} | e_2 \rangle x_1(t'). \quad (2.54)$$

Тут матриця \hat{A}_2 має вигляд

$$\hat{A}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\Gamma_+ & -\Gamma_- & -2h \\ \Gamma_- & -3\Gamma_+ & 0 \\ 2h & 0 & -\Gamma_+ \end{pmatrix}, \quad (2.55)$$

$\Gamma_\pm = \Gamma \pm \gamma$, $|e_0\rangle = (1, 0, 0)^T$ і компоненти вектора $|e_2\rangle$ наступні:

$$e_{21} = -\frac{2\Gamma_-}{\Delta_2}(\Gamma_+^2 - \Gamma_-^2), \quad (2.56)$$

$$e_{22} = -\frac{2\Gamma_+}{\Delta_2}(\Gamma_+^2 - \Gamma_-^2 + 4h^2), \quad (2.57)$$

$$e_{23} = -\frac{4h\Gamma_+\Gamma_-}{\Delta_2}, \quad (2.58)$$

де $\Delta_2 = 3\Gamma_+^2 + \Gamma_-^2 + 12h^2$.

Шатлівська нестійкість виникає, коли розв'язок рівняння (2.54), $x_1(t) \sim \exp(i\Omega_2 t)$, який осцилює, стає нестабільним, тобто коли $\text{Im}\Omega_2 < 0$. Малість правої частини рівняння (2.54) дозволяє отримати уявну частину Ω_2 з використанням теорії збурень. Величини параметрів Γ_+ , Γ_- і h , для яких $\text{Im}\Omega_2 < 0$, що відповідає шатлівському режиму електронного транспорту, задовольняють нерівності:

$$h^4 + C_{22}h^2 + C_{20} < 0, \quad (2.59)$$

де

$$C_{22} = -3(\Gamma_+^2 + 1) - \frac{\Gamma_+^2 - \Gamma_-^2}{8\Gamma_+^2}(5\Gamma_+^2 + 4), \quad (2.60)$$

$$C_{20} = \frac{(\Gamma_+^2 - \Gamma_-^2)(\Gamma_+^2 + 4)}{8\Gamma_+^2} \left(\Gamma_+^2 + 1 + \frac{\Gamma_+^2 - \Gamma_-^2}{4} \right). \quad (2.61)$$

Зауважимо, що за відсутності зовнішнього магнітного поля наноелектромеханічний зв'язок призводить до додаткової дисипації в механічній підсистемі (оскільки коефіцієнт $C_{20} > 0$).

З нерівності (2.59), яка є біквратною за магнітним полем (h), очевидно, що шатлівська нестійкість існує в скінченному інтервалі магнітних полів, $h_{\min} < h < h_{\max}$. Проаналізуємо нерівність (2.59) у двох граничних випадках, (i) $\Gamma \gg 1$, $1 - \eta \ll 1$ і (ii) $\Gamma \ll 1$, $1 - \eta \ll 1$.

Зауважимо, що в випадку слабкої поляризації, $\eta \rightarrow 0$, магнітні сили малі, $J \rightarrow 0$, і шатлювання електронів підтримується кулонівськими силами. Цей випадок розглянуто в підрозділі 2.1, де було показано, що в випадку слабкої

поляризації магнітне поле перестає впливати на одноелектронне шатлювання. Зазначимо, що обмінні сили мають тунельну природу, тому є короткодійними, на відміну від кулонівських сил. Якщо електроди поляризовані за спіном і щілина між електродами має достатньо малі розміри (як у випадку з молекулярним транзистором), магнітні сили потрібно враховувати поряд з електричними. Ми вводимо кулонівські та обмінні сили як два незалежних параметра і вивчаємо окремо нестійкість на основі кулонівських сил (електричний шатл, підрозділ 2.1) і окремо нестійкість на основі магнітних сил (магнітний шатл, цей підрозділ).

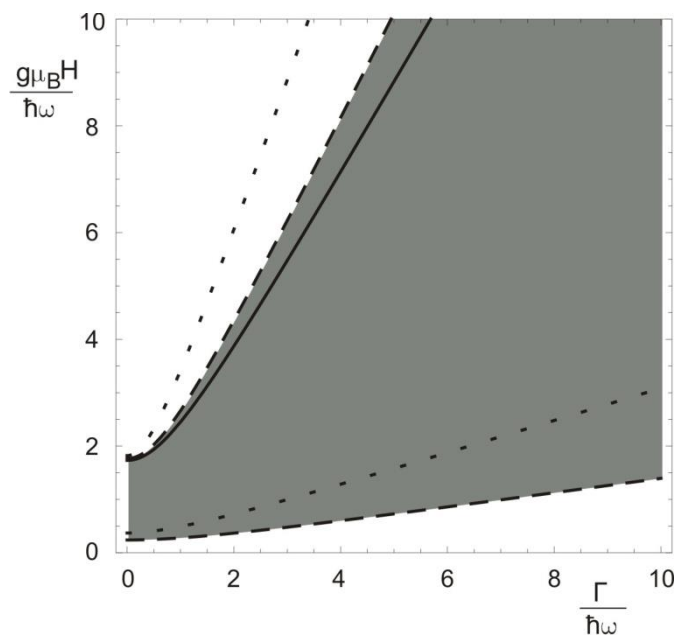


Рис. 2.4. Верхнє критичне магнітне поле (верхній набір кривих) і нижнє критичне магнітне поле (нижній набір кривих) для режиму шатлівського транспорту як функція нормованої на вібронну енергію ширини рівня $\Gamma / (\hbar\omega)$ для різних значень спінової поляризації η . Суцільні криві відповідають значенню $\eta=1$ (стовідсоткова спінова поляризація, тут нижня крива співпадає з віссю абсцис), пунктирні криві побудовані для $\eta=0.8$ і короткопунктирні – для $\eta=0.3$. Шатлівський режим відповідає області між нижнім і верхнім критичними полями (ця область затемнена для $\eta=0.8$), а зовнішність цієї області – вібронний режим.

В адіабатичному режимі, (i), знаходимо, повертаючись до розмірних параметрів, що область шатлівської нестійкості визначається подвійною нерівністю:

$$\frac{\Gamma}{2} \sqrt{\frac{1-\eta}{3}} < g\mu_B H < \sqrt{3}\Gamma. \quad (2.62)$$

В антиадіабатичному режимі, (ii), критичні магнітні поля визначаються вібронною енергією $\hbar\omega$, а не шириною рівня Γ , а саме

$$\hbar\omega \sqrt{\frac{1-\eta}{3}} < g\mu_B H < \sqrt{3}\hbar\omega. \quad (2.63)$$

У загальному випадку область шатлівської нестійкості в параметрах Γ , H показана на рис. 2.4 для різних ступенів спінової поляризації. Для даної тунельної ширини, нормованої на вібронну енергію, $\Gamma/(\hbar\omega)$, інтервал магнітних полів, що відповідає області шатлівської нестійкості, зі зменшенням ступеня поляризації зсувається в область більш високих полів. Верхнє критичне поле для високих ступенів спінової поляризації, $\eta \rightarrow 1$, лінійно залежить від η :

$$g\mu_B H_{\max} \sim \sqrt{3[\Gamma^2 + (\hbar\omega)^2]} [1 + K(1-\eta)], \quad (2.64)$$

де $K \sim 1$ – додатна стала.

Залежність нижнього критичного магнітного поля від η слабша. У антиадіабатичному режимі маємо

$$g\mu_B H_{\min} \sim \hbar\omega \sqrt{1-\eta}, \quad \Gamma \ll \hbar\omega; \quad (2.65)$$

як наслідок, H_{\min} швидко насичується на постійне значення порядку $\hbar\omega/(g\mu_B)$ зі зменшенням ступеня спінової поляризації (див. рис. 2.5, короткопунктирна крива). У адіабатичному режимі, $\Gamma \gg \hbar\omega$, нижнє критичне магнітне поле лінійно спадає із зростанням спінової поляризації, виключаючи близьку околицю повної спінової поляризації, де $H_{\min} \propto \sqrt{1-\eta}$ (порівняйте з суцільною кривою на рис. 2.5).

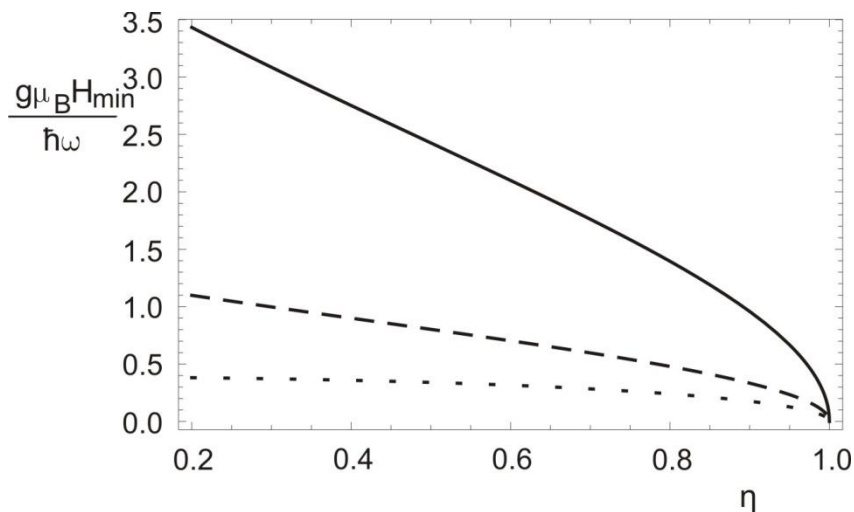


Рис. 2.5. Залежність нижнього критичного магнітного поля H_{\min} , яке відокремлює вібронний режим ($H < H_{\min}$) від режиму шатлівського транспорту ($H > H_{\min}$; порівняйте з рис. 2.4) від поляризації η для різних значень нормованої ширини рівня $\Gamma / (\hbar\omega)$ (суцільна крива: $\Gamma / (\hbar\omega) = 10$, пунктирна крива: $\Gamma / (\hbar\omega) = 3$, короткопунктирна крива: $\Gamma / (\hbar\omega) = 0.1$).

Поява верхнього та нижнього критичних магнітних полів має просте фізичне пояснення. Якщо $\mu_B H$ – найбільший енергетичний параметр у задачі, $\mu_B H \gg \Gamma$ і $\mu_B H \gg \hbar\omega$, то швидкі перевороти спіну електрона на точці в перпендикулярному зовнішньому магнітному полі призводять до того, що середній спін дорівнює нулю і магнітна шатлівська нестійкість зникає. Для оцінки верхнього поля потрібно порівняти характерну частоту прецесії спіну, $\mu_B H_{\max} / \hbar$, з частотою тунельних переходів Γ / \hbar або частотою коливань ω . Тому $\mu_B H_{\max} \sim \max(\Gamma, \hbar\omega)$. Нижнє критичне магнітне поле можна легко оцінити для високого ступеня спінової поляризації, $1 - \eta \ll 1$. У цьому випадку потрібно порівняти середній час між переворотами спінів, τ_f , обумовлений постійним магнітним полем H у присутності електронного тунельного зв'язку Γ , з характерним часом життя електронів на точці зі спіном, протилежним за напрямком до основного (minority spin electrons), $\sim \hbar / \gamma$. Частота переворотів спіну ν_f в слабких магнітних полях H може бути оцінена в теорії збурень, і

результатом є $\hbar \nu_f \sim (\mu_B H)^2 / \max(\Gamma, \hbar \omega)$. Тому нижнє магнітне поле сильно чутливе до спінової поляризації,

$$\mu_B H_{\min} \sim \sqrt{\Gamma \gamma} \max(\Gamma, \hbar \omega) \sim \sqrt{1 - \eta} \max(\Gamma, \hbar \omega), \quad (2.66)$$

і зникає для стовідсотково поляризованих електронів ($\eta = 1$).

Виникнення при неповній спіновій поляризації нижнього критичного магнітного поля можна пояснити словами таким чином. При достатньо малих полях електрон тунелює з квантової точки в стік раніше, ніж перевернеться його спін. Оскільки сили відштовхування, необхідні для розвитку шатлівської нестійкості, виникають при перевероті спіна, в малих полях шатлу немає.

Оцінимо максимальний інкремент експоненціального зростання, $r_m = -\text{Im}\Omega_2(H_{\text{opt}})$, амплітуди коливань квантової точки в шатлівському режимі. В адиабатичному режимі, $\Gamma \gg \hbar \omega$, знаходимо, що $g \mu_B H_{\text{opt}} \approx 0.4\Gamma$ і що

$$r_m \approx C \frac{\omega J}{\Gamma} \left(\frac{x_0}{\lambda} \right)^2, \quad (2.67)$$

де $C \sim 0.1$ – малий числовий множник. У випадку $\Gamma \ll \hbar \omega$, який нас зараз цікавить, максимальний інкремент відповідає значенню поля $g \mu_B H_{\text{opt}} \approx \hbar \omega$ і дорівнює

$$r_m \approx \frac{\Gamma}{\hbar} \frac{J}{\hbar \omega} \left(\frac{x_0}{\lambda} \right)^2, \quad (2.68)$$

де ми опускаємо числовий множник порядку одиниці.

У присутності дисипації в механічній підсистемі, яку можна описати, додаючи член $\gamma_0(dx/dt)$ з феноменологічним тертям до рівняння руху (2.53) ($\gamma_0 = \omega/Q$, де Q – добротність), режим шатлювання виникає, коли $r_m > \omega/Q$. Тому шатлювання електронів у транзисторі на основі молекули фулерену з магнітними електродами може бути реалізоване, якщо добротність Q механічного резонатора задовольняє нерівності:

$$Q > Q_{\text{opt}} = \frac{(\hbar \omega)^2}{J \Gamma} \left(\frac{\lambda}{x_0} \right)^2. \quad (2.69)$$

Для експериментального зразка з роботи [35], де спостерігалися коливання молекули фулерену, величина $(\lambda/x_0)^2 \approx 10^3$, а $\Gamma \ll \hbar\omega \sim 5 \text{ meV}$ (можна оцінити $\Gamma \sim 0.1 - 0.5 \text{ meV}$ з максимального струму, який був виміряний у [35]). У транзисторі на основі молекули фулерену з магнітними (нікелевими) електродами $J \sim \Gamma \sim 10 \text{ meV}$ (див. [29]). З формули (2.69) можна оцінити, що необхідна добротність $Q \geq 10^3 - 10^4$. Однак оптимальне зовнішнє магнітне поле в цьому випадку занадто високе: $H_{\text{opt}} \approx 50 \text{ T}$. Тому оцінимо Q для магнітних полів поблизу нижнього критичного магнітного поля $H \geq H_{\text{min}}$, де магнітні поля для дуже високого ступеню поляризації ($\sim 99\%$) можуть бути порядку декількох тесла. У цьому випадку ($\hbar\omega \gg \Gamma$, $1 - \eta \ll 1$)

$$r(\eta) \approx \omega \frac{J\Gamma(1-\eta)}{\Gamma^2 + 4(1-\eta)(\hbar\omega)^2} \left(\frac{\lambda}{x_0} \right)^2. \quad (2.70)$$

Припускаючи, що $\Gamma \approx \sqrt{1-\eta} \hbar\omega$, знаходимо: $Q \sim Q_{\text{opt}} / (1-\eta)$.

Висновки

У цьому розділі було показано, як такий додатковий параметр як ступінь поляризації впливає на область шатлівської нестійкості. У шатлівській системі, в якій нестійкість розвивається завдяки електричним силам (електричний шатл), часткова поляризація знімає спінову блокаду струму та відкриває додатковий канал транспорту – без перевероту спіна. З цим каналом пов'язана наявність (в режимі кулонівської блокади) граничного ступеня поляризації, нижче якого не можна, змінюючи магнітне поле, переходити з вібронної області в шатлівську та навпаки. Проте при достатньо високій спіновій поляризації (вище ніж 64%) є можливість контролювати шатлівську нестійкість за допомогою зовнішнього магнітного поля.

У шатлівській системі, в якій за розвиток нестійкості відповідають обмінні сили (магнітний шатл), неповна поляризація призводить до появи якісно нового

ефекту – нижнього критичного магнітного поля, що відокремлює вібронну область від шатлівської. Наведене фізичне пояснення виникнення нижнього поля, яке зникає, коли спінова поляризація стає стовідсотковою.

РОЗДІЛ 3

ТЕРМОІНДУКТОВАНИЙ ОДНОЕЛЕКТРОННИЙ ШАТЛ

Електричний шатл, у якому за розвиток нестійкості відповідають кулонівські сили між зарядом на квантовій точці та електродами, в принципі неможливо створити без електричної напруги, яка викликає появу електричних сил. Що стосується магнітного шатлу, то природа сил (обмінних) і джерела енергії (різниця потенціалів) є різною. Тому виникає питання: чи можна використовувати в магнітному шатлі в якості джерела енергії різницю температур між електродами, а не електричну напругу. У цьому розділі дається ствердна відповідь на це питання. На прикладі простої моделі з повністю поляризованими за спіном берегами та рівною нулю температурою в правому електроді знайдена область нестійкості одноелектронного термоіндуктованого магнітного шатлу.

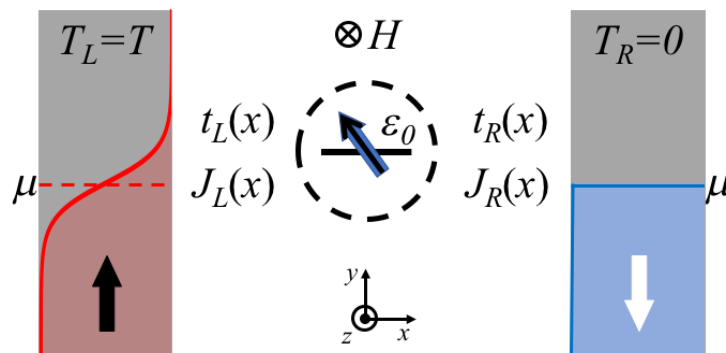


Рис. 3.1. Ескіз моделі наномагнітного пристрою, що вивчається: рухома з одним виродженням за спіном рівнем (з енергією ε_0) квантова точка тунельно зв'язана з двома повністю поляризованими за спіном електродами. Електроди підтримуються при одному хімічному потенціалі μ , але при різних температурах $T_L = T$ і $T_R = 0$. На рисунку $t_L(x), t_R(x)$ і $J_L(x), J_R(x)$ – це тунельні амплітуди та обмінні енергії, що залежать від положення квантової точки. Зовнішнє магнітне поле H викликає перевероти між електронними станами зі спіном вгору та спіном вниз на точці.

3.1. Модель термоіндуктованого одноелектронного шатлу.

Модель термоіндуктованого магнітного шатлу зображена на рис. 3.1. Однорівнева квантова точка тунельно зв'язана з двома ферромагнітними електродами (витоком і стоком), повністю поляризованими за спіном у протилежних напрямках. Зовнішнє магнітне поле в щілині між витоком і стоком спрямоване перпендикулярно до намагніченості електродів. Припускаємо, що електроди підтримуються при однакових хімічних потенціалах ($\mu_L = \mu_R \equiv \mu$), але при різних температурах $T_L \neq T_R$, отже в системі є градієнт температур $\delta T = T_L - T_R$. Спеціальна конструкція електродів (придатна для вимірювань теплового транспорту, як у роботі [72]) дозволяє підтримувати різницю температур між електродами, залишаючи рівними їх хімічні потенціали. Для спрощення розрахунків припускаємо в подальшому, що $T_L = T$ і $T_R = 0$. Звідси випливає, що в нашій системі різниця температур $\delta T = T$ і середня температура – залежні одна від іншої величини. Як і в розділі 2, гамільтоніан системи складається з чотирьох доданків (гамільтоніани електродів, квантової точки, вібронний і тунельний гамільтоніани). Гамільтоніан електродів

$$\hat{H}_l = \sum_{k,j} \varepsilon_{k,j} a_{k,j}^\dagger a_{k,j} \quad (3.1)$$

відрізняється від (2.1) лише тим, що формула (2.1) враховує неповну поляризацію електродів, а в формулі (3.1), яка відповідає повній поляризації, спіновий індекс співпадає з індексом електрода: $j = L = \uparrow$ і $j = R = \downarrow$. Гамільтоніан квантової точки описується формулою

$$\hat{H}_d = \left(\varepsilon_0 - \frac{J(x)}{2} \right) c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} + \left(\varepsilon_0 + \frac{J(x)}{2} \right) c_{\downarrow}^\dagger c_{\downarrow} - \frac{g \mu_B H}{2} (c_{\uparrow}^\dagger c_{\downarrow} + c_{\downarrow}^\dagger c_{\uparrow}) + U c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} c_{\downarrow}^\dagger c_{\downarrow}, \quad (3.2)$$

а вібронний гамільтоніан – формулою

$$\hat{H}_v = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}; \quad (3.3)$$

у подальшому вважатимемо координату та імпульс класичними залежними від часу змінними. Тунельний гамільтоніан описується формулою:

$$\hat{H}_{tun} = t_L(x) \sum_k c_{\uparrow}^{\dagger} a_{k,L} + t_R(x) \sum_k c_{\downarrow}^{\dagger} a_{k,R} + \text{H.c.}, \quad (3.4)$$

аналогічною формулі (2.4).

Як і в розділі 2, квантовий опис електронної підсистеми базується на припущенні, що матриця густини системи може бути факторизована:

$$\hat{\sigma}(t) \approx \hat{\rho}(t) \otimes \hat{\sigma}_l, \quad (3.5)$$

де $\hat{\sigma}_l$ – рівноважна матриця густини електродів. Це припущення завжди справедливе для $T \gg \Gamma$ (Γ – енергія тунельного зв'язку, або ширина рівня; в розділі 2 ми називали цю величину частотою тунельних переходів в енергетичних одиницях), коли послідовне електронне тунелювання – головний процес електронного транспорту. У формулі (3.5) $\hat{\rho}(t)$ – матриця густини квантової точки, що взаємодіє з магнітними електродами.

У загальному випадку потрібно враховувати неявну залежність від часу як незбуреного гамільтоніану $\hat{H}_0 = \hat{H}_l + \hat{H}_d + \hat{H}_v$, так і тунельного гамільтоніану, \hat{H}_{tun} , у зв'язку із залежністю координати та імпульсу точки від часу, $x(t)$, $p(t)$. Тому необхідно внести зміни в виведення кінетичних рівнянь, представлене в роботі [73].

