

## АНОТАЦІЯ

**Багрова О.М. ЕЛЕКТРОМЕХАНІЧНІ ЯВИЩА В НОРМАЛЬНИХ ТА НАДПРОВІДНИХ НАНОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВІ РУХОМОЇ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ. — Рукопис.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – фізика та астрономія. – Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б.І. Веркіна НАН України, Харків, 2023.

Дисертація присвячена вивченню нових фундаментальних явищ, які виникають внаслідок електромеханічного зв'язку в мезоскопічних системах на основі рухомої квантової точки.

У **вступі** коротко обґрунтовано актуальність теми дисертації, визначено мету та основні завдання дослідження, а також об'єкт, предмет і методи дослідження. Сформульовано наукову новизну та практичне значення отриманих результатів. Наведено відомості про публікації, особистий внесок здобувача та апробацію результатів дисертації. Також приведено відомості про структуру та обсяг дисертаційної роботи.

**Розділ 1** присвячено огляду та аналізу літератури за темою дисертації. Розглянуто основні явища, які виникають при транспортуванні електронів через одноелектронний транзистор. Зокрема, введено підхід Ландауера-Бюттікера та поняття кулонівської блокади тунелювання електронів. **Пункт 1.1.2** присвячено розгляду поляронних ефектів у транспорті електронів у молекулярних транзисторах. Зокрема, обговорюється походження блокади Франка-Кондона (поляронної) і поляронного звуження ширини енергетичного рівня, а також немонотонна температурна залежність диференціальної провідності. Окрім того, в останній частині **пункту 1.1.2** коротко розглянуто окремий випадок нерівноважної вібронної підсистеми.

На відміну від першої частини **розділу 1**, де обговорюється вплив механічних коливань квантової точки на транспорт електронів, на противагу цьому в подальших частинах розглядається еволюція механічної підсистеми під впливом тунелювання електронів. Так, у **підрозділі 1.2** введено поняття керованого кубіта та формулу Ландау-Зенера-Штукельберга-Майорани для ймовірності переходу. Крім того, обговорено деякі протоколи для квантових кодів корекції помилок та їх важливість для подальшого розгляду. У **підрозділі 1.3** розглянуто природу явища механічної нестійкості.

**Розділ 2** присвячено розгляду та аналізу поляронних ефектів, які виникають завдяки *нерівноважній* когерентній вібронній підсистемі.

У **підрозділі 2.1** представлено модель системи, що розглядається. Одномолекулярний транзистор складається з макромолекули, яку розміщено між двома об'ємними електродами, до яких прикладено постійну тягнучу напругу. Квантова точка, яка моделює молекулу, зазнає квантових коливань у напрямку, перпендикулярному до напрямку переносу електронів. За допомогою напруги на затворі виникає можливість керування енергією одноелектронного рівня квантової точки.

У **підрозділі 2.2** представлено гамільтоніан досліджуваної системи та отримано рівняння для матриці густини електронної підсистеми.

У **підрозділі 2.3** отримано аналітичний вираз для електричного струму через одномолекулярний транзистор. У **підрозділі 2.4** наведено та проаналізовано результати чисельних розрахунків вольт-амперних ( $I-V$ ) характеристик (ВАХ). Встановлено відповідність між ВАХ, отриманими в припущенні, що вібронна підсистема перебуває в когерентному (*нерівноважному*) стані, та франк-кондонівськими сходинками для вібронів у рівноважному стані. Показано, що на відміну від теорії Франка-Кондона, у випадку когерентних вібронів сходинки на вольт-амперних характеристиках є нерегулярними. Більш того, для когерентного стану вібронів струм насичення виникає при значно менших тягнучих напругах. Останній факт може бути вирішальним в експериментах, які вимагають роботи в режимі зняття поляронної блокади, тобто максимальних струмів.

У **підрозділі 2.5** знайдено аналітичну формулу для електричного струму. Наближення дає гарне узгодження з основними чисельними результатами.

**Розділ 3** присвячено отриманню та аналізу заплутаності, яка виникає між електронними та механічними ступенями свободи в надпровідному наноелектромеханічному пристрої.

