

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

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

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Багрова Ольга Миколаївна

УДК 538.93

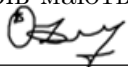
ДИСЕРТАЦІЯ

ЕЛЕКТРОМЕХАНІЧНІ ЯВИЩА
В НОРМАЛЬНИХ ТА НАДПРОВІДНИХ
НАНОСТРУКТУРАХ
НА ОСНОВІ РУХОМОЇ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ

104 — «Фізика та астрономія»

10 — «Природничі науки»

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії.
Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і
текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело


О.М. Багрова
(підпис здобувача)

Науковий керівник: Кулініч Сергій Іванович,
кандидат фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник

Харків – 2023

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 сходишками для вібронів у рівноважному стані. Показано, що на відміну від теорії Франка-Кондона, у випадку когерентних вібронів сходишки 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 тягнуchoю 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 тягнуchoю 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).

ЗМІСТ

	Стор.
ВСТУП	16
РОЗДІЛ 1 ЕЛЕКТРОМЕХАНІЧНІ ЕФЕКТИ В НАНОРОЗМІРНИХ СИСТЕМАХ	21
1.1. Електронний транспорт в одноелектронних транзисторах. . . .	21
1.1.1. Режим кулонівської блокади тунелювання електронів. . .	23
1.1.2. Транспортні властивості молекулярних транзисторів. . .	26
1.2. Когерентні ефекти в транспорті електронів через наноелектромеханічну систему.	35
1.3. Механічна нестійкість в наноелектромеханічних системах. . . .	38
РОЗДІЛ 2 ПОЛЯРОННІ ЕФЕКТИ, ЩО ВИНИКАЮТЬ ЗАВДЯКИ НЕРІВНОВАЖНИМ ВІБРОНАМ В ОДНОМОЛЕКУЛЯРНИХ ТРАНЗИСТОРАХ .	43
2.1. Модель одномолекулярного транзистора.	43
2.2. Гамільтоніан системи та рівняння для матриці густини.	44
2.3. Електричний струм.	49
2.4. Результати чисельного розрахунку вольт-амперних характеристик.	51
2.5. Оцінка величин ймовірності та струму в стаціонарному режимі.	53
Висновки	55
РОЗДІЛ 3 ЗАПЛУТАНІСТЬ МІЖ ЗАРЯДОВИМИ СТАНАМИ КУБІТА ТА КОГЕРЕНТНИМИ СТАНАМИ НАНОМЕХАНІЧНОГО РЕЗОНАТОРА.	56
3.1. Модель та гамільтоніан наноелектромеханічного пристрою. . . .	56
3.2. Еволюція системи у часі.	59
3.3. Генерація станів типу "Schrödinger-cat state".	62
3.4. Ентропія заплутаності.	63
3.5. Еволюція механічної підсистеми.	67
3.6. Усереднений за часом електричний струм.	69

Висновки.	70
РОЗДІЛ 4 НАНОМЕХАНІКА ЗА РАХУНОК ЕФЕКТУ БЛИЗЬКОСТІ	72
4.1. Самопідтримні наномеханічні осциляції.	72
4.1.1. Модель наноелектромеханічного пристрою. Гамільтоніан і динаміка.	72
4.1.2. Метод матриці густини.	75
4.1.3. Метод рівняння руху для функцій Гріна.	78
4.1.4. Динаміка системи в адіабатичному режимі.	81
4.1.5. Стійкість статичного розв'язку. Лінеаризація.	83
4.1.6. Ефект самонасичення.	84
4.1.7. Вплив асиметрії та тертя, що генеруються термодинамічним оточенням.	88
4.1.8. Транзисторна та діодна поведінка електричного струму.	91
4.1.9. Результати чисельних розрахунків.	95
4.2. Охолодження наномеханічних коливань за допомогою андреєвського тунелювання	98
4.2.1. Квантовомеханічний опис механічної підсистеми.	98
4.2.2. Рівняння для функцій розподілу Вігнера.	100
4.2.3. Охолодження до основного стану наномеханічних коливань.	109
4.2.4. Немонотонна поведінка залежностей електричного струму.	112
Висновки	114
ВИСНОВКИ	116
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	119
Додаток А Список публікацій здобувача за темою дисертації	140
Додаток Б Відомості про апробацію результатів дисертації. .	142

ВСТУП

Обрунтування актуальності теми дослідження. Нанотехнології знаходяться на передньому краї сучасної науки. Сучасна техніка дозволяє маніпулювати молекулярними орбіталями однієї молекули та створювати на основі молекул транзистори високої якості. Одномолекулярні транзистори, які найчастіше вивчаються в експериментах, являють собою пристрій на основі макромолекул (фулеренів або вуглецевих нанотрубок), де ця молекула є тунельно з'єднана з електродами витоку і стоку та ємнісно з'єднана з електродом затвора. В результаті взаємодії механічних (вібронних) та електронних ступенів свободи транспортні властивості такого нанорозмірного транзистора кардинально змінюються.

Основним новим ефектом, який спричинено впливом вібронної підсистеми, є поява непружних каналів тунелювання електронів в одноелектронному транзисторі. Для сильної електрон-вібронної взаємодії електричний струм при низьких напругах сильно пригнічується (блокада Франка-Кондона або поляронна блокада), а зняття цієї блокади напругою або температурою призводить до сходинкоподібної вольт-амперної характеристики та немонотонної температурної залежності провідності. Якщо вібронні збудження центральної частини транзистора пов'язані з тепловим оточенням, а час релаксації їх набагато менший за характерний час тунелювання електронів, то вібронна підсистема перебуває в рівноважному стані. Зазвичай розглядається транспорт електронів через молекулярний транзистор для випадку, коли вібронна підсистема перебуває у рівноважному стані. Однак, такий підхід не дає правильного результату, коли зв'язок вібронної підсистеми з навколишнім середовищем є слабким.

З іншого боку, наноелектромеханічні системи (НЕМСи) передбачають ефективний підхід для дослідження квантово-механічної взаємодії між механічною та електронною підсистемами. Одним з найважливіших явищ, що лежить в основі функціональності НЕМС є генерація самопідтримних механічних коливань під дією постійної напруги. До того ж наноелектромеханічні системи передбачають маніпулювання механічним рухом нанооб'єкта за допомогою електронної динаміки. Існує багато підходів до керування наномеханічними характеристиками, що забезпечують низку нових функціональних можливостей роботи нанопристроїв, зокрема, накачка або охолодження меха-

нічної підсистеми. Один з основних підходів використовує електронний потік через наносистему, індукований або тягнутою напругою, або перепадом температури між двома електродами.

Загалом існує кілька типів взаємодії між електронною та механічною підсистемами. Найчастіше така взаємодія виникає завдяки локалізації заряду або спіну електрона. Однак включення до складу НЕМС надпровідних елементів дозволяє використовувати зв'язок, що виникає за рахунок делокалізації куперівських пар, як основу для підвищення ефективності електромеханічних пристроїв.

Описане вище коло невирішених питань, що стосуються дослідження наноелектромеханічних систем і поляронних ефектів в молекулярних транзисторах, визначає **актуальність** теми дослідження 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 колективних явищ у квантових конденсованих структурах та наноматеріалах» (номер державної реєстрації 0117U002292, шифр 1.4.10.26.4, термін виконання 2017 – 2021 рр.), «Теоретичні дослідження квантових явищ у складних низьковимірних конденсованих середовищах» (номер державної реєстрації 0122U001505, шифр 1.4.10.26.5, термін виконання 2022 – 2026 рр.). Частина дисертаційної роботи була виконана в Центрі теоретичної фізики складних систем інституту фундаментальних наук у Теджоні, Республіка Корея (Center for Theoretical Physics of Complex Systems, Institute for Basic Science) в рамках проєктів Condensed matter theory at nanoscale (IBS-R024-D1) та Disorder and chaos in low-dimensional systems (IBS Young Scientist Fellowship (IBS-R024-Y3-2021)).

Мета і задачі дослідження.

Метою дисертаційної роботи є теоретичний опис квантових ефектів в транспорті електронів у наноелектромеханічних системах та молекулярних транзисторах.

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

- дослідити електронний транспорт через одномолекулярний транзистор для випадку, коли механічна підсистема знаходиться у нерівноважному стані, зокрема, когерентному стані;
- отримати еволюцію в часі надпровідної наноелектромеханічної системи на основі вуглецевої нанотрубки;
- дослідити характер заплутаності між зарядовими станами кубіта та когерентними станами наномеханічного осцилятора;
- дослідити динаміку гібридного наноелектромеханічного пристрою, яка виникає за рахунок надпровідного ефекту близькості;
- отримати області механічної нестійкості такої системи;
- дослідити вплив квантових флуктуацій на стаціонарний стан гібридної наномеханічної системи на основі вуглецевої нанотрубки.

Об'єктом дослідження дисертаційної роботи є квантовий транспорт електронів в наноструктурах на основі рухомої квантової точки.

Предметом дослідження є механічна нестійкість та процеси тунелювання в наноелектромеханічних системах, зокрема, молекулярних транзисторах.

Методи дослідження. Результати дисертаційної роботи отримані з використанням методів теоретичної фізики конденсованого стану. Для аналітичного знаходження областей механічної нестійкості та дослідження поляронних ефектів в наноелектромеханічних системах використаний метод матриці густини та теорія збурень. Також, для знаходження ефектів, пов'язаних з когерентними осциляціями в молекулярному транзисторі, були проведені чисельні розрахунки (розв'язання системи диференціальних рівнянь методом Рунге-Кутта).

Наукова новизна отриманих результатів.

1. *Вперше* досліджено електронний транспорт через одномолекулярний транзистор для випадку, коли механічна підсистема знаходиться у нерівноважному когерентному стані, зокрема, отримано вольт-амперні характеристики такого транзистора;
2. *Вперше* показана можливість генерації квантової заплутаності між зарядовими станами кубіта та когерентними станами наномеханічного резонатора за допомогою протоколу маніпуляції тягнуchoю напругою;

3. *Вперше* досліджено квантову динаміку гібридної наноелектромеханічної системи на основі вуглецевої нанотрубки, що виникає завдяки надпровідному ефекту близькості;
4. *Вперше* знайдено області нестійкості для наноелектромеханічної системи на основі вуглецевої нанотрубки та отримано явище самонасичення, що виникають як результат делокалізації куперівських пар завдяки ефекту близькості;
5. *Вперше* теоретично отримано ефект охолодження до основного стану наномеханічних коливань для наноелектромеханічної системи, де електромеханічний зв'язок має квантову природу — виникає в наслідок ефекту близькості.

Практичне значення отриманих результатів.

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 самопідтримні наномеханічні коливання та охолодження до основного стану наномеханічних осциляцій можуть бути виявлені в експериментах. Отримані протоколи маніпулювання тягнуchoю напругою можуть бути використані в кодуванні квантової інформації між станами кубіта та нанорезонатора в рамках однієї системи. На основі досліджень транспорту електронів в одноелектронному транзисторі, базисним елементом якого є рухома квантова точка, можуть бути створені більш ефективні молекулярні транзистори.

Особистий внесок здобувача.

У всіх роботах, які були виконані в співавторстві та увійшли до складу дисертації, автор виконала всі аналітичні та чисельні розрахунки, брала участь у обговоренні отриманих результатів та написанні статей. Таким чином, особистий внесок здобувача в вирішення поставлених теоретичних задач, які розглянуті в дисертації, є визначальним.

Апробація результатів дисертації. Основні результати, що містяться в дисертації, були представлені на наступних 7 міжнародних наукових конференціях:

- Фізика та науково-технічний прогрес: студентська наукова конференція (Харків, Україна, 10-12 квітня 2018 р.);

- I Міжнародна наукова конференція з фізики конденсованого стану та низьких температур (м. Харків, Україна, 8-14 червня 2020 р.);
- Конференція молодих вчених "Проблеми теоретичної фізики" (м. Київ, Україна (онлайн), 21-23 грудня 2020 р.);
- Міжнародна наукова конференція з фізики конденсованого стану та низьких температур (м. Харків, Україна, 6-12 червня 2021 р.);
- Міжнародний симпозиум з нових матеріалів і квантових технологій, (Канагава, Японія (онлайн), 14-17 грудня 2021 р.);
- Конференція з квантової термодинаміки 2022, (Белфаст, Велика Британія (онлайн), 27 червня - 1 липня 2022 р.);
- 29-а Міжнародна конференція з фізики низьких температур, (Саппоро, Японія (онлайн), 18-24 серпня 2022 р.);

Публікації. Результати, на яких базується дисертація, опубліковані в 4 наукових статтях [1–4] та 6 тезах конференцій [5–10].

Структура дисертації. Дисертація складається з анотацій, вступу, оглядового розділу, трьох оригінальних розділів з рисунками, висновків, списку використаних джерел. Загальний обсяг дисертації становить 142 сторінок. Вона містить 26 рисунків і список використаних джерел з 209 найменувань на 21 сторінці.

РОЗДІЛ 1

ЕЛЕКТРОМЕХАНІЧНІ ЕФЕКТИ В НАНОРОЗМІРНИХ СИСТЕМАХ

У цьому розділі ми коротко розглянемо основні квантові ефекти, що виникають при тунелюванні електронів у мезоскопічних пристроях.

1.1. Електронний транспорт в одноелектронних транзисторах.

На відміну від звичайного транзистора, одноелектронний транзистор (ОЕТ) (*з англ.* — single-electron transistor (SET)) має ряд нетривіальних особливостей, обумовлених принципово квантовими ефектами. Основними питаннями, які виникають при транспортуванні електронів в наноелектричних та наноелектромеханічних пристроях, є кулонівська блокада (*з англ.* — Coulomb blockade), вібронний (*з англ.* — polaronic) та човниковий (*з англ.* — shuttle) ефекти, ефекти Кондо та рідини Латінджера. У цьому розділі ми, йдучи шляхом від простого до більш складного, почнемо з простої моделі ОЕТ, таким чином, що вібронні ефекти опустимо в першому пункті, 1.1.1.

Одноелектронний транзистор можна розглядати в найпростішій моделі як квантову точку (КТ) (*з англ.* — quantum dot (QD)), розміщену між двома об'ємними електродами (*з англ.* — leads) витоку (*з англ.* — source) та стоку (*з англ.* — drain), а також при наявності третього електрода затвору (*з англ.* — gate), див. рис. 1.1. Центральна частина системи, квантова точка, являє собою нульвимірну мезоскопічну структуру з дискретним енергетичним спектром. Вона може бути представлена металевим острівцем, квантовим нанодротом (у тому числі вуглецевою нанотрубкою (ВНТ)) або масивною молекулою (наприклад, фулерену). В останньому випадку їх прийнято називати молекулярними транзисторами (*з англ.* — molecular transistor (MT)), див. підрозділ 1.1.2. Існує достатньо ґрунтовних оглядів та підручників на цю тему, див., наприклад, посилання [11–15]. КТ пов'язана з об'ємними (з невзаємодіючими електронами) електродами за допомогою процесів квантового тунелювання. Це означає, що таку систему можна розглядати як одновимірну двобар'єрну (з балістичним транспортом всередині), що з'єднана з резервуарами електронів. Випадок, коли енергія тунелюючих електронів знаходиться в межах енергетичного вікна тунелювання ширини резонансного енергетичного рівня все-

редині структури, відноситься до резонансного тунелювання. Повністю когерентний процес тунелювання зазвичай називають резонансним квантовим тунелюванням (РКТ) (*з англ.* — resonant quantum tunneling). Однак, коли електрони тунелюють некогерентно до проміжного стану (на КТ) і далі, такий процес називається послідовним тунелюванням (ПТ) (*з англ.* — sequential tunneling) [11]. Останній випадок якраз і цікавить нас. Таким чином, транспорт електронів через таку двобар'єрну систему можна описати в рамках підходу Ландауера-Буттікера (*з англ.* — Landauer-Büttiker approach) [16, 17]. В рамках цього методу середній струм I , який визначається тунельними процесами через систему, пов'язаний з коефіцієнтом тунелювання $T(\varepsilon)$,

$$I(V) = \frac{2e}{h} \int d\varepsilon T(\varepsilon) [f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)], \quad (1.1)$$

де $f_{L,R}$ — функція розподілу Фермі-Дірака в лівому (витік) або правому (стік) електроді, $f_{L,R}(\varepsilon) = 1 / [\exp \{(\varepsilon - \mu_{L,R})/T\} + 1]$, $\mu_{L,R}$ — хімічний потенціал, T — температура і e — заряд електрона. Для тунельних бар'єрів коефіцієнт проходження визначається за формулою Брейта-Вігнера (*з англ.* — Breit-Wigner formula),

$$T_{BW}(\varepsilon) = \frac{\Gamma^2}{(\varepsilon - \varepsilon_i)^2 + \Gamma^2}, \quad (1.2)$$

де ε_i відповідає енергії резонансного рівня КТ (всередині двобар'єрної структури), а $\Gamma \propto |t_0|^2$ - ширина енергетичного рівня, Γ/\hbar , (t_0 - амплітуда тунелювання). Корисно також зазначити, що для лінійної провідності $G = I/V$ можна отримати наступний вираз з рівняння (1.1) (в режимі лінійного відгуку, $V \rightarrow 0$), який є відомою формулою Ландауера для провідності,

$$G = G_0 \int_0^\infty d\varepsilon T(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right), \quad (1.3)$$

де $G_0 = 2e^2/h$ — провідності. З цього рівняння (1.3), можна отримати високо-температурну ($T \gg \Gamma$) $1/T$ залежність лінійної провідності для послідовного тунелювання електронів, $G \propto \Gamma/T$. Також рівняння (1.3) може слугувати підставою для виразу "провідність є проходженням" (*з англ.* — "conductance is transmission") [18].

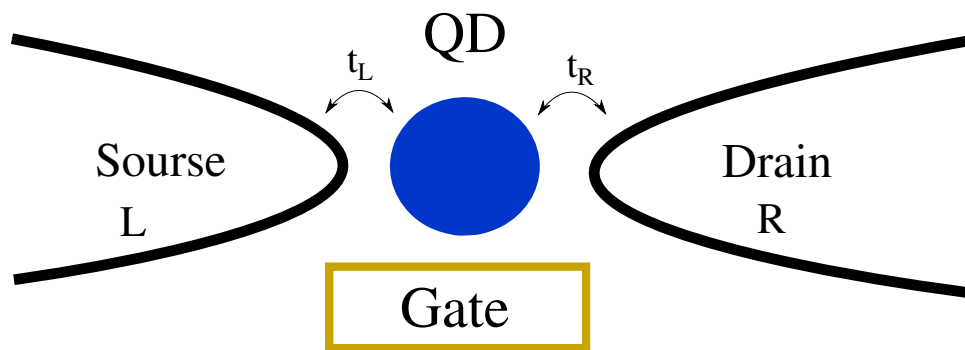


Рис. 1.1 Схематичне зображення одноелектронного транзистора. Квантова точка розміщується між двома об'ємними електродами (витоком і стоком) та тунельно пов'язана ($t_{L,R}$) з ними. Напруга на затворі задається для маніпулювання енергією КТ.

Часткова похідна в інтегралі рівняння (1.3) дає температурну залежність провідності, тоді як з коефіцієнта проходження, рівняння (1.2), видно, що провідність має максимуми при $\varepsilon = \varepsilon_i$. Тут положення максимумів визначаються енергетичними рівнями квантової точки і хімічним потенціалом в електродах. Але це не єдиний випадок. Сучасна експериментальна техніка дозволяє змінювати параметри центральної частини транзистора. Зокрема, за допомогою додаткового електроду (затворного контакту), який створює конденсатор з острівцем, можна змінювати потенціал квантової точки відносно електродів так, що енергія кожного рівня на КТ буде зміщена на величину, яка визначається напругою, прикладеною до затвору, eV_G [19]. Як наслідок, лінійна диференціальна провідність має резонансну залежність від напруги на затворі. Останнє твердження дає можливість ідентифікувати енергетичний спектр квантової точки за допомогою вимірювання електричного струму.

Транспортні властивості одноелектронних транзисторів на основі однієї або декількох квантових точок, квантових дротів є актуальною темою як теоретичних, так і експериментальних досліджень, див., наприклад, [20–27].

1.1.1. Режим кулонівської блокади тунелювання електронів.

У наведених вище міркуваннях ми вважали електрони невзаємодіючими. Це припущення може дуже добре працювати для макроскопічних провідників (і ми будемо дотримуватись його для електродів у подальшому). Однак

це не так для квантової точки, де один електрон може впливати на її стан через дискретність його заряду.

Важливим параметром є енергія, пов'язана з додаванням одного електрона до нейтрально зарядженої квантової точки, тобто енергія заряду, яка є електростатичною, зумовленою власною ємністю C КТ,

$$\varepsilon_C = \frac{e^2}{2C}. \quad (1.4)$$

Це означає, що за низьких температур, $T \ll \varepsilon_C$, і якщо напруга зміщення, прикладена до електродів, мала, $V < V_C = e/2C$, транспорт електронів через систему повністю блокується. Це відповідає ефекту кулонівської блокади. Явищам кулонівської блокади присвячено багато робіт, див., наприклад, посилення [12, 13, 15, 19, 28]. Важливо відзначити, що кулонівська блокада може бути знята регулюванням напруги на затворі V_G (в умову резонансного тунелювання потрібно включити енергію заряду, оскільки при приході електрона на острівцець він зміщує енергетичні рівні на величину енергії заряду), на відміну, наприклад, від блокади Франка-Кондона, яку ми детально розглянемо в наступному пункті, 1.1.2. Це призводить до осциляцій в режимі кулонівської блокади (з *англ.* — Coulomb blockade oscillations), тобто до резонансної поведінки диференціальної провідності за періодом коливань e/C (за напругою на затворі). Також слід зазначити, що якщо розміри КТ стають дуже малими (тобто збільшується ємність), то енергія заряду починає бути мізерно малою в порівнянні з відстанню між квантованими енергетичними рівнями на острівці. Це призводить до того, що дані осциляції тепер є лінійними коливаннями провідності (як функції напруги на затворі) з періодом, що визначається відстанню між енергетичними рівнями.

Подавлення електричного струму через ОЕТ в режимі кулонівської блокади можна зрозуміти з наступної наочної картинки. Хімічні потенціали електродів витоку і стоку визначають так зване "вікно провідності" так що при збільшенні напруги зміщення ширина "вікна" збільшується. Резонансний транспорт електронів можливий, коли (резонансні) енергетичні рівні КТ знаходяться в межах "вікна провідності". Напруга на затворі дозволяє змістити рівні енергії відносно ферміївського рівня в електродах і, таким чином, наблизити їх до "вікна провідності" (або навпаки).

Однією з особливостей явища кулонівської блокади в одноелектронних транзисторах є кулонівські сходинок вольт-амперних характеристик (з *англ.* — Coulomb staircase of current-voltage characteristic), які більш виражені у випадку несиметричних тунельних бар'єрів, див., наприклад, [15]. Ефект виникає за рахунок внеску у транспорт електронів станів з більшою енергією при більших тягнучих напругах. Це може бути зрозуміло в рамках згаданої вище картини "вікна провідності". Наприклад, при заданому значенні напруги на затворі електричний струм подавлений при низьких тягнучих напругах до критичного значення V_C , після чого електрони починають тунелювати через перший стан на квантовій точці. За більш високих напруг стають доступними наступні електронні стани, що призводить до стрибка величини струму. Як наслідок, у загальному випадку для n -ї сходинок струм знаходять як [15],

$$V_C^n = \frac{2(2n - 1)\epsilon_C}{e}. \quad (1.5)$$

При цьому висота сходинок різко зменшується, а залежність струм-напруга стає лінійною при великих значеннях напруги зміщення. Окрім того, температура згладжує і зрештою розмиває сходинок, тобто можна оцінити відповідну температуру для спостереження ефектів як $T \approx 1K$ [22].

Достатньо інформативними та зазвичай використовуються для представлення експериментальних результатів є діаграми стабільності (з *англ.* — stability diagrams). Вони являють собою контурні графіки залежностей електричного струму $I(V, V_G)$ і диференціальної провідності $dI/dV(V, V_G)$ від напруг тягнучої і затвору. На таких графіках добре видно ефекти кулонівської блокади через так звані кулонівські ромби (з *англ.* — Coulomb diamond) (режим кулонівської блокади відповідає області ромбічної форми). Варто зазначити, що на діаграмах стабільності можуть спостерігатися додаткові лінії (піки), зумовлені наявністю декількох енергетичних рівнів на КТ ($\Delta\epsilon \approx \epsilon_C$, де $\Delta\epsilon$ — різниця енергетичних рівнів) або впливом вібраційних ефектів (в молекулярних транзисторах, див. пункт 1.1.2) [22, 29].