Рівняння для матриці густини (в одиницях з $\hbar = 1$)

$$\frac{\partial \hat{\sigma}(t)}{\partial t} + i \left[\hat{H}_0 + \hat{H}_{tun}, \hat{\sigma}(t) \right] = 0 \quad (3.6)$$

має формальний розв'язок

$$\hat{\sigma}(t) = \hat{\sigma}(t = -\infty) - i \int_{-\infty}^t dt' \hat{u}(t, t') \left[\hat{H}_{tun}(t'), \hat{\sigma}(t') \right] \hat{u}^{\dagger}(t, t'). \quad (3.7)$$

Тут $\hat{u}(t, t')$ – оператор еволюції незбуреного гамільтоніану, котрий виражається через оператор еволюції квантової точки $\hat{u}_d(t, t')$ наступним чином:

$$\hat{u}(t, t') = e^{-i\hat{H}_l(t-t')} \hat{u}_d(t, t'), \quad \hat{u}_d(t, t) = 1. \quad (3.8)$$

Після підстановки формул (3.5) і (3.7) у рівняння (3.6) та взяття сліду за електронними ступенями свободи електродів отримуємо інтегро-диференціальне рівняння для матриці густини квантової точки:

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} + i \left[\hat{H}_d, \hat{\rho}(t) \right] = -\text{Tr}_{leads} \int_{-\infty}^t dt' \left[\hat{H}_{tun}(t), e^{-i\hat{H}_l(t-t')} \hat{u}_d(t, t') \left[\hat{H}_{tun}(t'), \hat{\sigma}(t') \right] e^{i\hat{H}_l(t-t')} \hat{u}_d^\dagger(t, t') \right]. \quad (3.9)$$

Права частина рівняння (3.9) – це інтеграл зіткнень, $\hat{I} = \hat{I}_L + \hat{I}_R$, поява якого обумовлена взаємодією між квантовою точкою і електродами. Ядро цього інтегралу виражається через функцію $K_j(t, t')$, яку можна обчислити точно в наближенні широких зон (wide band approximation, WBA). У цьому наближенні густина станів в електродах не залежить від енергії, тоді маємо

$$K_j(t, t') = K_j(t - t') \equiv K_j(\tau) = \sum_k e^{-i\varepsilon_{k,j}\tau} f(\varepsilon_{k,j}) = \frac{i\pi\nu_j T_j e^{-i\mu\tau}}{\sinh \pi(T_j\tau + i0)}. \quad (3.10)$$

У формулі (3.10) $\nu_j = \text{const}$ – густина станів, $T_j = \beta_j^{-1}$ – температура (β_j – обернена температура) в електроді j , $f(\varepsilon)$ – функція розподілу Фермі—Дірака, μ – хімічний потенціал. Як було вже зазначено вище, ми обмежимося випадком нульової температури в правому електроді, $T_R = 0$. Тоді, використовуючи добре відому з теорії узагальнених функцій формулу

$$\frac{e^{iz}}{\tau - i0} = \begin{cases} 2i\pi\delta(\tau), & z \rightarrow \infty, \\ 0, & z \rightarrow -\infty, \end{cases} \quad (3.11)$$

знаходимо наступний вираз для інтегралу зіткнень \hat{I}_R в режимі нерезонансного тунелювання, $(\varepsilon_0 - \mu) / \Gamma_j \gg 1$:

$$\hat{I}_R = \Gamma_R(x) \left[c_\downarrow \hat{\rho}(t) c_\downarrow^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{\rho}(t), c_\downarrow^\dagger c_\downarrow \} \right], \quad (3.12)$$

де $\{ \hat{A}, \hat{B} \} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ – антикомутатор і $\Gamma_j(x) = 2\pi\nu_j t_j^2(x)$ – ширина рівня.

Зведена матриця густини $\hat{\rho}(t)$ діє в просторі Фока, яке в нашому випадку є простором скінченної розмірності одного електронного рівня на квантовій точці. Матричні елементи матриці густини такі:

$$\rho_0 = \langle 0 | \hat{\rho} | 0 \rangle, \quad \rho_\sigma = \langle \sigma | \hat{\rho} | \sigma \rangle, \quad \rho_{\sigma\sigma'} = \langle \sigma | \hat{\rho} | \sigma' \rangle, \quad \rho_2 = \langle 2 | \hat{\rho} | 2 \rangle, \quad (3.13)$$

де $|\sigma\rangle = c_\sigma^\dagger |0\rangle$, $|2\rangle = c_\uparrow^\dagger c_\downarrow^\dagger |0\rangle$, $\rho_\sigma \equiv \rho_{\sigma\sigma}$, $\sigma \neq \sigma'$. У подальшому ми обмежимося режимом кулонівської блокади, $U \gg T$. Коли ця умова виконується, подвійне заповнення квантової точки заборонене, тобто $\rho_2 = 0$.

При класичному описі коливальних ступенів свободи (дивись гамільтоніан (3.3)), рівняння Гамільтона для координати та імпульсу точки мають вигляд:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}(t) \frac{\partial \hat{H}_d}{\partial p} \right\} = \frac{p}{m}, \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\text{Tr} \left\{ \hat{\rho}(t) \frac{\partial \hat{H}_d}{\partial x} \right\} = -m\omega^2 x - \frac{\alpha}{2} (\rho_\uparrow - \rho_\downarrow). \quad (3.15)$$

Звідси випливає, що координата осцилятора задовольняє наступному інтегро-диференціальному рівнянню:

$$\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + \omega^2 x = -\frac{\alpha}{2m} (\rho_\uparrow - \rho_\downarrow), \quad (3.16)$$

де $\rho_{\uparrow,\downarrow}$ – функціонали координати, $\rho_{\uparrow,\downarrow} = \rho_{\uparrow,\downarrow}\{x(t)\}$.

3.2. Адіабатичний режим коливань квантової точки.

При обчисленні інтегралу зіткнень \hat{I}_L в адіабатичному режимі $\omega \ll \Gamma_j$ можна знехтувати залежністю координати від часу. Тоді оператор еволюції квантової точки набуває вигляду:

$$\hat{u}_d(t, t') = \exp[-i\hat{H}_d(t - t')]. \quad (3.17)$$

Після безпосередніх розрахунків ми отримуємо наступний вираз для інтегралу \hat{I}_L в рівнянні (3.9):

$$\begin{aligned} \hat{I}_L = & \frac{\Gamma_L(x)}{2} [c_\uparrow^\dagger \hat{\rho}(t) c_\uparrow + c_\uparrow \hat{\rho}(t) c_\uparrow^\dagger - \hat{\rho}(t)] + \\ & + \frac{i\Gamma_L(x)}{4} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \frac{e^{i\beta\mu\tau}}{\sinh \pi\tau} c_\uparrow e^{-i\beta\hat{H}_d\tau} [\hat{\rho}(t - \beta\tau), c_\uparrow^\dagger]_+ e^{i\beta\hat{H}_d\tau} + \right. \\ & \left. + \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \frac{e^{-i\beta\mu\tau}}{\sinh \pi\tau} c_\uparrow^\dagger e^{-i\beta\hat{H}_d\tau} [\hat{\rho}(t - \beta\tau), c_\uparrow]_+ e^{i\beta\hat{H}_d\tau} - \text{H.c.} \right\} \end{aligned} \quad (3.18)$$

(тут τ – безрозмірна змінна інтегрування, індекс L у β_L ми опустили). У формулі (3.18) під знаком інтегралів розуміємо головне значення цих інтегралів. У границі високих температур у порівнянні з шириною рівня, $\Gamma_L \ll T$ (індекс L у T_L ми надалі опускаємо), можна знехтувати ефектами запізнювання та замінити в формулі (3.18) $\hat{\rho}(t - \beta\tau)$ на $\hat{\rho}(t)$. Дійсно, використовуємо формулу Тейлора для $\hat{\rho}(t - \beta\tau)$. Оскільки $\partial\hat{\rho}/\partial t \sim \Gamma\hat{\rho}$, очевидно, що в теорії збурень за малим параметром Γ_L/T усіма членами ряду, крім $\hat{\rho}(t)$, можна знехтувати.

З формул (3.9), (3.12) і (3.18) знаходимо наступну систему рівнянь для матричних елементів матриці густини (зауважимо, що гамільтоніан \hat{H}_d не є діагональним у σ -представленні, але його можна легко діагоналізувати за допомогою унітарного перетворення):

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho_0}{\partial t} = & \Gamma_L(x)(1-f_+)\rho_{\uparrow} - \Gamma_L(x)f_+\rho_0 + \Gamma_R(x)\rho_{\downarrow} - \\ & - \Upsilon_1(x)(\rho_0 + \rho_{\uparrow}) - \Upsilon_2(x)(\rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\uparrow\downarrow}^*), \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho_{\uparrow}}{\partial t} = & -\Gamma_L(x)(1-f_+)\rho_{\uparrow} - i\Omega_H(\rho_{\uparrow\downarrow} - \rho_{\uparrow\downarrow}^*) + \Gamma_L(x)f_+\rho_0 + \\ & + \Upsilon_1(x)(\rho_0 + \rho_{\uparrow}) + \Upsilon_2(x)(\rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\uparrow\downarrow}^*), \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial\rho_{\downarrow}}{\partial t} = -\Gamma_R(x)\rho_{\downarrow} + i\Omega_H(\rho_{\uparrow\downarrow} - \rho_{\uparrow\downarrow}^*), \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho_{\uparrow\downarrow}}{\partial t} = & iJ(x)\rho_{\uparrow\downarrow} - i\Omega_H(\rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}) - \frac{\Gamma_L(x)}{2}(1-f_+)\rho_{\uparrow\downarrow} - \frac{\Gamma_R(x)}{2}\rho_{\uparrow\downarrow} - \\ & - \frac{\Upsilon_1(x)}{2}\rho_{\uparrow\downarrow} + \Upsilon_2(x)(\rho_0 + \rho_{\uparrow}), \end{aligned} \quad (3.22)$$

де $\Omega_H = g\mu_B H / 2$ і

$$\Upsilon_1(x) = f_- \frac{J(x)\Gamma_L(x)}{\sqrt{J^2(x) + 4\Omega_H^2}}, \quad (3.23)$$

$$\Upsilon_2(x) = f_- \frac{\Omega_H\Gamma_L(x)}{\sqrt{J^2(x) + 4\Omega_H^2}}, \quad (3.24)$$

$$f_{\pm} = \frac{f(E_{-}) \pm f(E_{+})}{2}, \quad (3.25)$$

$$E_{\pm} = \varepsilon_0 \pm \frac{\sqrt{J^2(x) + 4\Omega_H^2}}{2}. \quad (3.26)$$

Для спрощення розрахунків ми розглядаємо симетричний тунельний контакт, $J_0 = 0$ (див. формулу (2.52)), $\Gamma_L(0) = \Gamma_R(0) = \Gamma$. Нам потрібно знайти умову, за якої стаціонарне положення квантової точки ($x = 0$) є нестійким. У цьому випадку достатньо розглянути малі відхилення $x/\lambda \ll 1$ і лінеаризувати ширину рівня як функцію координати: $\Gamma_j(x) \simeq \Gamma(1 \mp 2x/\lambda)$.

Спочатку ми розв'язуємо задачу в високотемпературній границі, $\beta \rightarrow 0$ ($f_- = 0$, $f_+ = 1/2$). Зручно переписати систему рівнянь (3.19)—(3.22) у нових змінних:

$$Q_{1,2} = \rho_{\uparrow} \pm \rho_{\downarrow}, \quad Q_3 = -i(\rho_{\uparrow\downarrow} - \rho_{\uparrow\downarrow}^*), \quad Q_4 = \rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\uparrow\downarrow}^*. \quad (3.27)$$

У подальшому будемо вважати безрозмірний параметр $\tilde{\alpha} = \alpha / (m\lambda\omega^2)$ малим, $\tilde{\alpha} \ll 1$. Оскільки ми вивчаємо малі коливання точки, можна розв'язувати систему рівнянь (3.19)—(3.22) з використанням теорії збурень, $|Q\rangle = |Q^{(0)}\rangle + |Q^{(1)}\rangle + \dots$, де $|Q\rangle = (Q_1, Q_2, Q_3)^T$ (зауважимо, що рівняння для Q_4 відокремлюється від інших рівнянь і в подальшому нам не потрібне). У нульовому порядку теорії збурень маємо

$$\langle Q^{(0)} | = \frac{1}{2\Delta_3} \left(\frac{3\Gamma^2}{4} + 4\Omega_H^2, \frac{3\Gamma^2}{4}, -2\Gamma\Omega_H \right), \quad \Delta_3 = \frac{3\Gamma^2}{4} + 5\Omega_H^2. \quad (3.28)$$

Для першої поправки $|Q^{(1)}\rangle$ маємо наступне рівняння:

$$\frac{\partial |Q^{(1)}\rangle}{\partial t} = \hat{A}_3 |Q^{(1)}\rangle + \frac{2\Gamma}{\lambda} x(t) |e_3\rangle, \quad (3.29)$$

де

$$\hat{A}_3 = -\frac{\Gamma}{4} \begin{pmatrix} 5 & -1 & 0 \\ 1 & 3 & -8\Omega_H/\Gamma \\ 0 & 8\Omega_H/\Gamma & 3 \end{pmatrix}, \quad |e_3\rangle = \frac{\Omega_H}{4\Delta_3} \begin{pmatrix} -8\Omega_H \\ 0 \\ \Gamma \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

Якщо підставити розв'язок рівняння (3.29) в праву частину рівняння (3.16), то отримуємо рівняння для координати одноелектронного шатлу:

$$\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + \omega^2 x = -\frac{\alpha\Gamma}{\lambda m} \int_0^\infty d\tau \langle e_{03} | e^{\hat{A}_3 \tau} | e_3 \rangle x(t-\tau), \quad (3.31)$$

де $\langle e_{03} | = (0,1,0)$.

В адиабатичному режимі $\omega \ll \Gamma$ можна розкласти $x(t-\tau) \simeq x(t) - \tau dx(t)/dt$. Ми бачимо, що електромеханічний зв'язок дає в механічному рівнянні (мале) додатне перенормування частоти коливань ω і появу загасання (або накачки) $\gamma_d dx/dt$, де коефіцієнт

$$\gamma_d(\Gamma, \Omega_H) = -\frac{\alpha\Gamma}{\lambda m} \int_0^\infty d\tau \tau \langle e_{03} | e^{\hat{A}_3 \tau} | e_3 \rangle = \frac{\hbar\alpha\Gamma\Omega_H^2}{\lambda m\Delta_3^3} \left(\Omega_H^2 - \frac{7\Gamma^2}{4} \right) \quad (3.32)$$

(ми повернулися до розмірних величин в останній формулі). З виразу (3.32) видно, що шатлівська нестійкість виникає в малих магнітних полях:

$$\left| \frac{g\mu_B H}{2} \right| < \frac{g\mu_B H_{c2}}{2} = \frac{\sqrt{7}}{2} \Gamma. \quad (3.33)$$

Зауважимо, що інкремент $r(\Gamma, \Omega_H) = -\gamma_d(\Gamma, \Omega_H)/2$ експоненціального зростання амплітуди коливань шатлу в граничному випадку $\omega \ll \Gamma$ не залежить від частоти ω коливань квантової точки.

Для ненульових температур розрахунки подібні до вищенаведених (лише більш громіздкі). Робимо таку заміну:

$$Q'_1 = \rho_0; \quad Q'_2 = \rho_\uparrow - \rho_\downarrow; \quad Q'_3 = i(\rho_{\uparrow\downarrow} - \rho_{\uparrow\downarrow}^*); \quad Q'_4 = \rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\uparrow\downarrow}^*. \quad (3.34)$$

Для простоти ми обмежимося випадком достатньо великих магнітних полів, $|\Omega_H| \gg \alpha\lambda$. За цієї умови отримуємо наступний вираз для коефіцієнту загасання (накачки):

$$\gamma_T(\Gamma, \Omega_H) = -\frac{\alpha\Gamma}{2\lambda m} \int_0^\infty d\tau \tau \langle e_{0T} | e^{\hat{A}_T \tau} | e_T \rangle, \quad (3.35)$$

де $\langle e_{0T} | = (0,1,0,0)$ і

$$\hat{A}_T = -\frac{\Gamma}{2} \begin{pmatrix} 2+f_+ & f_+ & 0 & f_- \\ -f_+ & 2-f_+ & 4\Omega_H/\Gamma & -f_- \\ 0 & -4\Omega_H/\Gamma & 2-f_+ & 0 \\ -f_- & -f_- & 0 & 2-f_+ \end{pmatrix}, \quad (3.36)$$

$$|e_T\rangle = \frac{4}{\Delta_T} \begin{pmatrix} -4\Omega_H^2 [f_+(2-f_+) + f_-^2] \\ 0 \\ \Gamma\Omega_H [f_+(2-f_+) + f_-^2] f_+ \\ [\Gamma^2(2-f_+) + 8\Omega_H^2] f_- \end{pmatrix}, \quad (3.37)$$

$$\Delta_T = \Gamma^2(2-f_+)^2 + 4\Omega_H^2(4-f_+^2 + f_-^2). \quad (3.38)$$

Умова шатлівської нестійкості – це наступна нерівність:

$$C_{T4}(\Omega_H/\Gamma)^4 - C_{T2}(\Omega_H/\Gamma)^2 + C_{T0} < 0, \quad (3.39)$$

де

$$C_{T4} = 2f_+^3(2-f_+)^3 - f_+f_-^2(2-f_+)^2(4-5f_+) - 4f_-^4(2-f_+)(1-f_+) - f_-^4(4-f_-^2), \quad (3.40)$$

$$C_{T2} = \frac{2-f_+}{2} [f_+^2(2-f_+)^2(4-f_+) - f_-^2(2-f_+)(4-f_+)(1-2f_+) + f_-^4(5-f_+)], \quad (3.41)$$

$$C_{T0} = \frac{(2-f_+)^3(4-f_+)f_-^2}{16}. \quad (3.42)$$

Як наслідок, область шатлівської нестійкості визначається наступною (трансцендентною) нерівністю:

$$\Omega_{Hc1}^2 < \Omega_H^2 < \Omega_{Hc2}^2, \quad (3.43)$$

де

$$\Omega_{Hc1(c2)}^2 = \Gamma^2 \frac{C_{T2} \mp \sqrt{C_{T2}^2 - 4C_{T4}C_{T0}}}{2C_{T4}}. \quad (3.44)$$

3.3. Область нестійкості. Залежне від температури тертя та нижнє критичне магнітне поле.

Нижнє критичне магнітне поле лежить в області параметрів, в якій не можна застосовувати наші розрахунки. (Ми нехтуємо амплітудою коливань шатлу

порівняно з Ω_H / α .) Існування нижнього критичного магнітного поля легко пояснити з фізичних міркувань. Навіть за відсутності зовнішнього магнітного поля (та за відсутності феноменологічного тертя) при ненульовій температурі в механічній підсистемі є дисипація, яка викликана обмінними силами та тунелюванням електронів назад у гарячий електрод. Відповідний коефіцієнт тертя $\gamma_j(T)$ може бути оцінений з простих фізичних міркувань. Це тертя виникає завдяки ненульовій роботі, яка виконується обмінною рушійною силою вздовж замкненої траєкторії осцилюючої квантової точки, і тому воно пропорційне похідній за координатою функції розподілу Фермі—Дірака $f[\varepsilon_\uparrow(x) - \mu]$. Оскільки обмінна сила ненульова тільки тоді, коли електронний рівень зайнятий, тертя залежить від енергії зв'язку Γ між квантовою точкою та електродом. Якщо взяти до уваги ефекти запізнювання, цей внесок у тертя може бути представлений множником $\Gamma / [\Gamma^2 + (\hbar\omega)^2]$. У результаті коефіцієнт тертя набуває вигляду:

$$r_j(T) \sim -\frac{\hbar\alpha^2}{m} \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + (\hbar\omega)^2} \frac{1}{T} \cosh^{-2}\left(\frac{\delta\varepsilon}{2T}\right), \quad (3.45)$$

де $\delta\varepsilon = \varepsilon_0 - \mu$. Нагадаємо, що коефіцієнт тертя пов'язаний з інкрементом формулою $\gamma_j(T) = -2r_j(T)$. Обчислення декременту коливань шатлу за відсутності зовнішнього магнітного поля ($\Omega_H = 0$) з використанням формул (3.16), (3.19)—(3.26) дає формулу (3.45) з числовим множником 1/32. Бачимо, що в високотемпературній границі $T \gg \delta\varepsilon$ тертя зменшується із зростанням температури. При температурах $\Gamma \ll T \ll \delta\varepsilon$ дисипація експоненціально мала, $r_j \propto \exp(-\delta\varepsilon / T)$. Наші обчислення не є справедливими при температурах $T \ll \Gamma$, коли має місце резонансне тунелювання. Однак з фізичних міркувань очевидно, що дисипація зникає при $T \rightarrow 0$. Немонотонна температурна залежність величини $r_j(T)$ – специфічна риса даної дисипації, яка є максимальною при $T \sim \Gamma \sim \delta\varepsilon$ і прямує до нуля в границі як низьких, так і високих температур. Зазначимо, що феноменологічний коефіцієнт тертя γ_0 , який виникає в рівнянні для середньої

координати з дисипативних доданків у рівнянні Ліндблада [74], як відомо (див., наприклад, [75]), не залежить від температури.

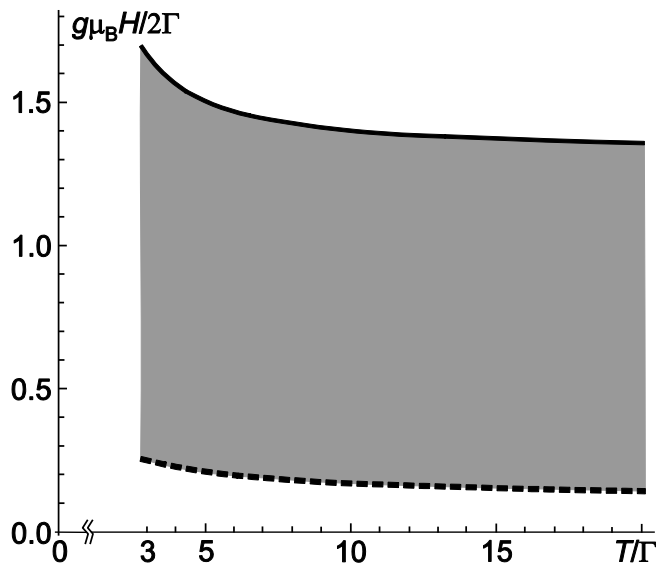


Рис 3.2. Залежність нижнього (H_{c1} , пунктирна крива) та верхнього (H_{c2} , суцільна крива) критичних магнітних полів від нормованої температури T/Γ для $\delta\varepsilon/\Gamma = 2$ в адіабатичному режимі, $\omega \ll \Gamma/\hbar$. Ці поля визначають границю між шатлівським режимом ($H_{c1} < H < H_{c2}$, темна область) і вібронним режимом (зовні цього інтервалу). При $T \rightarrow \infty$ нижнє критичне поле прямує до константи, яка визначається феноменологічним коефіцієнтом тертя γ_0 .