У **підрозділі 3.1** представлено модель наноелектромеханічного пристрою, що розглядається. Система складається з надпровідного нанодроту, що підвішений між двома надпровідними електродами. Нанодріт, який розглядається як зарядовий кубіт (сховище куперівських пар), зазнає згинальних коливань у напрямку, перпендикулярному до осі нанодроту. Окрім того,

нанодріт з'єднаний з електродами затвора за допомогою ємнісного зв'язку, що дозволяє керувати відстанню між енергетичними рівнями кубіта. До того ж, різниця фаз між надпровідними електродами може бути підлаштована постійною тягнучою напругою, що прикладена до них, як результат нестационарного ефекту Джозефсона. Також представлено гамільтоніан системи.

У **підрозділі 3.2** знайдено часову еволюцію чистого стану системи. Показано, що початковий чистий стан еволюціонує до стану, представленого заплутаністю між двома станами кубіта та двома когерентними станами механічного резонатора.

У **підрозділі 3.3**, який представляє основний результат цього розділу, запропоновано і виведено специфічний протокол маніпуляції тягнучою напругою, який призводить до утворення заплутаності між двома станами зарядового кубіта і двома станами типу "Schrödinger cat" (суперпозиція двох когерентних станів), починаючи з чистого стану. Розглянутий протокол завдяки своїй простоті може бути ефективно реалізований в експериментах з кодуванням квантової інформації з електронних станів кубіта до когерентних (зокрема, так званих "cat states") наномеханічного резонатора. До того ж, "cat states" завдяки своїй структурі не чутливі до виникнення помилок. Таким чином, запропонована схема не потребує додаткових протоколів корекції квантових помилок.

У **підрозділі 3.4** розглянуто ентропію заплутаності (фон Неймана) з метою кількісного аналізу заплутаності між зарядовими станами кубіта і когерентними станами наномеханічного резонатора. Далі в **підрозділі 3.5** обговорено часову еволюцію механічної підсистеми. Чітке обґрунтування наявності заплутаності представлено шляхом аналізу відповідних функцій Вігнера.

У **підрозділі 3.6** описано чіткий метод для експериментального виявлення заплутаності шляхом вимірювання середнього струму.

**Розділ 4** присвячено розгляду та аналізу наномеханічних явищ, які виникають завдяки ефекту близькості в наступному гібридному наноелектромеханічному пристрої. Система, що розглядається, включає вуглецеву нанотрубку, підвішену над канавкою в звичайному металевому електроді і розміщену в проміжку між двома надпровідними електродами. Крім того, нанотрубка зазнає згинальних коливань між двома надпровідними електродами таким чином, що згинання нанотрубки переміщує її ближче до одного електрода

і далі від іншого. Це призводить до залежних від положення амплітуд тунелювання. До того ж, завдяки наявності різниці фаз між надпровідними електродами, недіагональний параметр порядку квантової точки виникає в результаті надпровідного ефекту близькості. На додаток, тягнуча напруга, що прикладена до нормального електрода, спричиняє направлену динаміку електронів у системі.

У **підрозділі 4.1** напівкласичний підхід в рамках наближення матриці густини використано для отримання та аналізу режиму *нестійких* станів механічної підсистеми.

У **пункті 4.1.1** вводиться модель досліджуваного наноелектромеханічного пристрою та його гамільтоніан. У **пункті 4.1.2** розглянуто наближення матриці густини. Виведено систему рівнянь для елементів матриці густини разом з нелінійним диференціальним рівнянням другого порядку для координати квантової точки. Крім того, в **пункті 4.1.3** формалізм функцій Гріна використано для знаходження параметра порядку квантової точки, який виникає за рахунок надпровідного ефекту близькості.

У **пункті 4.1.4** розгляд в рамках адіабатичного режиму дозволяє спростити задачу до одного нелінійного диференціального рівняння (яке є центральним у цьому розділі) для координати квантової точки і аналітично проаналізувати його за допомогою методу лінеаризації, як у **пункті 4.1.5**. Крім того, в **пункті 4.1.6** використано метод усереднення Крилова-Боголюбова для знаходження наближеного розв'язку та аналізу режимів, в яких може працювати наноелектромеханічна система, що розглядається. Розглянуто два стани механічної підсистеми. Зокрема, показано, що в механічно *нестійкому* режимі виникають граничні цикли самопідтримних коливань. До того ж, має місце ефект самонасичення. У **пункті 4.1.7** основні результати узагальнено на випадок несиметричних тунельних контактів і впливу термодинамічного оточення.