Наступним пунктом зазначимо про узагальнення формули Ландауера для електричного струму, рівняння (1.1). У випадку взаємодіючих електронів для розрахунку транспортних властивостей такої системи зазвичай використовують підходи, що базуються на формалізмі функцій Гріна. Узагальнений

вираз для електричного струму має наступний вигляд,

$$I(V) = \frac{ie}{2e} \int d\varepsilon \text{Tr}\{[f_L(\varepsilon)\Gamma_L - f_R(\varepsilon)\Gamma_R] (G^r - G^a) + (\Gamma_L - \Gamma_R) G^<. \quad (1.6)$$

Ця формула називається формулою Мейра-Вінгріна (з *англ.* — Meir-Wingreen formula), отриманою за допомогою методу Келдиша (нерівноважний підхід з використанням функцій Гріна) [30]. Зокрема, для випадку, коли парціальні ширини рівнів пропорційні [30], вона має вигляд:

$$I(V) = -\frac{2e}{h} \int d\varepsilon [f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)] \text{Tr}\{T \text{Im} G^r\}. \quad (1.7)$$

Більше того, цю формулу було розширено до залежного від часу транспорту електронів у роботах [31, 32]. Тут Tr позначає операцію сліду, коефіцієнт передачі T тепер є матрицею, а $G^{r,a,<}$ — запізнення (з *англ.* — retarded), випередження (з *англ.* — advanced) або Келдиша (з *англ.* — Keldysh) функціями Гріна, відповідно, які є кореляційними функціями з операторами на КТ. Для незалежного від часу випадку та однорівневої квантової точки функція Гріна запізнення має такий вигляд [11, 31] в енергетичному представленні,

$$G^r(\varepsilon) = [\varepsilon - \varepsilon_0 - \Lambda(\varepsilon) + i\Gamma(\varepsilon)]^{-1}, \quad (1.8)$$

де $\Lambda(\varepsilon)$ і $\Gamma(\varepsilon)$ — зсув і ширина енергетичного рівня квантової точки, ε_0 [11, 32]. Для невзаємодіючих електронів у широкозонному наближенні (з *англ.* — wide band approximation) [33, 34] (ширина рівня не залежить від енергії) з рівняння (1.6) отримуємо формулу Ландауера, рівняння (1.1).

1.1.2. Транспортні властивості молекулярних транзисторів.

Під одномолекулярним транзистором (ОМТ) можна розуміти ОЕТ, в якому центральна частина системи є рухомою. Це може бути макромолекула (наприклад, фулерен) або квантовий нанодріт (зокрема, вуглецева нанотрубка), розміщений між двома масивними електродами. У транспортних властивостях таких пристроїв (як і в молекулярних переходах) виникають якісно нові ефекти за рахунок електрон-вібронного зв'язку і реалізуються такі нові явища, як поляронні ефекти і тунелювання електронів за допомогою фонових (з *англ.* — phonon-assisted electron tunneling), механічна нестійкість і

шатлювання (човниковий транспорт) електронів. Існують ґрунтовні огляди поляронних ефектів, див., наприклад, посилення [11, 35, 36]. Таким чином, у цьому підрозділі ми лише вводимо основні поняття і робимо огляд останніх досягнень у цій галузі, де віброни (кванти коливань КТ) пов'язані з модою коливань, не пов'язаною з напрямком тунелювання електронів [11]. Однак, шатлювання електронів буде розглянуто в підрозділі 1.3.

Тунельна спектроскопія є добре відомим методом дослідження електрон-фононої взаємодії в об'ємних металах (див., напр., [37]). Електронн-транспортна спектроскопія може бути використана для вивчення коливальних властивостей молекул в одномолекулярних транзисторах [20, 38]. Вольтамперні характеристики одноелектронних транзисторів, де молекула фулерену [20], чи підвішена одностінна вуглецева нанотрубка [22, 39, 40] або в якості базового елемента використовується вуглецевий стрічок (з *англ.* – carbon nano-rearod) [38], демонструють при низьких температурах додаткові особливості (сходинки) при напругах зміщення $eV_n \simeq n\hbar\omega$ (ω – частота коливального ступеня свободи). Найпростіші моделі (див., напр., огляд [11]), які описують ступінчасту поведінку $I - V$ кривих, ґрунтуються, як правило, на теорії, де фононні збудження є бездисперсійними (віброни з єдиною частотою) і передбачається, що вони перебувають у рівновазі з тепловим оточенням при температурі T (роль цього теплового оточення можуть грати масивні металеві електроди). Сходинки на вольт-амперних залежностях (еквідистантні піки) (рівновіддалені піки диференціальної провідності) пов'язані з відкриттям непружних каналів електронного тунелювання електронів через вібруючу квантову точку. Для сильної електрон-вібронної взаємодії ці моделі передбачають:

- (i) Блокада Франка-Кондона [41] (експоненціальне подавлення) провідності при низьких температурах $T \ll \hbar\omega$,
- (ii) немонотонна температурна залежність диференціальної лінійної провідності.

Всі ці ефекти спостерігалися в експериментах з молекулярними транзисторами на основі однієї молекули фулерену [20] або вуглецевих стрічків (з *англ.* – carbon nanorearods) [38].

Мінімальна модель, яка описує вищевказані ефекти, складається з вібруючої однорівневої квантової точки, розміщеної між двома об'ємними нор-

мальними металевими електродами, до яких прикладена постійна тягнуча напруга. Положення енергетичного рівня КТ налаштовується напругою на затворі (зазвичай, так, щоб отримати максимальний струм, $\varepsilon_0(V_G) = \varepsilon_F$). Для простоти спочатку розглянемо безспінові електрони (невзаємодіючі). Гамільтоніан такої системи (тунельна модель або гамільтоніан Андерсона-Гольштейна (з *англ.* – Anderson-Holstein Hamiltonian)) складається з наступних частин:

$$H = H_l + H_d + H_v + H_{int} + H_t. \quad (1.9)$$

Тут H_l — гамільтоніан не взаємодіючих електронів у берегах $\kappa = L, R$,

$$H_l = \sum_{\kappa\kappa} \varepsilon_{\kappa\kappa} a_{\kappa\kappa}^\dagger a_{\kappa\kappa}, \quad (1.10)$$

де $a_{\kappa\kappa}^\dagger$ ($a_{\kappa\kappa}$) — оператор породження (знищення) електрона зі стандартним антикомутаційним співвідношенням. У гамільтоніані однорівневої квантової точки,

$$H_d = \varepsilon_0 c^\dagger c, \quad (1.11)$$

c^\dagger (c) — оператор породження (анігіляції) електронного стану на КТ з енергією ε_d . Вібраційна підсистема описується гамільтоніаном гармонічного осцилятора,

$$H_v = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (1.12)$$

з канонічно спряженими операторами координати та імпульсу, $[x, p] = i\hbar$. Гамільтоніан електрон-вібрональної взаємодії має такий вигляд:

$$H_{int} = \Delta x c^\dagger c. \quad (1.13)$$

Тунельний гамільтоніан наступний:

$$H_t = \sum_{\kappa\kappa} t_\kappa a_{\kappa\kappa}^\dagger c + \text{H.c.}, \quad (1.14)$$

де t_κ — амплітуда тунелювання, яку ми розглядаємо в симетричному випадку, $t_L = t_R = t_0$, для простоти подальшого викладу. Випадок тунельної амплітуди, що залежить від положення гранули, буде враховано в розділі 1.3.

Для того, щоб діагоналізувати гамільтоніан, рівняння (1.9), можна виконати унітарне перетворення Ланга-Фірсова (з *англ.* — Lang-Firsov) [42] або "мале поляронне" [11],

$$\hat{V} = \exp [\imath \lambda p c^\dagger c], \quad (1.15)$$

де $\lambda = \Delta / \hbar m \omega^2$ — константа електрон-вібронного зв'язку. Після цього перетворення отримаємо перенормування амплітуди тунелювання таким чином:

$$H_t \rightarrow H_t = \sum_{k\kappa} t_0 e^{-\imath \lambda p} a_{k\kappa}^\dagger c + \text{H.c.}, \quad (1.16)$$

а зсув (зміщення) енергії електрона віброуючої КТ називається поляронним зсувом (з *англ.* — polaronic shift), $\varepsilon_p = \varepsilon_d - \lambda^2 \hbar \omega$, див., напр., посилання [11, 36, 41, 43]. А зв'язаний стан електрона і віброна називається *поляроном*.

Існує декілька підходів до розрахунку транспорту через одномолекулярний транзистор, таких як метод рівняння руху (з *англ.* — equation of motion (EOM) method) [44], управляючого рівняння (з *англ.* — master equation) [11] з використанням золотого правила Фермі (з *англ.* — Fermi Golden rule), методу Келдиша [30, 41], або наближення матриці густини (з *англ.* — density matrix approximation) [45]. Однак, у всіх цих методах одним з вирішальних моментів є те, як трактувати електрон-вібронні кореляції в процедурі усереднення. Звичайний підхід, який справедливий в теорії збурень для малих параметрів ширини електронного рівня (мала прозорість бар'єру), полягає в тому, щоб нехтувати кореляціями між електронами і вібронами та оцінювати середні за гамільтоніаном невзаємодіючих вібронів або за ферміонною частиною гамільтоніану для ферміонних середніх [11]. Незважаючи на це, потрібно бути точним у розгляді режимів транспорту в межах справедливості теорії збурень, оскільки деякі результати можуть стати сумнівними [46]. Також типовим припущенням є врахування випадку сильного зв'язку вібронів з бозонним оточенням (тепловим оточенням з температурою T) так, щоб процес вирівнювання їх функцій розподілу був достатньо швидким (швидшим за час, що відповідає тунельній події) [11]. Основне середнє, яке необхідно обчислити — це кореляційна функція з експоненціальною функцією вібронних операторів. Це можна зробити кількома методами, див., наприклад, посилання [47], де добре пояснюється техніка фейнманівського розплутування операторів (з *англ.* — Feynman disentangling of operators technique). Крім то-

го, зручно використовувати відому формулу Кемпбелла-Бейкера-Хаусдорфа-Динкіна (з *англ.* — Campbell-Baker-Hausdorff-Dynkin formula). Результатом розрахунків кореляційних функцій є наступний [11, 41, 43, 47, 48],

$$\langle e^{\mp i\lambda\hat{p}(t)} e^{\pm i\lambda\hat{p}(t')} \rangle_0 = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n e^{-i\omega n(t-t')}, \quad (1.17)$$

де $\langle \dots \rangle_0$ вказує на усереднення з вібронною рівноважною функцією розподілу (матриця густини, яка має так званий гібсовський вигляд), а

$$A_n = e^{-\lambda^2(1+n_B)} I_n(z) e^{-n\omega/(2T)}, \quad (1.18)$$

з умовою нормалізації $\sum_n A_n = 1$. У цьому рівнянні $I_n(z)$ є модифікованою функцією Бесселя першого роду [49], $z = 2\lambda^2 \sqrt{n_B(1+n_B)}$, де n_B - функція розподілу Бозе-Ейнштейна,

$$n_B = 1 / \left[e^{\hbar\omega/T} - 1 \right]. \quad (1.19)$$

Тоді для електричного струму, використовуючи, наприклад, формулу Мейра-Вінгріна, рівняння (1.7), отримаємо наступний вираз [46],

$$I(V) = -\frac{e}{h} e^{-\lambda^2(1+2n_B)} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} I_n e^{-n\omega/(2T)} \int d\varepsilon T_{BW}^n(\varepsilon) [f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)], \quad (1.20)$$

який представлено у вигляді суми по непружним вібронним каналам, і тепер коефіцієнт проходження Брейта-Вігнера має вигляд:

$$T_{BW}^n = \frac{\Gamma^2}{(\varepsilon - \varepsilon_p + n\hbar\omega)^2 + \Gamma^2}. \quad (1.21)$$

Аналізуючи рівняння (1.20), можна зробити висновок про декілька особливостей у транспорті електронів з урахуванням електрон-вібронного зв'язку. По-перше, поява непружних резонансних каналів для тунелювання електронів з випусканням ($n < 0$) або поглинанням ($n > 0$) вібронів. Це пов'язано з так званим тунелюванням за допомогою фононів. Як наслідок, вольт-амперні характеристики молекулярного транзистора при низьких температурах є ступінчастими функціями (див., наприклад, рис. 2.2). Отже, ко-

жна сходинка (етап зняття блокади Франка-Кондона) відповідає відкриттю нового непружного каналу для тунелювання електронів при збільшенні тягнучої напруги (в "вікно провідності" входить більше непружних каналів). По-друге, для достатньо ($\lambda \gtrsim 1$) сильної електрон-вібронної взаємодії електричний струм досить сильно подавлений при низьких температурах і малих напругах зміщення (див., наприклад, рис. 2.2). Цей ефект називають ефектом Франка-Кондона [41] або поляронною блокадою [11]. І тут важливим моментом є те, що ця блокада не може бути знята підстроюванням напруги на затворі, як це має місце для кулонівської блокади. Також електрон-вібронний зв'язок призводить до немонотонної температурної залежності лінійної провідності через поляронне звуження ширини енергетичного рівня квантової точки Γ ,

$$G_\lambda(T) \propto G_0(T)e^{-\lambda^2}, \quad (1.22)$$

для низьких температур $\Gamma \ll T \ll \hbar\omega$. В рівнянні (1.22) $G_0 = \Gamma/T$ — високо-температурна провідність через нерухому однорівневу квантову точку.

Наступним кроком візьмемо до уваги спин електрона. Неважко включити в гамільтоніан, рівняння (1.9), спінову $\sigma = \uparrow, \downarrow$, ступінь свободи, і додати доданок, що відповідає кулонівській взаємодії (з силою U) на КТ,

$$H_U = U c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow} c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\downarrow}. \quad (1.23)$$

Таким чином, унітарне перетворення рівняння (1.15) призводить до перенормування величини кулонівської взаємодії, $U_p = U - 2\lambda^2\hbar\omega$. Можна бачити, що це може привести до випадку кулонівського притягання для сильної електрон-вібронної взаємодії, $U < 2\lambda^2\hbar\omega$. Однак цей випадок потребує спеціального розгляду [50]. Всі особливості, які ми обговорювали для безспінового електрона, зберігаються і при наявності електрон-електронної взаємодії.

В роботі [51] в молекулярних транзисторах, виготовлених з молекул фулерену C_{140} , показано, що тунелювання з вібронами, пов'язаними з внутрішнім режимом розтягування молекули [51], може мати місце, див. також посилання на [20, 22]. Сильний зв'язок цієї моди з тунельними електронами, порівняно з іншими молекулярними модами, узгоджується з молекулярним моделюванням. Варіації у вимірної сили тунелювання за допомогою вібрації між різними приладами представлено в роботі [51].

В нещодавно опублікованій роботі [43] транспортні властивості одномолекулярного транзистора зі спін-поляризованими електродами розглядалися за наявності не тільки електрон-вібронаї та кулонівської взаємодії, але й враховувався вплив магнітного поля, спрямованого перпендикулярно до напрямку протікання струму. Випадок повністю спін-поляризованих берегів дозволяє виділити ефект, що виникає внаслідок взаємодії вищезгаданих явищ. Магнітне поле, яке індукує спін-переворотні процеси на квантовій точці, призводить до зняття спінової блокади в спінтронному пристрої. Член в гамільтоніані, що з'явився внаслідок ефекту Зеемана (розщеплення) в магнітному полі H , має вигляд:

$$H_H = -\frac{g\mu_B H}{2} \left(c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow} + c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\uparrow} \right), \quad (1.24)$$

де g і μ_B позначають гіромагнітне відношення та магнетон Бора, відповідно. Цей недіагональний член у гамільтоніані може бути усунутий шляхом виконання канонічного перетворення ферміонних операторів [5, 43, 52–55], що приводить до перенормування енергетичного рівня точки (розщеплення) $\varepsilon_{1,2} = \varepsilon_d \pm g\mu_B H/2$, та амплітуди тунелювання,

$$H_t \rightarrow H_t = \frac{t_0}{\sqrt{2}} e^{-i\lambda\hat{p}} \sum_{k\kappa} a_{k\kappa}^{\dagger} (j_{\kappa} d_1 + d_2) + \text{H.c.}, \quad (1.25)$$

де $j_{L,R} = \pm 1$ і $d_{1,2}$ – нові оператори електрона на КТ. Для розрахунку транспортних властивостей системи в роботі [43], див. також [7] використано метод редукованої матриці густини та теорію збурень за шириною рівня КТ. Отримано, що на вольт-амперних характеристиках кількість сходинок Франка-Кондона збільшилася вдвічі, порівняно зі звичайним молекулярним транзистором. Кожен інтервал напруги $eV = 2\hbar\omega$ додає тепер дві сходинок. Подвоєння пояснюється тим, що система з зееманівським розщепленням має вдвічі більшу кількість пружних каналів, з кожним з яких пов'язані непружні канали [43]. Подвоєння кількості сходинок спостерігається також при наявності кулонівської взаємодії. Окрім того, було виявлено, що зняття кулонівської блокади напругою протікає поетапно, так що існує два пружних канали для тунелювання другого електрона до квантової точки, причому один з цих каналів відкривається раніше за інший за енергією. Етапи розділені інтерва-

лом напруги, що дорівнює енергії розщеплення в зовнішньому магнітному полі [43]. На додачу, отримано, що для сильної електрон-вібронної взаємодії $\lambda \gtrsim 1$ температурна залежність лінійної провідності є немонотонною і аномальне зростання максимуму провідності залежить як від сили кулонівської взаємодії, так і від зовнішнього магнітного поля [43]. Також досліджено термоелектричні властивості розглянутого пристрою в роботі [43] та при наявності градієнта температури в системі в роботі [56].

До того ж, транспортні властивості наступного спітронного пристрою досліджено в роботі [52]. (Опустимо на мить електрон-вібронну взаємодію.) У моделі, що розглядається, нерухома КТ розміщується між магнітними повністю спін-поляризованими (для простоти) провідниками (напівметалами), які утримуються при різних температурах і хімічних потенціалах (керуються за допомогою тягучої напруги). У такому пристрої виникає ефект спінової блокади (з *англ.* – spin blockade): електрон зі спіном \uparrow не може тунелювати до КТ зі спіною поляризацією \downarrow і навпаки. Однак зовнішнє магнітне поле, яке прикладене перпендикулярно намагніченості КТ, індукує спін-переворотні процеси електрона на квантовій точці. Довільний напрямок магнітного поля розглянуто в роботі [57], де враховано випадок як невзаємодіючих, так і взаємодіючих електронів і знайдено залежність провідності з використанням підходу функцій Гріна. В роботі [52] метод рівняння руху в явному вигляді використано для розрахунку електричного та теплового струмів у випадку невзаємодіючих електронів. Показано, що в оптимальному режимі добротність (ZT) запропонованого спітронного приладу суттєво підвищується [52] у порівнянні з аналогічним приладом з неполяризованими електронами [58]. Зокрема, було показано [52], що (в найпростішому випадку) електричний струм (коефіцієнт передачі) має наступну залежність від магнітного поля, див. також посилання [5],

$$I = I_0 \frac{h^2/2}{h^2 + \Gamma^2} [f_L^+ - f_R^+], \quad (1.26)$$

де $I_0 = e\Gamma$ – максимальний струм через ОЕТ на основі нерухомої квантової точки, а $h = g\mu_B H$ та $2f_{L,R}^+ = f_{L,R}(\varepsilon_1) + f_{L,R}(\varepsilon_2)$. Також вплив кулонівської взаємодії на термоелектричні властивості був розрахований за допомогою

наближення матриці густини. Отримано, що в режимі кулонівської блокади добротність не зменшується за рахунок електрон-електронної взаємодії [52].

Проте, коли зв'язок вібронної підсистеми з тепловим оточенням слабкий і віброни не перебувають у рівновазі протягом часу тунелювання електрона через систему, їх матриця густини не може мати рівноважну гібсовську форму і її доводиться оцінювати з розв'язку кінетичних рівнянь. Ця задача може бути розв'язана тільки чисельно (див., наприклад, посилання [59]). Існує лише декілька робіт [60–64], в яких віброни при тунелюванні електронів через ОЕТ вважалися нерівноважними. В роботі [62] припускалося, що вібронна підсистема перебуває в когерентному стані. У підході, використаному в цитованій роботі, матриця густини когерентного стану була незалежною від часу, що суперечить рівнянню Ліувілля-фон Неймана для матриці густини *невзаємодіючих* вібронів. Тому результати такого підходу є сумнівними, а проблема транспорту електронів через вібруючу квантову точку з когерентними осциляціями потребує перегляду.

Варто згадати про один випадок невзаємодіючих вібронів, зокрема, коли вібронна підсистема перебуває у фоківському стані з вібронним числом n або в суперпозиції таких станів. В роботі [65] повідомляється про експериментальну генерацію багатофононних фоківських станів в об'ємному акустико-хвильовому резонаторі з достатньою точністю (до $n = 8$). Також було проведено вігнерівську томографію та реконструкцію станів, що дозволило виявити квантову природу отриманих станів [65]. Так, у випадку, коли матриця густини механічної підсистеми описує фоківський стан, кореляційна функція, рівняння (1.17), має наступний вигляд [47, 61],

$$\begin{aligned} \langle n | e^{\mp i\lambda\hat{p}(t)} e^{\pm i\lambda\hat{p}(t')} | n \rangle &= e^{-\lambda^2[1-e^{i\omega(t-t')}] L_n [2\lambda^2(1-\cos\{\omega(t-t')\})]} = \\ &= \sum_{m=0}^n \sum_{k=0}^{\infty} A_{mk}^n e^{i\omega[m-k](t-t')}, \end{aligned} \quad (1.27)$$

де

$$A_{mk}^n = e^{-\lambda^2} \frac{(-1)^{m+k} n!}{(m!)^2 (n-m)!} (2\lambda)^{2m} L_k^{2m-k}(\lambda^2), \quad (1.28)$$

де $L_i^j(z)$ — узагальнений поліном Лаґера [49]. Зауважимо, що рівняння (1.17) можна отримати з рівняння (1.27) за допомогою підсумовування за n з відповідними коефіцієнтами [47, 66].

На противагу цьому, в наступному розділі 2 ми розглянемо одноелектронний транзистор з віброуючою квантовою точкою, де віброна підсистема описується залежною від часу матрицею густини. Фізично такий підхід відповідає когерентним коливанням квантової точки, що розглядається як гармонічний квантовий осцилятор. Когерентні стани гармонічних осциляторів добре відомі у фізиці (див., напр., посилення [67, 68]). У тунельному електронному транспорті вони з'являються, наприклад, у слабкій надпровідності (струм Джозефсона через віброуючу квантову точку, див. роботу [69] та посилення в ній). Останнім часом, когерентні стани фотонів (зокрема, "cat states"), зв'язані з кубітами та кубіти, утворені когерентними станами фотонів, знаходяться в авангарді досліджень у квантовій комунікації (див., наприклад, огляд [70]).

1.2. Когерентні ефекти в транспорті електронів через наноелектромеханічну систему.

Електромеханічні явища на нанометрових масштабах привертають значну увагу протягом останніх двох десятиліть [71]. Останні досягнення в галузі нанотехнологій набувають перспективної платформи для вивчення фундаментальних явищ, які виникають за рахунок взаємодії квазікласичної та повністю квантової підсистемами. Зарядовий кубіт (з *англ.* — charge qubit), утворений крихітним надпровідним острівцем (сховище куперівських пар (з *англ.* — Cooper pair box (CPB))), базисними станами якого є зарядові стани (наприклад, стани, які представляють наявність або відсутність надлишкових куперівських пар на гранулі), є однією з великої групи чисто квантових систем [72]. Існує чимало типів твердотільних систем, на яких базується кубіт, таких як квантові надпровідні схеми (серед яких джозефсонівські з'єднання (JJ), надпровідні квантові інтерферометри (з *англ.* — superconducting quantum interference device (SQUID)) та CPB), див., наприклад, огляди [73, 74]; квантові точки [75, 76] та атоми [77].