Шатлівська нестійкість виникає, коли інкремент експоненціального зростання амплітуди коливань точки перевищує декремент $\gamma_j(T)/2$. Для малих магнітних полів, $\Omega_H \rightarrow 0$, інкремент дорівнює

$$r(\Gamma, \Omega_H \rightarrow 0) \simeq \frac{56\hbar\alpha}{3m\lambda\Gamma^3} \Omega_H^2. \quad (3.46)$$

Порівнюючи формули (3.45) і (3.46), можна оцінити нижнє критичне магнітне поле в високотемпературній границі як

$$\Omega_{Hc1} \simeq 0.1 \sqrt{\frac{\alpha\lambda}{T}} \Gamma. \quad (3.47)$$

Феноменологічним тертям $\gamma_0 = \omega/Q$ можна знехтувати в порівнянні з оптимальним внутрішнім коефіцієнтом тертя $\gamma_j(T)$, якщо добротність Q механічної підсистеми достатньо велика. Для експериментальних даних з робіт [28, 30], де вивчалися засновані на молекулі фулерену молекулярні транзистори,

$\Gamma \sim \hbar\omega \sim 1 \text{ meV}$, $J_L(0) \sim J_R(0) \sim 10 \text{ meV}$, ми оцінюємо, що мінімальна необхідна добротність має бути $Q_{min} \sim 10^2 \div 10^3$.

Область шатлівської нестійкості (темна область на рис. 3.2) побудована в змінних T/Γ , $g\mu_B H/(2\Gamma)$ для $\delta\varepsilon/\Gamma=2$. Область шатлівської нестійкості зображена лише для $T \geq \Gamma$, тому що ми розв'язували задачу в теорії збурень за малим параметром $\beta\Gamma \ll 1$. Хоча наші розрахунки не є справедливими при низьких температурах, при $T \rightarrow 0$ інкремент $r(\Gamma, \Omega_H)$ поводить себе як $r \sim \exp[-2\beta(\delta\varepsilon - \Omega_H)]$. Експоненціальна малість $r_T(\Omega_H)$ при $T \rightarrow 0$ є правильним з фізичної точки зору результатом. У високотемпературній границі, $T \rightarrow \infty$, ми повертаємося до формули (3.33) для H_{c2} . Залишаючи наступний член при розкладі за малим параметром $\beta\delta\varepsilon$, отримуємо таку асимптотичну поведінку критичного магнітного поля при високих температурах:

$$\frac{g\mu_B H_{c2}}{2} \simeq \frac{\sqrt{7}}{2} \left[1 + \frac{2}{7} \frac{\delta\varepsilon}{T} \right] \Gamma. \quad (3.48)$$

3.4. Шатлівська нестійкість при високих частотах.

У адіабатичному режимі ($\omega \ll \Gamma$) ми використали оператор еволюції квантової точки, $\hat{u}_d(t, t')$, в формі (3.17). Однак критерій справедливості виразу для оператора еволюції в цій формі для магнітного шатлу не є еквівалентним умові $\omega \ll \Gamma$. Аналіз показує, що критерій справедливості формули (3.17) наступний ($\Omega_H, \Gamma \neq 0$):

$$\frac{\omega}{\Gamma} \frac{\alpha\lambda\Omega_H}{\Omega_H^2 + (\alpha\lambda)^2} \ll 1. \quad (3.49)$$

Тому в границі $\alpha\lambda/\Omega_H \ll 1$ відношення ω/Γ може мати великі значення ($\omega/\Gamma \geq 1$), і це не порушує адіабатичності механічного руху.

Крім цього, ми вважаємо параметр $\tilde{\alpha} = \alpha/(m\lambda\omega^2)$ малим, $\tilde{\alpha} \ll 1$. Беручи до уваги обидві нерівності, отримуємо верхню границю частот

$$\omega \ll \omega_m = \left[\frac{\Omega_H \Gamma}{m\lambda^2} \right]^{1/3}, \quad (3.50)$$

при яких оператор еволюції можна розглядати в формі, що відповідає адіабатичному руху.

Коли нерівності (3.49), (3.50) виконуються, можна використати для аналізу поведінки системи при високих частотах систему рівнянь (3.19) – (3.22). При частотах, вищих ніж Γ , область шатлівської нестійкості визначається нерівністю:

$$|\Omega_H|/\omega < \tilde{C}(\Omega_H, T), \quad (3.51)$$

де

$$\tilde{C}(\Omega_H, T) = \sqrt{\frac{(2-f_+)(4-f_+)(2f_+^2-f_-^2)+f_-^2(2f_+-f_-^2)}{4(f_+^2-f_-^2)[2f_+(2-f_+)+f_-^2]}}. \quad (3.52)$$

(У формулах (3.51) – (3.52) ми вважаємо, що $\omega \gg \Gamma$.)

Область шатлівської нестійкості, побудована в змінних $T/(\hbar\omega)$, $g\mu_B H/(2\hbar\omega)$, має такий самий вигляд, як і шатлівська область при малих частотах, побудована на рис. 3.2.

Цікаво зазначити, що в границі $T \rightarrow \infty$ задача може бути вирішена точно для довільних параметрів Ω_H , Γ , ω . З фізичної точки зору границя нескінченної температури реалізується при $T \gg \max(\Gamma, \hbar\omega)$. У цій границі ядро інтегралу зіткнень у формулі (3.9) можна замінити на дельта-функцію, тоді інтегро-диференціальне рівняння для матриці густини стає локальним за часом. Дійсно, при $T \rightarrow \infty$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{T}{\sinh \pi(T\tau + i0)} = -i\delta(\tau) \quad (3.53)$$

і функція $K_L(t, t')$, яка визначає ядро інтеграла зіткнень, зводиться до $K_L(t, t') = \pi\nu_L \delta(t - t')$. Як наслідок, оператор еволюції квантової точки є одиничним оператором і система кінетичних рівнянь для компонент матриці густини має марківський вигляд. Очевидно, що в границі $\Gamma < \omega \ll \omega_m$ ця система співпадає з рівняннями (3.19) – (3.22) для адіабатичного випадку в режимі $T \rightarrow \infty$. Тому динаміка точки описується рівнянням (3.31) і критерій шатлівської нестійкості для високих частот наступний:

$$\left| \frac{g\mu_B H}{2} \right| < \frac{g\mu_B H_{c2}}{2} = \frac{\sqrt{7}}{2} \hbar\omega. \quad (3.54)$$

Цей результат узгоджується з формулами (3.51), (3.52).

Інкремент $r(\Gamma, \Omega_H, \omega)$ експоненціального зростання координати центру мас шатлу в границі високих температур (нагадаємо, що в нашій моделі $\delta T = T$) має вигляд (ми відновлюємо розмірність)

$$r(\Gamma, \Omega_H, \omega) = \frac{\tilde{\alpha}\Gamma^3\Omega_H^2}{2\hbar\Delta_3 D_3} \left[\frac{7}{4}(\hbar\omega)^2 - \Omega_H^2 \right], \quad (3.55)$$

де Δ_3 визначається рівнянням (3.28) і

$$D_3 = \left[(\hbar\omega)^2 - 4\Omega_H^2 \right]^2 + \left(\frac{\Gamma}{\hbar\omega} \right)^2 \left[\frac{11}{4}(\hbar\omega)^2 - 5\Omega_H^2 \right]^2. \quad (3.56)$$

Максимальне значення інкременту $r_{\max}(\Gamma, \Omega_H = \hbar\omega/2, \omega) = \tilde{\alpha}\Gamma / (15\hbar)$ досягається при $\Omega_H = \hbar\omega/2$.

3.5. Внутрішнє тертя в електричному шатлі.

Ми показали, що в системі, в котрій квантова точка тунельно зв'язана з «гарячим» електродом і знаходиться під дією магнітних сил, присутнє внутрішнє тертя з немонотонною температурною залежністю. Тертя тої самої природи характерне для аналогічної системи з електричними силами замість магнітних. Розглянемо систему з електродом, що підтримується за температури T , і тунельно зв'язаною з ним квантовою точкою з одним рівнем. Припускаємо, що система знаходиться в постійному однорідному електричному полі напруженості E . Складові гамільтоніану системи $\hat{H} = \hat{H}_l + \hat{H}_d + \hat{H}_v + \hat{H}_{int}$ наступні:

$$\hat{H}_l = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k - \quad (3.57)$$

гамільтоніан електрода з неполяризованими електронами, що не взаємодіють,

$$\hat{H}_d = (\varepsilon_0 - eEx)c^\dagger c - \quad (3.58)$$

гамільтоніан квантової точки з одним рівнем в електричному полі (e – заряд електрона),

$$\hat{H}_v = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} - \quad (3.59)$$

вібронний гамільтоніан (координата та імпульс вважаються класичними змінними),

$$\hat{H}_{tun} = t_0(x) \sum_k (a_k^\dagger c + \text{H.c.}) - \quad (3.60)$$

тунельний гамільтоніан з тунельною амплітудою $t_0(x) = t_0 \exp(-x/\lambda)$.

Аналогічні вищенаведеним розрахунки дають вираз для внутрішнього коефіцієнта тертя:

$$\gamma_E(T) = -\frac{\hbar(eE)^2}{4m} \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + (\hbar\omega)^2} \frac{1}{T} \cosh^{-2}\left(\frac{\delta\varepsilon}{2T}\right), \quad (3.61)$$

що співпадає з формулою (3.45) після формальної заміни $\alpha/2 \rightarrow eE$.

Висновки

Показана принципова можливість створення шатлівської системи з тепловим джерелом енергії. Знайдена область шатлівської нестійкості одноелектронного термоіндуктованого шатлу. Запропонований новий механізм внутрішнього тертя з немонотонною залежністю коефіцієнта тертя від температури. Коефіцієнт внутрішнього тертя звертається на нуль в границі низьких та високих температур і досягає максимуму в проміжній області температур. Внутрішнє тертя характерне для наноелектромеханічної системи як з кулонівськими, так і з обмінними силами. Температурна залежність нижнього критичного магнітного поля, що відокремлює вібронний режим коливань квантової точки від шатлівського, визначається відповідною залежністю коефіцієнта внутрішнього тертя.

РОЗДІЛ 4

ОПТИМАЛЬНА ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНА ДОБРОТНІСТЬ І ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ ЕФЕКТИ В СПІНТРОННОМУ ТРАНЗИСТОРІ

У даному розділі на прикладі двох молекулярних транзисторів вивчаються термоелектричні характеристики, зокрема, термоелектрична добротність – величина, яка, поряд з ефективністю Карно, визначає термоелектричну ефективність твердотільної термоелектричної системи. По-перше, вивчаються термоелектричні характеристики спітронного транзистора. Подібна система (квантова точка, тунельно зв'язана з повністю поляризованими в протилежних напрямках за спіном електродами) активно вивчалася в літературі. Зокрема, вона використана в розділі 3, де квантова точка рухома і грає роль шатлу. У даному розділі квантова точка є нерухомою, тунельний транспорт електронів забезпечує перенос заряду і тепла і нас цікавить вплив зовнішнього магнітного поля (яке знімає спінову блокаду струму) на термоелектричні ефекти.

По-друге, в якості молекули розглядаємо металічну вуглецеву нанотрубку. Взагалі-то метали мають низьку термоелектричну ефективність, але в даному випадку при певних умовах, що забезпечують хіральне тунелювання [76, 77], можна досягти високих значень термоелектричної добротності (а отже, і ефективності).

4.1. Транспортні властивості та підвищена термоелектрична добротність спітронного термоелектричного пристрою на основі квантової точки.

У даному підрозділі знайдена максимальна потужність і відповідна термоелектрична добротність спітронного термоелектричного пристрою на основі квантової точки. Отримані термоелектричні характеристики порівнюються з характеристиками термоелектрика на основі звичайного транзистора з неполяризованими електронами.

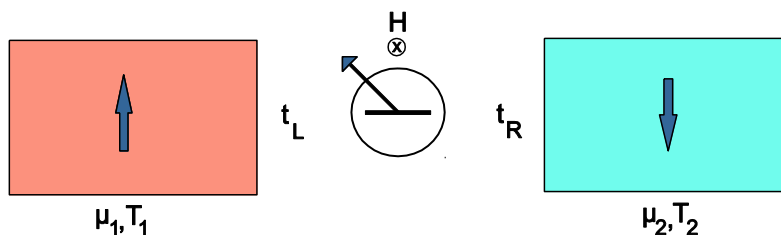


Рис. 4.1. Ескіз моделі спітронного термоелектричного пристрою. Квантова точка з одним енергетичним рівнем тунельно зв'язана (з амплітудами t_L і t_R) з витоком і стоком електронів, що підтримуються при різних хімічних потенціалах і температурах. Зовнішнє магнітне поле H викликає перевороти спіну електронів на точці.

4.1.1. Гамільтоніан спітронного термоелектричного пристрою.

Гамільтоніан $\hat{H} = \hat{H}_l + \hat{H}_d + \hat{H}_{tun}$ спітронного термоелектричного пристрою на основі квантової точки, зображеного на рис. 4.1, складається з трьох доданків. Перший доданок, \hat{H}_l , описує електрони, що не взаємодіють, в електродах:

$$\hat{H}_l = \sum_{k,j} \varepsilon_{k,j} a_{k,j}^\dagger a_{k,j}, \quad j = L, R. \quad (4.1)$$

Тут $a_{k,j}^\dagger$ ($a_{k,j}$) – оператор народження (знищення) електронного стану з імпульсом k в електроді j , $\varepsilon_{k,j}$ – відповідна енергія. Другий доданок, \hat{H}_d , – це гамільтоніан квантової точки з одним виродженим за спіном енергетичним рівнем ε_0

$$\hat{H}_d = \varepsilon_0 \sum_j c_j^\dagger c_j - \frac{g\mu_B H}{2} (c_\uparrow^\dagger c_\downarrow + c_\downarrow^\dagger c_\uparrow) + U c_\uparrow^\dagger c_\uparrow c_\downarrow^\dagger c_\downarrow \quad (4.2)$$

у магнітному полі H (μ_B – магнетон Бора, g – гіромагнітне відношення). У формулі (4.2) c_j^\dagger (c_j) – оператор народження (знищення) електронного стану зі спіном $j = \uparrow, \downarrow$ на точці. (Індекси $L = \uparrow$, $R = \downarrow$ позначають напрям спіну електронів у поляризованих електродах.) Взаємодія електронів на точці характеризується кулонівською енергією U . Третій доданок у гамільтоніані, \hat{H}_{tun} , описує тунелювання (із збереженням спіну) електронів між точкою і електродами:

$$\hat{H}_{tun} = \sum_{k,j} t_j a_{k,j}^\dagger c_j + \text{H.c.} \quad (4.3)$$

Тут t_j – тунельна амплітуда.

4.1.2. Коефіцієнт проходження для випадку електронів без взаємодії. Максимізація потужності та термоелектрична добротність.

Якщо знехтувати в гамільтоніані (4.2) доданком з кулонівською взаємодією, то задачу можна вирішити точно методом рівнянь руху (equation of motion method, EOM).

Гейзенберґівський оператор електричного струму в електроді j наступний:

$$\hat{I}_j(t) = -e \frac{d\hat{N}_j}{dt} = -\frac{ie}{\hbar} [\hat{H}, \hat{N}_j(t)], \quad (4.4)$$

де

$$\hat{N}_j(t) = \sum_k a_{k,j}^\dagger(t) a_{k,j}(t) - \quad (4.5)$$

оператор числа частинок, e – заряд електрона, \hbar – стала Планка. Залежність від часу електронних операторів в електродах та на точці описується наступною системою рівнянь Гейзенберґа:

$$-i\hbar \frac{da_{k,j}}{dt} = [\hat{H}, a_{k,j}], \quad j = L, R, \quad -i\hbar \frac{db_n}{dt} = [\hat{H}, b_n], \quad n = 1, 2. \quad (4.6)$$

У рівняннях (4.6) b_n – лінійна комбінація операторів c_j , яка діагоналізує гамільтоніан квантової точки: $b_{1(2)} = (c_\uparrow \mp c_\downarrow) / \sqrt{2}$; діагональний гамільтоніан квантової точки має вигляд $\hat{H}_d = \sum_n \varepsilon_n b_n^\dagger b_n$, де $\varepsilon_{1(2)} = \varepsilon_0 \pm h/2$ (для скорочення запису ми ввели позначення $h = g\mu_B H$). Зауважимо, що в даному підрозділі величина h має розмірність енергії, в той час як у розділі 2 величина h (яка теж позначає магнітне поле) є безрозмірною.

Рівняння руху (4.6) можуть бути переписані наступним чином:

$$\hbar \frac{db_1}{dt} = -i\varepsilon_1 b_1 - \frac{i}{\sqrt{2}} \sum_k \left(t_L e^{-i\varepsilon_k L t / \hbar} a_{k,L}^{(0)} - t_R e^{-i\varepsilon_k R t / \hbar} a_{k,R}^{(0)} \right) - \frac{\Gamma_L}{4} (b_1 + b_2) + \frac{\Gamma_R}{4} (-b_1 + b_2), \quad (4.7)$$

$$\hbar \frac{db_2}{dt} = -i\varepsilon_2 b_2 - \frac{i}{\sqrt{2}} \sum_k \left(t_L e^{-i\varepsilon_{k,L}t/\hbar} a_{k,L}^{(0)} + t_R e^{-i\varepsilon_{k,R}t/\hbar} a_{k,R}^{(0)} \right) - \frac{\Gamma_L}{4} (b_1 + b_2) - \frac{\Gamma_R}{4} (-b_1 + b_2), \quad (4.8)$$

де $a_{k,j}^{(0)}$ – електронні оператори в представленні Шредінгера, $\Gamma_{L/R} = 2\pi\nu t_{L/R}^2$ – тунельні ширини рівня, ν – густина станів в електродах. Для спрощення розрахунків ми нехтуємо слабкою залежністю густини станів від енергії, вважаючи ν константою, тобто використовуємо наближення широких зон (wide band approximation, WBA). Ефективний гамільтоніан, що відповідає динамічним рівнянням (4.7)—(4.8) у наближенні, коли ми нехтуємо не залежними від $b_{1,2}$ членами, може бути записаний як сума двох внесків: $\hat{H}^{eff} = \hat{H}_1^{eff} + i\hat{H}_2^{eff}$, де $\hat{H}_1^{eff} = \hat{H}_d$ і ермітовий оператор \hat{H}_2^{eff} має вигляд:

$$\hat{H}_2^{eff} = -\frac{1}{4} \left\{ \Gamma_+ \sum_n b_n^\dagger b_n + \Gamma_- (b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1) \right\}, \quad \Gamma_\pm = \Gamma_L \pm \Gamma_R. \quad (4.9)$$

Зауважимо, що тут позначення Γ_\pm не співпадають з відповідними позначеннями розділу 2 (див. формулу (2.41)). Відомо (див., наприклад, книгу [78]), що \hat{H}^{eff} може бути діагоналізований, якщо і лише якщо $[\hat{H}_1^{eff}, \hat{H}_2^{eff}] = 0$. Оскільки $[\hat{H}_1^{eff}, \hat{H}_2^{eff}] = \Gamma_- h (b_1^\dagger b_2 - b_2^\dagger b_1)$, система рівнянь (4.7)—(4.8) може бути розв'язана (при ненульовому магнітному полі $h \neq 0$) лише у випадку симетричного тунельного контакту $\Gamma_L = \Gamma_R (\equiv \Gamma)$. У цьому випадку система (4.7)—(4.8) зводиться до двох окремих диференціальних рівнянь для b_1 і b_2 . Ми отримуємо стаціонарні розв'язки цих рівнянь у граничному випадку $\Gamma t \gg 1$ (термодинамічна рівновага). Усереднення дає

$$\langle a_{k,j}^{\dagger(0)} a_{k',j'}^{(0)} \rangle = f_j(\varepsilon_k) \delta_{jj'} \delta_{kk'}, \quad \langle a_{k,j}^{\dagger(0)} a_{k',j'}^{\dagger(0)} \rangle = \langle a_{k,j}^{(0)} a_{k',j'}^{(0)} \rangle = 0, \quad (4.10)$$

де $f_{L/R}(\varepsilon) = (1 + \exp[(\varepsilon - \mu_{L/R})/T_{L/R}])^{-1}$ – функції розподілу Фермі—Дірака в лівому/правому електроді. Для середнього струму отримуємо вираз у формі Ландауера—Бюттікера:

$$I = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon; h) [f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)] \quad (4.11)$$

з коефіцієнтом проходження

$$D(\varepsilon; h) = \frac{\frac{1}{4}\Gamma^2 h^2}{\left[(\varepsilon - \varepsilon_1)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2 \right] \left[(\varepsilon - \varepsilon_2)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2 \right]}. \quad (4.12)$$

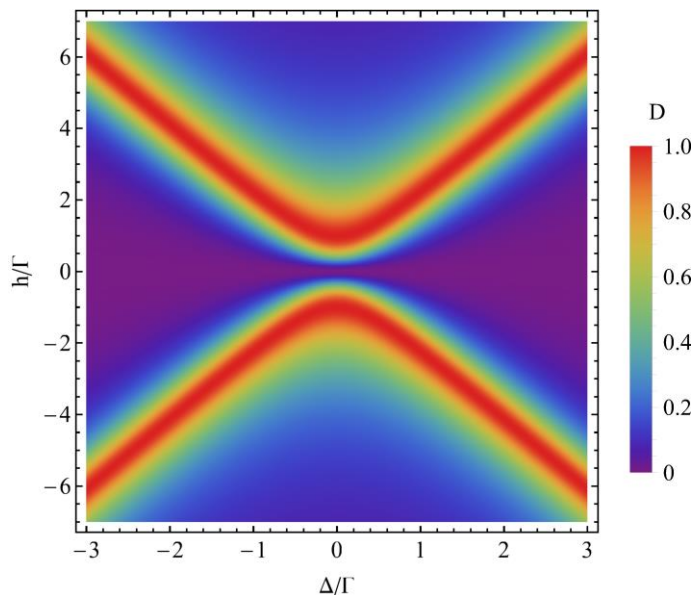


Рис. 4.2. Залежність коефіцієнта проходження $D(\varepsilon; h)$ від нормованих магнітного поля та параметра відхилення Δ/Γ для $\varepsilon = \varepsilon_F$.

Цей коефіцієнт проходження формально співпадає з результатом, що був отриманий у роботі [79] для моделі подвійної квантової точки, оскільки наш гамільтоніан і гамільтоніан [79] можуть бути зведені один до одного. Коефіцієнт проходження $D(\varepsilon; h)$ звертається на нуль при $h=0$, що є проявом режиму «спінової блокади» в системі. Протилежний випадок, коли квантова точка стає майже повністю прозорою, може бути реалізований при $h \gg \Gamma$. У режимі резонансного тунелювання, $\varepsilon_0(V_g) = 0$, і при $\varepsilon = \pm h/2$ (V_g – напруга на затворі, або гейті) коефіцієнт проходження досягає максимального значення $D_{\max} \approx 1 - (1/4)(\Gamma/h)^2$. Коефіцієнт проходження як функція параметру відхилення (detuning parameter, $\Delta \equiv \varepsilon_0 - \varepsilon_F$, де ε_F – енергія Фермі) і магнітного поля h для

випадку $\varepsilon = \varepsilon_F$ зображений на рис. 4.2. (На всіх рисунках величини, які вимірюються в одиницях енергії, нормовані на Γ .) Для кожного фіксованого значення Δ на залежності коефіцієнту проходження від магнітного поля є два пагорби. Симетричне положення цих пагорбів – наслідок розщеплення рівня енергії точки. Коефіцієнт проходження найбільший при $\Delta \sim \hbar$.