У **пункті 4.1.8** обговорюється можливість експериментального виявлення механічної нестійкості в системі за допомогою вимірювання електричного струму. Продемонстровано, що дана система може працювати в транзисторному та діодному режимах.

У **пункті 4.1.9** обговорюється чисельно розрахована еволюція розглянутої системи в діабатичній границі, що не може бути зроблено аналітично.

У підрозділі 4.2 враховано вплив квантово-механічних флуктуацій. Продемонстровано, що можна досягти режиму охолодження до основного стану в результаті ефекту близькості.

У пункті 4.2.1 введено гамільтоніан наноелектромеханічної системи, що розглядається. У пункті 4.2.2 виведено систему рівнянь, яка описує динаміку в стаціонарному режимі, і проаналізовано її за допомогою представлення функцій Вігнера.

У пункті 4.2.3 розглянуто режим охолодження наномеханічних коливань.

У пункті 4.2.4 розглянуто електричний струм через систему. Показано, що охолодження механічних коливань і, зокрема, охолодження до основного стану можна експериментально дослідити за допомогою вимірювання електричного струму.

**Ключові слова:** квантова точка, наноелектромеханічна система, молекулярний транзистор, когерентний стан, ефект близькості, кубіт.

## ABSTRACT

**Bahrova O.M. ELECTROMECHANICAL PHENOMENA IN NORMAL AND SUPERCONDUCTING NANOSTRUCTURES BASED ON A MOVABLE QUANTUM DOT. — Manuscript.**

Dissertation for a Doctor of Philosophy degree on speciality 104 – Physics and Astronomy. — B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering, NAS of Ukraine, Kharkiv, 2023.

The dissertation is devoted to the study of new fundamental phenomena which emerge due to electromechanical coupling in mesoscopic systems based on movable quantum dot.

In the **introduction** it is briefly justified the relevance of the dissertation topic, defined the purpose and main tasks of the research, as well as objects, subject and research methods. The scientific novelty and practical value of the obtained results are formulated. The information about the publications, the personal applicant's contribution and the approbation of the results of the dissertation are discussed. The information about the structure and volume of the dissertation is also given.

The **chapter 1** is devoted to the review and analysis of the literature related to the topic of the dissertation. The main phenomena which arise in the electron transport through a single-electron transistor, are considered. Namely, Landauer-Büttiker approach and the Coulomb blockade of electron tunneling are introduced. The **subsection 1.1.2** is devoted to the polaronic effects in transport of electrons in molecular transistors. In particular, the origin of the Franck-Condon (polaronic) blockade and polaronic narrowing of the energy level width are discussed as well as non-monotonic temperature dependence of the differential conductance. In addition, in the last part of the **subsection 1.1.2** a special case of a non-equilibrium vibron subsystem is briefly considered.

In contrast to the first part of the **chapter 1**, where influence of the mechanical vibrations of a quantum dot on the electron transport is discussed, in the further parts we alternatively take into account the evolution of the mechanical subsystem under an impact of the tunneling of electrons. Thus, in the **section 1.2** the concept of a driven qubit and Landau-Zener-Stückelberg-Majorana formula for transition probability are introduced. Also, some protocols for quantum error correction codes and its importance in the further consideration are discussed. In

the **section 1.3** nature of the mechanical instability phenomenon and key results are considered.

The **chapter 2** is devoted to the derivation and analysis of polaronic effects which emerge due to the *non-equilibrium* coherent vibron subsystem.

In the **section 2.1** a model device is introduced. A single-molecule transistor consists of a big molecule which is placed between two bulk electrodes biased by a constant voltage. The quantum dot which models the molecule, undergoes quantum oscillations in the direction perpendicular to the electron transport flow. It also gated by the gate voltage in order to control the energy of a single-electron level in the quantum dot.

In the **section 2.2** Hamiltonian of the system under consideration is presented and equations for the density matrix of the electronic subsystem are obtained.

In the **section 2.3** an analytical expression for the electric current through the single-molecular transistor is derived. In the **section 2.4** results of numerical calculations for the current-voltage characteristics ( $I$ - $V$  curves) are presented and analysed. The correspondence between the current-voltage curves obtained for the assumption of the vibron subsystem being in coherent (*non-equilibrium*) state and Franck-Condon steps for equilibrated vibrons are drawn. It is demonstrated that in contrast to the Franck-Condon theory, in our case of coherent vibrons steps in the current-voltage characteristics are completely non-regular. Moreover, for the vibrons being in coherent state, the current saturates at much lower bias voltages. This can be effective in experiments which require working in a regime out of the polaronic blockade, i.e., maximal currents.