Загалом, кубіт є однією з фізичних реалізацій дворівневої системи [78], що включає також надхолодні атоми, класичні наномеханічні резонатори та напівпровідникові резонатори, де на ексітон-поляритонних конденсатах можуть бути реалізовані надзвичайно добре керовані кубіти [79, 80]. Однією з головних особливостей, пов'язаних з дворівневою системою, є те, що вона,

як правило, демонструє квазіперетин (з *англ.* — anticrossing) енергетичних рівнів при зміні зовнішнього параметра [81]. Керована дворівнева система (з *англ.* — driven two-level system) описується стандартним гамільтоніаном,

$$H = -\frac{\Delta}{2}\sigma_x - \frac{\varepsilon(t)}{2}\sigma_z, \quad (1.29)$$

де $\varepsilon(t)$ — збуджуючий сигнал, а Δ — енергетична щілина [82]. Розв'язуючи залежне від часу рівняння Шредінгера для лінійно керованої системи, $\varepsilon(t) = vt$, отримуємо наступний вираз для ймовірності переходу, тобто ймовірності знайти систему у збудженому стані, відомий як формула Ландау-Зенера-Штукельберга-Майорани (ЛЗСМ) (з *англ.* — Landau-Zener-Stückelberg-Majorana (LZSM)),

$$P_{LZSM} = e^{-2\pi\delta}, \quad (1.30)$$

де $\delta = \Delta^2/(2\hbar v)$ — параметр адіабатичності, див. огляд [78]. Нелінійний збуджуючий сигнал розглянуто в роботі [83]. Додатково досліджено перехідні процеси ЛЗСМ у періодично керованій системі сховищ куперівських пар [84]. Одночасно з цим, сучасні наномеханічні резонатори, динаміка яких згідно з теоремою Еренфеста значною мірою описується класичними рівняннями, є ідеальними представниками квазікласичної підсистеми [85]. Системи, динаміка яких визначається взаємним впливом надпровідного кубіта та наномеханічного резонатора, є предметом найсучасніших досліджень у квантовій фізиці, зокрема, у квантовій комунікації, див., наприклад, роботи [86—91]

Виникають два основні питання, пов'язані зі взаємодією між квазікласичною динамікою механічного резонатора та квантовою динамікою заряду кубіта. Першим з них є наступне. Як квазікласичний рух може впливати на чисто квантові явища? Розглядаючи це питання, було показано, що надпровідний струм між двома віддаленими надпровідниками може виникати при механічному транспортуванні куперівських пар, яке здійснюється за рахунок коливань гранули [92]. Більш того, було продемонстровано, що таке транспортування може генерувати кореляції між фазами просторово розділених надпровідників [93]. З іншого боку існує питання, як когерентна джозефсонівська динаміка зарядового кубіта вплине на динаміку квазікласичного резонатора, зокрема, чи буде квантовий зв'язок між надпровідним кубітом і механічними коливаннями. Нещодавно було продемонстровано, що окремі

фонони можна контролювати і детектувати за допомогою надпровідного кубіта. Це дозволяє когерентно генерувати та реєструвати квантову суперпозицію основного та однофононних фоківських станів [86, 87]. При цьому, наномеханічні резонатори надають можливість зберігати квантову інформацію в складних багатофононних когерентних станах. Такі стани, на відміну від однофононних, де механічні втрати необоротно видаляють квантову інформацію, дозволяють їх виявлення та корекцію [70, 94]. Величезною проблемою в реалізації повномасштабних квантових комп'ютерних систем є безпомилкове керування кубітами. Протоколи квантової корекції помилок (ККП) (*з англ.* — Quantum Error Correction (QEC)) пропонують вирішення цієї проблеми, дозволяючи виправлення логічних помилок за умови дотримання певних порогових умов для фізичних кубітів [95]. Наразі запропоновано чимало методів квантової корекції помилок. Широко використовуються ККП-коди [96], засновані на так званих *cat states* [70]. Оскільки фази є більш стійкими до помилок, пов'язаних з втратою фотонів, інформація зазвичай кодується у фазі когерентного стану. За аналогією до класичної фазової маніпуляції, квантова інформація також може бути закодована у фазі когерентного стану. Найпростіший код (двокомпонентний *cat-state* код) полягає, таким чином, у використанні двох когерентних станів з протилежними фазами, тобто *cat state* [97]. Іншими протоколами ККП є так звані ГКР-коди. Це квантові коди з виправленням помилок, які захищають стан скінченновимірної квантової системи (кудіта) (*з англ.* — qudit), що кодується нескінченновимірною системою (гармонічним осцилятором) [98]. Для логічного кубіта код ГКР визначається як когерентна суперпозиція нескінченно стиснутих станів (*з англ.* — squeezed state) або власних станів оператора зміщення \hat{x} з кроком $2/\sqrt{\pi}$ [97]. Окрім того, нещодавно було запропоновано біноміальні коди для ККП [99, 100]. Так, біноміальні квантові коди формуються зі скінченної суперпозиції фоківських станів, з біноміальними коефіцієнтами. Показано, що біноміальні коди захищені до заданого порядку на часовому кроці від неперервної дисипативної еволюції при помилках втрат, підсилення та дефазування [99].

Отже, у розділі 3 ми обговоримо можливість генерування квантової заплутаності між зарядовими станами кубіта та механічними когерентними в наноелектромеханічній системі (НЕМС), де механічні коливання сильно впливають через слабкий зв'язок зі сховищем куперівських пар. Окрім того, роз-

роблено протокол маніпуляції тягнучою напругою, що призводить до утворення заплутаних станів, які включають в себе так звані *cat states* (квантова суперпозиція когерентних станів), які є стійкими до помилок.

1.3. Механічна нестійкість в наноелектромеханічних системах.

На відміну від попереднього розгляду, 1.1, 1.2, впливу електрон-вібронаї взаємодії на транспортні властивості одномолекулярних транзисторів в рамках підходу, коли ця взаємодія пов'язана з механічними модами, незалежними від напрямку перенесення електронів, в цьому підрозділі ми звертаємо увагу на випадок, коли положення КТ між електродами експоненціально змінює ймовірність тунелювання електрона до берегів [11]. Це може призвести до того, що рівноважне положення КТ перестане бути механічно стійким, тобто може мати місце механічна нестійкість та, як результат, режим човникового транспорту електронів [101]. Це, як правило, випадок слабого електромеханічного зв'язку. Вплив поляронного ефекту на явище шатлювання електронів вивчався в роботах [102, 103]. Існує декілька ґрунтовних оглядів на цю тему, див. посилання [103–107]. Отже, ми коротко представимо ефекти механічної нестійкості в такій системі та розглянемо деякі результати.

Найпростіша модель, яка може демонструвати ефекти електричного шатлу та механічної нестійкості, описується гамільтоніаном рівняння (1.9), де тепер амплітуда тунелювання залежить від положення, а член рівняння (1.13) можна представити як:

$$H_{int} = (\varepsilon_d - e\mathcal{E}x)c^\dagger c, \quad (1.31)$$

де \mathcal{E} — електричне поле, зумовлене наявністю електрона на квантовій точці,

$$H_t = \sum_{k\kappa} t_\kappa(\hat{x}) a_{k\kappa}^\dagger c + \text{H.c.}, \quad (1.32)$$

де $t_\kappa = t_0 e^{\pm \hat{x}/\lambda}$, де λ — тунельна довжина. Для розв'язання задачі використовується рівняння Ліувілля-фон Неймана (або, в більш загальному випадку, рівняння Ліндблада), а також метод функцій Гріна в теорії збурень за параметром електромеханічного зв'язку. При цьому, якщо знехтувати ефектами нульових флуктуацій квантової точки, то можна використати напівкласичне трактування, в рамках якого $\langle \hat{x} \rangle = x$ і нас цікавлять досить великі значення

амплітуди коливань квантової точки. Отже, її координата підпорядковується рівнянню Ньютона,

$$\ddot{x} + \omega^2 x = \mathcal{F}(t)/m, \quad (1.33)$$

де введена середня сила, що дорівнює

$$\mathcal{F}(t) = -\text{Tr} \left[\hat{\rho} \frac{\partial H}{\partial x} \right].$$

Аналітично показано [108], що може виникати механічна (або човникова) нестійкість, тобто амплітуда коливань КТ, яка, будучи малою після початкового відхилення від положення рівноваги, починає зростати експоненціально з приростом $r_s \sim \lambda\Gamma$, якщо тягнуча напруша більша за порогову, $eV > 2(\varepsilon_d + \hbar\omega)$. У цьому випадку може розвинутися граничний цикл при наявності малого, але скінченного механічного тертя (член $\gamma\dot{x}$ у л.ч. рівняння (1.33)) [44, 108]. Крім того, для дослідження механічної нестійкості може бути використаний повністю квантовомеханічний підхід (трактування координати КТ за допомогою представлення функції Вігнера). Отримано, що функція Вігнера в режимі розвинених самопідтримних коливань має колоколоподібну форму (гаусову), див. [45, 109]. Отримано також різке зростання струму при переході до стаціонарного режиму. Отже, в режимі граничного циклу $I \sim e\omega$ [109].

Внутрішнє тертя, зумовлене перепадом температури T (а не тягнучою напругою) в системі у випадку безспінових електронів, розглянуто в роботі [110]. Знайдено наступну температурну залежність,

$$\gamma(T) \sim T^{-1} [\cosh^2 \{\varepsilon_d/(2T)\}]^{-1}. \quad (1.34)$$

Наступним кроком в узагальненні є врахування спіну електрона. Спінтронний наноелектромеханічний одноелектронний транзистор зі спін-поляризованими берегами розглянуто в роботі [109]. Для знаходження стаціонарного розв'язку використано наближення матриці густини та наближення нескінченно великої тягнучої напруги. Виявлено, що існують два типи переходів між стаціонарними станами при зміні електричного або магнітного поля [109]. Окрім того, отримано гістерезис в поведінці стаціонарної амплітуди та електричного струму в режимі жорсткого переходу. Так званий спін-механічний зв'язок розглянуто в роботах [111, 112]. Напівкласичний підхід використано

для визначення інкременту зростання коливань точки в механічно нестійкому режимі в системі в періодичному магнітному полі [111]. Протилежний режим механічного охолодження (*з англ.* — ground-state cooling) до основного стану запропоновано в роботі [112].

Інший тип електромеханічного зв'язку в магнітних човникових структурах базується на феромагнітному обмінному зв'язку між КТ і магнітними берегами. Область механічної нестійкості для такого наноелектромеханічного пристрою зі спін-поляризованими електродами та для взаємодіючих електронів отримано в роботі [113], див. також [114, 115]. Виявлено, що човниковий режим транспорту електронів має місце при досить низькій напруженості магнітного поля ($\hbar \ll \Gamma$), на відміну від електричного. Дана система з урахуванням градієнта температур досліджена в роботах [116–119]. Область механічної нестійкості отримано аналітично в адіабатичному випадку в рамках напівкласичного підходу. Показано, що нестійкість виникає в області зовнішніх магнітних полів між нижнім, яке залежить тільки від феноменологічного тертя, і верхнім (яке залежить від температури і при високих температурах насичується за $\hbar c_2 / \hbar \omega = \sqrt{7/2}$) критичними значеннями [119]. Режим нестійкості не виникає в області високих значень напруженості магнітного поля, оскільки в цьому випадку час спін-перевороту перевищує характерні часові масштаби, що визначаються механічними (ω^{-1}) та електронними (\hbar/Γ) часовими масштабами [119]. Причому температурна залежність коефіцієнта тертя залишається такою самою, як і у випадку безспінових електронів, рівняння (1.34). Вплив кулонівської взаємодії на механічну нестійкість системи з човниковим транспортом описано в роботах [117, 118, 120]. Показано, що така спінтро-механічна нестійкість може бути викликана електрон-електронним відштовхуванням. Критичне значення сили цієї взаємодії вирішальним чином залежить від температури та напруженості магнітного поля [118]. Також було передбачено ефект самонасичення для такої системи [113, 118]. Цей ефект проявляється у наявності стаціонарного режиму механічних автоколивань навіть без впливу зовнішнього тертя, що визначається добротністю наномеханічної системи, як і для електричної. Крім того, чисельно досліджено кулонівські кореляційні ефекти в термічно керованих та зміщених за напругою магнітних пристроях в роботі [117]. Було отримано, що термоіндукований магнітний човниковий рух спін-поляризованих електронів є пороговим явищем [117], як і

для електричного човникового пристрою. Зрештою, в роботі [116] електричні та магнітні обмінні сили враховано одночасно. Це призводить до ряду нетривіальних ефектів, які можна побачити в експериментах з вимірюванням електричного струму, оскільки така можливість була продемонстрована в роботі [116] шляхом отримання чисельно I - V кривих. Отримано, з одного боку, немонотонну залежність диференціальної провідності в стабільному (вібронному) режимі. З іншого боку, показана наявність від'ємної диференціальної провідності в стаціонарному режимі механічних автоколиваний [116]. Існує ряд експериментів, в яких спостерігався режим механічної нестійкості в наноелектромеханічних системах, див., напр., [121–129]. Когерентний спіновий човниковий процес в масиві квантових точок GaAs/AlGaAs розглянуто в роботі [130].

Ефект самопідтримних коливань сам по собі є цікавою проблемою з фундаментальної точки зору, відкриваючи нові можливості для спектроскопії [131, 132], а фізичні процеси, що лежать в його основі, показують можливі застосування для механічного охолодження [133]. Самопідтримні механічні коливання вперше спостерігалися в транзисторі на основі вуглецевих нанотрубок (ВНТ) [128], а подальші дослідження пізніше підтвердили їхні транспортні особливості [134–136]. Нещодавно було проведено експериментальне спостереження самокерованих коливань квантової точки на основі ВНТ в режимі кулонівської блокади [137].

Проте, надпровідні елементи, включені в наноелектромеханічні (НЕМ) системи, розширюють горизонт цього явища, зокрема, за рахунок ефектів надпровідної фазової когерентності; див., наприклад, наступні огляди [103, 138]. Електрод, розташований поблизу квантової точки, може впливати на її електронний стан через тунельний обмін куперівськими парами завдяки ефекту близькості. В роботі [92] (див. також [93]) показано, що рухома надпровідна гранула, яка періодично коливається між двома віддаленими надпровідними електродами, може слугувати медіатором джозефсонівського зв'язку, що призводить до когерентного переносу куперівських пар між берегами. Вплив поляронних ефектів на джозефсонівський струм в системі надпровідник-квантова точка-надпровідник (S-QD-S) було розглянуто в роботі [139]. Також, аналогічно до системи в нормальному стані, де зняття блокади Франка-Кондона призводить до немонотонної температурної залежності диференці-

альної провідності [38, 140], в даному випадку це супроводжується немонотонною температурною залежністю критичного джозефсонівського струму [139, 141, 142]. Поляронне звуження критичного джозефсонівського струму розглянуто в роботах [69, 143, 144].

Окрім того, якщо амплітуда тунелювання залежить від відстані між КТ і надпровідними електродами, то такий обмін забезпечує також зв'язок між електронними і механічними ступенями свободи. Додаткова інжекція електронів із нормального металевого електрода під напругою на КТ породжує своєрідну динаміку куперівських пар на ньому. Взаємодія електромеханічних ефектів і фазової когерентності призводить до нових і незвичних властивостей ряду гібридних переходів нормальний метал/надпровідник [145–148]. Зокрема, нещодавно було показано, що в звичайний метал-КТ на основі ВНТ-надпровідник транзисторі (N-QD-S), андреевське відбиття [149, 150] може призводити до охолодження механічної підсистеми [26, 151, 152] або генерувати ефект одноатомного лазерного випромінювання [26] при виконанні певних умов. Резонансне андреевське тунелювання в системі N-QD-S спостерігалось в роботі [153].

Механічна функціональність НЕМС в значній мірі визначається фізичними принципами, що лежать в основі взаємодії між електронною та механічною підсистемами. В усіх дослідженнях згаданих вище, ця взаємодія була обумовлена локалізацією заряду [108, 145] або спіну [113, 118], що переноситься електронами в рухомій частині системи. У главі 4 ми розглянемо принципово новий тип електромеханічного зв'язку, що ґрунтується на *квантовій делокалізації* куперівських пар (див. також посилання [154]). Ми демонструємо, що такий зв'язок може сприяти самонасиченню механічної нестійкості (*з англ.* — self-saturation effect), що призводить до до генерації *самопідтримних* механічних коливань. Запропоновано також ефект *охолодження* до основного стану наномеханічних коливань у розглянутій системі. Показано, що режим накачки або охолодження суттєво впливають на середній струм через систему, що робить можливим пряме експериментальне виявлення предбачених ефектів.

РОЗДІЛ 2

ПОЛЯРОННІ ЕФЕКТИ, ЩО ВИНИКАЮТЬ ЗАВДЯКИ НЕРІВНОВАЖНИМ ВІБРОНАМ В ОДНОМОЛЕКУЛЯРНИХ ТРАНЗИСТОРАХ

У даному розділі розглядається електронний транспорт в молекулярному транзисторі, припускаючи, що механічна підсистема знаходиться в нерівноважному стані, а саме — когерентному. Отримано вольт-амперні характеристики такого одноелектронного транзистора на основі вібруючої квантової точки. Проаналізовано знайдену залежність електричного струму від амплітуди коливань квантової точки.

2.1. Модель одномолекулярного транзистора.

Модель одномолекулярного транзистора зображена на рис. 2.1. Наноелектромеханічна система складається з двох масивних електродів — витоку (*англ.* — source (Left)) та стоку (*англ.* — drain (Right)), з хімічними потенціалами, які визначаються тягнутою напругою, $\mu_L - \mu_R = eV$, та однорівневої квантової точки (*англ.* — quantum dot (QD)). Квантова точка здійснює коливання у напрямку x — перпендикулярно до напрямку протікання електричного струму. Напруга на електроді затвору V_G вибрана таким чином, $\varepsilon_0(V_G) = \varepsilon_F$, щоб отримати максимальну величину тунельного струму. Тут $\varepsilon_0(V_G)$ позначає енергію рівня квантової точки, а ε_F — ферміївську енергію берегів. Для спрощення розрахунків ми розглядаємо тунелювання безспінових електронів через симетричний контакт. Також припускаємо, що величини тунельних матричних елементів не залежать від коливань квантової точки, $t_L = t_R = t_0$. Ми беремо до уваги лише процеси послідовного одноелектронного тунелювання, коли $\max(eV, T) \gg \Gamma$, де $\Gamma \propto |t_0|^2$ — тунельна ширина рівня (характерна енергія тунельного зв'язку точка-береги), T — температура та V — тягнуча напруга. За допомогою даної моделі може бути описаний одноелектронний транзистор на основі одностінної вуглецевої нанотрубки.

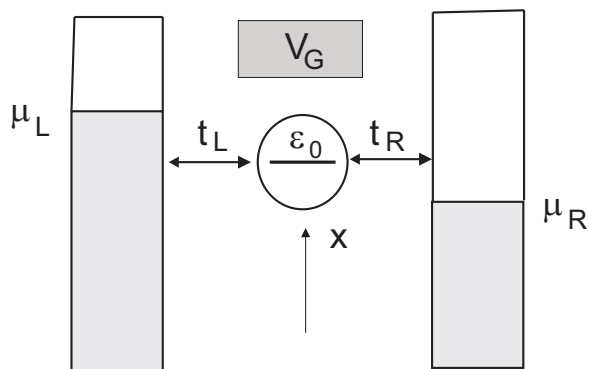


Рис. 2.1 Ескіз одномолекулярного транзистора. Вібруюча однорівнева (ε_0 – енергія рівня) квантова точка (макромолекула) розташована між двома масивними електродами, до яких прикладена тягнуча напруга V . Квантова точка тунельно ($t_L = t_R = t_0$ – тунельна амплітуда) пов’язана з електродами з хімічними потенціалами $\mu_{L,R}$, $\mu_L - \mu_R = eV$, та температурою T . Напруга затвору прикладена таким чином, що рівень енергії квантової точки знаходиться на ферміївському рівні берегів ε_F , $\varepsilon_0(V_G) = \varepsilon_F$, для отримання максимальної величини струму. Квантова точка осцилює в напрямку x – перпендикулярно до напрямку протікання електричного струму. Осциляції квантової точки описуються за допомогою когерентного стану одновимірного гармонічного осцилятора.

2.2. Гамільтоніан системи та рівняння для матриці густини.

Гамільтоніан наноелектромеханічної системи, модель якої зображена на рис. 2.1, складається з чотирьох наступних доданків,

$$H = H_l + H_{dot} + H_{v-d} + H_{tun}, \quad (2.1)$$

де H_l , H_{dot} – гамільтоніани невзаємодіючих електронів в берегах та квантової точки відповідно,

$$H_l = \sum_{k,\kappa} \varepsilon_{k,\kappa} a_{k,\kappa}^\dagger a_{k,\kappa}, \quad H_{dot} = \varepsilon_0 c^\dagger c, \quad (2.2)$$

$a_{k,\kappa}^\dagger$ ($a_{k,\kappa}$) – оператор породження (знищення) електрона в березі $\kappa = L, R$ з імпульсом k та енергією $\varepsilon_{k,\kappa}$, c^\dagger (c) – оператор породження (знищення) електронного стану на квантовій точці з енергією ε_0 . Вищезгадані оператори вторинного квантування задовольняють стандартні антикомутаційні співвідношення, $\{a_{k,\kappa}^\dagger, a_{k',\kappa'}\} = \delta_{kk',\kappa\kappa'}$, де $\delta_{k,\kappa}$ – символ Кронекера.

Гамільтоніаном H_{v-d} описуємо вібронну (механічну) підсистему та взаємодію електронів і вібронів,

$$\hat{H}_{v-d} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \Delta x c^\dagger c. \quad (2.3)$$

В рівнянні (2.3) x, p — канонічно спряжені оператори координати та імпульсу з комутаційними співвідношеннями $[x, p] = i\hbar$. Тут ω, m — власна частота коливань квантової точки та її маса, а Δ — постійна електрон-вібронної взаємодії.

Гамільтоніан H_{tun} відповідає тунелюванню електронів між квантовою точкою та електродами,

$$H_{tun} = \sum_{k,\kappa} t_\kappa a_{k,\kappa}^\dagger c + \text{H.c.}, \quad (2.4)$$

де t_κ позначає тунельну амплітуду. Нижче ми обмежимося розглядом симетричного випадку, $t_L = t_R = t_0$, що якісно не впливає на отримані ефекти.

Для того, щоб діагоналізувати гамільтоніан (2.1), зручно зробити унітарне перетворення $U H U^\dagger \rightarrow H$, де $U = \exp[i\lambda p c^\dagger c]$, відоме в літературі як перетворення Ланга-Фірсова (*англ.* – Lang-Firsov canonical transformation) або поляронне перетворення [47]. Прирівнюючи коефіцієнти при однакових степенях бозонних операторів, отримуємо пренормовану константу електрон-вібронної взаємодії $\lambda = \Delta/\hbar m \omega^2$. Тоді формула (2.3) приймає діагональний вигляд,

$$H_{v-d} \rightarrow H_v = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (2.5)$$

а тунельний гамільтоніан H_{tun} є наступним,

$$H_{tun} \rightarrow H_{tun} = t_0 \sum_{k,\kappa} e^{-i\lambda p} a_{k,\kappa}^\dagger c + \text{H.c.}. \quad (2.6)$$

Один зі способів квантовомеханічного розгляду системи з електрон-вібронною взаємодією є так званий метод зведеної (редукованої) матриці густини [45]. В рамках даного підходу матриця густини системи факторизується на тензорний добуток рівноважної матриці густини берегів, вібронної матриці

густини та матриці густини квантової точки,

$$\rho \approx \rho_l \otimes \rho_v \otimes \rho_{dot}. \quad (2.7)$$

Дане наближення відповідає випадку послідовного електронного тунелювання, коли $\max\{eV, T\} \gg \Gamma$. На відміну від досить розповсюдженого вихідного положення про рінважну матрицю густини механічної підсистеми, ми розглядаємо випадок нерівноважних вібронів. Ми припускаємо, що вібронна підсистема описується когерентним станом, який залежить від часу $|z(t)\rangle$. Важливо відмітити, що в роботі [61] когерентний стан вважається незалежним від часу, що суперечить рівнянню руху для невзаємодіючих вібронів в нашій моделі,

$$|z(t)\rangle = \exp(-\imath H_v t) |z\rangle, \quad (2.8)$$

($\hbar = 1$). Тут $|z\rangle$ — власна функція оператора знищення віброна $b, b|z\rangle = z|z\rangle$ (z є комплексним числом). Відповідна вібронна матриця густини має стандартний вигляд,

$$\rho_v(t) = |z(t)\rangle \langle z(t)|. \quad (2.9)$$

Еволюція системи у часі описується рівнянням Ліувілля (*англ.* — Liouville-von Neumann equation) для матриці густини,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \imath [H_0 + H_{tun}, \rho] = 0, \quad (2.10)$$

з $H_0 = H_l + H_v + H_{dot}$, яке має наступне формальне рішення,

$$\rho(t) = \rho(-\infty) - \imath \int_{-\infty}^t dt' e^{-\imath H_0(t-t')} [H_{tun}, \rho(t')] e^{\imath H_0(t-t')}. \quad (2.11)$$

Наступним кроком ми підставляємо рівняння (2.7), (2.11) в формулу (2.10) та знаходимо рівняння для зведеної матриці густини квантової точки $\rho_{dot} = \text{Tr}_{leads,v} \rho$, де слід береться за електронними ступенями свободи в берегах та вібронними ступенями свободи,

$$\frac{\partial \rho_{dot}}{\partial t} + \imath [H_{dot}, \rho_{dot}] = -\text{Tr} \int_{-\infty}^t dt' [H_{tun}, e^{-\imath H_0(t-t')} [H_{tun}, \rho(t')] e^{\imath H_0(t-t')}. \quad (2.12)$$

Ми можемо точно обчислити середні значення електронних та вібронних операторів в рамках наближення редукованої матриці густини, рівняння (2.7). Так як матриця густини електронів в берегах рівноважна, то середні значення обчислюються стандартним способом,

$$\langle a_{k,\kappa}^\dagger a_{k',\kappa'} \rangle = f_\kappa(\varepsilon_{k,\kappa}) \delta_{k,k'} \delta_{\kappa,\kappa'}, \quad (2.13)$$

де $f_\kappa(\varepsilon) = (\exp((\varepsilon - \mu_\kappa)/T) + 1)^{-1}$ — функція розподілу Фермі-Дірака, $\mu_{L,R} = \mu_0 \pm (eV/2)$ — електрохімічний потенціал в березі κ . Обчислення вібронної кореляційної функції

$$F(t, t_1; \lambda) = \langle \exp[-i\lambda p(t)] \exp[i\lambda p(t_1)] \rangle \quad (2.14)$$

за когерентним станом приводить до наступного виразу:

$$F(t, t_1; \lambda) = \text{Tr} [e^{-i\lambda p(t)} |z\rangle \langle z| e^{i\lambda p(t_1)}] = \exp \left\{ -\lambda^2 \left[1 - e^{\omega(t-t_1)} \right] - \lambda z \left[e^{-i\omega t} - e^{-i\omega t_1} \right] + \lambda z^* \left[e^{i\omega t} - e^{i\omega t_1} \right] \right\} \quad (2.15)$$

Тут ми вводимо безрозмірну постійну електрон-вібронної взаємодії $\lambda \hbar \sqrt{2}/l_0 \rightarrow \lambda$, де $l_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ — амплітуда нульових коливань. Параметр λ може бути записаний в наступній формі $\lambda = \sqrt{2}l/l_0$, де $l = \Delta/m\omega^2$ позначає характерну величину зміщення класичного осцилятора. Варто відмітити, що у випадку усереднення з нерівноважною вібронною матрицею густини з використанням відомої формули $\langle e^{\hat{A}} \rangle = e^{\frac{1}{2}\langle \hat{A}^2 \rangle}$ [155] ми отримуємо невірний результат.