У лінійному відгуку за напругою $eV = \mu_L - \mu_R$ і різницею температур $\delta T = T_L - T_R$ електричний струм (I) і струм тепла (J) можна записати наступним чином (див., наприклад, книгу [55]):

$$\begin{aligned} I &= GV + L\delta T, \\ J &= \tilde{L}V + K\delta T. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Говорячи про лінійний відгук, маємо на увазі, що $\delta T \ll T = (T_L + T_R)/2$ і $eV = \mu_L - \mu_R \ll \varepsilon_F$. У формулах (4.13) $G(K)$ – електричний (тепловий) кондуктанс; перехресні коефіцієнти L і \tilde{L} пов'язані співвідношенням Казимира—Онсагера, $\tilde{L}(-\vec{H}) = TL(\vec{H})$, див., наприклад, книгу [49]. Зауважимо, що в нашій одновимірній задачі всі термоелектричні коефіцієнти є парними функціями магнітного поля, тому виконується співвідношення Кельвіна $\tilde{L} = TL$ для системи із зворотною зміною часу (time-reversal system).

Використовуючи формалізм Ландауера—Бюттікера, можна виразити термоелектричні коефіцієнти через коефіцієнт проходження (див. статтю [50], а також книгу [51])

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right), \quad (4.14)$$

$$L = \frac{ek_B}{2\pi\hbar} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \frac{\varepsilon - \mu}{T} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right), \quad (4.15)$$

$$K = \frac{k_B}{2\pi\hbar} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \frac{(\varepsilon - \mu)^2}{T} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right), \quad (4.16)$$

де $\mu = (\mu_L + \mu_R)/2$ ($\mu = \varepsilon_F$ при $T \ll \varepsilon_F$), k_B – стала Больцмана, температура вимірюється в одиницях енергії. У подальшому в цьому підрозділі вважаємо $\hbar = k_B = 1$.

Термоелектрична добротність, що визначається формулою (1.7), – це характеристика якості твердотільного термоелектричного пристрою (див., наприклад, книги [47, 48]). Термоерс (термоелектрорушійна сила) S – це коефіцієнт Зеєбека, який можна виразити через термоелектричні коефіцієнти, $S = -L/G$. Ми нехтуємо фононним внеском K_{ph} у ZT , тому що в пристроях, заснованих на квантовій точці, фононний кондуктанс є малим, завдяки акустичній неузгодженості на поверхнях (див., наприклад, книгу [58]). Коефіцієнти K_e в формулі (1.7) і K в формулі (4.16) не є незалежними. Це різні визначення теплового кондуктансу, і вони зв'язані співвідношенням (див., наприклад, огляд [56]):

$$K_e = K - GS^2T. \quad (4.17)$$

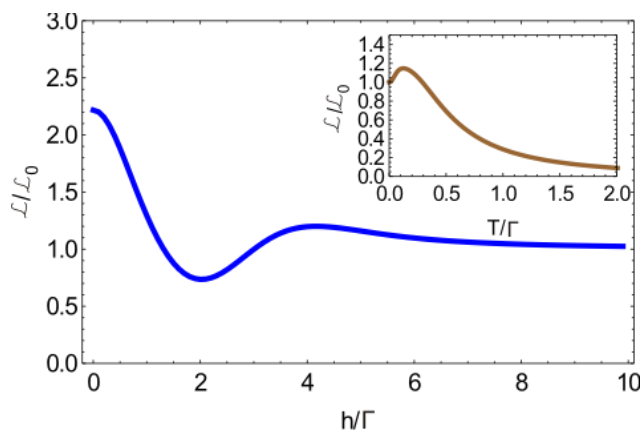


Рис. 4.3. Залежність нормованого «числа» Лоренца $\frac{K}{(GT)}$ від магнітного поля \mathcal{L}_0 для оптимальних параметрів $T/\Gamma=0.15$, $\Delta/\Gamma=0.9$, при яких потужність максимальна. Вставка: температурна залежність нормованого «числа» Лоренца для оптимальних параметрів $h/\Gamma=1.15$, $\Delta/\Gamma=0.9$.

Зазначимо, що в нашій моделі закон Відемана—Франца $K/(GT) = \mathcal{L}_0$ (\mathcal{L}_0 – це число Лоренца) не виконується. Через сильну залежність коефіцієнта проходження від енергії в певному інтервалі магнітних полів і температур справедлива нерівність $\mathcal{L} \equiv K/(GT) < \mathcal{L}_0$. Цей факт грає позитивну роль, тому що призводить до більших значень ZT . На рис. 4.3 зображений неглибокий мінімум

у залежності $\frac{K/(GT)}{\mathcal{L}_0}$ від магнітного поля. Вставка до рис. 4.3 показує, що нормоване «число» Лоренца повільно спадає із зростанням температури при достатньо високих температурах.

З використанням визначень термоелектричних коефіцієнтів (4.14)—(4.16) була обчислена термоелектрична добротність (1.7). На рис. 4.4 зображена ZT як функція нормованих магнітного поля та температури. Зрозуміло, що термоелектрична добротність досягає максимуму при малих магнітних полях. Цей максимум не цікавий з практичної точки зору, тому що як електричний струм $I(h)$, так і потужність $P=|VI|$ прямують до нуля при $h \rightarrow 0$. Нас цікавить термоелектричний пристрій з високою потужністю. У подальшому ми шукаємо набір параметрів, які оптимізують ефективність і потужність.

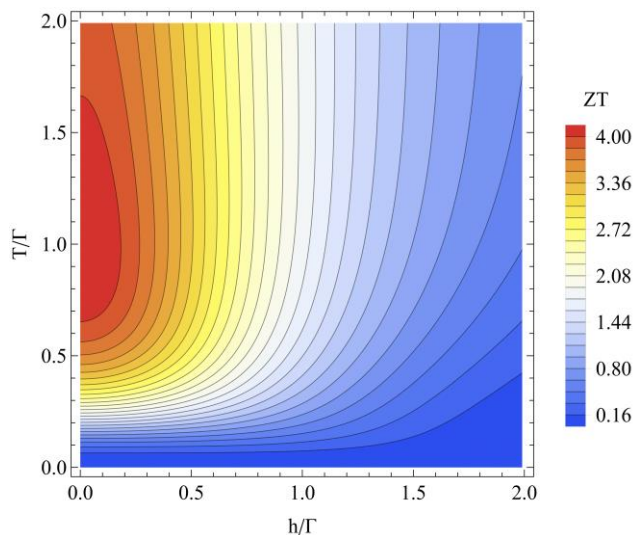


Рис. 4.4. Залежність термоелектричної добротності ZT від нормованих магнітного поля і температури для $\Delta/\Gamma \approx 0.9$.

У режимі лінійного відгуку можна максимізувати ефективність $\eta = P/J$ за напругою V . Максимум η (максимальна ефективність) визначається формулою (див., наприклад, книгу [58])

$$\eta_m = \eta_c \frac{\sqrt{ZT+1}-1}{\sqrt{ZT+1}+1}, \quad (4.18)$$

де $\eta_c = \delta T / T$ – це ефективність Карно в режимі лінійного відгуку. Потужність, яка розвивається при цій ефективності (потужність при максимальній ефективності) дається формулою (див. роботу [52]):

$$P_{me} = \eta_c^2 \frac{TK}{\sqrt{ZT+1}} \frac{\sqrt{ZT+1}-1}{\sqrt{ZT+1}+1}. \quad (4.19)$$

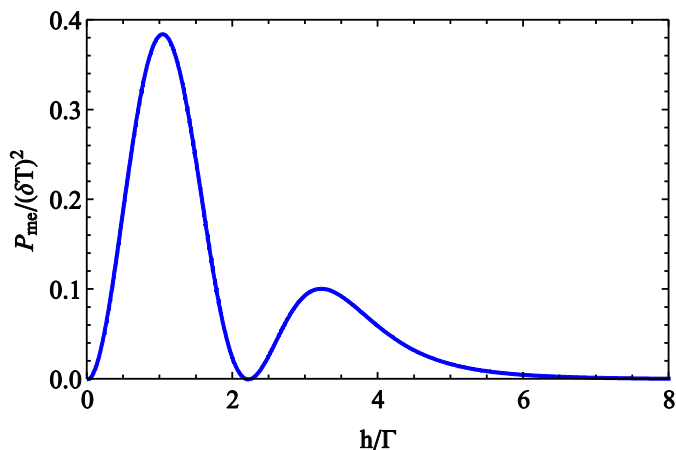


Рис. 4.5. Залежність потужності при максимальній ефективності (розділеної на $(\delta T)^2$) від нормованого магнітного поля для оптимальних параметрів: $\Delta / \Gamma = 0.9$, $T / \Gamma = 0.15$.

Потужність у формулі (4.19) є функцією трьох параметрів – температури T , магнітного поля h і параметру відхилення $\Delta \equiv \varepsilon_0 - \varepsilon_F$. Параметр відхилення не може бути проігнорований, тому що точно в резонансі $\varepsilon_0 = \varepsilon_F$ термоерс дорівнює нулю. Для того щоб отримати ненульову ZT , враховується ненульове відхилення Δ від резонансу. Термоерс $S(\Delta) = -L/G$, яка є функціоналом коефіцієнта проходження $D(\varepsilon; h)$, що визначається формулою (4.12), досягає максимуму при $\Delta \sim \Gamma$. Зауважимо, що більші значення термоерс S взагалі-то потребують більших значень похідної $dD/d\varepsilon$ (див., наприклад, огляд [56]). Оскільки коефіцієнт проходження (4.12) має гострішу залежність від енергії, ніж коефіцієнт проходження, обчислений для однорівневої системи, термоерс і ZT для запропонованого спітронного пристрою виявляються більшими ніж ті самі величини, обчислені в роботі [52]. Подальша оптимізація ZT здійснюється за допомогою магнітного поля h .

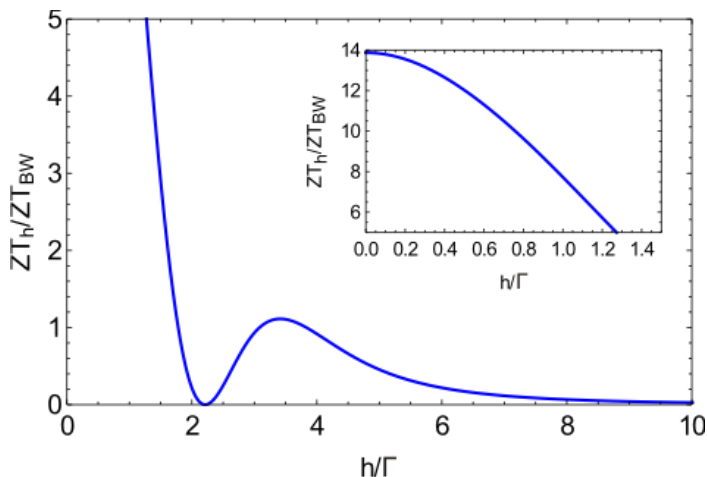


Рис. 4.6. Відношення термоелектричної добротності ZT_h до термоелектричної добротності ZT_{BW} звичайного термоелектричного пристрою на основі квантової точки з коефіцієнтом проходження Брейта—Вігнера як функція магнітного поля для $\Delta/\Gamma=0.9$, $T/\Gamma=0.15$. Термоелектрична добротність запропонованого пристрою є вищою для достатньо малих магнітних полів, зокрема, для оптимального значення магнітного поля $h/\Gamma=1.15$, при якому потужність при максимальній ефективності максимальна. Вставка: те саме відношення для $0 < h/\Gamma < 1.5$.

Залежність $P_{me}/(\delta T)^2$ від магнітного поля, h/Γ , зображена на рис. 4.5. Два максимуми на цій кривій – завдяки відповідній залежності теплового кондуктансу K . Потужність звертається на нуль при тому значенні магнітного поля, при якому термоерс S змінює знак. Потужність (4.19) має глобальний максимум при $T/\Gamma \approx 0.15$, $h/\Gamma \approx 1.15$, $\Delta/\Gamma \approx 0.9$. При цих значеннях параметрів термоелектрична добротність $ZT \approx 0.44$ і максимальна ефективність $\eta_m \approx 0.1\eta_c$. Хоча отримане значення ефективності є досить малим, термоелектричні характеристики спітронного пристрою значно кращі ніж характеристики термоелектрика, заснованого на квантовій точці, з неполяризованими електронами [52]. Дійсно, на рис. 4.6 ми порівнюємо термоелектричну добротність нашої моделі та звичайного тунельного пристрою. Бачимо, що в певному інтервалі магнітних полів термоелектрична добротність нашої моделі в декілька разів перевищує термоелектричну добротність тунельного пристрою,

запропонованого в роботі [52]. Зокрема, термоелектричні характеристики нашого пристрою значно кращі для $h \sim \Gamma$, де ϵ максимальною потужністю при максимальній ефективності.

Коли два енергетичні рівні знаходяться по обидва боки від енергії Фермі, $\epsilon_2 < \epsilon_F < \epsilon_1$, на проходження через квантову точку сильно впливає так званий біполярний ефект (див., наприклад, [80]). Квазічастинки з енергією вище ϵ_F (електрони) тунелюють зліва направо. Це тунелювання частково компенсується квазічастинками з енергією нижче ϵ_F (дірками), які рухаються в тому самому напрямку. Ця компенсація сильно зменшує термоерс системи, що призводить до малих значень ZT . У нашій моделі біполярний ефект виникає при $h > 2\Delta$. На рис. 4.6 повна компенсація, що призводить до нульового значення ZT , виникає при $h \sim 2.5\Delta$. У цій точці термоерс змінює знак і дірки стають основними носіями заряду. Для квантової точки, що розглядається тут, при Δ і h , близьких до своїх оптимальних значень, які дають максимальну потужність, обидва рівні лежать або вище, або нижче ϵ_F . (Для стислості ми розглядаємо електрони як основні носії заряду.) Тому, завдяки сильному порушенню електрон-діркової симетрії, для параметрів, що відповідають максимальній потужності та близьких до них, не спостерігається біполярний ефект.

Максимальна потужність (потужність, оптимізована за напругою V) в режимі лінійного відгуку за V і δT визначається формулою (див., наприклад, огляд [56])

$$P_m = \frac{1}{4} GS^2 (\delta T)^2 \quad (4.20)$$

і відповідна ефективність (ефективність при максимальній потужності) дорівнює [57]

$$\eta_{mp} = \frac{\eta_c}{2} \frac{ZT}{ZT + 2}. \quad (4.21)$$

Залежність P_m від h/Γ якісно така сама, як залежність P_{me} від h/Γ . Оптимальні параметри, які максимізують потужність (4.20), наступні: $T/\Gamma \approx 0.5$, $h/\Gamma \approx 1.4$,

$\Delta/\Gamma \approx 1.7$. Відповідна термоелектрична добротність $ZT \approx 2.6$ і ефективність $\eta_m \approx 0.3\eta_c$.

4.1.3. Вплив електрон-електронної взаємодії на термоелектричну добротність.

Розглянемо вплив асиметрії контакту ($\Gamma_L \neq \Gamma_R$) та електрон-електронної взаємодії U на термоелектричну добротність. Спочатку ми проаналізуємо два граничних випадки:

(a) $U=0$, $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ (електрони, що не взаємодіють, і асиметричний тунельний контакт) і

(b) $U \rightarrow \infty$, $\Gamma_L = \Gamma_R$ (режим кулонівської блокади й симетричний тунельний контакт).

У високотемпературній границі $T \gg \Gamma_L, \Gamma_R$ були отримані (з використанням методу матриці густини) аналітичні вирази для електричного струму та струму тепла.

Почнемо з динамічного рівняння для повної матриці густини $\sigma(t)$ ($\hbar = 1$):

$$i \frac{\partial \sigma(t)}{\partial t} = [\hat{H}, \sigma(t)]. \quad (4.22)$$

Припускаємо, що електроди знаходяться в стані рівноваги, тоді матриця густини факторизується, $\sigma \approx \rho \otimes \sigma_l$, де ρ – зведена матриця густини квантової точки і σ_l – матриця густини електродів. Зведена матриця густини в представленні взаємодії $\tilde{\rho}(t)$ може бути отримана з наступного інтегро-диференціального рівняння:

$$\frac{\partial \tilde{\rho}(t)}{\partial t} = -\text{Tr}_{\text{leads}} \left(\int_{-\infty}^t dt_1 [\tilde{H}_{\text{tun}}(t), [\tilde{H}_{\text{tun}}(t_1), \tilde{\sigma}(t_1)]] \right), \quad (4.23)$$

де «тільда» означає представлення взаємодії, так, $\tilde{\rho}(t) = e^{i\hat{H}_0 t} \rho e^{-i\hat{H}_0 t}$ ($\hat{H}_0 = \hat{H}_l + \hat{H}_d$), слід береться за ступенями свободи в електродах. Рівняння (4.23) не може бути розв'язано в квадратурах. Тому ми використовуємо теорію збурень за Γ/T та замінюємо $\tilde{\sigma}(t_1)$ на $\tilde{\sigma}(t)$ і робимо таким чином рівняння (4.23) локальним за часом.

Є чотири незалежні матричні елементи оператора ρ : $\rho_0 = \langle 0|\rho|0\rangle$, $\rho_\uparrow = \langle \uparrow|\rho|\uparrow\rangle$, $\rho_\downarrow = \langle \downarrow|\rho|\downarrow\rangle$ і $\rho_{\uparrow\downarrow} = \langle \uparrow|\rho|\downarrow\rangle$. Тут $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle = c_\uparrow^\dagger|0\rangle$, $|\downarrow\rangle = c_\downarrow^\dagger|0\rangle$ і $|2\rangle = c_\uparrow^\dagger c_\downarrow^\dagger|0\rangle$ – це базисні вектори підпростору електронних станів на квантовій точці. Вектор $|0\rangle$ описує незаповнену квантову точку, $|\uparrow\rangle$ і $|\downarrow\rangle$ описують квантову точку з одним електроном і $|2\rangle$ позначає стан точки з двома електронами. Матричний елемент $\rho_2 = \langle 2|\rho|2\rangle$ можна виразити через інші матричні елементи, враховуючи умову нормування $\text{Tr}\rho=1$. У пункті 4.1.4 виведена система рівнянь для елементів матриці густини і вирази для струмів заряду й тепла, а також наведені аналітичні вирази для термоелектричних коефіцієнтів.

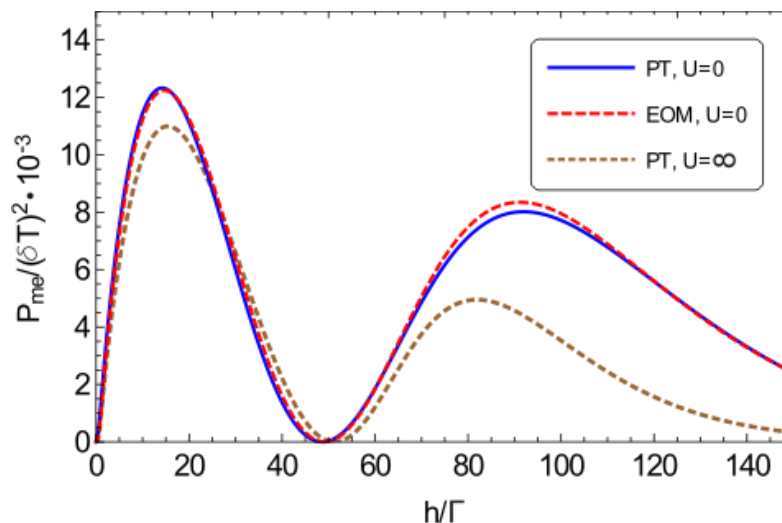


Рис. 4.7. Нормована потужність при максимальній ефективності як функція нормованого магнітного поля для двох граничних випадків: $U=0$ (дві криві – отримана методом рівнянь руху та отримана за допомогою теорії збурень), $U=\infty$ при $T/\Gamma=10$ та оптимальному параметрі відхилення ($\Delta/\Gamma=23$ для $U=0$ і $\Delta/\Gamma=25$ для $U=\infty$).

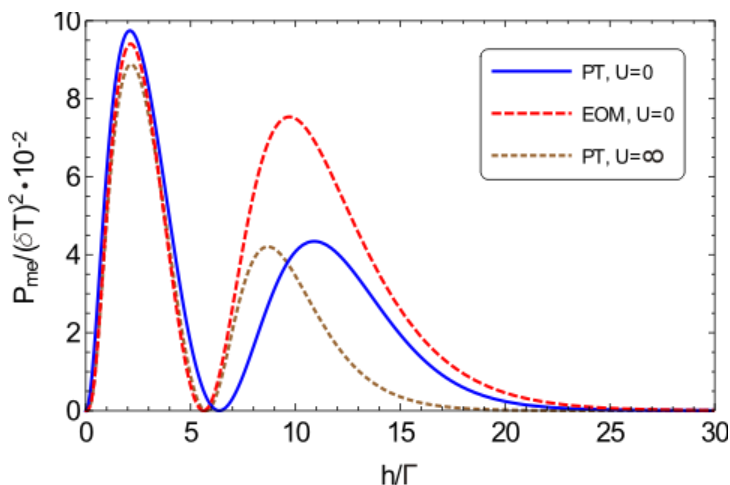


Рис. 4.8. Нормована потужність при максимальній ефективності як функція нормованого магнітного поля для двох граничних випадків: $U=0$ (дві криві – отримана методом рівнянь руху та отримана за допомогою теорії збурень), $U=\infty$ при $T/\Gamma=1$ та оптимальному параметрі відхилення ($\Delta/\Gamma=2.7$ для $U=0$ і $\Delta/\Gamma=2.8$ для $U=\infty$).

У наближенні теорії збурень за малим параметром Γ/T вплив асиметрії тунельного контакту на термоелектричну добротність не проявляється. Це можна побачити з формул (4.55)—(4.57) для кінетичних коефіцієнтів: множники, що містять тунельні ширини рівня Γ_L і Γ_R , скасовуються в відношенні кінетичних коефіцієнтів.