In the **section 2.5** a quite simple analytical formula for the electric current is found. The approximation gives high-precision agreement with the main results.

The **chapter 3** is devoted to the obtaining and analysis of entanglement between electronic and mechanical degrees of freedom in a superconducting nanoelectromechanical device.

In the **section 3.1** a model of the nanoelectromechanical device under consideration is introduced. The system consists of a superconducting nanowire suspended over two superconducting leads. The nanowire which is treated as a charge qubit (Cooper pair box), undergoes bending vibrations in the perpendicular to the nanowire axis direction. Furthermore, the nanowire is capacitively

coupled to the gate electrodes which allow one to control the difference between the energy levels of the qubit. Also, the superconducting phase difference between the electrodes can be tuned by the constant bias voltage applied to them as a result of non-stationary (ac) Josephson effect. The Hamiltonian of the system is derived.

In the **section 3.2** time evolution of the pure state of the system is found. It is demonstrated that initial pure state evolves into the state represented by entanglement between the two qubit states and two coherent states of the mechanical resonator.

In the **section 3.3**, which represents the main result of this chapter, we propose and derive a specific bias voltage manipulation protocol which results in the formation of entanglement between two states of the charge qubit and two Schrödinger-cat states (superposition of two coherent states) starting from the initial pure state. The considered protocol due to its simplicity can effectively be implemented in experiments with encoding quantum information from the electronic qubit states to coherent (cat states, in particular) of a nanomechanical resonator. Moreover, the cat states due to its structure are not sensitive to errors. Thus, the proposed scheme does not require additional quantum error correction protocols.

In the **section 3.4** the entanglement (von Neumann) entropy is considered in order to quantitatively analyse the entanglement between charge states of the qubit and coherent states of the nanomechanical resonator. Further, in the **section 3.5** time evolution of the mechanical subsystem is discussed. A clear justification of presence of the entanglement is presented by analysing corresponding Wigner functions.

In the **section 3.6** an experimentally feasible method for the detection of signatures of the entanglement by measuring average current is discussed.

The **chapter 4** is devoted to the derivation and analysis of nanomechanical phenomena which arise due to proximity effect in the following hybrid nanoelectromechanical device. The system under consideration involves a carbon nanotube suspended above a trench in a normal metal electrode and positioned in a gap between two superconducting leads. Moreover, the nanotube undergoes bending vibrations in between two superconducting electrodes in such a way that the bending of the nanotube moves it closer to one electrode and further away



from the other. It results in the position-dependent tunneling amplitudes. In addition, due to the presence of superconducting phase difference between the leads, the off-diagonal order parameter of the quantum dot emerges as a result of superconducting proximity effect. Lastly, the bias voltage applied to the normal electrode induces directed electron dynamics in the system.

In the **section 4.1** the semi-classical approach within the density matrix approximation is used to obtain and analyse the regime of mechanically *unstable* states.

In the **subsection 4.1.1** the model of the considered nanoelectromechanical device and Hamiltonian are introduced. In the **subsection 4.1.2** the density matrix approximation is considered. The system of equation for the density matrix elements together with the second-order nonlinear differential equation for the quantum dot displacement is derived. Additionally, in the **subsection 4.1.3** the Green function formalism is used to find the quantum dot order parameter induced by superconducting proximity effect.

In the **subsection 4.1.4** the consideration within an adiabatic limit allow one to simplify the problem to one strongly nonlinear differential equation (which is the central one in this chapter) for the displacement and analytically analyse it by using a simple linearization method as in **subsection 4.1.5**. Furthermore, in the **subsection 4.1.6** the Krylov-Bogoliubov method of averaging is used to find an approximate solution and analyse regimes in which the nanoelectromechanical system under consideration can operate. Two states of mechanical subsystem are discussed. In particular, it is demonstrated that in the mechanically *unstable* regime the limit cycles of self-sustained oscillations occur. Moreover, the self-saturation effect takes place. In the **subsection 4.1.7** the main results are generalized to the case of asymmetric tunnel contacts and the influence of a thermodynamic environment.

In the **subsection 4.1.8** a possibility to experimentally detect the mechanical instability in the system due to electric current measurements is discussed. It is demonstrated that the device can operate in transistor and diode regimes.