Використовуючи співвідношення (2.13), (2.15), рівняння (2.12) для редукованої матриці густини квантової точки приймає наступний вигляд,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{dot}}{\partial t} + i[H_{dot}, \rho_{dot}] = & \frac{\Gamma}{4\pi} \sum_{\kappa} \int d\tau \int d\varepsilon \times \\ & \{ F(t, t - \tau; \lambda) e^{i\varepsilon\tau} [1 - f_\kappa(\varepsilon)] c e^{-iH_{dot}\tau} \rho_{dot}(t - \tau) c^\dagger e^{iH_{dot}\tau} + \\ & + F(t, t - \tau; -\lambda) e^{-i\varepsilon\tau} f_\kappa(\varepsilon) c^\dagger e^{-iH_{dot}\tau} \rho_{dot}(t - \tau) c e^{iH_{dot}\tau} - \\ & - F^*(t, t - \tau; -\lambda) e^{i\varepsilon\tau} f_\kappa(\varepsilon) c e^{-iH_{dot}\tau} c^\dagger \rho_{dot}(t - \tau) e^{iH_{dot}\tau} - \\ & - F^*(t, t - \tau; \lambda) e^{-i\varepsilon\tau} [1 - f_\kappa(\varepsilon)] c^\dagger e^{-iH_{dot}\tau} c \rho_{dot}(t - \tau) e^{iH_{dot}\tau} + \text{H.c.} \} \quad (2.16) \end{aligned}$$

де $\Gamma = 2\pi\nu t_0^2$ позначає ширину рівня електронного стану на квантовій точці, ν — густину електронних станів в берегах, яка в рамках наближення широких зон (*англ.* — wide-band approximation), див. напр. [33], не залежить від енергії. Зауважимо, що на відміну від випадку рівноважної матриці густини вібронів (див. напр. [43]), вібронна кореляційна функція, формула (2.15), залежить від двох моментів часу незалежно, а не від їх різниці. Остання обставина означає, що у даній системі часова інваріантність не зберігається, тобто у випадку вібронів у когерентному стані $|z(t)\rangle$, що фізично відповідає коливанням квантового маятника, інваріантність за часом порушується.

Редукована матриця (оператор) густини квантової точки ρ_{dot} діє у просторі Фока, який у даному випадку є двовимірним простором безспінового електронного рівня на квантовій точці. Матричні елементи оператора густини є наступними: $\rho_0(t) = \langle 0|\rho_{dot}(t)|0\rangle, \rho_1(t) = 1 - \rho_0(t) = \langle 1|\rho_{dot}(t)|1\rangle$, де $|1\rangle = c^\dagger|0\rangle$, а $|0\rangle$ позначає основний (вакуумний) стан. З формули (2.16) отримуємо наступне інтегро-диференціальне рівняння для ймовірності $\rho_0(t)$,

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} = \frac{\Gamma}{4\pi} \sum_{\kappa} \int d\tau \int d\varepsilon \left\{ F(t, t - \tau; \lambda) e^{i(\varepsilon - \varepsilon_0)\tau} [1 - f_{\kappa}(\varepsilon)] [1 - \rho_0(t - \tau)] - F^*(t, t - \tau; -\lambda) e^{i(\varepsilon - \varepsilon_0)\tau} f_{\kappa}(\varepsilon) \rho_0(t - \tau) \right\}. \quad (2.17)$$

Інтегрування за змінною ε можливе, використовуючи формулу Сохоцького-Племеля, див. напр. [156],

$$\int d\varepsilon e^{-i\varepsilon\tau} f_{\kappa}(\varepsilon) = -i\pi\delta(\tau) + \text{p.v.} \frac{i\pi T e^{-i\mu_{\kappa}\tau}}{\sinh \pi T \tau}, \quad (2.18)$$

де символом *p.v.* (*англ.* — principal value) позначено головне значення інтеграла (за Коші). У випадку виконання нерівності $T \gg \Gamma$ можна знехтувати ефектами запізнення в рівнянні (2.18) та отримати наступне локальне (у часі) рівняння для матричного елемента ρ_0 ,

$$-\frac{\partial \rho_0}{\partial t} = M_1(t)\rho_0 - M_2(t), \quad (2.19)$$

де

$$M_i(t) = 1 - \frac{1}{2} \sum_n A_n^{(i)}(t) [f_L(\varepsilon_0 - n\omega) + f_R(\varepsilon_0 - n\omega)]. \quad (2.20)$$

Коефіцієнти $A_n^{(i)}(t)$ є періодичними функціями часу (з періодом $2\pi/\omega$) та тому можуть бути представлені у вигляді рядів Фур'є,

$$A_n^{(i)}(t) = \sum_p a_{n,p}^{(i)} e^{i\omega p t}, \quad (2.21)$$

$$a_{n,p}^{(1)} = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\vartheta e^{-\lambda^2(1-\cos\vartheta)} \sin\left(n\vartheta - \frac{\pi p}{2}\right) \times \\ \times \sin\left(\lambda^2 \sin\vartheta\right) \cos\left(\frac{p\vartheta}{2}\right) J_p\left(4\lambda|z| \sin\frac{\vartheta}{2}\right), \quad (2.22)$$

$$a_{n,p}^{(2)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\vartheta e^{-\lambda^2(1-\cos\vartheta)} \cos\left(\frac{p\vartheta}{2}\right) \times \\ \times \cos\left(\frac{\pi p}{2} - n\vartheta + \lambda^2 \sin\vartheta\right) J_p\left(4\lambda|z| \sin\frac{\vartheta}{2}\right). \quad (2.23)$$

В формулах (2.22), (2.23) $J_p(x)$ — функції Бесселя першого роду. До того ж, ми параметризуємо власне значення когерентного стану z як $z = |z| \exp(i\varphi)$, де параметр $|z|$ визначає амплітуду коливань квантової точки.

Розглянемо стаціонарний режим коливань евантової точки, $t \gg 1/\Gamma$, коли ймовірність $\rho_0(t)$ є періодичною функцією часу, $\rho_0(t + T_0) = \rho_0(t)$, а, отже, може бути розкладена у ряд Фур'є,

$$\rho_0(t) = \sum_n \rho_n e^{i\omega n t}, \quad \rho_{-n} = \rho_n^*. \quad (2.24)$$

Тоді рівняння для гармонік перетворення Фур'є має наступний вигляд,

$$i p \rho_p = \delta_{p,0} - \rho_p - \frac{1}{2} \sum_n \left[a_{n,p}^{(2)} - \sum_k a_{n,p+k}^{(1)} \rho_k \right] \times \\ [f_L(\varepsilon_0 - n\omega) + f_R(\varepsilon_0 - n\omega)], \quad (2.25)$$

та є основним рівнянням даного розділу. Його рішення обговорюється у підрозділі 2.4.

2.3. Електричний струм.

Нас цікавлять вольт-амперні характеристики (ВАХ-и) даного одномолекулярного транзистора, тому нам необхідно розрахувати середній струм за

період коливань (в стаціонарному режимі), який визначається як,

$$I = \frac{1}{T_0} \int_{T_0} J(t) dt, \quad (2.26)$$

де $J(t) = (J_L + J_R)/2$, а «лівий» (*англ.* – left (L)) та «правий» (*англ.* – right (R)) електричні струми визначаються стандартним чином як зміна числа електронів у відповідному березі,

$$J_\kappa = \eta_\kappa e \text{Tr} \left(\rho \frac{\partial N_\kappa}{\partial t} \right), \quad N_\kappa = \sum_k a_{k,\kappa}^\dagger a_{k,\kappa}, \quad (2.27)$$

де $\eta_{L/R} = \pm 1$, а N_κ – оператор числа електронів в електроді κ . За допомогою рівняння (2.11) вираз для електричного струму може бути записаний в наступному вигляді,

$$\begin{aligned} J_\kappa &= \eta_\kappa \text{Tr} \int_{-\infty}^t dt' e^{iH_0(t-t')} I_\kappa e^{-iH_0(t-t')} [H_{tun}, \rho] + \text{с.с.}, \\ I_\kappa &= e t_0 e^{-i\lambda p} \sum_k c a_{k,\kappa}^\dagger. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Розрахунки за формулою (2.28) приводять до наступного рівняння, яке аналогічне до рівняння (2.19),

$$\frac{J(t)}{I_0} = -\rho_0(t) P_1(t) + P_2(t), \quad (2.29)$$

де $I_0 = e\Gamma/2$ – максимальний струм (насичення) через однорівневий симетричний контакт,

$$P_i(t) = \sum_n A_n^{(i)}(t) [f_L(\varepsilon_0 - n\omega) - f_R(\varepsilon_0 - n\omega)], \quad (2.30)$$

а коефіцієнти $A_n^{(i)}$ даються формулами (2.21)-(2.23). З рівнянь (2.24),(2.26) та (2.29) отримуємо наступний вираз для середнього струму,

$$I = I_0 \sum_{n,k} \left[a_{n,k}^{(2)} \delta_{k,0} - a_{n,k}^{(1)} \rho_k \right] [f_L(\varepsilon_0 - n\omega) - f_R(\varepsilon_0 - n\omega)]. \quad (2.31)$$

Важливо відмітити, що середній електричний струм не залежить від фази когерентного стану φ .

2.4. Результати чисельного розрахунку вольт-амперних характеристик.

Рівняння (2.25) представляє собою нескінченну систему рівнянь для гармонік перетворення Фур'є. Однак, у даному випадку ряди для коефіцієнтів при гармоніках швидко збігаються та ми можемо обмежитися лише вкладом перших декількох доданків. Необхідна їх кількість задежить від параметрів системи, перш за все, параметра когерентного стану $|z|$. Результати числових обчислень рівняння (2.31) разом з (2.25) продемонстровано на рис. 2.2, 2.3.

Бачимо, що за низьких температур $T \ll \hbar\omega$ вольт-амперні характеристики для вібронів у когерентному стані (крива чорна пунктирна) мають ступінчатий характер, подібно (однак, не у загальному випадку) до тих, що відповідають випадку рівноважних вібронів (зелена суцільна крива), див. напр. оглядову роботу [11]. Криві, що відповідають випадкам рівноважних та когерентних вібронів, співпадають, див. рис. 2.2, якщо амплітуда коливань квантової точки менша або такого ж порядку величини як амплітуда нульових коливань l_0 ($|z| \leq 1$ відповідно).

З фізичних міркувань зрозуміло, що коли система знаходиться у стані близькому до основного, тобто середнє число вібронів $\langle n \rangle \ll 1$, немає різниці у поведінці когерентних та некогерентних вібронів. Суттєва різниця виникає, коли амплітуда осциляцій квантової точки, $|z| \gg 1$ (див. рис. 2.3, де чорна пунктирна відноситься до випадку вібронів у когерентному стані з параметром $|z| = 10$). Зручно ввести ефективну температуру вібронів (механічної підсистеми) T^* , прирівнюючи середнє число вібронів в когерентному та рівноважному станах,

$$|z|^2 = (\exp(\hbar\omega/T^*) - 1)^{-1}. \quad (2.32)$$

Для великих значень амплітуд осциляцій квантової точки ($|z| \gg 1$) та відносно сильної електрон-вібронної взаємодії ($\lambda \sim 1$), $T^* \simeq |z|^2 \hbar\omega \gg \lambda^2 \hbar\omega$. Зрозуміло, що за високих температур в електродах стоку та витоку, франк-кондонівські сходинки на вольт-амперних характеристиках зникають. Це означає,

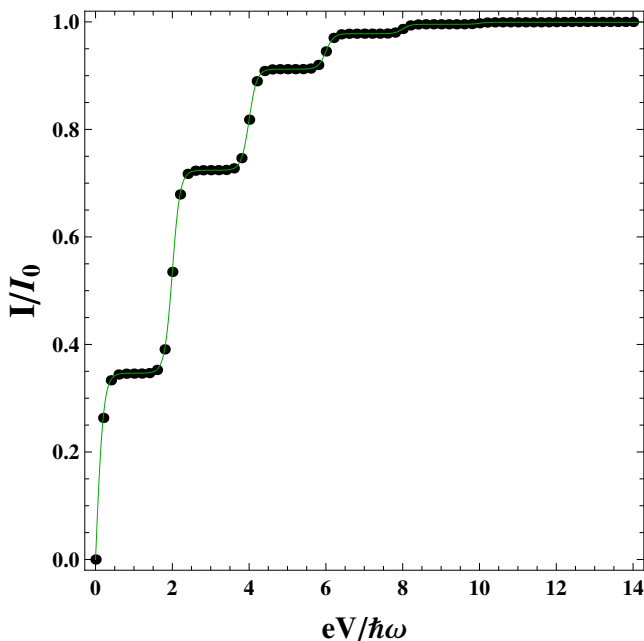


Рис. 2.2 Вольт-амперні характеристики для малих значень параметра когерентного стану $|z| = 0.25$ та сильної електрон-вібронної взаємодії, $\lambda = 1$. Чорні точки відповідають результату чисельного розрахунку струму для випадку, коли вібронна підсистема знаходиться в когерентному стані. Тонка зелена крива — ВАХ для випадку рівноважних вібронів, що характеризуються ефективною температурою T^* (див. формулу (2.32)). Інші параметри: $T/\hbar\omega = 0.05$, $\Gamma/\hbar\omega = 0.001$.

що у випадку когерентних вібронів, за великих амплітуд коливань, виникає сильне подавлення струму в області низьких напруг, а також має місце ступінчатий характер ВАХ. Має сенс порівняння такої залежності з передбаченою в рамках теорії Франка-Кондона, припускаючи, що механічна підсистема підтримується при високій температурі T^* , яка задається з розподілу Бозе-Ейнштейна, тоді як температура берегів підтримується низькою, $T \ll \hbar\omega$. Цей випадок проілюстровано на рис. 2.3. Можемо бачити суттєву різницю між вольт-амперними характеристиками, а саме: (а) висота сходинок не є регулярною у випадку когерентних вібронів та (б) насичення струму відбувається за значно нижчих напруг ($eV_s \simeq |z|\hbar\omega$), ніж у випадку рівноважних вібронів.

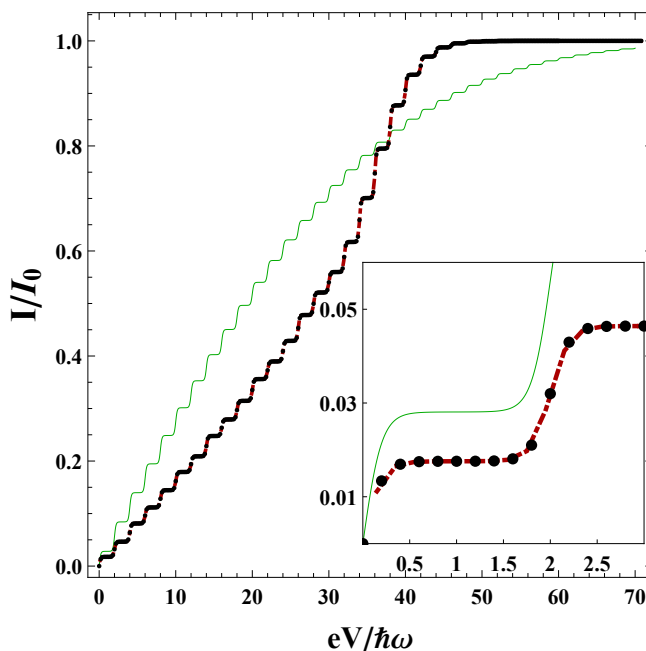


Рис. 2.3 ВАХ для випадку великого значення параметра когерентного стану, $|z| = 10$. Інші параметри такі ж як на рис. 2.2. Зелена суцільна крива відповідає випадку рівноважних вібронів з температурою, яка задається параметром $|z| = 10$. Червона штрих-пунктирна крива відображає розрахунок за припущення $\rho_0 = 0.5$ (див. підрозділ 2.5). Вставка — регіон низьких напруг.

2.5. Оцінка величин ймовірності та струму в стаціонарному режимі.

Розраховуючи чисельно рівняння (2.31) та (2.25), можна відмітити, що коефіцієнт ρ_0 (нульова гармоніка) ряду Фур'є (2.24) в стаціонарному режимі $\rho_0 = 0.5$, тобто ймовірність (матричні елементи редукованого оператора густини квантової точки) не залежить від часу, з високою точністю, $\sim 10^{-5}$. Тоді, підставляючи в рівняння (2.31) значення $\rho_0 = 1/2$ та $\rho_p = 0$ для $p \geq 1$, отримуємо набагато простішу, а головне, аналітичну формулу для середнього електричного струму,

$$I = I_0 \sum_n a_n [f_L(\varepsilon_0 - n\omega) - f_R(\varepsilon_0 - n\omega)], \quad (2.33)$$

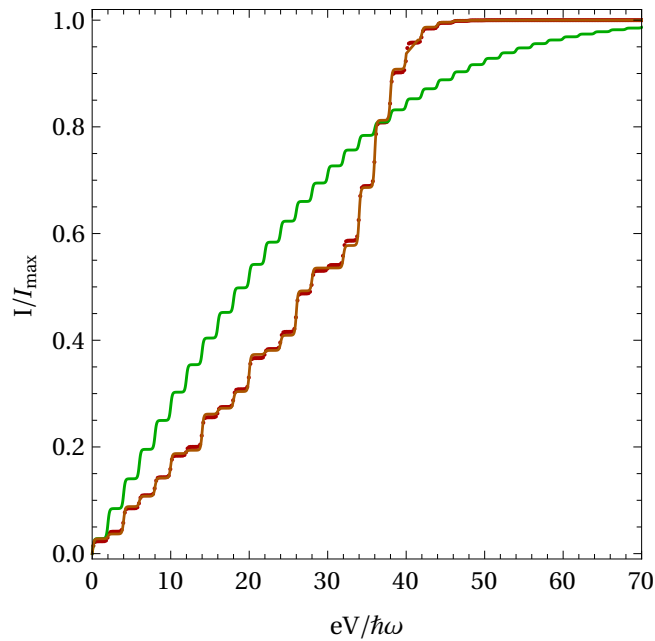


Рис. 2.4 ВАХ для великого значення параметра когерентного стану $|z| = 20$ та $\lambda = 0.5$. Інші параметри такі ж як на рис. 2.2. Зелена суцільна крива відповідає випадку рівноважних вібронів з температурою, яка задається параметром $|z| = 20$. Червона штрих-пунктирна крива, що відповідає спрощеному розрахунку за формулами (2.33) та (2.34), майже повністю співпадає з помаранчевою суцільною кривою, розрахованою з використанням формули (2.35).

де

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\vartheta e^{-\lambda^2(1-\cos\vartheta)} \times \\ \times \cos n\vartheta \cos(\lambda^2 \sin\vartheta) J_0\left(4\lambda|z| \sin\frac{\vartheta}{2}\right). \quad (2.34)$$

Більш того, для $\lambda \leq 1$ можна зробити наступну оцінку інтеграла в формулі (2.34),

$$a_n \simeq J_n^2(2\lambda|z|). \quad (2.35)$$

Ці міркування дозволяють значно спростити числові розрахунки. Рисунки 2.3 та 2.4 ілюструють отримані вольт-амперні характеристики. Червона штрих-пунктирна крива відповідає спрощеному розрахунку за формулами (2.33) та (2.34). Результати наближених аналітичних розрахунків співпадають з результатами числових з високою точністю.

Зазначимо, що рівняння (2.33) має такий же вигляд як і відома формула (див. напр. роботу [11]) для струму безспінових електронів через вібруючу квантову точку, коли механічна підсистема знаходиться у рівноважному стані і описується рівноважною матрицею густини ρ_{eq} ,

$$I_{eq} = I_0 \sum_n A_n [f_L(\varepsilon_0 - n\omega) - f_R(\varepsilon_0 - n\omega)], \quad (2.36)$$

де спектральна густина A_n визначається формулою $\text{Tr} [e^{-i\lambda p(t)} e^{i\lambda p(0)} \rho_{eq}] = \sum_n A_n e^{i\omega n t}$, див. підрозділ 1.1.

Висновки

У даному розділі розглянуто транспорт електронів у молекулярному транзисторі, припускаючи, що віброни осциляцій квантової точки знаходяться у когерентному стані. Отримані вольт-амперні характеристики такого транзистора мають ступінчатий вигляд, подібно до франк-кондонівських сходинок, проте є суттєві відмінності. А саме, за великих значень амплітуд осциляцій квантової точки кондактанс подавлений (поляронна блокада) в значній мірі, незалежно від сили електрон-вібронної взаємодії. Зняття такої поляронної блокади, яка виникає за рахунок когерентних осциляцій, відбувається за значно нижчих напруг, ніж у випадку блокади Франка-Кондона; причому, висота сходинок у цьому разі є нерегулярною функцією тягнутої напруги. На додачу, вольт-амперні характеристики розглянутого транзистора не залежать від фази когерентного стану.

Основні положення цього розділу викладено у публікаціях здобувача [1, 5, 6].

РОЗДІЛ 3

ЗАПЛУТАНІСТЬ МІЖ ЗАРЯДОВИМИ СТАНАМИ КУБІТА ТА КОГЕРЕНТНИМИ СТАНАМИ НАНОМЕХАНІЧНОГО РЕЗОНАТОРА.

Розглянуто надпровідну нанoeлектромеханічну систему на основі нанодроту. Обговорено експериментально простий протокол маніпуляції тягнучою напругою. Цей протокол призводить до утворення між зарядовим кубітом і наномеханічним резонатором заплутаності, яка може бути керована параметрами пристрою. Розглянуто також експериментально можливе виявлення ефектів шляхом вимірювання середнього струму.

3.1. Модель та гамільтоніан нанoeлектромеханічного пристрою.

Схематичне зображення прототипу нанoeлектромеханічної системи (НЕМС), що розглядається, представлено на рис. 3.1. Вона складається з надпровідникового нанодроту (НД) (*з англ.* — superconducting nanowire (SCNW)), [157, 158], який підвішений між двома об'ємними надпровідниками і ємнісно з'єднаний з двома електродами затвора. Надалі розглядається випадок коли НД являє собою надпровідний острівець, який можна розглядати як зарядовий кубіт (сховище куперівських пар (*з англ.* — Cooper pair box (CPB))), базисними станами якого є зарядові стани — стани, які відображають наявність або відсутність надлишкових куперівських пар на острівці. Зазвичай ці стани позначаються як зарядовий та нейтральний стан відповідно. У цьому випадку, напруга на затворі V_G і напруга між затворами V_ε вибираються таким чином, щоб різниця електростатичних енергій зарядженого і нейтрального станів дорівнювала нулю при прямій конфігурації нанодроту, тоді як вигин нанодроту усуває це виродження. Ми також зводимо динаміку згину НД до динаміки фундаментальної моди що описується гармонічним осцилятором.