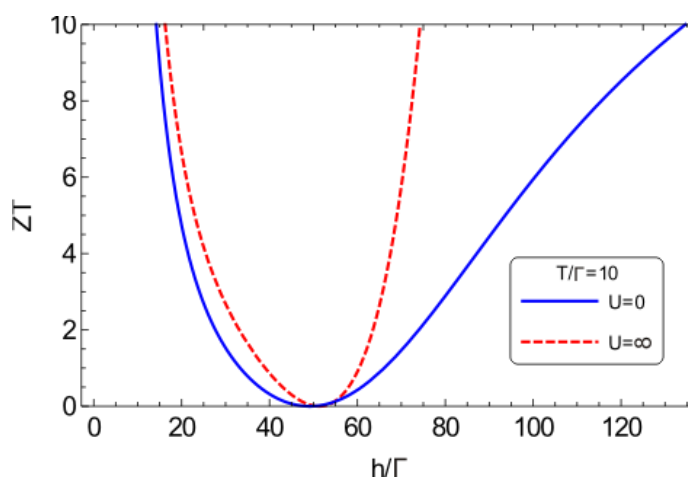


Рис. 4.9. Термоелектрична добротність ZT як функція нормованого на Γ магнітного поля для $T/\Gamma=10$ та оптимального параметра відхилення ($\Delta/\Gamma=23$ для $U=0$ і $\Delta/\Gamma=25$ для $U=\infty$).

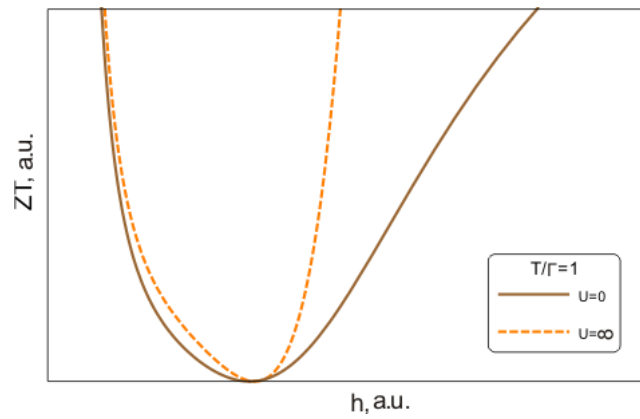


Рис. 4.10. Термоелектрична добротність ZT як функція нормованого магнітного поля для $T/\Gamma=1$ та оптимального параметра відхилення ($\Delta/\Gamma=2.7$ для $U=0$ і $\Delta/\Gamma=2.8$ для $U=\infty$). Цей графік показує тільки якісну поведінку $ZT(h)$, оскільки теорія збурень, що використовується, не справедлива для $T=\Gamma$ (тому числа на осях не наведені).

У режимі кулонівської блокади термоелектричні коефіцієнти, потужність і термоелектрична добротність залежать від тих самих трьох параметрів, h , T , Δ , як і в випадку електронів, що не взаємодіють. Нашою метою є знайти термоелектричну добротність для оптимальних параметрів, при яких потужність при максимальній ефективності P_{me} є максимальною. Потужність (4.19) зменшується із зростанням нормованої температури, T/Γ , в області справедливості теорії збурень ($T/\Gamma > 1$), і в цій області максимуму немає. Функція P_{me} має максимум в області $T/\Gamma < 1$, де теорія збурень несправедлива. Потужність, зображена на рис. 4.7, і термоелектрична добротність, зображена на рис. 4.9, побудовані як функції магнітного поля для параметру $T/\Gamma=10$, що лежить у рамках теорії збурень. Короткопунктирна крива на рис. 4.7 – це залежність $P_{me}(h/\Gamma)$ для режиму кулонівської блокади ($U=\infty$), суцільна та пунктирна криві – та сама залежність для електронів, що не взаємодіють ($U=0$). Результати для електронів, що не взаємодіють, були отримані з використанням теорії збурень (perturbation theory, PT, суцільна крива) і з використанням метода рівнянь руху (EOM, пунктирна крива). Результати теорії збурень якісно відтворюють поведінку $P_{me}(h/\Gamma)$, отриману методом рівнянь руху. Потужність

прямує до нуля при $h \rightarrow 0$ і при $h \rightarrow \infty$. В останньому випадку розщеплення рівнів $\Delta\varepsilon \rightarrow \infty$ і при скінченних температурах на квантовій точці немає доступних рівнів для здійснення електронного транспорту. Як показує рис. 4.9, при слабких магнітних полях термоелектрична добротність для електронів, що не взаємодіють, незначно менша ніж термоелектрична добротність у режимі кулонівської блокади. На відміну від цього, дві криві суттєво розрізняються в сильних магнітних полях. У режимі кулонівської блокади термоелектричні коефіцієнти містять додаткові члени [порівняйте рівняння (4.58)—(4.60) з рівняннями (4.52)—(4.54)], які дають вагомий внесок у сильних магнітних полях.

Використовуючи точний розв'язок для електронів, що не взаємодіють, ми показали, що оптимальна температура, за якої потужність максимальна, менше або порядку тунельної ширини рівня Γ . Тому область оптимальних параметрів не може бути вивчена в теорії збурень за Γ/T .

Для того щоб зрозуміти тенденції поведінки P_{me} і ZT при менших температурах, ми побудували графіки цих величин при $T = \Gamma$, див. рис. 4.8 і 4.10. На кривій $P_{me}(h/\Gamma)$, як і раніше, є два максимуми, але результати для електронів, що не взаємодіють, отримані в теорії збурень та методом рівнянь руху, не співпадають один з одним, як і припускалося.

На рис. 4.8 показана поведінка термоелектричної добротності як функції магнітного поля для $T = \Gamma$ у випадку, коли електрони не взаємодіють, і в режимі кулонівської блокади. Наш попередній висновок, що термоелектрична добротність у слабких магнітних полях є незначно меншою для електронів, що не взаємодіють, ніж у режимі кулонівської блокади, залишається справедливим навіть для $T \gtrsim \Gamma$.

Теорія збурень дає асимптотичну поведінку термоелектричної добротності $ZT \propto 1/h^2$ при $h \rightarrow 0$ в обох граничних випадках, $U = 0$ і $U \rightarrow \infty$. Однак термоелектрична добротність, обчислена методом рівнянь руху, прямує до константи при $h \rightarrow 0$. При $h \rightarrow \infty$ теорія збурень дає, що ZT прямує до ненульової константи, а ZT , обчислена методом рівнянь руху, прямує до нуля в

цій границі. Ці якісні розбіжності показують, що в випадках слабких та сильних магнітних полів підхід теорії збурень для електронів із взаємодією ($U \neq 0$) несправедливий. Важливо зазначити, що для набору параметрів, що відповідають максимальній потужності, обидва методи дають близькі результати. Наприклад, для $T/\Gamma = 10$ потужність P_{me} досягає максимуму при параметрах $h_{pme}/\Gamma \approx 14.5$ і $\Delta_{pme}/\Gamma \approx 23$; у цьому випадку термоелектрична добротність $ZT \approx 9.8$. У границі високих температур $T \rightarrow \infty$ термоелектрична добротність прямує до константи. Ці результати узгоджуються з результатами, отриманими в граничному випадку $T/\Gamma \gg 1$ методом рівнянь руху. Зауважимо, що при таких високих значеннях термоелектричної добротності як $ZT \sim 10$ потужність набуває значень, далеких від максимуму. Для вищенаведених параметрів потужність на порядок нижча ніж потужність, обчислена для оптимальної температури $T \approx 0.15\Gamma$.

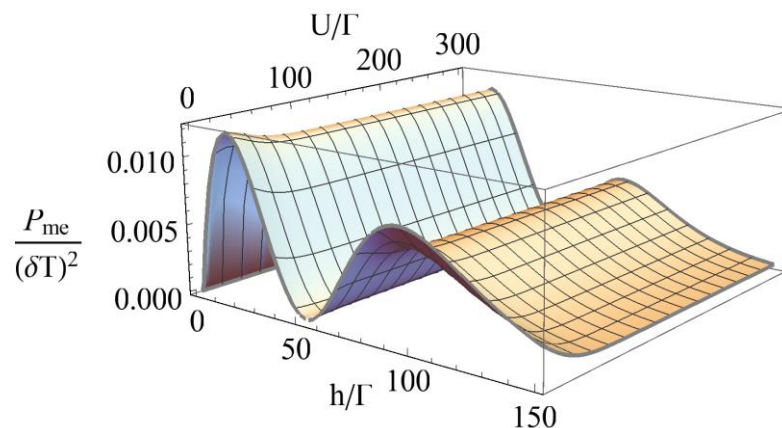


Рис. 4.11. Залежність потужності при максимальній ефективності від енергії кулонівської взаємодії та магнітного поля при $T/\Gamma = 10$ і $\Delta/\Gamma = 23$.

Зауважимо, що сильна електрон-електронна взаємодія (режим кулонівської блокади електронного транспорту) дає незначний внесок у відхилення відношення $K/(GT)$ від числа Лоренца \mathcal{L}_0 , таким чином, вона не є основним фактором, що призводить до порушення закону Відемана—Франца.

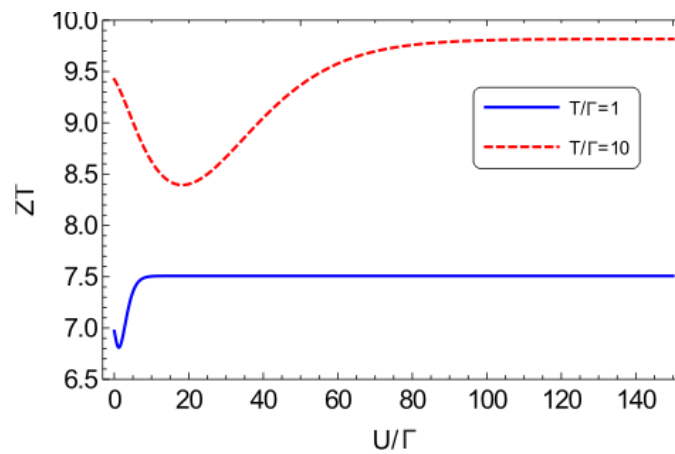


Рис. 4.12. Залежність термоелектричної добротності ZT від енергії кулонівського відштовхування для $T/\Gamma=1$ і відповідних оптимальних параметрів ($h/\Gamma=2.1$, $\Delta/\Gamma=2.7$) і $T/\Gamma=10$ і відповідних оптимальних параметрів ($h/\Gamma=14.5$, $\Delta/\Gamma=23$).

При наявності ненульової взаємодії з'являється ще один параметр, U , який сильно ускладнює аналітичні формули для струмів і термоелектричних коефіцієнтів. Ці формули були отримані, але, незважаючи на це, ми представляємо результати для $U \neq 0$ лише в графічній формі. Залежність потужності від U плавна. Як показує рис. 4.11, на залежності $P_{me}(U/\Gamma)$ немає виражених мінімумів або максимумів. Тому можна оптимізувати потужність за параметрами h і Δ , а потім максимізувати термоелектричну добротність (яка береться при цих оптимальних параметрах) за U . На рис. 4.12 побудована залежність ZT від U/Γ для двох значень температури, $T/\Gamma=10$ і $T/\Gamma=1$ (ці значення температури ми брали, розглядаючи випадок кулонівської блокади). Обидві криві мають неглибокий мінімум при малих значеннях U і насичення при великих значеннях U . Таким чином, ми робимо висновок: що стосується залежності ZT від U , результати теорії збурень можуть бути якісно поширені до оптимальних температур $T \sim \Gamma$. Зауважимо, що наші результати стосовно взаємодії узгоджуються з отриманими в роботах [81–83]. Насичення ZT при $U \rightarrow \infty$ можна пояснити так: подвійно заповнений рівень не дає внеску в транспорт, тому ми повертаємося до випадку двох однократно заповнених рівнів, як у випадку електронів без взаємодії (див. також роботу [82]). Рис. 4.12 показує,

що ZT досягає максимуму в режимі кулонівської блокади $U \rightarrow \infty$. Зокрема, $ZT \approx 9.8$ при $T/\Gamma = 10$. Мінімум на залежності $ZT(U/\Gamma)$ при $T/\Gamma = 10$ виникає, в основному завдяки порушенню закону Відемана—Франца, що викликане взаємодією: $\mathcal{L}(U) > \mathcal{L}(0)$. У той час термоерс змінюється несуттєво в області помірних значень U/Γ . Бачимо, що зниження термоелектричної добротності лише порядку 10%.

4.1.4. Обчислення термоелектричних коефіцієнтів.

Для обчислення термоелектричних коефіцієнтів використовуємо метод матриці густини. Для того щоб отримати замкнену систему рівнянь для елементів матриці густини $\rho_0 = \langle 0|\rho|0\rangle$, $\rho_\uparrow = \langle \uparrow|\rho|\uparrow\rangle$, $\rho_\downarrow = \langle \downarrow|\rho|\downarrow\rangle$, $\rho_{\uparrow\downarrow} = \langle \uparrow|\rho|\downarrow\rangle$, $\rho_2 = \langle 2|\rho|2\rangle$, ми використовуємо діагоналізований гамільтоніан, $\hat{H}_d = \sum_n \varepsilon_n b_n^\dagger b_n + U b_1^\dagger b_1 b_2^\dagger b_2$. Його власні функції $|0\rangle$, $b_1^\dagger|0\rangle$, $b_2^\dagger|0\rangle$, $b_1^\dagger b_2^\dagger|0\rangle$ вибираємо як нові базисні вектори. Відповідні власні значення наступні: 0 , ε_1 , ε_2 , $2\varepsilon_0 + U$.

Інтеграл за t_1 в рівнянні (4.23) не може бути обчислений точно. Однак при малих значеннях параметру Γ/T можна розвинути теорію збурень. Нехтуючи нелокальними ефектами, ми можемо замінити $\tilde{\sigma}(t_1)$ на $\tilde{\sigma}(t)$. Щоб отримати рівняння для $\tilde{\rho}(t)$ з рівняння (4.23), обчислюємо шпур за електронними ступенями свободи електродів. Подвійний комутатор у рівнянні (4.23) містить добуток двох тунельних гамільтоніанів і тому є білінійною функцією операторів $A_j \equiv \sum_k a_{k,j}$ і A_j^\dagger . Обчислення шпуру за квантовими станами в електродах зводиться до обчислення двох статистичних кореляторів: $\langle A_j^\dagger(t) A_j(t_1) \rangle$ і $\langle A_j(t_1) A_j^\dagger(t) \rangle$. Перший з них дається інтегралом

$$\langle A_j^\dagger(t) A_j(t_1) \rangle = \nu \int_0^\infty d\varepsilon e^{i\varepsilon(t-t_1)} f_j(\varepsilon) = \nu T_j e^{i\mu_j(t-t_1)} \int_{-\mu_j/T_j}^\infty dz \frac{e^{iT_j(t-t_1)z}}{e^z + 1}. \quad (4.24)$$

Оскільки $\mu_j/T_j \gg 1$, останній інтеграл може бути апроксимований наступною асимптотикою:

$$I_\delta = \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{e^{iT_j(t-t_1-i\delta)z}}{e^z + 1} = -i\pi \frac{1}{\sinh[\pi T_j(t-t_1-i\delta)]}. \quad (4.25)$$

При $\delta \rightarrow +0$ отримуємо з формул (4.24) і (4.25) вираз для першого з зазначених кореляторів:

$$\langle A_j^\dagger(t) A_j(t_1) \rangle \equiv K_j(t-t_1), \quad K_j(t) = -i\pi T_j \nu \frac{e^{i\mu_j t}}{\sinh[\pi T_j(t-i0)]}. \quad (4.26)$$

Інтегрування за часом виразів, що містять ядро $K_j(t-t_1)$, проводиться з використанням узагальнення формули Сохоцького—Племеля:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{F(\zeta)}{\sinh(\zeta - i0)} = \text{v.p.} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{F(\zeta)}{\sinh \zeta} + i\pi F(0). \quad (4.27)$$

Другий корелятор обчислюється подібним до обчислення першого корелятора чином, що дає наступний результат:

$$\langle A_j(t_1) A_j^\dagger(t) \rangle = 2\pi\nu\delta(t-t_1) - \langle A_j^\dagger(t) A_j(t_1) \rangle. \quad (4.28)$$

Беручи до уваги формули (4.26), (4.28), переписуємо рівняння (4.23) в наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\rho}(t)}{\partial t} = & - \int_{-\infty}^t dt_1 \{ K_L(t-t_1) t_L^2 [\tilde{c}_\uparrow(t) \tilde{c}_\uparrow^\dagger(t_1) \tilde{\rho}(t) - \tilde{c}_\uparrow^\dagger(t_1) \tilde{\rho}(t) \tilde{c}_\uparrow(t)] \\ & + [2\pi\nu\delta(t-t_1) - K_L(t-t_1)] t_L^2 [\tilde{\rho}(t) \tilde{c}_\uparrow^\dagger(t_1) \tilde{c}_\uparrow(t) - \tilde{c}_\uparrow(t) \tilde{\rho}(t) \tilde{c}_\uparrow^\dagger(t_1)] \} \\ & + [(L, \uparrow) \rightarrow (R, \downarrow)] + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (4.29)$$

Повертаючись до представлення Шредінгера, отримуємо наступне рівняння для ρ :

$$\begin{aligned} & \sum_j \left\{ \int_0^\infty d\tau K_j(\tau) t_j^2 \right. \\ & \times (c_j e^{-iH_d \tau} c_j^\dagger e^{iH_d \tau} \rho - e^{-iH_d \tau} c_j^\dagger e^{iH_d \tau} \rho c_j - \rho e^{-iH_d \tau} c_j^\dagger e^{iH_d \tau} c_j + c_j \rho e^{-iH_d \tau} c_j^\dagger e^{iH_d \tau}) \\ & \left. - \frac{1}{2} \Gamma_j (c_j \rho c_j^\dagger - \rho c_j^\dagger c_j) \right\} + \text{H.c.} + i[H_d, \rho] = 0. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Використовуючи формулу (4.30), отримуємо систему лінійних неоднорідних рівнянь для матричних елементів ρ_0 , ρ_\uparrow , ρ_\downarrow , $\rho_{\uparrow\downarrow}$ і ρ_2 :

$$\begin{aligned} & \Gamma_L \left(-f_L^+ \rho_0 + (1 - f_L^+) \rho_\uparrow + \frac{1}{2} f_L^- (\rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\uparrow\downarrow}^*) \right) \\ & + \Gamma_R \left(-f_R^+ \rho_0 + (1 - f_R^+) \rho_\downarrow + \frac{1}{2} f_R^- (\rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\uparrow\downarrow}^*) \right) = 0, \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned} & -i \frac{\hbar}{2} (\rho_{\uparrow\downarrow} - \rho_{\uparrow\downarrow}^*) + \Gamma_L \left(f_L^+ \rho_0 - (1 - f_L^+) \rho_\uparrow - \frac{1}{2} f_L^- (\rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\uparrow\downarrow}^*) \right) \\ & - \Gamma_R \left(f_R^+ (\varepsilon + U) \rho_\uparrow - [1 - f_R^+ (\varepsilon + U)] \rho_2 + \frac{1}{2} f_R^- (\varepsilon + U) (\rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\uparrow\downarrow}^*) \right) = 0, \end{aligned} \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} & i \frac{\hbar}{2} (\rho_{\uparrow\downarrow} - \rho_{\uparrow\downarrow}^*) + \Gamma_R \left(f_R^+ \rho_0 - (1 - f_R^+) \rho_\downarrow - \frac{1}{2} f_R^- (\rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\uparrow\downarrow}^*) \right) \\ & - \Gamma_L \left(f_L^+ (\varepsilon + U) \rho_\downarrow - [1 - f_L^+ (\varepsilon + U)] \rho_2 + \frac{1}{2} f_L^- (\varepsilon + U) (\rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\uparrow\downarrow}^*) \right) = 0, \end{aligned} \quad (4.33)$$

$$\begin{aligned} & -i \hbar (\rho_\uparrow - \rho_\downarrow) - \Gamma_L \left([1 - f_L^+ + f_L^+ (\varepsilon + U)] \rho_{\uparrow\downarrow} + f_L^- (\rho_0 + \rho_\downarrow) + f_L^- (\varepsilon + U) (\rho_\uparrow + \rho_2) \right) \\ & - \Gamma_R \left([1 - f_R^+ + f_R^+ (\varepsilon + U)] \rho_{\uparrow\downarrow} + f_R^- (\rho_0 + \rho_\uparrow) + f_R^- (\varepsilon + U) (\rho_\downarrow + \rho_2) \right) = 0, \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\rho_0 + \rho_\uparrow + \rho_\downarrow + \rho_2 = 1, \quad (4.35)$$

де

$$2f_{L,R}^\pm = f_{L,R}(\varepsilon_1) \pm f_{L,R}(\varepsilon_2), \quad 2f_{L,R}^\pm(\varepsilon + U) = f_{L,R}(\varepsilon_1 + U) \pm f_{L,R}(\varepsilon_2 + U). \quad (4.36)$$

Макроскопічний електричний струм – це слід оператора електричного струму (4.4) в електроді j з матрицею густини, $I_j = \text{Tr}_l \left(\tilde{I}_j(t) \tilde{\sigma}(t) \right)$. Тут матрицю густини $\tilde{\sigma}(t)$ можна замінити на її інтегральне представлення, яке ми отримуємо з рівняння (4.22); тоді маємо

$$I_j = -i \text{Tr}_l \left(\tilde{I}_j(t) \int_{-\infty}^t dt_1 \left[\tilde{H}_{int}(t_1), \tilde{\sigma}(t_1) \right] \right). \quad (4.37)$$

Обчислюючи слід, отримаємо після декількох кроків електричний струм у лівому електроді як функцію елементів матриці густини:

$$I_L = e\Gamma_L [f_L^+ \rho_0 - (1 - f_L^+) \rho_\uparrow + f_L^+ (\varepsilon + U) \rho_\downarrow - [1 - f_L^+ (\varepsilon + U)] \rho_2 + \frac{1}{2} [f_L^- (\varepsilon + U) - f_L^-] (\rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\uparrow\downarrow}^*)]. \quad (4.38)$$

Оператор струму тепла в електроді j визначається так:

$$J_j = \frac{d}{dt} (\hat{H}_j - \mu_j \hat{N}_j). \quad (4.39)$$

Аналогічні обчислення дають макроскопічний струм тепла в лівому електроді як функцію елементів матриці густини:

$$J_L = \frac{\Gamma_L}{2} \{ [(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) f_L(\varepsilon_1) + (\varepsilon_2 - \varepsilon_F) f_L(\varepsilon_2)] \rho_0 - [(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) [1 - f_L(\varepsilon_1)] + (\varepsilon_2 - \varepsilon_F) [1 - f_L(\varepsilon_2)]] \rho_\uparrow + [(\varepsilon_1 + U - \varepsilon_F) f_L(\varepsilon_1 + U) + (\varepsilon_2 + U - \varepsilon_F) f_L(\varepsilon_2 + U)] \rho_\downarrow - [(\varepsilon_1 + U - \varepsilon_F) [1 - f_L(\varepsilon_1 + U)] + (\varepsilon_2 + U - \varepsilon_F) [1 - f_L(\varepsilon_2 + U)]] \rho_2 + \frac{1}{2} [(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) [1 - f_L(\varepsilon_1)] - (\varepsilon_2 - \varepsilon_F) [1 - f_L(\varepsilon_2)]] + [(\varepsilon_1 + U - \varepsilon_F) f_L(\varepsilon_1 + U) - (\varepsilon_2 + U - \varepsilon_F) f_L(\varepsilon_2 + U)] (\rho_{\uparrow\downarrow} + \rho_{\uparrow\downarrow}^*) \}. \quad (4.40)$$