In the **subsection 4.1.9** we discuss numerically calculated time evolution of the considered system in the diabatic limit which cannot be done analytically.

In the **section 4.2** quantum-mechanical fluctuations are taken into account. It is demonstrated that we can achieve ground-state cooling regime as a result of the superconducting proximity effect.

In the **subsection 4.2.1** Hamiltonian of the nanoelectromechanical under consideration is introduced. In the **subsection 4.2.2** the system of equations that describes dynamics in the stationary regime is derived and analysed by using the Wigner function representation.

In the **subsection 4.2.3** the regime of cooling of nanomechanical vibrations is discussed.

In the **subsection 4.2.4** the electric current through the system is discussed. It is demonstrated that the cooling of the mechanical vibrations and ground-state cooling, particularly, can be experimentally explored via electric current measurements.

**Keywords:** Quantum dot (QD), nanoelectromechanical system (NEMS), molecular transistor, coherent state, proximity effect, qubit.

## Список публікацій здобувача за темою дисертації

Основні результати дисертаційної роботи опубліковані в 10 наукових працях, серед яких 4 статті у провідних спеціалізованих наукових журналах.

1. **О.М. Bahrova**, S.I. Kulinich, I.V. Krive, Polaronic effects induced by non-equilibrium vibrons in a single-molecule transistor, *Low Temp. Phys.* **46**, No. 7, 671, (2020) [*Fiz. Nizk. Temp.*, **46**, 799 (2020)], DOI: 10.1063/10.0001362
2. **О.М. Bahrova**, L.Y. Gorelik, S.I. Kulinich, Entanglement between charge qubit states and coherent states of nanomechanical resonator generated by ac Josephson effect, *Low Temp. Phys.*, **47**, No. 4, 287, (2021) [*Fiz. Nizk. Temp.*, **47**, 315 (2021)], DOI: 10.1063/10.0003739
3. **О.М. Bahrova**, L.Y. Gorelik, S.I. Kulinich, R.I. Shekhter, H.C. Park, Nanomechanics driven by the superconducting proximity effect, *New J. Phys.*, **24**, 033008 (2022), DOI: 10.1088/1367-2630/ac5758
4. **О.М. Bahrova**, L.Y. Gorelik, S.I. Kulinich, R.I. Shekhter, H.C. Park, Cooling of nanomechanical vibrations by Andreev injection, *Low Temp. Phys.*, **48**, No. 6, 476 (2022) [*Fiz. Nizk. Temp.*, **48**, 535 (2022)], DOI: 10.1063/10.0010443
5. **О.М. Bahrova**, I.V. Krive, How to control transport of spin-polarized electrons via magnetic field in a molecular transistor, Physics and Scientific&Technological progress: student scientific conference, p.3, (2018).
6. **О. М. Bahrova**, S. I. Kulinich, I. V. Krive, Polaronic effects induced by coherent vibrons in a single-molecule transistor, I International Advanced Study Conference Condensed matter & Low Temperature Physics, June 8-14, 2020, Ukraine, Kharkiv, Abstracts, p. 183, (2020).
7. A.D. Shkop, **О.М. Bahrova**, Coulomb and vibration effects in spin-polarized current through a single-molecule transistor, XI Conference of Young Scientists “Problems of Theoretical Physics”, December 21-23, 2020, Ukraine, Kyiv, Abstracts, p.15-16, (2020).
8. **О.М. Bahrova**, L.Y. Gorelik, S.I. Kulinich, Schrödinger-cat states generation via mechanical vibrations entangled with a charge qubit, II International Advanced Study Conference Condensed matter & Low Temperature Physics, June 6–12, 2021, Ukraine, Kharkiv, Abstracts, p.201, (2021).

9. **O.M. Bahrova**, L.Y. Gorelik, S.I. Kulinich, H.C. Park, R.I. Shekhter, Self-sustained mechanical oscillations promoted by superconducting proximity effect, The International Symposium on Novel maTerials and quantum Technologies, December 14–17, 2021, Abstracts, p.134, (2021).
10. **O.M. Bahrova**, L.Y. Gorelik, S.I. Kulinich, H.C. Park, R.I. Shekhter, Nanomechanics provoked by Andreev injection, 29th International Conference on Low Temperature Physics, August 18-24, 2022, Abstracts, p.1554 & 1771, (2022).