Сувмісна динаміка куперівських пар і механічна динаміка цієї системи описується гамільтоніаном, який можна записати у вигляді,

$$H = H_q + H_m + H_{int}. \quad (3.1)$$

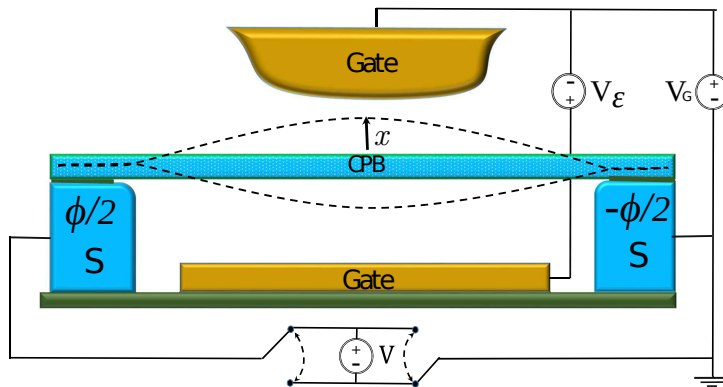


Рис. 3.1 Схематична ілюстрація розглянутої НЕМС. Надпровідний нанодріт, що розглядається як зарядовий кубіт, тунельно з'єднаний з двома об'ємними надпровідниками (S) з різницею фаз ϕ між надпровідниками та ємнісно з'єднаний з двома електродами затвора. Коливання згину в напрямку x описуються гармонічним осцилятором.

Тут

$$H_{q,int} = \frac{[\hat{Q} + Q_G(\hat{x})]^2}{2C(\hat{x})} - \sum_{\sigma} [E_{J,\sigma} \cos(\phi_{\sigma} - \hat{\phi})], \quad (3.2)$$

де $\hat{Q} = 2e\hat{n}$ — дискретний оператор заряду на точці (\hat{n} — оператор числа куперівських пар на КТ), $Q_G(\hat{x}) = V_G C_G(\hat{x})$ — оператор заряду, генерований напругою на затворі V_G , $C(\hat{x}) = 2C_J + C_G(\hat{x})$ — взаємна ємність, що складається з ємностей затвора і джозефсонівського контакту. Константа $E_J = E_{J,L} = E_{J,R}$ є енергією джозефсонівського зв'язку (розглядаємо лише випадок симетричного зв'язку), $\hat{\phi}$ — оператор фази, що задовольняє комутаційному співвідношенню $[\hat{\phi}, \hat{n}] = i$. Таким чином, рівняння (3.2) можна переписати у вигляді

$$H_{q,int} = E_c(\hat{x}) \left(\hat{n} + \frac{C_G(\hat{x})V_G}{2e} \right)^2 - 2E_J \cos \phi \cos \hat{\phi}. \quad (3.3)$$

Тут $E_c(\hat{x}) = (2e)^2/(2C(\hat{x}))$ — енергія заряду. Координатно-залежна ємність затвора $C_G(\hat{x})$ налаштовується таким чином, щоб різниця електростатичних енергій між зарядженим (з однією надлишковою куперівською парою) і нейтральним станом була пропорційна безрозмірному зміщенню КТ \hat{x} і дорівню-

вала нулю в точці рівноваги коливань. Тоді в режимі кулонівської блокади ($E_C(0) \gg E_J$) в зарядовому базисі з визначеним числом куперівських пар на острівці операторна функція $\exp[\imath\hat{\phi}]$ має вигляд:

$$e^{\imath\hat{\phi}}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} d\phi e^{\imath(n+1)\phi} |\phi\rangle = |n+1\rangle. \quad (3.4)$$

Отже, в базисі з векторами нейтрального $|0\rangle = (0; 1)^T$ та зарядового $|1\rangle = (1; 0)^T$ станів та в представленні вторинного квантування для операторів зміщення та імпульсу маємо:

$$\begin{aligned} H_q &= -E_J \sigma_1 \cos \phi, \\ H_m &= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{x}^2 + \hat{p}^2), \\ H_{int} &= \varepsilon \hat{x} \sigma_3. \end{aligned}$$

Тут $\sigma_i, i = 1, 2, 3$, — матриці Паулі, E_Q — власне значення енергії, пов'язаної з електростатичним полем, що виникає за рахунок затворної напруги V_G . Звідси випливає, що тільки перший порядок ємності затвора дає істотний вклад і розглядається випадок руху до точки виродження в точці рівноваги. Варто зауважити, що можна діагоналізувати незбурену частину гамільтоніана, рівняння (3.5), за допомогою унітарного перетворення $\hat{U} = (I + \imath\sigma_2) / \sqrt{2}$, згідно до якого $\sigma_1 \rightarrow \sigma_3, \sigma_3 \rightarrow -\sigma_1$. Тоді,

$$H = \varepsilon \hat{x} \sigma_1 + E_J \cos \phi(t) \sigma_3 + \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{x}^2 + \hat{p}^2). \quad (3.5)$$

Тут гамільтоніан H_q представляє джозефсонівський зв'язок між сховищем куперівських пар та об'ємними надпровідниками з $\phi = \phi(t)$ різницею фаз між електродами, $\sigma_i (i = 1, 2, 3)$ — матриці Паулі що діють у гільбертовому просторі в базисі, де вектори $(1, 0)^T$ і $(0, 1)^T$ представляють відповідно зарядовий і нейтральний стани. Гамільтоніан H_m у рівнянні (3.1) представляє динаміку фундаментальної згинальної моди, що описується гармонічним осцилятором з частотою ω (тут оператори імпульсу та координат, \hat{p} і \hat{x} , нормовані на амплітуду нульових коливань $x_0 = \sqrt{\hbar/M\omega}$, M — ефективна маса острівця, $[\hat{x}, \hat{p}] = \imath$). Третій член, H_{int} , описує електромеханічний зв'язок між зарядовим кубітом та механічним осцилятором, який індуковано електроста-

тичною силою, що діє на зарядовий стан кубіта, $\varepsilon = e\mathcal{E}x_0$. В останній рівності \mathcal{E} — це ефективне електростатичне поле, яке контролюється різницею прикладених напруг V_G і V_ε . Нижче будемо вважати, що $\varepsilon \ll \hbar\omega, E_J$, що відповідає типовій експериментальній ситуації [86, 91, 159].

Стани системи, що описуються гамільтоніаном, рівняння (3.1), є суперпозицією прямих добутків кубітових станів, \mathbf{e}_i^\pm , та власних станів осцилятора $|n\rangle$. Тут і далі \mathbf{e}_i^ν позначає власні вектори матриць Паулі σ_i з власними значеннями $\nu = \pm 1$.

Якщо $\varepsilon = 0$, то взаємодія між кубітом та механічною підсистемою виникається і стаціонарні стани гамільтоніана, рівняння (3.1), є чистими станами. Ентропія заплутаності є інтегралом руху, тобто, якщо система знаходиться спочатку в чистому стані, то вона буде перебувати в чистому стані в будь-який подальший момент часу. Якщо між надпровідниками прикласти постійну тягнучу напругу, то за рахунок ефекту Джозефсона виникає змінний ($\propto \sin \phi(t)$) струм, $\dot{\phi}(t) = 2eV/\hbar$, де V — тягнуча напруга. Синхронне увімкнення електричного поля \mathcal{E} та напруги між надпровідними електродами призводить до виникнення станів, які представляють собою заплутаність між станами кубіта та осцилятора.

3.2. Еволюція системи у часі.

Для проведення аналізу еволюції системи введемо безрозмірний час та енергії, $\omega t \rightarrow t, E_J/\hbar\omega \rightarrow E_J, \varepsilon/\hbar\omega \rightarrow \varepsilon$, а також припустимо, що в момент перемикання взаємодії між підсистемами ($t = 0$), різниця фаз дорівнює $\phi = \phi_0$ та система перебуває в чистому стані,

$$|\Psi(0)\rangle = \mathbf{e}_{in} \otimes |0\rangle. \quad (3.6)$$

При $t > 0$, згідно зі (другим) співвідношенням Джозефсона,

$$\phi(t) = 2eVt/\hbar\omega + \phi_0. \quad (3.7)$$

Гамільтоніан, рівняння (3.1), і, як наслідок, оператор еволюції $\hat{U}(t, t')$, який визначає еволюцію довільного початкового стану, мають наступні властивості,

$$\hat{H}(t + T_V) = \hat{H}(t), \quad \hat{U}(t, t') = \hat{U}(t + T_V, t' + T_V), \quad (3.8)$$

тобто є періодичними у часі з періодом

$$T_V = 2\pi/\Omega_V = \pi\hbar\omega/e|V|. \quad (3.9)$$

Для аналізу оператора еволюції можна скористатися представленням взаємодії (відносно гамільтоніану взаємодії H_{int}), взявши,

$$U(t,t') = \hat{U}_\kappa(t)\hat{U}_\kappa(t,t')\hat{U}_\kappa^\dagger(t'), \quad (3.10)$$

де

$$\hat{U}_\kappa(t) = \exp \left[\frac{iE_J}{\Omega_V} \sigma_1 \sin(\Omega_V t + \kappa\phi_0) - ia^\dagger at \right], \quad (3.11)$$

унітарний оператор еволюції, що відповідає незбуреному гамільтоніану і описує еволюцію механічної та електронної підсистем незалежно. Параметр $\kappa = \text{sgn}(V/|V|) = \pm$ характеризує напрямок тягнучої напруги. Оператор $\hat{U}_\kappa(t,t')$ підпорядковується наступним рівнянням,

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \hat{U}_\kappa(t,t')}{\partial t} &= \hat{\mathcal{H}}_\kappa(t)\hat{U}_\kappa(t,t'), \\ \hat{\mathcal{H}}_\kappa(t) &= \varepsilon \hat{x}(t)\sigma_3(t), \quad \hat{U}_\kappa(t,t) = \hat{I}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Тут

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}e^{-it} + \hat{a}^\dagger e^{it}), \\ \sigma_3(t) &= \sigma_3 \cos \left(\frac{E_J}{\Omega_V} \sin(\Omega_V t + \kappa\phi_0) \right) - \\ &\quad - \sigma_2 \sin \left(\frac{E_J}{\Omega_V} \sin(\Omega_V t + \kappa\phi_0) \right). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Якщо частоти ω і Ω_V несумірні, то оператор $\hat{\mathcal{H}}_\kappa(t)$ є квазіперіодичною функцією часу. У такому випадку можна очікувати, що механічна підсистема, перебуваючи спочатку в основному стані, не буде суттєво відхилитися від цього стану в процесі еволюції. Детальний розгляд цього випадку виконано чисельно [160]. Тут розглянемо резонансний випадок, коли $\Omega_V = \omega$, і припустимо, що $\varepsilon \ll 1$. Перша умова обумовлює наступні властивості оператора

еволюції,

$$\hat{U}_\kappa(2\pi N, 2\pi N') = \left(\hat{U}_\kappa(2\pi, 0) \right)^{N-N'}, \quad (3.14)$$

де N, N' — натуральні числа. Друге припущення дозволяє зробити наступну підстановку з урахуванням основного вкладу в наближенні за ε ,

$$\hat{U}_\kappa(t, t') = \hat{U}_\kappa(2\pi N, 2\pi N'), \quad (3.15)$$

де $N(N') = [t(t')/2\pi]$ ($[x]$ позначає цілу частину від x), та отримати вираз для $\hat{U}_\kappa(2\pi, 0)$, який можна записати наступним чином:

$$\begin{aligned} \hat{U}_\kappa(2\pi, 0) &= \exp \left[i\tilde{\varepsilon}\sigma_2\hat{p}(\kappa\phi_0) + \varepsilon^2\mathcal{O}(\hat{I}) \right], \\ \hat{p}(\phi) &= \hat{p} \cos \phi + \hat{x} \sin \phi. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Тут $\tilde{\varepsilon} = 2\pi\varepsilon J_1(2E_J)$ та $J_1(x)$ є функцією Бесселя першого роду. Використовуючи вищевказані співвідношення, можемо отримати вираз для оператора еволюції $\hat{U}(t, t')$ в основному наближенні за малим параметром ε ,

$$\hat{U}(t, t') = \hat{U}_\kappa(t) \exp [i\tilde{\varepsilon}\sigma_2\hat{p}(\kappa\phi_0)(t - t')] \hat{U}_\kappa^\dagger(t'). \quad (3.17)$$

Використовуючи рівняння (3.6),(3.17), отримуємо, що в момент часу t , з точністю до малого параметру $\tilde{\varepsilon} \ll 1$, стан системи $|\Psi(t)\rangle$ описується наступним виразом:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\nu} A_{\nu}^{\kappa} \mathbf{e}_2^{\nu}(t, \kappa\phi_0) \otimes |-\nu z(t, \kappa)/\sqrt{2}\rangle. \quad (3.18)$$

Тут

$$\mathbf{e}_2^{\nu}(t, \kappa\phi_0) = \mathbf{e}_2^{\nu} \exp [iE_J\sigma_1 \sin(t + \kappa\phi_0)],$$

та $\mathbf{e}_2^{\nu} = \sigma_1 \mathbf{e}_2^{-\nu}$ є власними векторами матриць Паулі σ_2 з власними значеннями $\nu = \pm 1$,

$$A_{\nu}^{\kappa} \equiv (\mathbf{e}_2^{\nu}(0, \kappa\phi_0), \mathbf{e}_{in}) = \cos(\kappa E_J \sin \phi_0) c_2^{\nu} - i \sin(\kappa E_J \sin \phi_0) c_2^{-\nu}, \quad (3.19)$$

де початковий стан можна представити в базисі власних векторів матриці σ_2 як:

$$\mathbf{e}_{in} = \sum_{\nu=\pm 1} c_2^\nu \mathbf{e}_2^\nu. \quad (3.20)$$

Позначення $|\alpha\rangle$ (де α — комплексне число) відповідає когерентному стану гармонічного осцилятора, $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, тоді як функція $z(t, \kappa)$ є:

$$z(t, \kappa) = \tilde{\varepsilon} t \exp[-\imath(t + \kappa\phi_0)]. \quad (3.21)$$

Слід підкреслити, що рівняння (3.18) справедливе лише для обмеженого інтервалу часу $t \leq \tilde{\varepsilon}^{-2}$. Час t має бути також меншим за будь-який час дефазифікації та релаксації. З рівняння (3.18) видно, що початково чистий стан $|\Psi(t=0)\rangle = \mathbf{e}_{in} \times |0\rangle$ еволюціонує у стан, представлений заплутаністю між двома станами кубіта і двома когерентними станами механічного резонатора. Причому, деталі цієї заплутаності залежать від часу перемикання (параметр ϕ_0) і напрямку тягнутої напруги (параметр κ). Дані обставини дозволяють маніпулювати описаним вище заплутуванням, змінюючи напрямок напруги зміщення.

3.3. Генерація станів типу "Schrödinger-cat state".

Для демонстрації ефекту зв'язку між зарядовим кубітом і механічними коливаннями, який пояснює утворення так званих "Schrödinger-cat states" наномеханічного резонатора, розглянемо наступний часовий протокол для $V(t)$:

$$2eV(t) = -\hbar\omega\theta(t) [1 - 2\theta(t - t_s)].$$

А саме, на інтервалі часу $0 < t < t_s$ тягнуча напруга $V(t) = -\hbar\omega/2e$, а потім змінює свій знак. Використовуючи рівняння (3.10), (3.14), (3.16), отримуємо, що при $t > t_s$ оператор еволюції має вигляд:

$$\hat{U}(t, 0) = \hat{U}_+(t) e^{i\sigma_2 \tilde{\varepsilon}(t-t_s) \hat{p}(\phi_0)} \hat{S} e^{i\sigma_2 \tilde{\varepsilon} t_s \hat{p}(-\phi_0)} \hat{U}_-(0), \quad (3.22)$$

де

$$\begin{aligned}\hat{S} &= \hat{\mathcal{U}}_+^\dagger(t_s)\hat{\mathcal{U}}_-(t_s) \equiv \rho(t_s, \phi_0) + i\tau(t_s, \phi_0)\sigma_1, \\ \rho(t_s, \phi_0) &= \cos(2E_J \cos t_s \sin \phi_0), \\ \tau(t_s, \phi_0) &= -\sin(2E_J \cos t_s \sin \phi_0).\end{aligned}\tag{3.23}$$

В результаті стан системи після зміни напрямку тягнучої напруги має наступний вигляд:

$$\begin{aligned}|\Psi(t)\rangle &= \sum_{\nu} \mathbf{e}_2^{\nu}(t, \phi_0) \times \\ &\otimes \left(\rho A_{\nu}^{-} |-\nu z_+/\sqrt{2}\rangle + i\tau A_{-\nu}^{-} |\nu z_-/\sqrt{2}\rangle \right),\end{aligned}\tag{3.24}$$

де $z_{\pm} = z_1 \pm z_2 i$,

$$\begin{aligned}z_1 &= e^{-i(t-\phi_0)} \tilde{\varepsilon} t_s, \\ z_2 &= e^{-i(t+\phi_0)} \tilde{\varepsilon} (t - t_s).\end{aligned}\tag{3.25}$$

Схематичне зображення еволюції когерентних станів можна побачити на рис. 3.2. Рівняння (3.24) демонструє, що стан системи представляється заплутаністю двох станів кубіта з двома так званими "cat state" (суперпозицією когерентних станів), структура яких контролюється параметрами E_J (ρ) та ϕ_0 . Як випливає з рівнянь (3.24), (3.25), перемикання напруги зміщення не впливає на динаміку системи, якщо $\phi_0 = \pi n$, де n — ціле число.

3.4. Ентропія заплутаності.

Наразі у цьому підрозділі обмежимося для простоти розглядом найцікавішого випадку, коли $\phi_0 = \pi/2$ і покладемо $\mathbf{e}_{in} = (\mathbf{e}_2^+ + \mathbf{e}_2^-)/\sqrt{2}$, тобто, ми припускаємо, що безпосередньо перед включенням взаємодії кубіт знаходився у власному стані оператора $\hat{H}_q(t = 0 - \delta)$. З цими припущеннями рівняння (3.19) перетворюється на

$$A_+^- = A_-^- = \exp(iE_J)/\sqrt{2}.\tag{3.26}$$

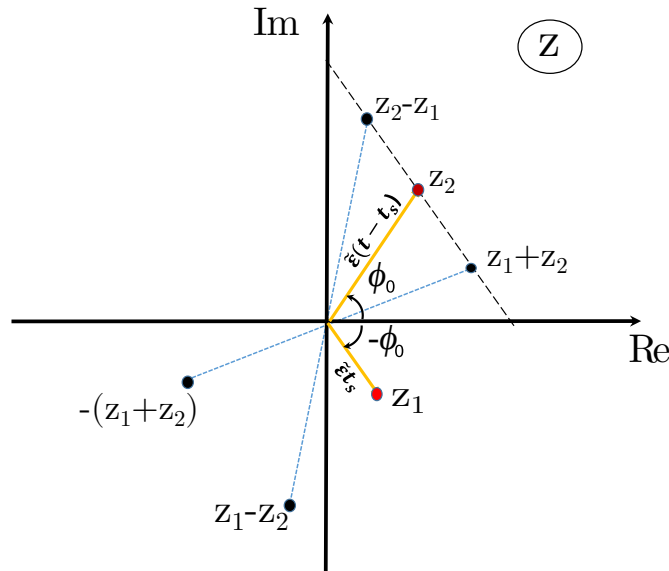


Рис. 3.2 Схематична ілюстрація положень когерентних станів, що описуються комплексними числами $z_{1,2}$ та їх комбінаціями z_{\pm} на комплексній площині. Позначає часову еволюцію когерентних станів, з одного боку, та залежність від початкової різниці фаз ϕ_0 , з другого боку.

Для того, щоб охарактеризувати зв'язок між кубітними станами та станами механічного осцилятора, введемо приведені (редуковані) матриці густини, $\hat{\rho}_{q(m)}(t) = \text{Tr}_{m(q)} \hat{\rho}$, де

$$\hat{\rho} = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|. \quad (3.27)$$

є повною матрицею густини системи, а $\text{Tr}_{m(q)}$ позначає слід за механічними (кубітовими) ступенями свободи. Використовуючи рівняння (3.18), (3.24), можна отримати наступний вираз для редукованої матриці густини кубіта $\hat{\rho}_q$,

$$\hat{\rho}_q(t) = \frac{I + \lambda(t, t_s) \sigma_1}{2}, \quad (3.28)$$

де

$$\lambda(t, t_s) = \exp(-\tilde{\varepsilon}^2 t^2), \quad 0 < t \leq t_s, \quad (3.29)$$

$$\lambda(t, t_s) = \rho^2 \exp[-\tilde{\varepsilon}^2 (t - 2t_s)^2] + \tau^2 \exp(-\tilde{\varepsilon}^2 t^2), \quad t > t_s. \quad (3.30)$$

Зауважимо, що $\lambda(t, t_s) \geq 0$. При виведенні рівняння (3.28) враховано співвідношення $\mathbf{e}_2^+(\mathbf{e}_2^-)^\dagger + \mathbf{e}_2^-(\mathbf{e}_2^+)^\dagger = \sigma_1$.

Ентропія заплутаності (яку також називають ентропією фон Неймана) визначається наступним чином:

$$S_{en}(t) \equiv -\text{Tr } \hat{\rho}_q(t) \log \hat{\rho}_q(t) = -\text{Tr } \hat{\rho}_m(t) \log \hat{\rho}_m(t). \quad (3.31)$$

Оскільки базис когерентного стану не є ортонормованим (фактично квазіортонормальним) і переповненим, то доцільно використовувати рівняння (3.28). Для того, щоб обчислити ентропію заплутаності, зручно представити матрицю в діагональному вигляді. Причина в тому, що якщо $\lambda_i, i = 1, 2$ є власним значенням матриці $\hat{\rho}_q$, то рівняння (3.31) можна переписати як

$$S_{en}(t) = -\sum_{i=1,2} \lambda_i \log \lambda_i. \quad (3.32)$$

Можна легко знайти власні значення редукованої матриці густини кубіта $\hat{\rho}_q$, рівняння (3.28),

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} [1 - \lambda(t, t_s)]. \quad (3.33)$$

З цих рівнянь видно, що максимальне значення ентропії заплутаності дорівнює

$$S_{en}^{(max)} = \log 2 \quad (3.34)$$

(при $\lambda_{1,2} = 1/2$), тобто кореляції між електронною та механічною підсистемами максимальні. В розрахунках прийнято такий спосіб трактування невизначеності $0 \log 0 = 0$. У загальному випадку ентропія заплутаності є обмеженою функцією, $0 \leq S_{en} \leq \log N$, де N — кількість підсистем (ступенів свободи), з яких складається вся система.

Графік $S_{en}(t)$ для $\tilde{\varepsilon}t_s = 1$ і різних значень ρ (однаково, для $\tau^2 = 1 - \rho^2$) наведено на рис. 3.3. Ентропія заплутаності монотонно зростає з часом в межах інтервалів $0 < t < t_s$ та $2t_s < t < \infty$, до максимального значення $S_{en}^{(max)}$ при $t \rightarrow \infty$. На інтервалі $t_s < t \leq 2t_s$ поведінка заплутаності ентропії залежить від співвідношення між ρ та τ . Зокрема, для $\rho^2 > \tau^2$ ентропія заплутаності $S_{en}(t)$ починає зменшуватись після перемикання, досягаючи деякого мінімального значення (дорівнює нулю для $\rho^2 = 1$, тобто наша система сепарабельна) на інтервалі $t_s < t \leq 2t_s$. Якщо $\rho^2 < \tau^2$, то ентропія продовжує зростати відразу після перемикання. Однак її похідна може бути і

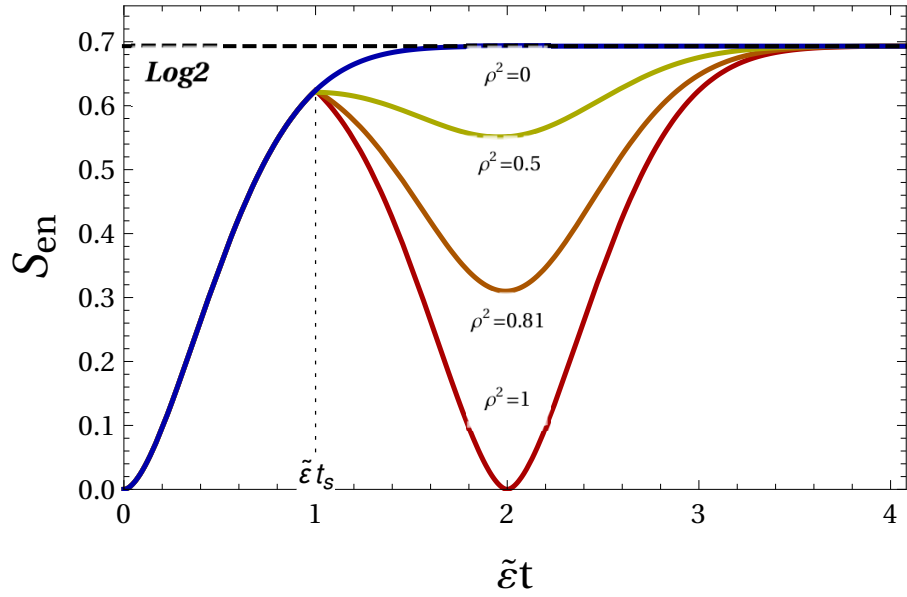


Рис. 3.3 Залежність ентропії заплутаності від часу для різних значень $\rho = 0, 1/\sqrt{2}, 0.9, 1$ (синя, жовта, помаранчева та червона криві). Тонкою пунктирною лінією показано час перемикання тягнутої напруги. Штрихова лінія відповідає максимальному значенню заплутаності, $\log 2$.