Хоча систему лінійних рівнянь (4.31)—(4.35) можна розв'язати в загальному випадку, ми розглянемо три граничних важливих з практичної точки зору випадки: (ni) $U = 0$, $\Gamma_L = \Gamma_R \equiv \Gamma$ (електрони без взаємодії, ni – non-interacting, і симетричний тунельний контакт), (a) $U = 0$, $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ (електрони без взаємодії, асиметричний тунельний контакт), (b) $U \rightarrow \infty$, $\Gamma_L = \Gamma_R$ (режим кулонівської блокади, симетричний тунельний контакт). У кожному з цих випадків ми отримуємо явні формули для електричного струму та струму тепла. У випадку (ni) вирази для струмів наступні:

$$I^{(ni)} = e \frac{\Gamma}{2} \frac{h^2}{\Gamma^2 + h^2} (f_L^+ - f_R^+), \quad (4.41)$$

$$J^{(ni)} = \frac{\Gamma}{2} \left\{ (\varepsilon_0 - \varepsilon_F) (f_L^+ - f_R^+) \frac{h^2}{\Gamma^2 + h^2} + \frac{h}{2} (f_L^- - f_R^-) \right\}. \quad (4.42)$$

У випадках (а) та (б) отримуємо:

$$I^{(a)} = e \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L + \Gamma_R} \frac{h^2}{\Gamma_L \Gamma_R + h^2} (f_L^+ - f_R^+), \quad (4.43)$$

$$J^{(a)} = \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L + \Gamma_R} \left\{ (\varepsilon_0 - \varepsilon_F) \frac{h^2}{\Gamma_L \Gamma_R + h^2} (f_L^+ - f_R^+) + \frac{h}{2} (f_L^- - f_R^-) \right\}; \quad (4.44)$$

$$I^{(b)} = -e \Gamma h^2 \frac{1}{M_0} \left\{ -[(f_L^+)^2 - (f_R^+)^2] + 2(f_L^+ - f_R^+) + [(f_L^-)^2 - (f_R^-)^2] \right\}, \quad (4.45)$$

$$J^{(b)} = -\Gamma h^2 \frac{1}{M_0} \left\{ (\varepsilon_0 - \varepsilon_F) M_1 + h M_2 \right\}, \quad (4.46)$$

де

$$M_0 = M_3 \Gamma^2 + M_4 h^2, \quad (4.47)$$

$$M_1 = (f_L^+ - f_R^+) (2 - f_L^+ - f_R^+) + (f_L^-)^2 - (f_R^-)^2, \quad (4.48)$$

$$M_2 = (f_L^- - f_R^-) + (f_L^+ f_R^- - f_L^- f_R^+), \quad (4.49)$$

$$M_3 = (2 - f_L^+ - f_R^+) \left[-(2 - f_L^+ - f_R^+) + (f_L^+ + f_R^+) f_L^- f_R^- \right. \\ \left. + f_L^+ f_R^+ (2 - f_L^+ - f_R^+) - (f_L^-)^2 - (f_R^-)^2 \right], \quad (4.50)$$

$$M_4 = - \left[(2 + f_L^+ + f_R^+) (2 - f_L^+ - f_R^+) + (f_L^- + f_R^-)^2 \right]. \quad (4.51)$$

Використовуючи результати для струмів, легко обчислити відповідні термоелектричні коефіцієнти, G , L , K [див. формули (4.13)], в цих граничних випадках:

$$G^{(ni)} = -\frac{e^2}{4} \Gamma \frac{h^2}{\Gamma^2 + h^2} \left\{ f'_\varepsilon (\varepsilon_1 - \varepsilon_F) + f'_\varepsilon (\varepsilon_2 - \varepsilon_F) \right\}, \quad (4.52)$$

$$L^{(ni)} = -\frac{e \Gamma}{4 T \Gamma^2 + h^2} \frac{h^2}{\Gamma^2 + h^2} \{(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) f'_\varepsilon(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) + (\varepsilon_2 - \varepsilon_F) f'_\varepsilon(\varepsilon_2 - \varepsilon_F)\}, \quad (4.53)$$

$$K^{(ni)} = -\frac{1 \Gamma}{4 T \Gamma^2 + h^2} \frac{h^2}{\Gamma^2 + h^2} \{(\varepsilon_1 - \varepsilon_F)^2 f'_\varepsilon(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) + (\varepsilon_2 - \varepsilon_F)^2 f'_\varepsilon(\varepsilon_2 - \varepsilon_F)\}; \quad (4.54)$$

$$G^{(a)} = -\frac{e^2}{2} \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L + \Gamma_R} \frac{h^2}{\Gamma_L \Gamma_R + h^2} \{f'_\varepsilon(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) + f'_\varepsilon(\varepsilon_2 - \varepsilon_F)\}, \quad (4.55)$$

$$L^{(a)} = -\frac{e}{2 T} \frac{1}{\Gamma_L + \Gamma_R} \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L \Gamma_R + h^2} \frac{h^2}{\Gamma_L \Gamma_R + h^2} \{(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) f'_\varepsilon(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) + (\varepsilon_2 - \varepsilon_F) f'_\varepsilon(\varepsilon_2 - \varepsilon_F)\}, \quad (4.56)$$

$$K^{(a)} = -\frac{1}{2 T} \frac{1}{\Gamma_L + \Gamma_R} \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L \Gamma_R + h^2} \frac{h^2}{\Gamma_L \Gamma_R + h^2} \{(\varepsilon_1 - \varepsilon_F)^2 f'_\varepsilon(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) + (\varepsilon_2 - \varepsilon_F)^2 f'_\varepsilon(\varepsilon_2 - \varepsilon_F)\}; \quad (4.57)$$

$$G^{(b)} = -e^2 \Gamma h^2 \frac{1}{R_0} \{f'_\varepsilon(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) [1 - f(\varepsilon_2 - \varepsilon_F)] + f'_\varepsilon(\varepsilon_2 - \varepsilon_F) [1 - f(\varepsilon_1 - \varepsilon_F)]\}, \quad (4.58)$$

$$L^{(b)} = -e \frac{\Gamma}{T} h^2 \frac{1}{R_0} \{(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) f'_\varepsilon(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) [1 - f(\varepsilon_2 - \varepsilon_F)] + (\varepsilon_2 - \varepsilon_F) f'_\varepsilon(\varepsilon_2 - \varepsilon_F) [1 - f(\varepsilon_1 - \varepsilon_F)]\}, \quad (4.59)$$

$$K^{(b)} = -\frac{\Gamma}{T} h^2 \frac{1}{R_0} \{(\varepsilon_1 - \varepsilon_F)^2 f'_\varepsilon(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) [1 - f(\varepsilon_2 - \varepsilon_F)] + (\varepsilon_2 - \varepsilon_F)^2 f'_\varepsilon(\varepsilon_2 - \varepsilon_F) [1 - f(\varepsilon_1 - \varepsilon_F)]\}, \quad (4.60)$$

де

$$R_0 = \{1 - f(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) f(\varepsilon_2 - \varepsilon_F)\} \{[2 - f(\varepsilon_1 - \varepsilon_F) - f(\varepsilon_2 - \varepsilon_F)]^2 \Gamma^2 + 4 h^2\}. \quad (4.61)$$

Зауважимо, що в межах застосовності теорії збурень співвідношення Кельвіна справедливе. Потужність і термоелектрична добротність були знайдені чисельно з використанням формул (4.52)—(4.60) для термоелектричних коефіцієнтів.

4.2. Термоелектричні ефекти в хіральному тунелюванні електронів у металічних вуглецевих нанотрубках.

У даному підрозділі з'ясований вплив ефекту хірального тунелювання на термоелектричні властивості металічних одностінних вуглецевих нанотрубок. Коли хіральна нанотрубка знаходиться під дією електростатичного та псевдомагнітного потенціалів одночасно, то виникає так званий ефект хірального тунелювання електронів [76, 77], який характеризується осцилюючою залежністю коефіцієнта проходження від енергії, а також глибоким мінімумом у цій залежності («щілиною»). Така поведінка коефіцієнта проходження призводить до порушення закону Відемана—Франца і появи піків у термоелектрорушійній силі. Як наслідок, термоелектрична добротність може в певній області параметрів набувати великих значень.

4.2.1. Коефіцієнт проходження.

Гамільтоніан електрона в металічній одностінній вуглецевій нанотрубці (single wall nanotube, SWNT) з хіральним кутом θ для довільної форми потенціалу розсіяння має вигляд:

$$\hat{H} = -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta} \partial_x \\ e^{-i\theta} \partial_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} W_d(x) & W_o(x)e^{i\varphi} \\ W_o(x)e^{-i\varphi} & W_d(x) \end{pmatrix}, \quad (4.62)$$

де $v_F \simeq 8 \cdot 10^5$ m/s – швидкість Фермі, x – координата вздовж осі трубки, кут θ визначає кут згортання графенового листа (ми вважаємо $\theta=0$ для структури «крісло», armchair, і $\theta=\pi/6$ для структури «зигзаг», як у роботі [84]). Другий доданок у формулі (4.62) – це матричний потенціал розсіяння (бар'єр), що створюється, наприклад, еластичною деформацією поверхні трубки [85] або розсіянням електронів на молекулі фулерену всередині одностінної вуглецевої нанотрубки [84]. У першому випадку W_d – це потенціал деформації і W_o виникає завдяки зміні інтегралу перескоку між двома атомами вуглецю під дією напруження. Як правило, W_d і W_o суттєво відрізняються за величиною. В якості оцінки можна брати $W_d \sim 10$ eV і $W_o \sim 1$ eV. Амплітуди $W_{d,o}$ і фаза φ виражаються

через компоненти тензора напружень (див., наприклад, [85]). Матричний потенціал вигляду (4.62) виникає також у вуглецевих наностручках, завдяки гібридизації LUMO станів (LUMO – the lowest unoccupied molecular orbital) молекули фулерену з електронними станами, що проводять, в металічній одностінній нанотрубці (див. роботу [84]). У цьому випадку амплітуди $W_{d,o}$ можуть бути одного порядку ($W_d \sim W_o \sim 1 \text{ eV}$). У подальшому розглядатимемо $W_{d,o}$ і φ як незалежні вхідні параметри.

Гамільтоніан (4.62) написаний лише для $+k_F$ -долини, оскільки ми вважаємо, що характерний просторовий масштаб потенціалу розсіяння перевищує сталу підрешітки, $W_d(x)/W'_d(x) > a_0$, і можна знехтувати міждолинним електронним розсіянням [86]. Для того, щоб вирішити задачу розсіяння точно, ми моделюємо потенціал розсіяння прямокутним бар'єром скінченної ширини a і висоти $W_{d,o}$.

Розв'язуючи рівняння Дірака з гамільтоніаном (4.62) для прямокутного потенціалу, знаходимо електронні хвильові функції в трьох областях, «I» ($x < 0$, нульовий потенціал), «II» ($0 < x < a$, скінченний потенціал), «III» ($x > a$, нульовий потенціал):

$$\psi_I(x) = e^{ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix} + \tilde{r} e^{-ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\theta} \end{pmatrix}, \quad (4.63)$$

$$\psi_{II}(x) = c_1 e^{i(k-q)x} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{\hbar v_F e^{-i\theta} (\kappa - q) + W_o e^{-i\varphi}}{W_d - \varepsilon} \end{pmatrix} + c_2 e^{-i(k+q)x} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\hbar v_F e^{-i\theta} (\kappa + q) - W_o e^{-i\varphi}}{W_d - \varepsilon} \end{pmatrix}, \quad (4.64)$$

$$\psi_{III}(x) = \tilde{t} e^{ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix}. \quad (4.65)$$

Тут $k = \pm |\varepsilon| / (\hbar v_F)$ – це хвильові вектори для зони провідності та валентної зони, $q = (W_o / \hbar v_F) \cos \theta$ і $\kappa = \sqrt{(\varepsilon - W_d)^2 - W_o^2 \sin^2(\theta - \varphi)} / (\hbar v_F)$; \tilde{r} , \tilde{t} – амплітуди

відбиття та проходження ($|\tilde{r}|^2 + |\tilde{t}|^2 = 1$), $c_{1,2}$ – амплітуди плоских хвиль в області бар'єра, що рухаються вліво та вправо. Ці величини та коефіцієнт проходження $D = |t|^2$ отримуються зшивкою хвильових функцій (4.63)–(4.65) у точках $x = 0, a$. Імовірність проходження D для рівних електростатичного та псевдомагнітного потенціалів $W_d = W_o \equiv W$ має простий вигляд:

$$D(\varepsilon, \theta - \varphi) = \left\{ \cos^2(w\chi) + \frac{(1 - \varepsilon/W)^2}{\chi} \sin^2(w\chi) \right\}^{-1}, \quad (4.66)$$

де $w = Wa / (\hbar v_F)$ – безрозмірний потенціал розсіяння і $\chi = \kappa \hbar v_F / W$. Введемо позначення θ_{eff} для різниці $\theta - \varphi$. Імовірність проходження (4.66) сильно чутлива до енергії електрона ε . Зазначимо, що в роботах [76, 77] був розглянутий граничний випадок локального (вигляду дельта-функції) потенціалу розсіяння ($W \rightarrow \infty, a \rightarrow 0, w = const$), коли коефіцієнт проходження перестає залежати від енергії. З формули (4.66) легко отримати відповідні формули роботи [77] в границі $\varepsilon \ll W$.

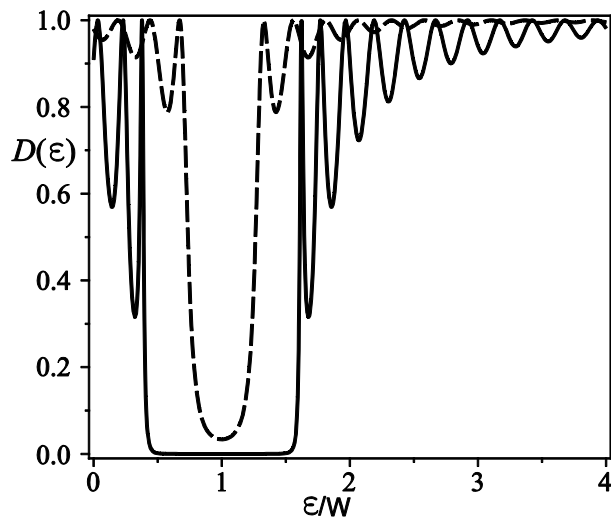


Рис. 4.13. Енергетична залежність коефіцієнта проходження $D(\varepsilon)$, для $w=7$ і $\theta_{eff} = 1.5$ (суцільна крива); для $w=12$ і $\theta_{eff} = 0.2$ (пунктирна крива).

З формули (4.66) видно, що імовірність проходження є осцилюючою функцією енергії (див. рис. 4.13). Для $\theta_{eff} = 0$ електронні хвилі повністю проходять через бар'єр ($D=1$). Відсутність розсіяння назад – це прояв одновимірного тунелювання Клейна [87], яке формально пояснюється збереженням псевдоспіну. Для ненульових хіральных кутів коефіцієнт проходження демонструє резонансну поведінку, тобто $D(\varepsilon, \theta_{eff})=1$ для $\varepsilon_N = W + \sqrt{(\hbar v_F \pi N / a)^2 + W^2 \sin^2 \theta_{eff}}$, де N – ціле число. Форма кривої поблизу кожного піку має лоренцевий вигляд. Із збільшенням безрозмірної сили потенціального бар'єру період осциляцій зменшується, тобто зменшується відстань між резонансними піками. Зазначимо, що масштаб цієї відстані різний для малих і великих N : (i) $\delta\varepsilon_N \sim (\hbar v_F / a)^2 / W$ для малих N , $N \ll w / \pi$, і (ii) $\delta\varepsilon_N \sim \hbar v_F / a$ для великих N , $N \gg w / \pi$. Крім того, ймовірність проходження (4.66) має таку специфічну рису як класично заборонена область («щілина» $\Delta_g \equiv 2W_o \sin \theta_{eff}$) для тунелювання електронів з енергіями $|W_d - \varepsilon| < W_o \sin \theta_{eff}$, див. рис. 4.13. Цю поведінку (резонансні піки та провали в коефіцієнті проходження) легко зрозуміти на якісному рівні. У випадку, коли матричний потенціал у формулі (4.62) є константою, псевдомагнітна компонента W_o потенціалу розсіяння дає зсув імпульсу та виникнення щілини в енергетичному спектрі діраківських електронів, $\varepsilon = W_d \pm \sqrt{(\hbar v_F k + \text{Re}[W_o])^2 + (\text{Im}[W_o])^2}$. Резонанси при енергіях ε_N з'являються завдяки конструктивній інтерференції плоских хвиль в області «II».

Хіральне тунелювання в одностінних вуглецевих нанотрубках може бути більш вираженим явищем у порівнянні з тунелюванням Клейна в графені або біграфені. У двовимірних системах при обчисленні фізичних величин потрібно інтегрувати коефіцієнти проходження за кутами падіння. Тому гостра залежність електронного проходження та хіральні властивості системи згладжуються. На відміну від цього, в одновимірній системі ефективний хіральний кут $\theta_{eff} = \theta - \varphi$, що визначає хіральні властивості деформованої нанотрубки, грає ключову роль в електронному розсіянні.

4.2.2. Немонотонна температурна залежність кондуктансу та піки термоелектрорушійної сили.

Явна залежність коефіцієнту проходження (4.66) від енергії дозволяє проаналізувати залежності термоелектричних коефіцієнтів від температури та хімічного потенціала з використанням формалізму Ландауера—Бюттікера [50]. Ми розглянемо стандартну геометрію одноелектронного транзистора на основі одностінної нанотрубки з хіральною розсіювачем, що характеризується пропускною здатністю. Електрони в двох електродах характеризуються функцією розподілу Фермі—Дірака $f_{L/R}(\varepsilon) = (\exp[(\varepsilon - \mu_{L/R}) / (k_B T_{L/R})] + 1)^{-1}$ з хімічними потенціалами $\mu_{L/R}$. Ми також вважаємо, що границя між металічною нанотрубкою та електродами прозора.

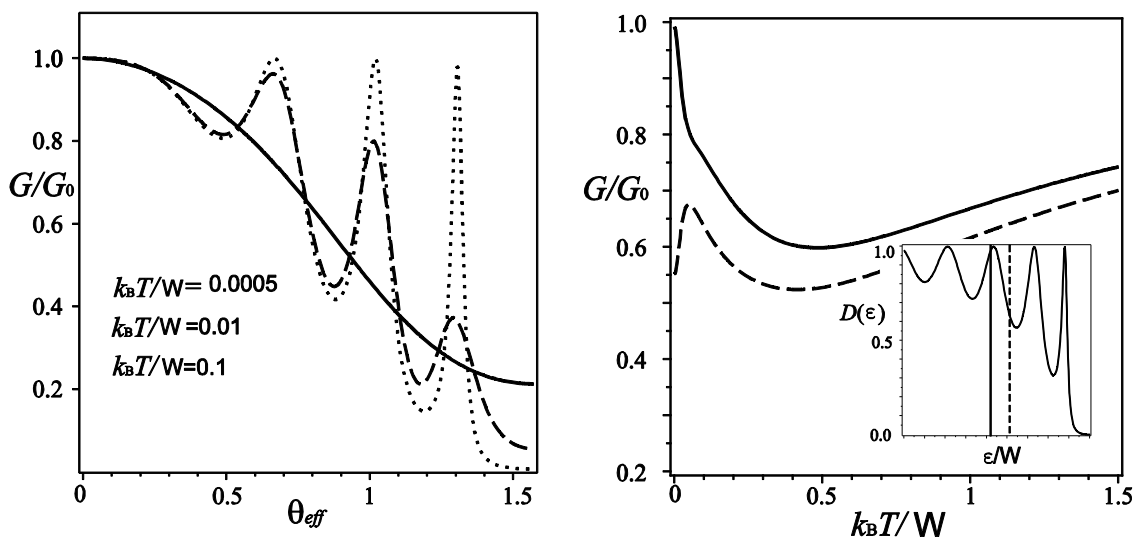


Рис. 4.14. Ліва панель: Залежність нормованого кондуктансу від хірального куту для різних температур і $w=12$. Права панель: Залежність нормованого кондуктансу від температури для $w=12$, $\mu=0$ і двох хіральних кутів: $\theta_{eff} = 0.65$ (пунктирна крива), $\theta_{eff} = 0.8$ (суцільна крива). Ці хіральні кути відповідають двом якісно різним випадкам, коли хімічний потенціал співпадає (суцільна крива) і не співпадає (пунктирна крива) з резонансним піком у коефіцієнті проходження. Вставка: ескіз енергетичної залежності коефіцієнта проходження, на якому вертикальні лінії показують два цих випадки.

Спочатку ми розглянемо електричний кондуктанс у режимі лінійного відгуку, $\mu_L - \mu_R = eV \rightarrow 0$. Відповідна формула Ландауера

$$G(T, \theta_{\text{eff}}) = \frac{G_0}{4k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon, \theta_{\text{eff}})}{\cosh^2[(\varepsilon - \mu) / (2k_B T)]} \quad (4.67)$$

дає залежності кондуктансу від температури та хірального куту. У формулі (4.67) $G_0 = 4e^2 / (2\pi\hbar)$, причому числовий множник 4 виникає завдяки виродженості за спіном і долиною. Загалом ненульова температура викликає подавлення резонансних піків для ненульових хіральних кутів, див. рис. 4.14 (ліва панель). Чисельні розрахунки показують, що резонансні риси в коефіцієнті проходження залишаються спостережуваними до температур $k_B T / W \sim 0.05$.

Бачимо, що температурна залежність кондуктансу немонотонна. При нульовій температурі нормований кондуктанс, G / G_0 , дорівнює коефіцієнту проходження при $\varepsilon = \mu$ і для резонансного тунелювання дає одиницю. При високих температурах у процес розсіяння залучаються електрони з широкого енергетичного вікна, більшість з яких характеризуються коефіцієнтами проходження, близькими до одиниці. Тому при високих температурах нормований кондуктанс прямує до одиниці. При температурах порядку $k_B T \sim W^2 a / (\hbar v_F)$ кондуктанс має мінімум, що можна легко пояснити наявністю енергетичного провалу в коефіцієнті проходження. Невелике (обумовлене температурою) зростання кондуктансу (малий пік при низьких температурах, див. пунктирну криву на рис. 4.14, права панель) може виникнути, коли хімічний потенціал нанотрубки знаходиться між резонансними піками в енергетичній залежності коефіцієнта проходження. Новий енергетичний масштаб тепер – це відстань між резонансними піками, $k_B T \sim (\hbar v_F / a)^2 W^{-1}$. Коли μ знаходиться поблизу резонансного піку $\mu \simeq \varepsilon_N$, температурна залежність кондуктансу є немонотонною з одним мінімумом при $k_B T \sim W^2 a / (\hbar v_F)$, див. рис. 4.14 (права панель). Аналогічну поведінку можна очікувати для температурної залежності теплового кондуктансу (див. нижче).

Тепер розглянемо термоелектричні ефекти в нанотрубках у присутності хірального тунелювання. Припускаємо, що електроди підтримуються як при різних хімічних потенціалах, так і при різних температурах. Термоерс S визначається умовою нульового електричного струму, $G_0 L^{(0)} V + (4ek_B) / (2\pi\hbar) L^{(1)} \delta T = 0$. Відповідна формула [50] в режимі лінійного відгуку наступна: $S = V / \delta T = -(k_B / e)(L^{(1)} / L^{(0)})$, де

$$L^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T} \right)^1 D(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \quad (4.68)$$

і δT – це різниця температур між електродами – виток і сток електронів.

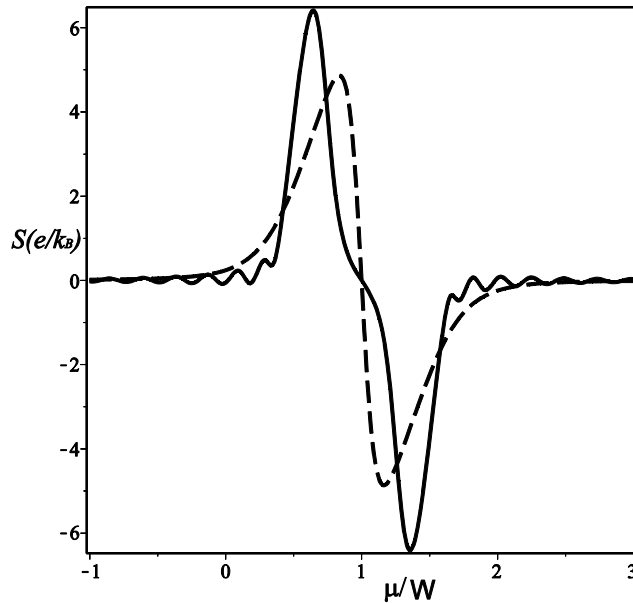


Рис. 4.15. Залежність термоерс від нормованого хімічного потенціалу μ / W для $w=12, \theta_{\text{eff}}=0.6$ при температурах $k_B T / W = 0.03$ (суцільна крива) і $k_B T / W = 0.1$ (пунктирна крива).

Добре відомо, що при низьких температурах, $k_B T \ll \mu$, і при плавній залежності коефіцієнта проходження від енергії величина $L^{(1)}$ пропорційна першій похідній коефіцієнта проходження, $L^{(1)} \simeq (\pi^2 / 3)(k_B T) D'(\mu)$. У цьому випадку термоерс описується формулою Мотта $S = (-k_B / e)(\pi^2 / 3) k_B T [d \ln G(\mu) / d\mu]$. У металічних нанотрубках, де транспорт електронів балістичний (електрон-

фононним розсіянням при кімнатній температурі можна знехтувати [88]), кондуктанс у відсутності домішок не залежить від хімічного потенціалу. Термоерс дорівнює нулю. Скінченна (хоча мала) термоерс викликана електронним розсіянням на локальних дефектах (домішках). Ефекти хірального тунелювання можуть суттєво підняти термоерс, завдяки появі гострих рис (енергетичної «щілини») в енергетичній залежності коефіцієнта проходження (див. рис. 4.15). Термоерс при хіральному розсіянні змінює знак при зростанні хімічного потенціала. Вона характеризується яскраво вираженим піком і провалом при енергіях, що відповідають границям енергетичної «щілини» в коефіцієнті проходження. Малі осциляції в залежності термоерс від хімічного потенціала при низьких температурах (див. рис. 4.15) викликані аналогічними осциляціями в енергетичній залежності коефіцієнта проходження, і вони згладжуються із зростанням температури.

4.2.3. Сильне підвищення термоелектричної добротності.

Нагадаємо, що термоелектрична добротність твердотільної термоелектричної системи визначається формулою (1.7), де $G = G_0 L^{(0)}$ – це електричний кондуктанс, S – термоерс, або коефіцієнт Зеєбека (див. визначення вище в цьому підрозділі). Величина в знаменнику – це тепловий кондуктанс, який містить внесок коливань решітки (фонони) K_{ph} та електронний внесок K_e . Зазначимо, що K_e – це тепловий кондуктанс при умові ефекту Зеєбека, тобто при нульовому електричному струмі. Він пов'язаний із стандартним тепловим кондуктансом $K = 4k_B^2 / (2\pi\hbar) TL^{(2)}$ (який визначається умовою відсутності напруги) простим співвідношенням:

$$K_e = \frac{4k_B^2 T}{2\pi\hbar} \left(L^{(2)} - \frac{[L^{(1)}]^2}{L^{(0)}} \right). \quad (4.69)$$

Спочатку ми розглядаємо лише електронний внесок у ZT і нехтуємо фононним тепловим кондуктансом K_{ph} у формулі (1.7). У цьому випадку термоелектрична добротність виражається через моменти $L^{(i)}$ наступним чином:

$$ZT = \left[\frac{L^{(0)}L^{(2)}}{[L^{(1)}]^2} - 1 \right]^{-1}. \quad (4.70)$$

Безрозмірна величина (4.70) характеризує ефективність перетворення енергії в термоелектричних пристроях і пов'язана з максимальною ефективністю термоелектричних пристроїв формулою

$$\eta_m = \frac{T_{high} - T_{low}}{T_{high}} \left(1 - \frac{1 + \frac{T_{low}}{T_{high}}}{\sqrt{1 + ZT} + \frac{T_{low}}{T_{high}}} \right), \quad (4.71)$$

де $T_{low/high}$ – низька та висока температури резервуарів у тепловому двигуні. У режимі лінійного відгуку, коли ефективність Карно мала, $\eta_C = (T_{high} - T_{low}) / T_{high} \ll 1$, формула (4.71) переходить у формулу (4.18). Очевидно, що $\eta_m \rightarrow \eta_C$ при $ZT \rightarrow \infty$. З формули (4.71) бачимо, що для $ZT \approx 1$ і $T_{high} \gg T_{low}$ отримуємо ефективність, приблизно рівну 0.3; це достатнє для застосування значення ефективності. Тому пошук матеріалів з високими значеннями термоелектричної добротності ($ZT > 1$) – важлива проблема в сучасній фізиці термоелектричних явищ (див., наприклад, [89, 90]).

З визначення (1.7) зрозуміло, що для того, щоб отримати великі значення термоелектричної добротності, необхідно зменшити тепловий кондуктанс та/або підвищити електричний кондуктанс та термоерс. Однак цього, зазвичай, складно досягти, по-перше, через закон Відемана—Франца $K(T) / [G(T)k_B T] = (\pi^2 / 3)(k_B / e)^2$ (число Лоренца), який зв'язує тепловий та електричний кондуктанси. По-друге, через формулу Мотта, згідно з якою підвищення G призводить до зменшення коефіцієнту Зеєбека.

Продемонструємо деякі фундаментальні властивості «електронної» термоелектричної добротності, що впливають з математичного аналізу формули (4.70). З теореми Коші—Шварца—Буняковського

$$\left| \int_a^b f_1 f_2 dg \right|^2 \leq \left(\int_a^b |f_1|^2 dg \right) \left(\int_a^b |f_2|^2 dg \right) \quad (4.72)$$

легко зробити висновок, що $[L^{(1)}]^2 / [L^{(0)}L^{(2)}] \leq 1$, якщо в якості f_1 , f_2 , dg взяти $f_1 = \sqrt{D(\varepsilon)}$, $f_2 = \sqrt{D(\varepsilon)}(\varepsilon - \mu) / (k_B T)$, $dg = (\partial f / \partial \varepsilon) d\varepsilon$. Звідси випливає, що $0 < ZT < \infty$. Термоелектрична добротність мала для будь-якого плавного коефіцієнта проходження, тому що $ZT \propto [D'(\mu) / D(\mu)]^2 \ll 1$.

Покажемо, що електронне розсіяння «хіральним розсіювачем» у нанотрубці призводить до сильного порушення закону Відемана—Франца. У комбінації з тим фактом, що термоерс має максимум (див. рис. 4.15) ця специфічна залежність термоелектричних коефіцієнтів від хімічного потенціалу дозволяє отримати великі значення «електронної» термоелектричної добротності.

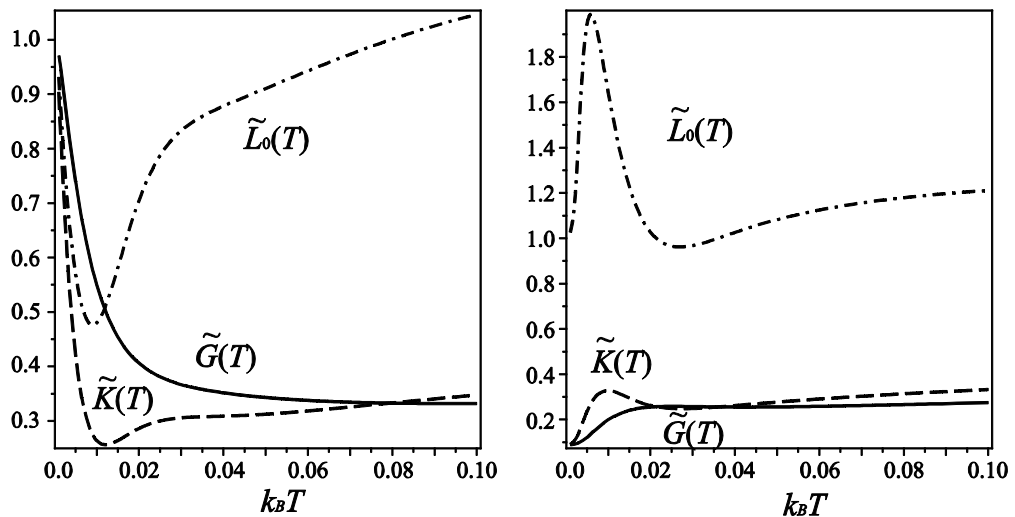


Рис. 4.16. Температурна залежність електричного кондуктансу $\tilde{G} = G / G_0$ (суцільна крива), теплового кондуктансу $\tilde{K} = K / [(\pi^2 / 3)(4k_B^2) / (2\pi\hbar)T]$ (пунктирна крива) і нормованого числа Лоренца $\tilde{L}_0 = \tilde{K} / \tilde{G}$ (штрих-пунктирна крива) для $w=15$ і $\theta_{\text{eff}}=1.4$ в двох випадках: (i) хімічний потенціал $\mu / W = -0.07$ співпадає (ліва панель) з резонансною енергією (резонанс, коефіцієнт проходження близький до одиниці), (ii) хімічний потенціал між двома піками (не в резонансі), $\mu / W = -0.03$ (права панель).

Відхилення від закону Відемана—Франца, тобто поява залежного від температури «числа» Лоренца $\mathcal{L}_0(T)$ пояснюється наявністю гострих рис у залежності коефіцієнту проходження від енергії. У результаті можна отримати резонансне підвищення відношення Лоренца при температурі $k_B T \sim (\hbar v_F / a)^2 W^{-1}$ і за умови, що хімічний потенціал не співпадає з резонансними енергіями ε_N хірального тунелювання (див. рис. 4.16, права панель). І навпаки, при $\mu \rightarrow \varepsilon_N$ (резонансне хіральне тунелювання) закон Відемана—Франца порушується так, що виникає провал у функції $\mathcal{L}_0(T)$ при низьких температурах (див. рис. 4.16, ліва панель).

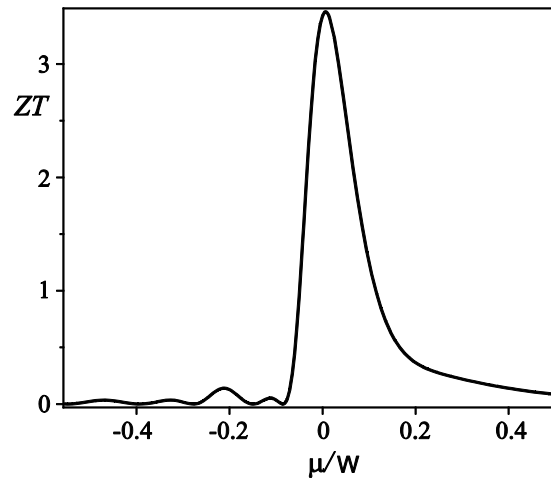


Рис. 4.17. Залежність термоелектричної добротності від μ/W для $w=8$, $\theta_{\text{eff}} = 1.52$ і $k_B T / W = 0.02$.

Термоелектрична добротність пропорційна квадрату коефіцієнта Зеєбека, $ZT \propto D'(\mu)^2$. Це означає, що максимум ZT виникає, коли хімічний потенціал знаходиться в вузьких енергетичних областях, де коефіцієнт проходження експоненціально спадає або зростає, див. рис. 4.13. Окрім того, взаємозв'язок резонансної поведінки «числа» Лоренца (піки та провали в його температурній залежності) і піки в термоерс призводять до сильного підвищення «електронної» термоелектричної добротності при низьких температурах для вузького діапазону хімічних потенціалів, див. рис. 4.17. На рис. 4.18 температурна залежність максимальної термоелектричної добротності показана для різних хіральних кутів,

що відповідають різним значенням коефіцієнту проходження при $\mu = 0$. Термоелектрична добротність як функція хімічного потенціалу має максимум, і, підбираючи хімічний потенціал (або ефективний хіральный кут) можна досягти великих значень «електронної» термоелектричної добротності $(ZT)_e \approx 5$.

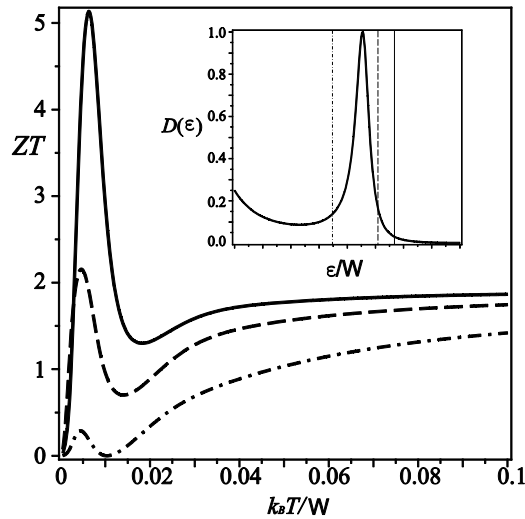


Рис. 4.18. Залежність термоелектричної добротності від нормованої температури $k_B T / W$ для $w = 15$ і $\mu = 0$. Три криві відповідають різним хіральним кутам: суцільна крива – $\theta_{eff} = 1.45$, пунктирна – $\theta_{eff} = 1.4$, штрих-пунктирна – $\theta_{eff} = 1.3$. Ці кути відповідають різним положенням резонансних піків по відношенню до $\mu = 0$. Вставка: енергетична залежність коефіцієнта проходження; три вертикальні лінії показують положення хімічного потенціалу по відношенню до піка для трьох хіральних кутів, зазначених вище.

Тепер ми оцінимо поправку $\chi(T) = (1 + K_{ph} / K_e)^{-1}$ в тепловий кондуктанс, що виникає за рахунок внеску збуджень решітки. Повна термоелектрична добротність дорівнює $ZT = \chi(T)(ZT)_e$. Точно обчислити фононну частину теплового кондуктансу складно, тому що ми не знаємо, як пружна деформація, що формує необхідний для хірального тунелювання електронів у нанотрубці потенціал розсіяння, впливає на фононний транспорт. Відомо (див., наприклад, [91]), що при низьких температурах в одностінній нанотрубці в тепловий кондуктанс дають внесок 4 фононні моди. Щоб оцінити мінімум $\chi(T)$, можемо

припустити, що навіть під дією напруження решітка не розсіює фонони назад. Тоді $K_{ph}(T) = 4K_0(T)$, де $K_0(T) = (\pi^2/3)k_B^2/(2\pi\hbar)T$ – універсальний квант теплового кондуктансу [92, 93]. Чисельні обчислення дають $\chi(T_p) \approx 0.1$ для температури T_p , що відповідає максимуму електронної термоелектричної добротності ZT (див. рис. 4.18). Цей фактор призводить до сильного зменшення термоелектричної добротності. Щоб підвищити ZT до значень $ZT > 1$, які потрібні для можливого використання, потрібно зменшити внесок збуджень решітки в тепловий кондуктанс і при цьому залишити незмінним електронний внесок в тепловий кондуктанс. Ми пропонуємо використовувати композитну термопару з сильною акустичною неузгодженістю на поверхнях. У цьому випадку можна сильно пригнітити фононний тепловий кондуктанс (на фактор $s/s_{NT} \ll 1$, де s_{NT} – це швидкість фононів у нанотрубці та s – це швидкість звуку в акустично «м'якому» матеріалі, див., наприклад, [94]) і підвищити ZT до значень, порівнянних з обчисленою електронною термоелектричною добротністю.

Висновки

Досліджений спітронний термоелектричний пристрій на основі квантової точки з повністю поляризованими в протилежних напрямках витоком і стоком електронів. Як відомо, електричний і тепловий струм тече в системі за умови наявності зовнішнього магнітного поля, непаралельного до намагніченості електродів. Ми показали, що при магнітних полях, близьких до оптимального (того, при якому потужність термоелектричної системи максимальна), термоелектрична добротність розглянутого спітронного пристрою в декілька разів перевищує відповідну величину для звичайного термоелектрика з неполяризованими електронами на основі квантової точки. Також ми врахували вплив кулонівського відштовхування електронів на термоелектричну добротність і показали, що для нашої системи (це узгоджується з попередніми результатами [81–83]) термоелектрична добротність при сильній електрон-електронній

взаємодії така сильна, як і в випадку електронів без взаємодії, а слабка взаємодія несуттєво знижує термоелектричну добротність.

Крім того, в даному розділі був розглянутий термоелектрик на основі пружно деформованої металічної вуглецевої нанотрубки. Оптимізована електронна термоелектрична добротність за хімічним потенціалом, і оцінена фононна поправка до теплового кондуктансу, яка призводить до зниження електронної термоелектричної добротності.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішена важлива задача в області теоретичної фізики конденсованого стану, а саме: вивчені квантові електромеханічні і термоелектричні ефекти в транспорті поляризованих за спіном електронів у наноструктурах.

Основними результатами дисертаційної роботи є наступні:

1. Теоретично досліджений вплив неповної поляризації електронів за спіном на область нестійкості електричного шатлу, а також керування за допомогою зовнішнього магнітного поля переходом між шатлівським і вібронним режимами електронного транспорту. Показано, що контролювати шатлівську нестійкість магнітним полем можна лише для достатньо високих значень ступеня поляризації (чисельно критичне значення ступеня поляризації приблизно дорівнює 64%).
2. Теоретично знайдена область нестійкості для магнітного шатлу з неповною поляризацією електронів за спіном. Показано, що при відмінній від стовідсоткової поляризації виникає нижня гілка на залежності критичного магнітного поля, що відокремлює шатлівську область від вібронної, від ширини рівня. Якісно пояснена фізична природа нижньої гілки.
3. Теоретично показана принципова можливість існування термоіндуктованого одноелектронного шатлу та отримана для нього область шатлівської нестійкості.
4. Передбачений новий механізм тертя в наноелектромеханічних системах, що характеризується немонотонною залежністю від температури коефіцієнта тертя.
5. Теоретично вивчені термоелектричні характеристики спітронного термоелектричного пристрою на основі квантової точки. Показано, що термоелектрична добротність (ZT) пристрою, який розглядається, в режимі максимальної потужності в декілька разів перевищує термоелектричну добротність аналогічного пристрою з неполяризованими електронами.

Знайдено, що помірний електрон-електронний взаємодія несуттєво знижує термоелектричну добротність у порівнянні з випадком електронів, що не взаємодіють, а в режимі кулонівської блокади оптимальне значення термоелектричної добротності відновлюється.

6. Теоретично вивчені термоелектричні ефекти при хіральному тунелюванні електронів через металічну одностінну вуглецеву нанотрубку. Показано, що хіральне тунелювання призводить до порушення закону Відемана—Франца та до появи піків на залежності термоелектрорушійної сили від хімпотенціалу, що, в свою чергу, призводить до високих значень термоелектричної добротності ZT .

Автор глибоко вдячна науковому керівнику Іллі Валентиновичу Криве за керівництво роботою, постійну увагу та підтримку. Автор дякує Сергію Івановичу Кулінічу за численні обговорення та корисні поради, а також Р.І. Шехтеру, М. Йонсону, Ю.В. Парку, А.А. Крохину, Х.Ч. Парку, А.В. Парафіло і Ю.Д. Зубову за співробітництво.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Magnetically controlled single-electron shuttle / **О.А. Ilinskaya**, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, and M. Jonson // ФНТ. – 2015. – Т. 41, № 1. – С. 90–95.
2. Shuttling of spin-polarized electrons in molecular transistors / **О.А. Ilinskaya**, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, Y.W. Park, and M. Jonson // Synthetic Metals. – 2016. – V. 216. – P. 83–87.
3. Mechanically induced thermal breakdown in magnetic shuttle structures / **О.А. Ilinskaya**, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, H.C. Park, and M. Jonson // New J. Phys. – 2018. – V. 20. – P. 063036-1–063036-11, <https://doi.org/10.1088/1367-2630/aac75e>.
4. **Ильинская О.А.** О новом механизме трения в наноэлектромеханических системах / **О.А. Ильинская** // ФНТ. – 2018. – Т. 44, № 8. – С. 1041–1044.
5. Transport properties and enhanced figure of merit of quantum dot-based spintronic thermoelectric device / Yu.D. Zubov, **О.А. Ilinskaya**, I.V. Krive, and A.A. Krokhin // J. Phys. Condens. Matter. – 2018. – V. 30, No. 31. – P. 315303-1–315303-11.
6. Thermoelectric effects in electron chiral tunneling in metallic carbon nanotubes / A.V. Parafilo, **О.А. Ilinskaya**, I.V. Krive, and Y.W. Park // Superlattices and Microstructures. – 2015. – V. 88. – P. 72–79.
7. **Ilinskaya О.А.** The influence of spin polarization on single-electron shuttle instability in the Coulomb blockade regime / **О.А. Ilinskaya** // VI International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 2 – 5, 2015: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2015. – P. 112.
8. **Ильинская О.А.** Термоиндуцированный одноэлектронный магнитный шаттл / **О.А. Ильинская**, С.И. Кулинич, И.В. Криве // XII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах», 1 – 4 грудня, 2015: тези доповідей. – Україна, Харків, 2015. – С. 31.
9. **Ilinskaya О.А.** Shuttle instability induced by temperature gradient / **О.А. Ilinskaya** // VII International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 6 – 10, 2016: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2016. – P. 182.