від'ємною протягом деякого часу інтервалу, існування якого контролюється параметрами $\tilde{\varepsilon}t_s$ та τ^2/ρ^2 .

Розглянемо також коротко більш загальний випадок довільного значення початкової різниці фаз ϕ_0 . Для інтервалу часу $0 < t \leq t_s$ матриця густини кубіта задається рівняннями (3.28), (3.29). Однак, для часу після перемикання тягнутої напруги, $t > t_s$, можна знайти наступний вираз для оператора густини кубіта,

$$\begin{aligned} \varrho_q(t) = & \frac{1}{2}I + I\rho\tau e^{-\tilde{\varepsilon}^2 t_s^2} \sin \left\{ \tilde{\varepsilon}^2 t_s (t - t_s) \sin (2\phi_0) \right\} + \\ & + \frac{1}{2}\sigma_1 e^{-\tilde{\varepsilon}^2 (t_s^2 + (t-t_s)^2)} \left[\rho^2 e^{-2\tilde{\varepsilon}^2 t_s (t-t_s) \cos (2\phi_0)} + \tau^2 e^{2\tilde{\varepsilon}^2 t_s (t-t_s) \cos (2\phi_0)} \right] - \\ & - \sigma_1 \rho \tau e^{-\tilde{\varepsilon}^2 (t-t_s)^2} \sin \left\{ \tilde{\varepsilon}^2 t_s (t - t_s) \sin (2\phi_0) \right\}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

З цього рівняння можна знайти, зокрема, дотримуючись вищевказаної процедури, що максимальний ефект досягається при $\phi_0 = \pi/2$ і отримати рівняння (3.28).

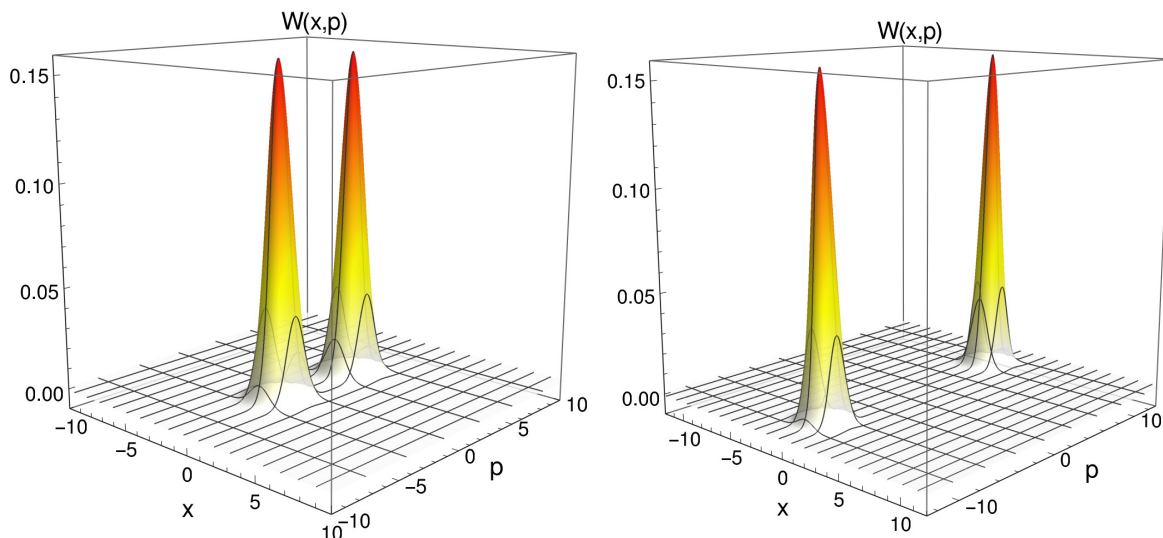


Рис. 3.4 Вігнерівські функції $W(x,p,t = 2\pi N)$ для $\rho = 1$ (а) та $\rho = 0$ (б).

Набувають лише невід'ємних значень і мають два максимуми, що демонструють зв'язок між двома станами зарядового кубіта та двома когерентними станами наномеханічного резонатора.

3.5. Еволюція механічної підсистеми.

Для опису еволюції механічної підсистеми розглянемо редуковану (приведену) матрицю густини $\hat{\rho}_m(t)$. З рівняння (3.24) отримуємо, що при $t > t_s$ редукована матриця густини механічної підсистеми має вигляд:

$$\hat{\rho}_m(t) = \frac{1}{2} \sum_{\nu} \left[\rho^2 |\nu 2\rangle \langle \nu z_+ / \sqrt{2} z_+ / \sqrt{2}| + \tau^2 |\nu z_- / \sqrt{2}\rangle \langle \nu z_- / \sqrt{2}| - \right. \\ \left. - i\rho\tau \left(| - \nu z_+ / \sqrt{2}\rangle \langle \nu z_- / \sqrt{2}| - \text{H.c.} \right) \right]. \quad (3.36)$$

Для візуалізації стану механічної підсистеми зручно використовувати представлення функції Вігнера для матриці густини $\hat{\rho}_m(t)$,

$$W(x,p,t) = \frac{1}{\pi} \int \varrho_m(x+y, x-y, t) \exp(2ipy) dy,$$

де $\varrho_m(x,x',t) = \langle x | \hat{\rho}_m(t) | x' \rangle$. Використовуючи рівняння (3.36), отримуємо:

$$W(x,p,t) = W_t(x \cos t - p \sin t, p \cos t + x \sin t), \quad (3.37)$$

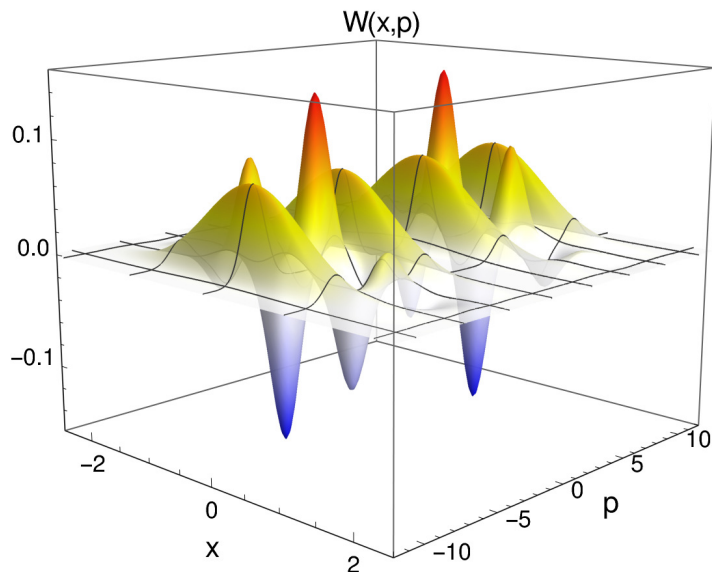


Рис. 3.5 Функція Вігнера $W(x,p,t = 2\pi N)$ для $\rho = 1/\sqrt{2}$. Приймає як додатні, так і від'ємні значення демонструючи заплутаність між станами кубіта та "cat-states" наномеханічного резонатора.

де функція $W_t(x,p)$ визначена згідно зі співвідношенням,

$$W_t(x,p) = \frac{1}{2} \sum_{\nu} [\rho^2 W_0(x,p + \nu|z_+|) + \tau^2 W_0(x,p - \nu|z_-|) + 2\rho\tau \sin(2\nu Z_- x) W_0(x,p + \nu Z_+)] . \quad (3.38)$$

У рівнянні (3.38) $Z_{\pm} = (|z_-| \pm |z_+|) / 2$ та

$$W_0(x,p) = \frac{1}{\pi} \exp [-(x^2 + p^2)] \quad (3.39)$$

вігнерівська функція, що відповідає основному стану гармонічного осцилятора. Графіки $W(x,p,t)$ для $t = 2\pi N$, $\rho = 0$, $\rho = 1$ і $\rho = \tau = 1/\sqrt{2}$ при $|z_+| = 3$ і $|z_-| = 9$ представлено на рис. 3.5 та 3.5.

З рівнянь (3.36),(3.38) видно, що у випадку, коли ρ дорівнює нулю або одиниці (зокрема, коли $t_s = 0$) функція Вігнера додатна і має два максимуми, демонструючи заплутаність між двома станами кубіта та двома когерентними станами (див. рис. 3.5). У загальному випадку $\rho\tau \neq 0$, а функція Вігнера приймає як додатні, так і від'ємні значення при $t > t_s$, демонструючи заплутаність двох станів кубіта з суперпозицією двох квазіортогональних когерентних станів наномеханічного резонатора (див. рис. 3.5).

3.6. Усереднений за часом електричний струм.

Як впливає з наведеного вище розгляду, амплітуда механічних коливань, а отже, і енергія, що запасається в механічній підсистемі, змінюються в часі. Ця енергія надходить від електронної підсистеми, що викликає випрямлення змінного струму. Для того, щоб проаналізувати це явище обчислимо безрозмірну (нормовану до $I_0 = 2e/\hbar$) величину змінного джозефсонівського струму, усередненого за N -й період,

$$I_N = \frac{1}{2\pi} \int_{2\pi(N-1)}^{2\pi N} dt \text{Tr} \left(\frac{\partial \hat{H}_q(t)}{\partial \phi} \hat{\varrho}(t) \right).$$

Враховуючи, що $\partial \hat{H}_q / \partial \Phi = \eta \partial \hat{H} / \partial t$ і $\hat{H}_q(t = 2\pi N) = 0$, отримуємо наступний вираз для I_N ,

$$\begin{aligned} I_N &= \frac{\kappa}{2\pi} \nabla_N \text{Tr} \left(\hat{H}_m + \hat{H}_{int} \right) \hat{\varrho}(2\pi N) \\ &= \frac{\kappa}{2\pi} \nabla_N [E_m(N) + E_{int}(N)], \end{aligned} \quad (3.40)$$

де $\nabla_N f(N) \equiv f(N) - f(N-1)$ — перша різниця. З цього рівняння видно, що середній струм визначається зміною механічної енергії E_m і енергії взаємодії E_{int} після N -го періоду. Отримуємо, що при $N > N_s = [t_s/2\pi] + 1$ функції $E_m(N)$ і $E_{int}(N)$ можна записати наступним чином,

$$\begin{aligned} E_m(N) &= 2\pi^2 \tilde{\varepsilon}^2 (\rho^2 (2N_s - N)^2 + \tau^2 N^2), \\ E_{int}(N) &= 2\pi \varepsilon \tilde{\varepsilon} \left[\rho^2 (N - 2N_s) e^{-(2\pi\tilde{\varepsilon})^2 (N-2N_s)^2} + \tau^2 N e^{-(2\pi\tilde{\varepsilon}N)^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Зміна енергії взаємодії вносить вклад в усереднений струм так само, як і механічна енергія. Однак цей внесок має порядок $\tilde{\varepsilon}^2$ і важливий лише для періодів, для яких $I(N)/\tilde{\varepsilon} \simeq \tilde{\varepsilon}^2$. Таким чином, середній струм визначається зміною механічної енергії в основному, і визначається наступними рівняннями,

$$\frac{I(N)}{\tilde{\varepsilon}} \approx I_m(N) = -2\pi\tilde{\varepsilon}N, \quad N \leq N_s - 1 \quad (3.42)$$

$$\frac{I(N)}{\tilde{\varepsilon}} \approx 2\pi\tilde{\varepsilon} (N - 2\rho^2 N_s), \quad N > N_s. \quad (3.43)$$

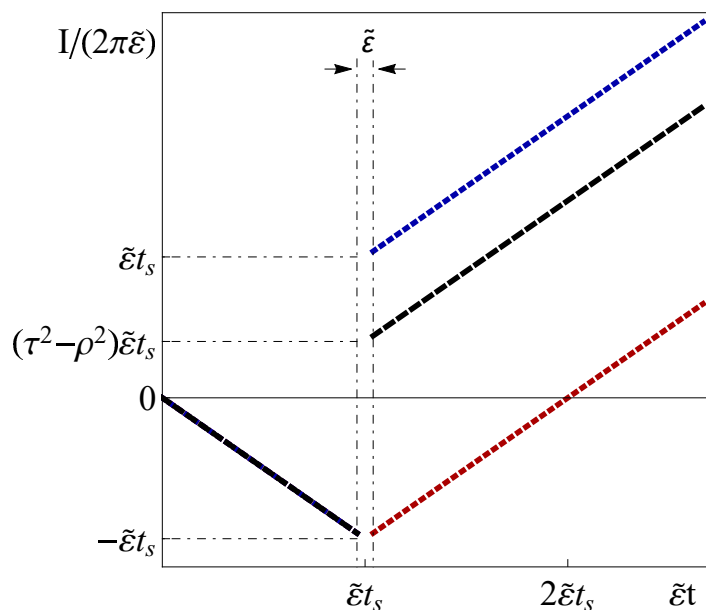


Рис. 3.6 Схематична ілюстрація усередненого за часом джозефсонівського струму як функції часу для різних значень ρ (чорна штрихова крива). Пунктирними лініями позначено граничні випадки $\rho = 0$ (верхня синя крива) та $\rho = 1$ (нижня червона крива). Струм для $t < t_s$ не залежить від ρ ($\rho = 1$), див. рівняння (3.42), (3.23). Період N_s , що відповідає моменту перемикання тягнучої напруги, не розглядається.

З рис. 3.6 видно, що усереднений струм має стрибок рівний $-\rho^2 I(N_s)$ після періоду, протягом якого перемикається тягнуча напруга. Він виникає через те, що при зміні знаку тягнучої напруги (при $t = t_s$) потужність, що накачується в механічну підсистему, змінюється в залежності від величини ρ^2 . При $\rho = 1$ потужність, що підводиться, $P = IV$, просто змінює свій знак з напругою зсуву, і струм продовжує текти в тому ж напрямку, що і до перемикання. При $\rho = 0$ потужність, що підводиться, не змінюється і отже, напрямок струму після перемикання не змінюється також.

Висновки

У цьому розділі досліджено квантову динаміку НЕМС яка складається з рухомого кубіта типу сховище куперівських пар (СКП) та зв'язаного з двома об'ємними надпровідниками через тунельні процеси. Продемонстровано аналітично, що змінна джозефсонівська частота надпровідників, керована тягнучою напругою, знаходиться в резонансі з механічною частотою СКП, то початковий чистий стан (прямий добуток стану кубіта і основного стану

осцилятора), що контролюється тягнучою напругою, еволюціонує в часі в когерентні стани механічного осцилятора, заплутані зі станами кубіта. Окрім того, запропоновано протокол маніпуляції тягнучою напругою, який призводить до утворення заплутаних станів, що включають в себе так звані "cat states" (квантова суперпозиція когерентних станів). Виникнення таких станів підтверджується аналізом відповідних функцій Вігнера, які приймають від'ємні значення, а їх специфічні особливості забезпечують можливість їх експериментального виявлення шляхом вимірювання середнього струму. Розглянуті явища можуть слугувати основою для кодування квантової інформації від зарядових кубітів в суперпозицію когерентних механічних станів. Це може становити інтерес для області квантових комунікацій через стійкість таких мультифононних станів відносно зовнішніх збурень, порівняно з однофононними фоківськими станами.

Результати досліджень даного розділу наведено в публікаціях здобувача [2, 8].

РОЗДІЛ 4

НАНОМЕХАНІКА ЗА РАХУНОК ЕФЕКТУ БЛИЗЬКОСТІ

У цьому розділі розглядається гібридна наноелектромеханічна система на основі вуглецевої нанотрубки. Точніше, вуглецева нанотрубка підвішується над траншеєю в звичайному металевому електроді і розміщується в проміжку між двома надпровідними берегами. Показано, що за постійної тягнутої напруги в такій системі, з одного боку, виникає механічна нестійкість, яка призводить до самопідтримних коливань нанотрубки. З іншого боку, система може працювати і в режимі охолодження. Явища виникають завдяки надпровідному ефекту близькості (гібридній (нормально-надпровідній) структурі пристрою). У першому підрозділі (4.1) згинні коливання нанотрубки розглядаються напівкласично і обговорюються деталі механічної нестійкості, що призводить до ефекту самонасичення, а також схема можливого експериментального виявлення розглянутих ефектів. У другому підрозділі (4.2) враховано квантові ефекти. Показано, що квантові флуктуації нанотрубки призводять до ефекту охолодження, який можна спостерігати в експерименті завдяки вимірюванню електричного струму, розглянутому в попередньому підрозділі 4.1.

4.1. Самопідтримні наномеханічні осциляції.

В даному підрозділі обговорюється виникнення механічної нестійкості в гібридній наноелектромеханічній системі. Отримано область та необхідні умови для її виникнення. Також виявлено сильне підсилення електричного струму через систему в стаціонарному режимі самопідтримних коливань нанотрубки. Останнє призводить до можливості роботи пристрою в режимі транзистора або діода.

4.1.1. Модель наноелектромеханічного пристрою. Гамільтоніан і динаміка.

Ескіз досліджуваної в даній роботі НЕМС представлено на рис. 4.1. Одностінну ВНТ підвішено над траншеєю в об'ємному металевому електроді, до якого прикладена тягуча напруга V_b . Два надпровідні електроди з різницею фаз ϕ розташовані поблизу середини нанотрубки таким чином, що

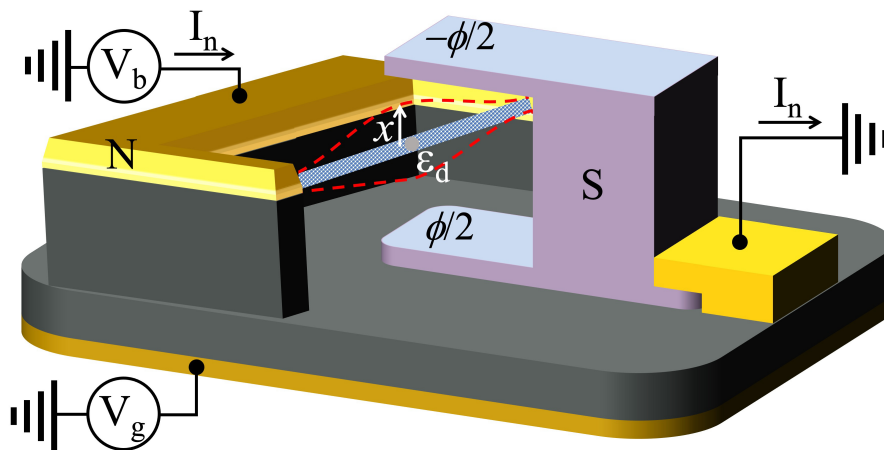


Рис. 4.1 Схематична ілюстрація наноелектромеханічного пристрою, що розглядається. Вуглецева нанотрубка (ВНТ) підвішена в зазорі між двома краями нормального електрода (N) і тунельно з'єднана з ним.

Електронні енергетичні рівні ВНТ налаштовані таким чином, що розглядається тільки один енергетичний рівень з енергією ϵ_d , який добре відокремлений від інших рівнів. Згин ВНТ у напрямку x між двома надпровідними електродами (S) впливає на величину тунельних бар'єрів між ними. До нормального електрода прикладається тягуча напруга V_b .

згин нанотрубки нанотрубки переміщує її ближче до одного електрода і далі віддаляє від іншого. Відстань між квантованими електронними рівнями всередині нанотрубки набагато більша, ніж інші енергетичні параметри, що дозволяє розглядати нанотрубку як однорівневу квантову точку. Динаміка згину ВНТ зводиться до динаміки фундаментальної згинної моди. Будемо вважати, що амплітуда цієї моди, x , більша за амплітуду нульових коливань. Тобто, ми розглядаємо його як класичний механічний осцилятор з масою m і частотою ω .

Динаміка механічної підсистеми описується рівнянням Ньютона,

$$\ddot{x} + \omega^2 x = -\frac{1}{m} \text{Tr} \left\{ \hat{\rho} \frac{\partial H(x)}{\partial x} \right\}, \quad (4.1)$$

де

$$H = H_d + H_l + H_t \quad (4.2)$$

гамільтоніан електронної підсистеми. Перший доданок H_d представляє однорівневу КТ,

$$H_d = \sum_{\sigma} \varepsilon_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}, \quad (4.3)$$

де $d_{\sigma}^{\dagger}(d_{\sigma})$ — оператор породження (анігіляції) електрона зі спіном $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Гамільтоніан $H_l = H_l^n + H_l^s$ описує нормальний і надпровідний береги, відповідно,

$$H_l^n = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k - eV_b) a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma}, \quad (4.4)$$

$$H_l^s = \sum_{kj\sigma} \left(\varepsilon_k c_{kj\sigma}^{\dagger} c_{kj\sigma} - \Delta_s (e^{i\phi_j} c_{kj\uparrow}^{\dagger} c_{-kj\downarrow}^{\dagger} + \text{H.c.}) \right). \quad (4.5)$$

Тут $a_{k\sigma}^{\dagger}(a_{k\sigma})$, а $c_{kj\sigma}^{\dagger}(c_{kj\sigma})$ — оператори породження (знищення) електрона з квантовим числом k і спіною проекцією σ в нормальному і надпровідному $j = 1, 2$ берегах, відповідно, і $\Delta_s e^{i\phi_j}$ — параметр порядку в надпровідниках (в j електроді). Зауважимо, що енергії $\varepsilon_d, \varepsilon_k$ відраховуються від енергії Фермі надпровідників. Надалі покладемо $\phi_1 = -\phi_2 = \phi/2$.

Гамільтоніан $H_t = H_t^n + H_t^s$ описує тунелювання електронів між квантовою точкою та берегами, де

$$H_t^n = \sum_{k\sigma} t_0^n (a_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \text{H.c.}), \quad (4.6)$$

$$H_t^s = \sum_{kj\sigma} t_j^s(x) (c_{kj\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \text{H.c.}). \quad (4.7)$$

Залежна від положення КТ амплітуда тунелювання має наступний вигляд:

$$t_{1(2)}^s(x) = t_0^s e^{(-1)^j(x+a)/2\lambda}, \quad (4.8)$$

де 2λ — характерна довжина тунелювання, а a — параметр асиметрії. Для типового наномеханічного резонатора на основі ВНТ $2\lambda \sim 0.5$ нм [161]. Ми сконцентруємо нашу увагу на симетричному випадку $a = 0$, а несиметричний залишимо для короткого обговорення в пункті 4.1.5, бо врахування асиметрії не дає, як ми покажемо, ніякого нового якісного результату. На додачу, повністю несиметричний випадок (присутній лише один надпровідний електрод) розглянуто в роботі [154].

4.1.2. Метод матриці густини.

Еволюція матриці густини електронної підсистеми $\hat{\rho}$ описується рівнянням Ліувілля-фон Неймана ($\hbar = 1$),

$$i\partial_t\hat{\rho} = [H, \hat{\rho}], \quad (4.9)$$

яке разом з рівнянням (4.1) утворює замкнену систему рівнянь, що описують наноелектромеханіку нашої системи. Обмежимося випадком $\Delta_s \gg |eV_b| \gg \Delta_d \sim \Gamma_n$, де $\Delta_d = (2\pi)\nu_s|t_0^s|^2$ і $\Gamma_n = (2\pi)\nu_n|t_0^n|^2$, причому $\nu_{s(n)}$ — густина станів у надпровідному (нормальному) електроді.

Для опису електронної динаміки КТ використано наближення редукованої (приведеної) матриці густини, в рамках якого повна матриця густини системи факторизується до тензорного добутку рівноважної матриці густини нормального і надпровідного берегів та матриці густини КТ у вигляді:

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_n \otimes \hat{\rho}_s \otimes \hat{\rho}_d.$$

Використовуючи стандартну процедуру взяття сліду, можна отримати наступне рівняння для приведеної матриці густини $\hat{\rho}_d$ [145] ($\Delta_s \rightarrow \infty$ (з *англ.* — deep subgap regime)),

$$\partial_t\hat{\rho}_d = -i \left[H_d^{eff}, \hat{\rho}_d \right] + \mathcal{L}_n\{\hat{\rho}_d\}, \quad (4.10)$$

де

$$H_d^{eff} = H_d + \Delta_d(x, \phi)d_\downarrow d_\uparrow + \Delta_d^*(x, \phi)d_\uparrow^\dagger d_\downarrow^\dagger, \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} \Delta_d(x, \phi) &= \frac{1}{2}\Delta_d \sum_{j=1,2} e^{(-1)^j(x/\lambda + i\phi/2)} = \Delta'(x, \phi) + i\Delta''(x, \phi) \\ &= \Delta_d \cosh(x/\lambda + i\phi/2). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Тут $\Delta_d(x, \phi)$ є параметром порядку, індукованим надпровідним ефектом близькості [151, 162], а $\Delta', \Delta''(x, \phi)$ є дійсними функціями. Лінбладіан в рівнянні (4.10) відображає некогерентний обмін електронами між нормальним електродом і КТ. В режимі високої тягнутої напруги $|eV_b| \gg \varepsilon_0, k_B T$, він набуває

вигляду:

$$\mathcal{L}_n\{\hat{\rho}_d\} = \Gamma_n \sum_{\sigma} \begin{cases} 2d_{\sigma}^{\dagger}\hat{\rho}_d d_{\sigma} - \{d_{\sigma}d_{\sigma}^{\dagger}, \hat{\rho}_d\}, & \kappa = +1; \\ 2d_{\sigma}\hat{\rho}_d d_{\sigma}^{\dagger} - \{d_{\sigma}^{\dagger}d_{\sigma}, \hat{\rho}_d\}, & \kappa = -1; \end{cases} \quad (4.13)$$

де $\kappa = \text{sgn}(eV_b)$.

Інший спосіб отримати ефективний гамільтоніан, рівняння (4.11), полягає у використанні методу рівняння руху в рамках формалізму функцій Гріна, див., наприклад, посилання [163] та додаток в посиланні [151]. Ідея цього добре відомого методу полягає в тому, щоб отримати серію зв'язаних диференціальних рівнянь для шуканої функції Гріна шляхом її кількаразового диференціювання.

На рисунку 4.2 представлена електронна динаміка на КТ для $\kappa = \pm 1$. З рисунку 4.2 видно, що не всі електронні процеси дозволені через масштаби параметрів у розглядуваному випадку. У підзонному режимі заборонено одноелектронні переходи між точкою і надпровідними електродними, а отже, відбувається лише обмін куперівськими парами. Більше того, через високу напругу тунелювання одноелектронних переходів між точкою і нормальними електродними дозволено виключно в одному напрямку (від електрода до точки, див. рис. 4.2а, або навпаки, рис. 4.2б), що свідчить про те, що наша модель задовільняє електронно-дірковій симетрії.

Як наслідок, матриця густини КТ $\hat{\rho}_d$ діє в гільбертовому просторі \mathcal{H}_4 , який можна представити як тензорний добуток двох просторів \mathcal{H}_2 через $\mathcal{H}_4 = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{CP}$ з базисними векторами станів $|\uparrow\rangle = d_{\uparrow}^{\dagger}|0\rangle$, $|\downarrow\rangle = d_{\downarrow}^{\dagger}|0\rangle$, та $|0\rangle$, $|2\rangle = d_{\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger}|0\rangle$ (при $d_{\uparrow,\downarrow}|0\rangle = 0$). Тоді рівняння для матриці густини КТ мають наступний вигляд:

$$\partial_t \rho_0 = -4\Gamma_n \rho_0 - \imath \Delta_d(x, \phi) \rho_{20} + \imath \Delta_d^*(x, \phi) \rho_{02}, \quad (4.14)$$

$$\partial_t \rho_2 = 2\Gamma_n (1 - \rho_0 - \rho_2) + \imath \Delta_d(x, \phi) \rho_{20} - \imath \Delta_d^*(x, \phi) \rho_{02}, \quad (4.15)$$

$$\partial_t \rho_{02} = -2\Gamma_n \rho_{02} + \imath \Delta_d(x, \phi) (\rho_0 - \rho_2) + 2\imath \varepsilon_d \rho_{02}, \quad (4.16)$$

$$\partial_t \rho_{20} = -2\Gamma_n \rho_{20} - \imath \Delta_d^*(x, \phi) (\rho_0 - \rho_2) - 2\imath \varepsilon_d \rho_{20}. \quad (4.17)$$

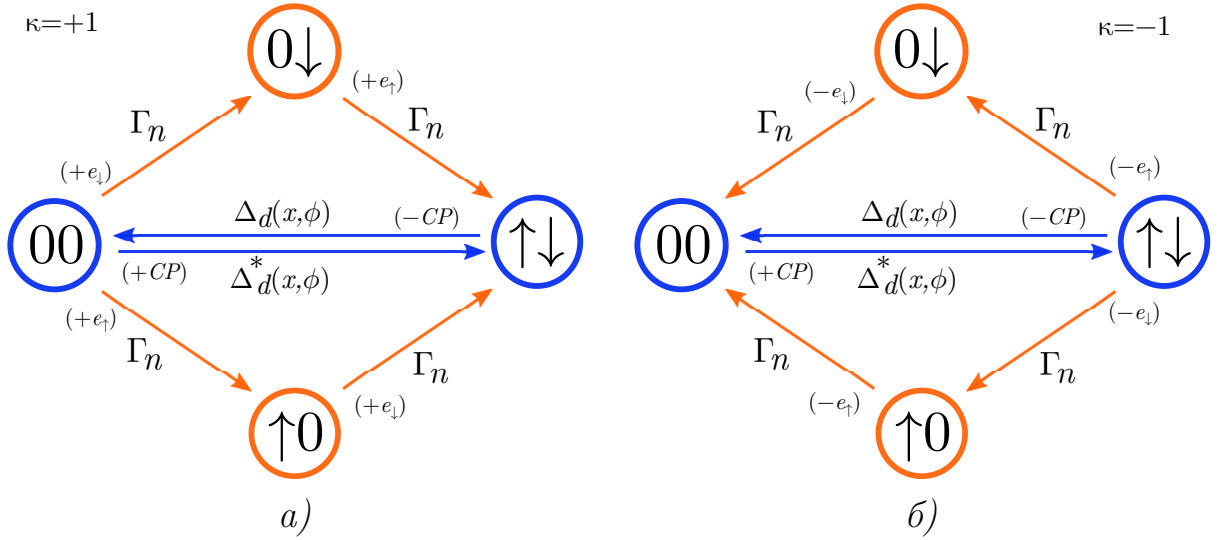


Рис. 4.2 Діаграми, що представляють переходи між електронними станами на квантовій точці. Одноелектронні стани змінюються за рахунок переходів з порожньої в однозайняту КТ, а потім з однозайнятої в двозайняту (позначені помаранчевими стрілками). В режимі високої тягучої напруги тунелювання електронів (а) або дірок (б) зі спіном \downarrow або \uparrow дозволено тільки від нормального електрода до квантової точки і заборонено в зворотному напрямку. Переходи між порожньою і подвійно зайнятою квантовою точкою відбуваються за рахунок зв'язку з надпровідними берегами (показані синіми стрілками).

Тут використано умову нормалізації $\rho_0 + \rho_\uparrow + \rho_\downarrow + \rho_2 = 1$. Рівняння для зміщення x , рівняння (4.1), має вигляд,

$$\ddot{x} + \omega x = -\frac{2\Delta_d}{\lambda} \left[\sinh\left(\frac{x}{\lambda} - i\frac{\phi}{2}\right) \rho_{02} + \sinh\left(\frac{x}{\lambda} + i\frac{\phi}{2}\right) \rho_{20} \right]. \quad (4.18)$$

Правило суперселекції, яке забороняє суперпозицію станів з цілими та напівцілими спінами, дозволяє представити матрицю густини $\hat{\rho}_d$ як пряму суму двох матриць густини $\hat{\rho}_d = \hat{\rho}_e + \hat{\rho}_{CP}$, що діють у гільбертовому просторі \mathcal{H}_2 з векторами станів $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ та $|0\rangle, |2\rangle$ відповідно. Більше того, враховуючи спин-обертальну симетрію, можна зробити висновок, що $\hat{\rho}_e$ має бути пропорційна одиничній матриці, $\hat{\rho}_e = \rho_e \hat{I}$, тоді як $\hat{\rho}_{CP}$ можна записати у вигляді:

$$\hat{\rho}_{CP} = \frac{1}{2} R_0 \hat{I} + \frac{1}{2} \sum_i R_i \sigma_i, \quad (4.19)$$

де $\sigma_i, (i = 1, 2, 3)$ — матриці Паулі. Тут новими змінними є $R_i = \text{Sp}(\sigma_i \hat{\rho}_{CP})$, з

$$\hat{\rho}_{CP} = \begin{pmatrix} \rho_0 & \rho_{02} \\ \rho_{20} & \rho_2 \end{pmatrix}, \quad (4.20)$$

(рівняння для $R_0 = \frac{1}{2} \text{Sp} \hat{I} \hat{\rho} = (\rho_0 + \rho_2)/2$ є додатковим і не має значення в даній конфігурації).

Тоді, ввівши безрозмірний час $\omega t \rightarrow t$ і зміщення $x/\lambda \rightarrow x$, та врахувавши умову нормалізації $\text{Tr} \hat{\rho}_d = 1$, отримаємо наступну замкнену систему рівнянь для $x(t)$ та $R_i(t)$,

$$\ddot{x} + x = -\xi \left[\sinh(x) \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) R_1 - \cosh(x) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) R_2 \right], \quad (4.21)$$

$$\alpha \dot{\vec{R}} = \hat{L} \vec{R} - \kappa \vec{e}_3, \quad (4.22)$$

де $\vec{R} = (R_1, R_2, R_3)^T$, $\vec{e}_3 = (0, 0, 1)^T$, $\xi = \Delta_d / (m \lambda^2 \omega^2)$ є наноелектромеханічного зв'язку, а $\alpha = \omega / (2\Gamma_n)$ — параметр адіабатичності. Для типової НЕМС на основі ВНТ можна оцінити $\xi \sim 10^{-3} \ll 1$ [161, 164]. Матриця \hat{L} визначається наступним чином:

$$\hat{L}(x) = \begin{pmatrix} -1 & \tilde{\varepsilon}_d & -\tilde{\Delta}''(x, \phi) \\ -\tilde{\varepsilon}_d & -1 & -\tilde{\Delta}'(x, \phi) \\ \tilde{\Delta}''(x, \phi) & \tilde{\Delta}'(x, \phi) & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

де $\tilde{\varepsilon}_d \equiv \varepsilon_d / \Gamma_n$, $\tilde{\Delta}_d \equiv \Delta_d / \Gamma_n$.

4.1.3. Метод рівняння руху для функцій Гріна.

У цьому пункті представлено ще один метод отримання ефективного рівняння для гамільтоніана (4.11), як зазначалося в попередньому пункті 4.1.2. Воно базується на методі рівняння руху в рамках формалізму функцій Гріна, див., наприклад, посилання [163] та додаток в [151]. Ідея цього добре відомого методу полягає в тому, щоб отримати серію зв'язаних диференціальних рівнянь для шуканої функції Гріна шляхом її багаторазового диференціювання.

Оскільки в розглянутій системі квантова точка зв'язана з надпровідним і нормальним електродами незалежно, то в наступному виводі можна опустити внесок нормального берега. Визначимо функцію Гріна запізнення в просторі Намбу 2×2 як [165],

$$\hat{G}^r(t) = -i\theta(t) \begin{pmatrix} \langle \{d_\uparrow(t), d_\uparrow^\dagger(0)\} \rangle & \langle \{d_\uparrow(t), d_\downarrow(0)\} \rangle \\ \langle \{d_\downarrow^\dagger(t), d_\uparrow^\dagger(0)\} \rangle & \langle \{d_\downarrow^\dagger(t), d_\downarrow(0)\} \rangle \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Тоді, продиференціювавши цю функцію двічі, знайдемо для гармонік Фур'є,

$$\hat{G}^r(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{G}^r(t) e^{-i\tau t}, \quad \hat{G}^r(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{G}^r(\tau) e^{i\tau t}, \quad (4.25)$$

наступну замкнену систему рівнянь:

$$\hat{g}_0^{-1}(\tau) \hat{G}^r(\tau) = \hat{I} + \sigma_z \sum_{kj} t_{kj}^s \hat{G}_j^{r,1}(k, \tau), \quad (4.26)$$

$$\hat{g}_{kj}^{s,-1}(\tau) \hat{G}_j^{r,1}(k, \tau) = \sigma_z t_{kj}^s \hat{G}^r(\tau), \quad (4.27)$$

де $\hat{G}_j^{r,1}(\tau)$ — гармоніки Фур'є наступної кореляційної функції:

$$\hat{G}_j^{r,1}(k, t) = -i\theta(t) \begin{pmatrix} \langle \{c_{kj\uparrow}(t), d_\uparrow^\dagger(0)\} \rangle & \langle \{c_{kj\uparrow}(t), d_\downarrow(0)\} \rangle \\ \langle \{c_{kj\downarrow}^\dagger(t), d_\uparrow^\dagger(0)\} \rangle & \langle \{c_{kj\downarrow}^\dagger(t), d_\downarrow(0)\} \rangle \end{pmatrix}. \quad (4.28)$$

Тут також функція Гріна однорівневої квантової точки з рівнем енергії ε_d ,

$$\hat{g}_0(\tau) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\tau - \varepsilon_d + i0} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\tau + \varepsilon_d + i0} \end{pmatrix}, \quad (4.29)$$

з її оберненою матрицею,

$$\hat{g}_0^{-1}(\tau) = \begin{pmatrix} \tau - \varepsilon_d + i0 & 0 \\ 0 & \tau + \varepsilon_d + i0 \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

та функцією Гріна (стандартною) j надпровідника,

$$\hat{g}_{kj}^s(\tau) = \frac{\imath}{\tau^2 - E_k^2} \begin{pmatrix} \tau + \varepsilon_k & -\Delta_s e^{\imath\phi_j} \\ -\Delta_s e^{-\imath\phi_j} & \tau - \varepsilon_k \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

де власні значення гамільтоніану $H_l^s \in E_k = \pm\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_s^2}$ (андреєвські рівні енергії).

Тоді, підставляючи рівняння (4.27) в рівняння (4.26), можна отримати наступне рівняння Дайсона для функції Гріна запізнення КТ $\hat{G}^r(\tau)$:

$$\hat{G}^r(\tau) = \hat{g}_0(\tau) + \hat{g}_0(\tau)\hat{\Sigma}^r(\tau)\hat{G}^r(\tau), \quad (4.32)$$

де власноенергетична функція визначається як:

$$\hat{\Sigma}^r(\tau) = \imath \sum_{kj} (t_{kj}^s)^2 \hat{g}_{kj}^s(-\Delta_s, \tau), \quad (4.33)$$

та після інтегрування за енергіями, отримуємо:

$$\hat{\Sigma}^r(\tau) = \frac{1}{2} \sum_j \frac{\Delta_d(x)}{\sqrt{\Delta_s^2 - \tau^2}} \begin{pmatrix} \tau & \Delta_s e^{\imath\phi_j} \\ \Delta_s e^{-\imath\phi_j} & \tau \end{pmatrix}. \quad (4.34)$$

Більш того, у випадку симетричних тунельних контактів (надпровідних), можемо переписати дане рівняння як:

$$\hat{\Sigma}^r(\tau) = \frac{\Delta_d}{\sqrt{\Delta_s^2 - \tau^2}} \begin{pmatrix} \tau \cosh(x/\lambda) & \Delta_s \cosh(x/\lambda - \imath\phi/2) \\ \Delta_s \cosh(x/\lambda + \imath\phi/2) & \tau \cosh(x/\lambda) \end{pmatrix}. \quad (4.35)$$

На додачу, використовуючи формальний розв'язок рівняння (4.32)

$$\hat{G}^r(\tau) = \left[\hat{g}_0^{-1} + \hat{\Sigma}^r \right]^{-1}, \quad (4.36)$$

отримуємо наступний вираз:

$$\hat{G}^r(\tau) = \frac{1}{\det(\hat{g}_0^{-1} - \hat{\Sigma}^r)} \begin{pmatrix} g_{22}^{-1} - \Sigma_{22}^r & g_{12}^{-1} - (-\Sigma_{12}^r) \\ g_{21}^{-1} - (-\Sigma_{21}^r) & g_{11}^{-1} - \Sigma_{11}^r \end{pmatrix}, \quad (4.37)$$

або більш докладно див. посилання [151, 166],

$$\hat{G}^r(\tau) = \frac{1}{D(\tau)} \begin{pmatrix} g_{22}^{-1} - \Sigma_{22}^r & \Sigma_{12}^r \\ \Sigma_{21}^r & g_{11}^{-1} - \Sigma_{11}^r \end{pmatrix}, \quad (4.38)$$

з $D(\tau) = (g_{11}^{-1} - \Sigma_{11}^r)(g_{22}^{-1} - \Sigma_{22}^r) - \Sigma_{12}^r \Sigma_{21}^r$ за визначенням. В режимі $\Delta_s \rightarrow \infty$ обчислення приводять до наступного виразу:

$$\hat{G}^r(\tau) = \frac{1}{D(\tau)} \begin{pmatrix} \tau + \varepsilon_d & \Delta_d^*(x, \phi) \\ \Delta_d(x, \phi) & \tau - \varepsilon_d \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

$$D(\tau) = \tau^2 - \varepsilon_d^2 - |\Delta_d(x, \phi)|^2. \quad (4.40)$$

З іншого боку, розглядаючи ефективний гамільтоніан квантової точки рівняння (4.11),

$$H' = \sum_{\sigma} \varepsilon_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \mathcal{Y} d_{\downarrow} d_{\uparrow} + \mathcal{Y}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger}, \quad (4.41)$$

де \mathcal{Y} — невідома поки що функція, або оператор-функція в більш загальному випадку, положення точки x і різниці фаз ϕ . Тоді можна знайти функцію Гріна запізнення, рівняння (4.24), точки, що описується гамільтоніаном, рівняння (4.41), використовуючи метод рівнянь руху, який було застосовано вище. Продиференціювавши лише один раз, отримуємо наступний вираз для шуканої компоненти Фур'є функції Гріна:

$$\hat{G}^r(\tau) = \frac{1}{\tau^2 - \varepsilon_d^2 - |\mathcal{Y}|^2} \begin{pmatrix} \tau + \varepsilon_d & \mathcal{Y}^{\dagger} \\ \mathcal{Y} & \tau - \varepsilon_d \end{pmatrix}. \quad (4.42)$$

На цьому етапі ми можемо співставити рівняння (4.42) та рівняння (4.39) та зробити висновок про те, що $\mathcal{Y} = \Delta_d(x, \phi)$.

4.1.4. Динаміка системи в адіабатичному режимі.

Система рівнянь (4.21) та (4.22) має досить очевидний статичний розв'язок

$$x_{st} = 0 + \mathcal{O}(\xi), \quad \vec{R}_{st} = \kappa L^{-1}(0) \vec{e}_3 + \mathcal{O}(\xi) \vec{R}^{(1)}, \quad (4.43)$$

де $\|\vec{R}^{(1)}\| = 1$. Стійкість цього розв'язку можна дослідити стандартними способами, див., наприклад, посилання [119]. Однак для спрощення цієї про-

цедури розглянемо адіабатичний випадок, коли $\alpha \ll 1$, що відповідає типовій експериментальній ситуації [137] і зводить задачу до такої, що дозволяє використовувати аналіз Пуанкаре. Точніше кажучи, ця нерівність дозволяє знайти розв'язок рівняння (4.22) з точністю α ,

$$\vec{R}(x,t) = \kappa L^{-1}(x(t))(1 + \alpha \dot{x} \partial_x L^{-1}(x(t)) + \mathcal{O}(\alpha^2)) \vec{e}_3. \quad (4.44)$$

В нульовому наближенні в теорії збурень за параметром адіабатичності, α , за допомогою рівняння (4.44) отримуємо:

$$R_1^{(0)}(x,t) = \kappa \frac{\tilde{\Delta}''(x,\phi) + \tilde{\varepsilon}_d \tilde{\Delta}'(x,\phi)}{\tilde{\mathcal{D}}^2(x,\phi)}, \quad (4.45)$$

$$R_2^{(0)}(x,t) = \kappa \frac{\tilde{\Delta}'(x,\phi) - \tilde{\varepsilon}_d \tilde{\Delta}''(x,\phi)}{\tilde{\mathcal{D}}^2(x,\phi)}, \quad (4.46)$$

$$R_3^{(0)}(x,t) = -\kappa \frac{1 + \tilde{\varepsilon}_d^2}{\tilde{\mathcal{D}}^2(x,\phi)}. \quad (4.47)$$

Тут $\tilde{\mathcal{D}}^2 \equiv \mathcal{D}^2(x,\phi)/\Gamma_n^2 = \tilde{\Delta}_d^2 [\sinh^2 x + \cos^2(\phi/2)] + \tilde{\varepsilon}_d^2 + 1$.

Використовуючи рівняння (4.44), можемо отримати наступний вираз для поправки першого порядку для матричних елементів оператора густини квантової точки,

$$\vec{R}^{(1)}(x,t) = \alpha \dot{x} L^{-1}(x(t)) \partial_x \vec{R}^{(0)}(x,t). \quad (4.48)$$

Коефіцієнти $R_1^{(1)}$ та $R_2^{(1)}$ можуть бути записані в термінах $R_3^{(1)}$, що має наступний вигляд:

$$R_3^{(1)}(x,t) = \alpha \kappa \dot{x} \frac{\tilde{\Delta}_d^2}{\tilde{\mathcal{D}}^6} \left[\sinh(2x) \left\{ (1 - \tilde{\varepsilon}_d^2) \tilde{\mathcal{D}}^2 - 4(1 + \tilde{\varepsilon}_d^2) \right\} + 2\tilde{\varepsilon}_d \tilde{\mathcal{D}}^2 \sin \phi \right]. \quad (4.49)$$

Таким чином, підставляючи даний вираз в рівняння (4.21), отримуємо (з точністю до α) наступне нелінійне диференціальне рівняння для $x(t)$,

$$\ddot{x} - \eta(x,\phi) \dot{x} + x = F(x,\phi), \quad (4.50)$$

розв'язання якого можна проаналізувати в рамках теорії Пуанкаре. Тут нелінійна сила $F(x,\phi)$ і коефіцієнт тертя η , який надалі будемо називати коефіцієнтом накачки, породжуються взаємодією з нерівноважним електронним

оточенням. В термінах $R_3^{(1)}$ коефіцієнт накачки має вигляд:

$$\begin{aligned} \dot{x}\eta(x, \phi) = & \frac{\tilde{\Delta}_d}{1 + \tilde{\varepsilon}_d^2} \left[- [\sin \phi - \tilde{\varepsilon}_d \sinh(2x)] R_3^{(1)} + \right. \\ & + \frac{\alpha \kappa \dot{x}}{\tilde{\mathcal{D}}^4} \left\{ 2\tilde{\varepsilon}_d \tilde{\mathcal{D}}^2 (\cosh(2x) - \cos \phi) + \right. \\ & \left. \left. + \tilde{\Delta}_d^2 \sinh(2x) [(1 - \tilde{\varepsilon}_d^2) \sin \phi - 2\tilde{\varepsilon}_d \sinh(2x)] \right\} \right]. \end{aligned} \quad (4.51)$$

За допомогою досить простих обчислень знаходимо:

$$F(x, \phi) = \kappa \xi \frac{\tilde{\Delta}_d}{2\tilde{\mathcal{D}}^2} [\sin \phi - \tilde{\varepsilon}_d \sinh(2x)], \quad (4.52)$$

$$\begin{aligned} \eta(x, \phi) = & \kappa \alpha \xi \frac{\tilde{\Delta}_d}{2\tilde{\mathcal{D}}^6} \left[\tilde{\Delta}_d^2 \sinh(2x) (\tilde{\mathcal{D}}^2 + 4) \{ \sin \phi - \tilde{\varepsilon}_d \sinh(2x) \} + \right. \\ & \left. + 8\tilde{\varepsilon}_d \tilde{\mathcal{D}}^2 \{ \sin^2(\phi/2) + \sinh^2 x \} \right]. \end{aligned} \quad (4.53)$$

4.1.5. Стійкість статичного розв'язку. Лінеаризація.