10. Zubov Yu.D. Optimal efficiency of thermoelectrics based on thermomagnetic effect in tunneling of spin-polarized electrons through a quantum dot in external magnetic field / Yu.D. Zubov, **O.A. Ilinskaya** // VII International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 6 – 10, 2016: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2016. – P. 183.
11. Zubov Yu.D. Optimal performance of magnetically controlled spintronic thermoelectrics / Yu.D. Zubov, **O.A. Ilinskaya**, I.V. Krive // Международный юбилейный семинар «Современные проблемы физики твердого тела», посвященный памяти Э.А. Канера, 22 – 23 ноября, 2016: тезисы докл. – Украина, Харьков, 2016. – С. 19.
12. Zubov Yu.D. Optimal thermoelectric performance of nanodevices based on single wall carbon nanotubes and single molecule transistors / Yu.D. Zubov, **O.A. Ilinskaya**, I.V. Krive // V Наукова конференція «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології», 1 – 2 грудня, 2016: тези доповідей. – Україна, Київ, 2016. – С. 32.
13. **Ilinskaya O.A.** Influence of electron-electron correlation on figure of merit of spintronic thermoelectrics controlled by magnetic field / **O.A. Ilinskaya**, Yu.D. Zubov // VIII International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, May 29 – June 2, 2017: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2017. – P. 193.
14. **Ilinskaya O.A.** Temperature dependent friction in a single-electron shuttle / **O.A. Ilinskaya** // IX International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 4 – 8, 2018: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2018. – P. 184.
15. Shuttle mechanism for charge transfer in Coulomb blockade nanostructures / L.Y. Gorelik, A. Isacsson, M.V. Voinova et al. // Phys. Rev. Lett. – 1998. – V. 80, No. 20. – P. 4526–4529.
16. Nanomechanical electron shuttle consisting of a gold nanoparticle embedded within the gap between two gold electrodes / A.V. Moskalenko, S.N. Gordeev, O.F. Koentjoro et al. // Phys. Rev. B. – 2009. – V. 79, No. 24. – P. 241403-1–241403-4.

17. Benjamin P. The intellectual rize in electricity / P. Benjamin // Appleton, New York, 1895. – 608 p. – P. 507.
18. Kulik I.O. Kinetic phenomena and charge discretness effects in granulated media / I.O. Kulik, R.I. Shekhter // Sov. Phys. JETP. – 1975. – V. 41, No. 2. – P. 308–316.
19. Averin D.V. Single electrons: a correlated transfer of single electrons and Cooper pairs in system of small tunnel junctions / D.V. Averin, K.K. Likharev in Mesoscopic phenomena in solids, edited by B.L. Altshuler, P.A. Lee, and R.A. Webb // Elsevier, Amsterdam, 1991. – 564 p. – P. 173–262.
20. Москалец М.В. Основы мезоскопической физики /М.В. Москалец // Харьков: НТУ ХПИ, 2010. – 180 с.
21. Cuevas J.C. Molecular electronics: An introduction to theory and experiment / J.C. Cuevas, E. Scheer – New Jersey, London: World Scientific. – 2010. – 703 p.
22. Vibrational instability due to coherent tunneling of electrons / D. Fedorets, L.Y. Gorelik, R.I. Shekhter et al. // Europhys. Lett. – 2002. – V. 58, No.1. – P. 99–104.
23. Spin-controlled nanoelectromechanics in magnetic NEM-SET systems / L.Y. Gorelik, D. Fedorets, R.I. Shekhter et al. // New J. Phys. – 2005. – V. 7. – P. 242-1–242-21.
24. Efficient spin injection into GaAs quantum well across Fe_3O_4 spin filter / E. Wada, K. Watanabe, Y. Shirahata et al. // Appl. Phys. Lett. – 2010. – V. 96. – P. 102510-1–102510-3.
25. New class of materials: Half-metallic ferromagnets / R.A. de Groot, F.M. Mueller, P.G. van Engen et al. // Phys. Rev. Lett. – 1983. – V. 50, No. 25. – P. 2024–2027.
26. Coulomb promotion of spin-dependent tunneling / L.Y. Gorelik, S.I. Kulinich, R.I. Shekhter et al. // Phys. Rev. Lett. – 2005. – V. 95, No. 11. – P. 116806-1–116806-4.
27. Nanomechanics of a magnetic shuttle device / S.I. Kulinich, L.Y. Gorelik, A.V. Parafilo et al. // Low Temp. Phys. – 2014. – V. 40, No. 10. – P. 907–914.
28. High spin-filter efficiency in a Co ferrite fabricated by a thermal oxidation / Y.K. Takahashi, S. Kasai, T. Furubayashi // Appl. Phys. Lett. – 2010. – V. 96. – P. 072512-1–072512-3.

29. The Kondo effect in the presence of ferromagnetism / A.N. Pasupathy, R.C. Bialczak, J. Martinek et al. // *Science*. – 2004. – V. 306. – P. 86–89.
30. Single electron shuttle based on electron spin / S.I. Kulinich, L.Y. Gorelik, A.N. Kalinenko et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2014. – V. 112, No. 11. – P. 117206-1–117206-5.
31. Scott G.D. Controlled electrode magnetization alignment in planar elliptical ferromagnetic break junction devices / G.D. Scott, T.-C. Hu // *J. Appl. Phys.* – 2016. – V. 120. – P. 164311-1–164311-6.
32. Spin injection from the Heusler alloy Co_2MnGe into $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}/\text{GaAs}$ heterostructures / X.Y. Dong, C. Adelman, J.Q. Xie et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – V. 86. – P. 102107-1–102107-3.
33. $\text{Co}_2\text{FeSi}/\text{GaAs}/(\text{Al,Ga})\text{As}$ spin light-emitting diodes: Competition between spin injection and ultrafast spin alignment / M. Ramsteiner, O. Brandt, T. Flissikowski et al. // *Phys. Rev. B*. – 2008. – V. 78, No. 12. – P. 121303-1–121303-4.
34. Skorobagatko G.A. Polaronic effects in electron shuttling / G.A. Skorobagatko, I.V. Krive, R.I. Shekhter // *Fiz. Nizk. Temp.* – 2009. – V. 35, No. 12. – P. 1221–1229.
35. Nanomechanical oscillations in a single- C_{60} transistor / H. Park, J. Park, A.K.L. Lim et al. // *Nature*. – 2000. – V. 407. – P. 57–60.
36. Braig S. Vibrational sidebands and dissipative tunneling in molecular transistors / S. Braig, K. Flensberg // *Phys. Rev. B*. – 2003. – V. 68, No. 20. – P. 205324-1–205324-10.
37. Blanter Ya.M. Shot noise in mesoscopic conductors / Ya.M. Blanter, M. Buttiker // *Phys. Rep.* – 2000. – V. 336. – P. 1–166.
38. Pistoiesi F. Full counting statistics of a charge shuttle / F. Pistoiesi // *Phys. Rev. B*. – 2004. – V. 69, No. 24. – P. 245409-1–245409-8.
39. Nord T. Impact of van der Waals forces on the classical shuttle instability / T. Nord, A. Isacsson // *Phys. Rev. B*. – 2004. – V. 69, No. 3. – P. 035309-1–035309-7.
40. Koenig D.R. DC voltage-sustained self-oscillation of a nano-mechanical electron shuttle / D.R. Koenig, E.M. Weig // *Appl. Phys. Lett.* – 2012. – V. 101, – P. 213111-1–213111-5.

41. Nanomechanical resonator shuttling single electrons at radio frequencies / A. Erbe, C. Weiss, W. Zwerger et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – V. 87, No. 9. – P. 096106-1–096106-4.
42. A mechanically flexible tunneling contact operating at radio frequencies / A. Erbe, R.H. Blick, A. Tike et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 1998. – V. 73. – P. 3751–3753.
43. Nanoelectromechanics of shuttle devices / R.I. Shekhter, L.Y. Gorelik, I.V. Krive et al. // *Nanoelectromech. Syst.* – 2013. – V. 1. – P. 1–25.
44. Shuttling of electrons and Cooper pairs / R.I. Shekhter, Yu. Galperin, L.Y. Gorelik et al. // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2003. – V. 15, No. 12. – P. R441–R469.
45. Hicks L.D. Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit / L.D. Hicks, M.S. Dresselhaus // *Phys. Rev. B.* – 1993. – V. 47, No. 19. – P. 12727–12731.
46. Hicks L.D. Thermoelectric figure of merit of a one-dimensional conductor / L.D. Hicks, M.S. Dresselhaus // *Phys. Rev. B.* – 1993. – V. 47, No. 24. – P. 16631–16634.
47. Ioffe A.F. Semiconductor thermoelements and thermoelectric cooling / A.F. Ioffe – London: Infosearch, 1957. – 184 p.
48. Rowe D.M. (Editor) Thermoelectrics handbook: macro to nano / D.M. Rowe – CRC Press, Boca Raton, 2006. – 954 p.
49. Ландау Л.Д. Электродинамика сплошных сред / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц – Москва: Наука, 1982. – 620 с.
50. Sivan U. Multichannel Landauer formula for thermoelectric transport with application to thermopower near the mobility edge / U. Sivan, Y. Imry // *Phys. Rev. B.* – 1986. – V. 33, No. 1. – P. 551–558.
51. Datta S. Electronic transport in mesoscopic systems / S. Datta // Cambridge University Press, Cambridge, 1997. – 392 p.
52. Kennes D.M. Efficiency and power of a thermoelectric quantum dot device / D.M. Kennes, D. Schuricht, V. Meden // *Europhys. Lett.* – 2013. – V. 102, No. 5. – P. 57003-1–57003-6.

53. Curzon F.L. Efficiency of a Carnot engine at maximum power output / F.L. Curzon, B. Ahlborn // *Amer. J. Phys.* – 1975. – V. 43. – P. 22–24.
54. Novikov I.I. The efficiency of atomic power stations / I.I. Novikov // *J. Nuclear Energy II.* – 1958. – V. 7. – P. 125–128. [Translated from *Atomnaya Energiya* – 1957. – V. 409. – P. 22–24.]
55. Callen H.B. *Thermodynamics and introduction to thermostatics*, 2nd ed. / H.B. Callen // John Wiley and Sons, 1985. – 493 p.
56. Fundamental aspects of steady-state conversion of heat to work at the nanoscale / G. Benenti, G. Casati, K. Saito et al. // *Phys. Rep.* – 2017. – V. 694. – P. 1–124.
57. Broeck C. van den. Thermodynamic efficiency at maximum power / C. van den Broeck // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – V. 95, No. 19. – P. 190602-1–190602-3.
58. Goldsmid H.J. *Introduction to Thermoelectricity* / H.J. Goldsmid // Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2010. – 242 p.
59. Sanchez D. Nonlinear phenomena in quantum thermoelectrics and heat / D. Sanchez, R. Lopez // *Comptes Rendus Physique.* – 2016. – V. 17, No. 10. – P. 1060–1071.
60. Mahan G.D. The best thermoelectric / G.D. Mahan, J.O. Sofo // *Proc. Nat. Acad. Sci. USA.* – 1996. – V. 93, No. 15. – P. 7436–7439.
61. Xu Y. *Handbook of spintronics* / Y. Xu, D.D. Awschalom, J. Nitta (Eds.) – Springer, 2016. – 1609 p.
62. Bauer G.E.W. Spin caloritronics / G.E.W. Bauer, E. Saitoh, B.J. van Wees // *Nat. Mater.* – 2012. – V. 11, No. 5. – P. 391–399.
63. Rajput G. Colossal enhancement in thermoelectric efficiency of weakly coupled double quantum dot system / G. Rajput, K.C. Sharma // *J. Appl. Physics.* – 2011. – V. 110, No. 11. – P. 113723-1–113723-3.
64. Unified description of phase lapses, population inversion, and correlation-induced resonances in double quantum dots / V. Kashcheyevs, A. Schiller, A. Aharony et al. // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V. 75, No. 11. – P. 115313-1–115313-22.

65. Sothmann B. Thermoelectric energy harvesting with quantum dots / B. Sothmann, R. Sanchez, A.N. Jordan // *Nanotechnology*. – 2015. – V. 26. – P. 032001-1–032001-23.
66. Quantum dot superlattice thermoelectric materials and devices / T.C. Harman, P.J. Taylor, M.P. Walsh et al. // *Science*. – 2002. – V. 297. – P. 2229–2232.
67. Sequential and cotunneling behavior in the temperature-dependent thermopower of few-electron quantum dots / R. Scheibner, E.G. Novik, T. Borzenko et al. // *Phys. Rev. B*. – 2007. – V. 75, No. 4. – P. 041301-1–041301-4.
68. A quantum dot heat engine operating close to the thermodynamic efficiency limit / M. Josefsson, A. Svilans, A.M. Burke et al. // *Nat. Nanotechnol.* – 2018, doi: [10.1038/s41565-018-0200-5](https://doi.org/10.1038/s41565-018-0200-5).
69. Field-effect control of graphene-fullerene nanodevices / P. Gehring, A. Harzheim, J. Spiece et al. // *Nano Lett.* – 2017. – V. 17, No. 11. – P. 7055–7061.
70. Nygard J. Quantum dots in suspended single-wall carbon nanotubes / J. Nygard, D.H. Cobden // *Appl. Phys. Lett.* – 2001. – V. 79. – P. 4216–4218.
71. Electrical transport measurements on single-wall carbon nanotubes / J. Nygard, D.H. Cobden, M. Bockrath et al. // *Appl. Phys. A*. – 1999. – V. 69. – P. 297–304.
72. Thermal conductance of a single-electron transistor / B. Dutta, J.T. Peltonen, D.S. Antonenko et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2017. – V. 119, No. 7. -- P. 077701-1–077701-5.
73. Quantum shuttle phenomena in a nanoelectromechanical single-electron transistor / D. Fedorets, L.Y. Gorelik, R.I. Shekhter et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – V. 92, No. 16. – P. 166801-1–166801-4.
74. Breuer H.-P. The theory of open quantum systems / H.-P. Breuer, F. Petruccione – Oxford: Oxford University Press. – 2002. – 645 p.
75. Grabert H. Quantum theory of the damped harmonic oscillator / H. Grabert, U. Weiss, P. Talkner // *Z. Phys. B – Condensed Matter*. – 1984. – V. 55. – P. 87–94.
76. Chiral effects in normal and superconducting carbon nanotube-based nanostructures / A.V. Parafilo, I.V. Krive, E.N. Bogachek et al. // *Low Temp. Phys.* – 2010. – V. 36, No. 10–11. – P. 959–968.

77. Chiral tunneling in metallic carbon nanotubes / A.V. Parafilo, I.V. Krive, E.N. Bogachek et al. // *Phys. Rev. B* – 2011. – V. 83, No. 4 – P. 045427-1–045427-5.
78. Horn R.A. *Matrix Analysis* / R.A. Horn, C.R. Johnson – Cambridge: Cambridge University Press, 1990. – 575 p.
79. Menichetti G. Analytic treatment of the thermoelectric properties for two coupled quantum dots threaded by magnetic fields / G Menichetti, G. Grosso, G. Pastori Parravicini // *J. Phys. Commun.* – 2018. – V. 2. – P. 055026-1–055026-11.
80. Liu J. Enhancement of the thermoelectric figure of merit in a quantum dot due to the Coulomb blockade effect / J. Liu, Q.-F. Sun, X.C. Xie // *Phys. Rev. B.* – 2010. – V. 81, No. 24. – P. 245323-1–245323-6.
81. Taylor E. Thermoelectric performance of strongly correlated quantum impurity models / E. Taylor, D. Segal // *Phys. Rev. B.* – 2015. – V. 92, No. 12. – P. 125401-1–125401-10.
82. Muralidharan B. Performance analysis of an interacting quantum dot thermoelectric setup / B. Muralidharan, M. Grifoni // *Phys. Rev. B.* – 2012. – V. 85, No. 15. – P. 155423-1–155423-11.
83. Kuo D.M.-T. Thermoelectric properties of multiple quantum dots junction system / D.M.-T. Kuo // *Jpn. J. Appl. Phys.* – 2009. – V. 48, No. 12. – P. 125005-1–125005-6.
84. Theory of scanning tunneling spectroscopy of fullerene peapods / C.I. Kane, E.J. Mele, A.T. Johnson et al. // *Phys. Rev. B.* – 2002. – V. 66, No. 23. – P. 235423-1–435423-15.
85. Suzuura H. Phonons and electron-phonons scattering in carbon nanotubes / H. Suzuura, T. Ando // *Phys. Rev. B.* – 2002. – V. 65, No. 23. – P. 235412-1–235412-15.
86. Ando T. Impurity scattering in carbon nanotubes – absence of back scattering / T. Ando, T. Nakanishi // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 1998. – V. 67. – P. 1704–1713.
87. Allain P.E. Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons / P.E. Allain, J.N. Fuchs // *Eur. Phys. J. B.* – 2011. – V. 83. – P. 301–317.
88. Electron-phonon scattering in metallic single-walled carbon nanotubes / J.-Y. Park, S. Rosenblatt, Y. Yaish et al. // *NanoLett.* – 2004. – V. 4, No. 3. – P. 517–520.

89. When thermoelectrics reached the nanoscale / J.P. Heremans, M.S. Dresselhaus, L.E. Bell et al. // *Nat. Nanotechnol.* – 2013. – V. 8, No. 7. – P. 471–473.
90. Vining C.B. An inconvenient truth about thermoelectrics / C.B. Vining // *Nat. Mater.* – 2009. – V. 8. – P. 83–85.
91. Thermal conductance and thermopower of an individual single-wall carbon nanotube / C. Yu, L. Shi, Z. Yao et al. // *NanoLett.* – 2005. – V. 5, No. 9. – P. 1842–1846.
92. Rego L.G.C. Fractional exclusion statistics and the universal quantum of thermal conductance: A unifying approach / L.G.C. Rego, G. Kirczenov // *Phys. Rev. B.* – 1999. – V. 59, No. 20. – P. 13080–13086.
93. Krive I.V. Transport properties of quasiparticles with fractional exclusion statistics / I.V. Krive, E.R. Mucciolo // *Phys. Rev. B.* – 1999. – V. 60, No.3. – P. 1429–1432.
94. Krive I.V. Thermal transport through Luttinger liquid constriction / I.V. Krive // *Low Temp. Phys.* – 1998. – V. 24, No. 5. – P. 377–379.

ДОДАТОК А

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Magnetically controlled single-electron shuttle / **О.А. Pinskaya**, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, and M. Jonson // ФНТ. – 2015. – Т. 41, № 1. – С. 90–95.
2. Shuttling of spin-polarized electrons in molecular transistors / **О.А. Pinskaya**, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, Y.W. Park, and M. Jonson // Synthetic Metals. – 2016. – V. 216. – P. 83–87.
3. Mechanically induced thermal breakdown in magnetic shuttle structures / **О.А. Pinskaya**, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, H.C. Park, and M. Jonson // New J. Phys. – 2018. – V. 20. – P. 063036-1–063036-11, <https://doi.org/10.1088/1367-2630/aac75e>.
4. **Ильинская О.А.** О новом механизме трения в наноэлектромеханических системах / **О.А. Ильинская** // ФНТ. – 2018. – Т. 44, № 8. – С. 1041–1044.
5. Transport properties and enhanced figure of merit of quantum dot-based spintronic thermoelectric device / Yu.D. Zubov, **О.А. Pinskaya**, I.V. Krive, and A.A. Krokhin // J. Phys. Condens. Matter. – 2018. – V. 30, No. 31. – P. 315303-1–315303-11.
6. Thermoelectric effects in electron chiral tunneling in metallic carbon nanotubes / A.V. Parafilo, **О.А. Pinskaya**, I.V. Krive, and Y.W. Park // Superlattices and Microstructures. – 2015. – V. 88. – P. 72–79.
7. **Pinskaya O.A.** The influence of spin polarization on single-electron shuttle instability in the Coulomb blockade regime / **О.А. Pinskaya** // VI International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 2 – 5, 2015: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2015. – P. 112.
8. **Ильинская О.А.** Термоиндуцированный одноэлектронный магнитный шаттл / **О.А. Ильинская**, С.И. Кулинич, И.В. Криве // XII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах», 1 – 4 грудня, 2015: тези доповідей. – Україна, Харків, 2015. – С. 31.
9. **Pinskaya O.A.** Shuttle instability induced by temperature gradient / **О.А. Pinskaya** // VII International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 6 – 10, 2016: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2016. – P. 182.

10. Zubov Yu.D. Optimal efficiency of thermoelectrics based on thermomagnetic effect in tunneling of spin-polarized electrons through a quantum dot in external magnetic field / Yu.D. Zubov, **O.A. Ilinskaya** // VII International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 6 – 10, 2016: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2016. – P. 183.
11. Zubov Yu.D. Optimal performance of magnetically controlled spintronic thermoelectrics / Yu.D. Zubov, **O.A. Ilinskaya**, I.V. Krive // Международный юбилейный семинар «Современные проблемы физики твердого тела», посвященный памяти Э.А. Канера, 22 – 23 ноября, 2016: тезисы докл. – Украина, Харьков, 2016. – С. 19.
12. Zubov Yu.D. Optimal thermoelectric performance of nanodevices based on single wall carbon nanotubes and single molecule transistors / Yu.D. Zubov, **O.A. Ilinskaya**, I.V. Krive // V Наукова конференція «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології», 1 – 2 грудня, 2016: тези доповідей. – Україна, Київ, 2016. – С. 32.
13. **Ilinskaya O.A.** Influence of electron-electron correlation on figure of merit of spintronic thermoelectrics controlled by magnetic field / **O.A. Ilinskaya**, Yu.D. Zubov // VIII International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, May 29 – June 2, 2017: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2017. – P. 193.
14. **Ilinskaya O.A.** Temperature dependent friction in a single-electron shuttle / **O.A. Ilinskaya** // IX International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 4 – 8, 2018: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2018. – P. 184.

ДОДАТОК Б

ВІДОМОСТІ ПРО АПРОБАЦІЮ РЕЗУЛЬТАТІВ ДИСЕРТАЦІЇ

- VI International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, June 2 – 5, 2015, усна доповідь);
- XII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» (Харків, Україна, 1 – 4 грудня, 2015, усна доповідь);
- VII International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, June 6 – 10, 2016, усна доповідь);
- Международный юбилейный семинар «Современные проблемы физики твердого тела», посвященный памяти Э.А. Канера (Харьков, Украина, 22 – 23 ноября, 2016, усна доповідь);
- International School & Conference on Nanoscience and Quantum Transport (Kyiv, Ukraine, October 8 – 14, 2016, усна доповідь);
- V Наукова конференція «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології» (Київ, Україна, 1 – 2 грудня, 2016, усна доповідь);
- VIII International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, May 29 – June 2, 2017, усна доповідь);
- IX International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, June 4 – 8, 2018, усна доповідь).