Сильно нелінійне рівняння (4.50) в адіабатичному наближенні має статичні розв'язки, які визначаються рівнянням:

$$x_{st} = F(x_{st}, \phi), \quad (4.54)$$

яке в розглянутій межі малого електромеханічного зв'язку, $\xi \ll 1$, має тривіальний розв'язок,

$$x_{st} = \kappa \xi \frac{\tilde{\Delta}_d}{2\tilde{\mathcal{D}}^2} \sin \phi \propto \mathcal{O}(\xi). \quad (4.55)$$

З рівняння (4.55) видно, що x_{st} строго дорівнює нулю, коли $\phi = \pi n$ (n — ціле число). Це відповідає прямій конфігурації нанотрубки. Для еволюції малих відхилень від положення рівноваги $\delta x(t) = x(t) - x_{st}$ можна отримати наступне рівняння (лінеаризоване рівняння (4.50) поблизу точки рівноваги x_{st}),

$$\delta \dot{x} - \eta(0, \phi) \delta \dot{x} + \delta x = 0. \quad (4.56)$$

Тут ми нехтуємо невеликим зсувом частоти механічних коливань внаслідок перенормування.

$$\eta(0, \phi) = +\kappa\alpha\xi \frac{4\tilde{\varepsilon}_d\tilde{\Delta}_d}{\tilde{D}^4(0, \phi)} \sin^2\left(\frac{\phi}{2}\right). \quad (4.57)$$

Таким чином, статичний розв'язок x_{st} є *нестійким*, тобто початкова мала спонтанна флуктуація призводить до експоненціального зростання амплітуди коливань КТ, коли $\eta(0, \phi) > 0$, і є стійким в інших випадках. З рівняння (4.57) добре видно, що наявність *механічної нестійкості* безпосередньо залежить від положення енергетичного рівня КТ ε_d і прикладеної тягнучої напруги κ . У випадку додатної $\kappa\varepsilon_d$ положення рівноваги x_{st} є *нестійким* по відношенню до збільшення амплітуди коливань для всіх значень надпровідної різниці фаз ϕ (за винятком $\phi = 0$, яка є такою лише для симетричного випадку, що буде обговорено в пункті 4.1.7). Останній факт розкриває причину, чому ми назвали $\eta(x, \phi)$ коефіцієнтом накачки. З рівняння (4.57) можна також легко помітити, що коефіцієнт накачки досягає максимуму при $\phi = \pi$ (сила $F(0, \pi) = 0$). Слід порівняти це з випадком $\phi = 0$, коли сила і накачка дорівнюють нулю, $F(0, 0) = 0$ і $\eta(0, 0) = 0$. Це досить несподівана ситуація, оскільки зазвичай тертя/накачка виникає за рахунок сили, що діє на КТ. Однак у нашому випадку сила, відповідальна за наномеханічну накачку, має електронну природу і чутлива до того, що куперівські пари делокалізовані між нанотрубкою і надпровідними електродами. Ця сила виникає, коли куперівська пара знаходиться в стані квантової суперпозиції, що контролюється різницею фаз, вигином нанотрубки та іншими параметрами.

Фазова діаграма механічної нестійкості, що виникає в запропонованій системі, представлена на рис. 4.3. Максимальна накачка має місце при $\tilde{\varepsilon}_d = 1/\sqrt{3}$ (і $\phi = \pi$).

4.1.6. Ефект самонасичення.

Для того, щоб з'ясувати, до чого призводить механічна нестійкість, знайдемо стаціонарні розв'язки $x_c(t)$ рівняння (4.50). Використаємо як малий параметр ξ і тоді рівняння (4.50) можна розглядати як таке, що описує гармонічний осцилятор, слабо збурений взаємодією з електронною підсистемою,

$$\ddot{x} + x = \xi f(\dot{x}, x). \quad (4.58)$$

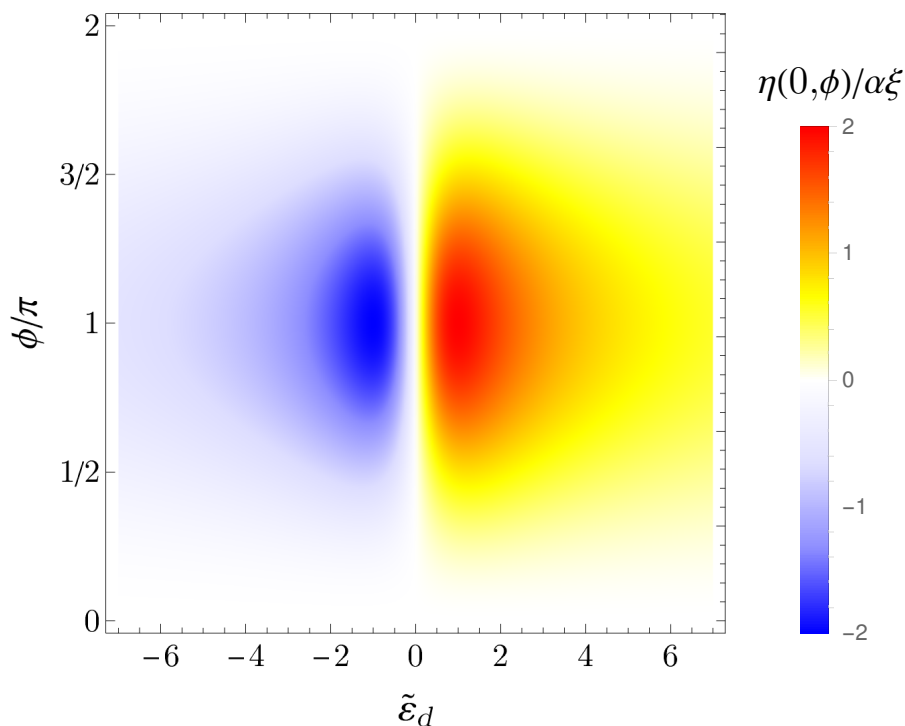


Рис. 4.3 Залежність коефіцієнта накачки $\eta(0, \phi)$ (в одиницях $\alpha\xi$) від положення енергетичного рівня КТ $\tilde{\varepsilon}_d$ та різниці фаз між надпровідниками ϕ для додатного напрямку тягнучої напруги $\kappa = 1$ та $\tilde{\Delta}_d = 1$. Червоним кольором позначено режим, в якому має місце механічна нестійкість, а синій колір відповідає ситуації зворотнього напрямку передачі енергії.

У випадку малого параметра електромеханічного зв'язку $\xi \ll 1$ можна використати метод усереднення Крилова–Боголюбова [167] (див. також [168]) для знаходження наближеного розв'язку рівняння (4.50). У першому порядку за теорією збурень цей метод збігається з методом усереднення Ван-дер-Поля. Слідуючи йому, припустимо, що в стаціонарному режимі зміщення квантової точки x_c має вигляд (з прийнятою точністю ξ):

$$x_c(t) = x_{st} + \sqrt{A} \sin(t + \varphi(t)) + \mathcal{O}(\xi), \quad (4.59)$$

де амплітуда $\sqrt{A(t)}$ і фаза $\varphi(t)$ змінюються повільно в часі, $x_{st}, \dot{A}(t), \dot{\varphi}(t) \sim \xi$. Потім, підставивши анзац (4.59) в рівняння (4.50) і прийнявши ту саму функціональну форму для похідної \dot{x}_c ,

$$\dot{x}_c(t) = \sqrt{A} \cos(t + \varphi(t)), \quad (4.60)$$

для $A(t)$ та $\varphi(t)$ можна знайти наступні рівняння:

$$\dot{A} = 2A \cos^2 \psi \eta \left(\sqrt{A} \sin \psi, \phi \right), \quad (4.61)$$

$$\dot{\varphi} = -A^{-1/2} \sin \psi F \left(\sqrt{A} \sin \psi, \phi \right). \quad (4.62)$$

Оскільки амплітуда і фаза мало змінюються за період коливань, то середні значення рівнянь (4.61)-(4.62) можна замінити їхнім середнім значенням за період, і, як наслідок, отримаємо:

$$\dot{A} = A \bar{\eta}(A, \phi), \quad (4.63)$$

$$\dot{\varphi} = -A^{-1/2} \bar{F}(A, \phi). \quad (4.64)$$

Тут

$$\bar{\eta}(A, \phi) = (\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} d\psi \cos^2(\psi) \eta \left(\sqrt{A} \sin \psi, \phi \right) \equiv \kappa \xi \alpha W(A, \phi), \quad (4.65)$$

$$\bar{F}(A, \phi) = (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} d\psi \sin(\psi) F \left(\sqrt{A} \sin \psi, \phi \right). \quad (4.66)$$

Коефіцієнт накачки $\bar{\eta}(A, \phi)$ має очевидний фізичний сенс: він дає співвідношення між енергією, що підводиться до механічної підсистеми за один період механічних коливань з амплітудою \sqrt{A} і повною механічною енергією.

З рівняння (4.63) видно, що стаціонарні режими $\dot{A} = 0$ задаються рівняннями $A = 0$ ($x(t) = x_{st}$) і $\bar{\eta}(A, \phi) = 0$. Перше з них є статичним станом нанотрубки, а друге відповідає періодичним коливанням з амплітудою $\sqrt{A_c}$, де $W(A_c, \phi) = 0$. Статичний режим стійкий, коли $\bar{\eta}(0, \phi) < 0$ і нестійкий у протилежному випадку. Стійкість періодичного розв'язку визначається знаком похідної $\partial_A \bar{\eta}(A, \phi)|_{A=A_c}$: якщо вона від'ємна (додатна), то то періодичний режим стійкий (нестійкий). Тоді, аналізуючи рівняння (4.50) і (4.65), можна зробити висновок, що коефіцієнт накачки $\bar{\eta}(A, \phi) \propto \kappa$ є непарною функцією ε_d (перший доданок в правій частині рівняння (4.53) не дає внеску) і приймає

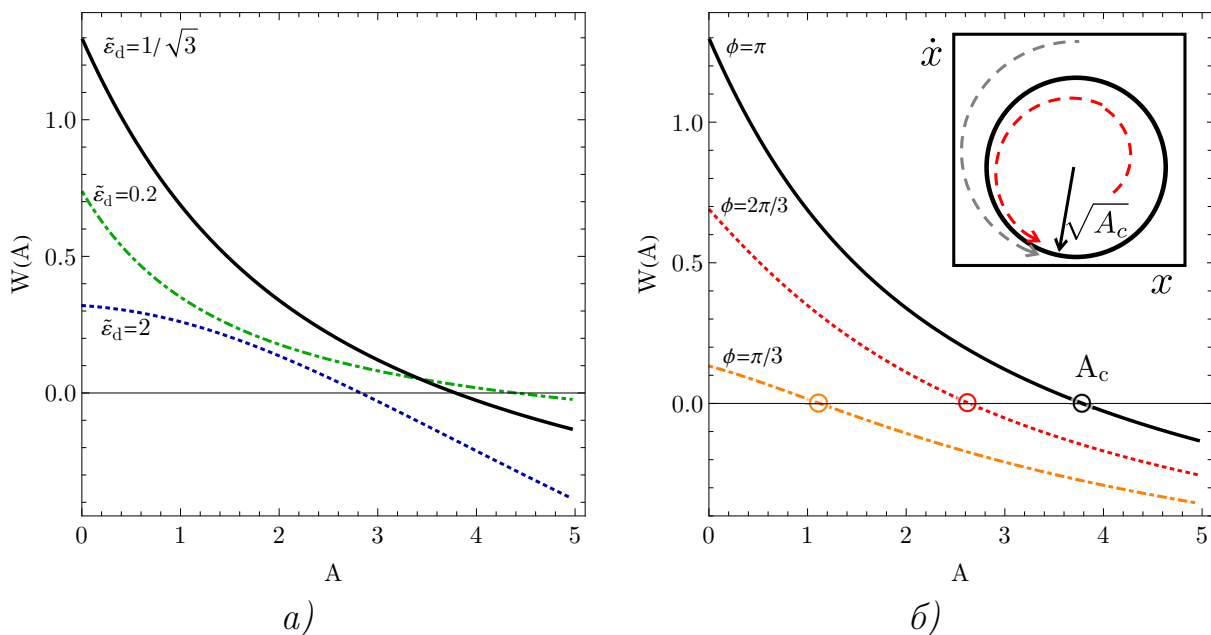


Рис. 4.4 Графіки функції $W(A)$, пропорційної коефіцієнту накачки $\bar{\eta}(A, \phi)$, для різних значень (а) відносного положення енергетичного рівня квантової точки $\tilde{\varepsilon}_d = 0.2; 1/\sqrt{3}; 2$ для $\phi = \pi$, та (б) надпровідну різницю фаз $\phi = \pi/3, 2\pi/3, \pi$ для $\tilde{\varepsilon}_d = 1/\sqrt{3}$. Нулі функцій відповідають амплітуді граничного циклу [див. вставку в (б)], яка залежить від різниці фаз і досягає максимуму при $\phi = \pi$. Інші параметри: $\tilde{\Delta}_d = 1, \kappa = +1$.

наступні граничні значення:

$$\bar{\eta}(0, \phi) = \kappa \alpha \xi W(0, \phi) = +\kappa \alpha \xi \frac{4\tilde{\varepsilon}_d \tilde{\Delta}_d}{\tilde{D}^4(0, \phi)} \sin^2 \left(\frac{\phi}{2} \right), \quad (4.67)$$

$$\bar{\eta}(A \rightarrow \infty, \phi) = \kappa \alpha \xi W(A \rightarrow \infty, \phi) = -\kappa \alpha \xi \frac{\tilde{\varepsilon}_d}{2\tilde{\Delta}_d}, \quad (4.68)$$

звідки випливає, що при $\phi \neq 0$ розв'язок рівняння $W(A_c, \phi) = 0$, що відповідає стаціонарному періодичному режиму, існує при будь-яких значеннях інших параметрів. Однак при малих $\phi \ll 1$ коефіцієнт накачки $\eta(x, \phi)$, який визначається взаємодією з електронною підсистемою, малий і може бути компенсований коефіцієнтом тертя за рахунок теплового оточення. Положення у випадку, коли $\phi = 0$ є дуже нестійким відносно малого параметра асиметрії $|a| \ll 1$ і буде розглянуто у наступному підрозділі, 4.1.7. Функції $W(A)$ та A_c при різних $\phi \geq 1$ та $\tilde{\varepsilon}_d > 0$ представлені на рис. 4.4 та 4.5.

З рівняння (4.67) випливає, що якщо $\kappa \varepsilon_d > 0$ і $\phi \neq 0$, то статичний механічний стан $x = x_{st} \ll 1$ є нестійким відносно появи згинних коливань з

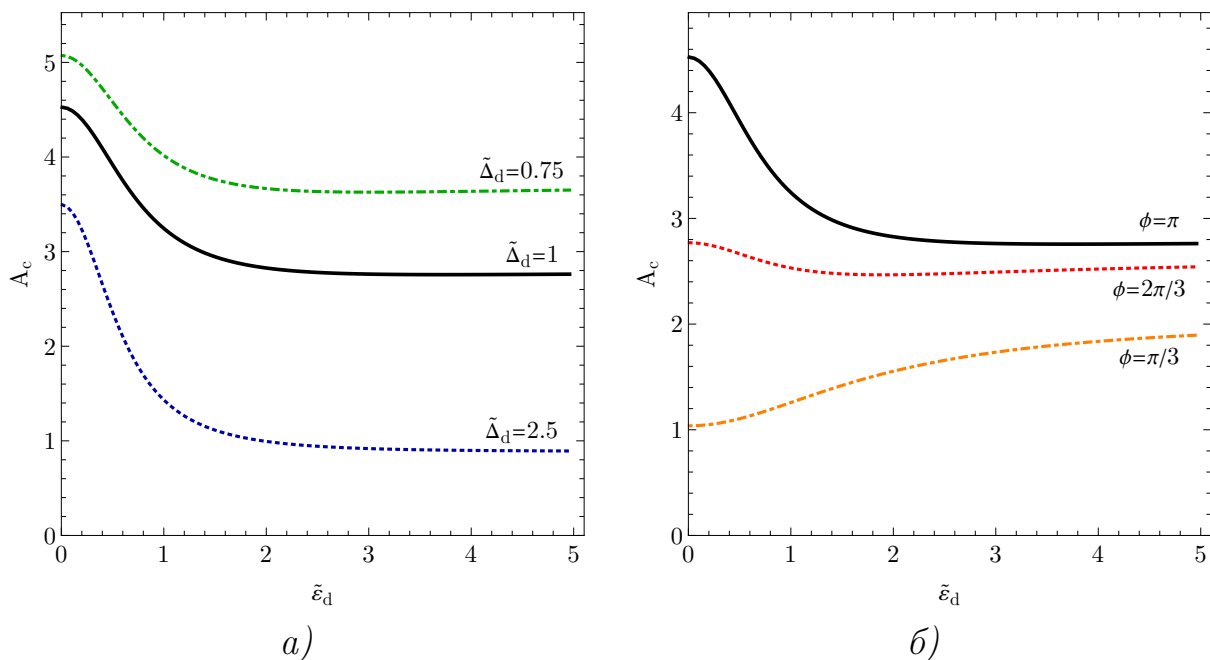


Рис. 4.5 Залежності A_c граничних циклів від відносного положення енергетичного рівня $KT \tilde{\epsilon}_d$ (відрахованого від енергії Фермі) для різних значень (а) $\tilde{\Delta}_d = 0.75; 1; 2.5$ для $\phi = \pi$ і (б) різниці фаз між надпровідниками $\phi = \pi/3, 2\pi/3; \pi$ для $\tilde{\Delta}_d = 1$.

амплітудами, які експоненціально зростають у часі з інкрементом,

$$\gamma = \kappa \alpha \xi W(0, \phi). \quad (4.69)$$

Остання величина досягає свого максимуму при $\phi = \pi$ при фіксованих значеннях всіх інших параметрів ($x_{st}(\pi) = 0$). Однак приріст насичується при амплітуді $\sqrt{A_c}$, що призводить до самопідтримних коливань з цією амплітудою. Слід зазначити, що амплітудне насичення в розглянутій системі є повністю внутрішнім ефектом і має місце коли тертя, викликане взаємодією з термодинамічним середовищем дорівнює нулю. Про ефект "самонасичення" також повідомлялося в [118], де розглядалася спеціальна магнітна система.

4.1.7. Вплив асиметрії та тертя, що генеруються термодинамічним оточенням.

В експерименті природно виникає наявність асиметрії тунельних контактів. Слідом за цим врахуємо несиметричність надпровідних тунельних контактів з параметром $\Delta_{d1}/\Delta_{d2} = \zeta$, де $\zeta = e^{-a/\lambda}$ (див. рівняння (4.8)). Таким чином, об'єднавши рівняння (4.8) і (4.12), отримуємо, що асиметрія тунель-

них амплітуд призводить до відносного зсуву положення рівноваги квантової точки і в отриманих формулах потрібно зробити наступну заміну:

$$\Delta_d(x, \phi) \rightarrow \Delta_d(x + a, \phi). \quad (4.70)$$

Надалі зручно ввести перенормований параметр асиметрії $a/\lambda \rightarrow a$. Тоді для критерію механічної нестійкості отримаємо $\eta(0 + a, \phi) > 0$, де

$$\begin{aligned} \eta(a, \phi) = \kappa \alpha \xi \frac{\tilde{\Delta}_d}{2\tilde{\mathcal{D}}^6} & \left[\tilde{\Delta}_d^2 \sinh(2a) \left(\tilde{\mathcal{D}}^2 + 4 \right) \{ \sin \phi - \tilde{\varepsilon}_d \sinh(2a) \} + \right. \\ & \left. + 8\tilde{\varepsilon}_d \tilde{\mathcal{D}}^2 \{ \sin^2(\phi/2) + \sinh^2 a \} \right]. \end{aligned} \quad (4.71)$$

З цієї нерівності отримуємо, що стан механічної підсистеми є *нестійким* коли

$$\begin{cases} |\tilde{\Delta}_d \sinh a| < \tilde{\Delta}_d^{cr}, & \tilde{\varepsilon}_d > 0; \\ |\tilde{\Delta}_d \sinh a| > \tilde{\Delta}_d^{cr}, & \tilde{\varepsilon}_d < 0; \end{cases} \quad \phi = \pi; \quad (4.72)$$

$$\begin{cases} |\tilde{\Delta}_d \cosh a| < \tilde{\Delta}_d^{cr}, & \tilde{\varepsilon}_d > 0; \\ |\tilde{\Delta}_d \cosh a| > \tilde{\Delta}_d^{cr}, & \tilde{\varepsilon}_d < 0; \end{cases} \quad \phi = 0; \quad (4.73)$$

або,

$$\begin{cases} |\tilde{\Delta}_{d1} \pm \tilde{\Delta}_{d2}| < 2\tilde{\Delta}_d^{cr}, & \tilde{\varepsilon}_d > 0; \\ |\tilde{\Delta}_{d1} \pm \tilde{\Delta}_{d2}| > 2\tilde{\Delta}_d^{cr}, & \tilde{\varepsilon}_d < 0. \end{cases} \quad (4.74)$$

Тут — відповідає випадку $\phi = \pi$, а $+\ - \phi = 0$, ($\zeta \neq 1$). Гранична величина, яка визначається як,

$$(\tilde{\Delta}_d^{cr})^2 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{(3 + \tilde{\varepsilon}_d^2)^2 + 8(1 + \tilde{\varepsilon}_d^2)} - (3 + \tilde{\varepsilon}_d^2) \right), \quad (4.75)$$

дорівнює приблизно 1, $(\tilde{\Delta}_s^{cr})^2 \in [(\sqrt{17}-3)/2, 2)$, за рахунок $\lim_{\tilde{\varepsilon}_d \rightarrow \infty} (\tilde{\Delta}_d^{cr})^2 = 2$.

Інший спосіб отримання критеріїв нестійкості полягає в тому, щоб представити переміщення у вигляді:

$$x(t) \sim e^{i\Omega t}, \quad (4.76)$$

Підставимо в рівняння (4.50) і знайдемо розв'язок нерівності $\text{Im}\Omega < 0$, що відповідає випадку експоненціального зростання амплітуди коливань КТ. З наведених вище критеріїв нестійкості (рівняння (4.72)-(4.74)) можна зробити висновок, що наявність ефекту самонасичення не впливає асиметрія.

Зауважимо, що нескінченно мале значення асиметрії може призвести до появи механічної нестійкості навіть у випадку нульової різниці фаз. Однак, в останньому випадку сила накачки мала і повинна бути порівняна із затуванням, що створюється впливом термодинамічного рівноважного оточення. Для цього ми включаємо феноменологічний член $+\gamma\dot{x}$ в л.ч.с. рівняння (4.1). Коефіцієнт тертя γ визначається як $\propto Q^{-1}$, де Q — добротність, що визначається взаємодією з термодинамічним оточенням [128]. Таким чином, механічна нестійкість має місце, якщо

$$\gamma - \eta(a, \phi) < 0. \quad (4.77)$$

Це означає, що при малих значеннях різниці фаз, $\phi < 1$, коефіцієнт накачки $\eta(x + a, \phi)$, який визначається взаємодією з електронною підсистемою, значно менший, ніж у випадку $\phi \approx \pi$ і врівноважує коефіцієнт тертя γ , пов'язаний з впливом термодинамічного оточення. Це призводить до конкуренції між цими двома процесами, оскільки режим самопідтримних коливань виникає тоді, коли накачка дорівнює затуванню. Як наслідок, тертя, викликане взаємодією з тепловим оточенням, призводить до зменшення амплітуди автоколивань. Проте, оскільки накачка, викликана електронним нерівноважним оточенням, сильно залежить від різниці фаз ϕ , то в найбільш вираженому випадку $\phi = \pi$ воно домінує над термодинамічним тертям для високодобротних наномеханічних резонаторів, $Q \sim 10^5$.

На рисунках 4.6, 4.7 наведено залежності функції $W(A)$, яка пропорційна коефіцієнту накачки $\bar{\eta}(A, \phi)$ для різних значень параметра асиметрії a . Зауважимо, що $W(A)$ є парною функцією a . З рисунка 4.6, який відповідає випадку максимальної сили накачки, $\phi = \pi$, $\tilde{\varepsilon}_d = 1/\sqrt{3}$, видно, що значення амплітуди граничного циклу зменшується при збільшенні асиметрії (зміщення положення нуля функції вліво). Чорна крива пов'язана з симетричним випадком ($a = 0$) і є такою ж, як на рис. 4.4. Помаранчева крива відповідає критичному значенню (при подальшому збільшенні параметра асиметрії накачки зникає), отриманому з рівняння (4.75), $(\tilde{\Delta}_d^{cr})^2 = 2/3$ для $\tilde{\varepsilon}_d = 1/\sqrt{3}$.

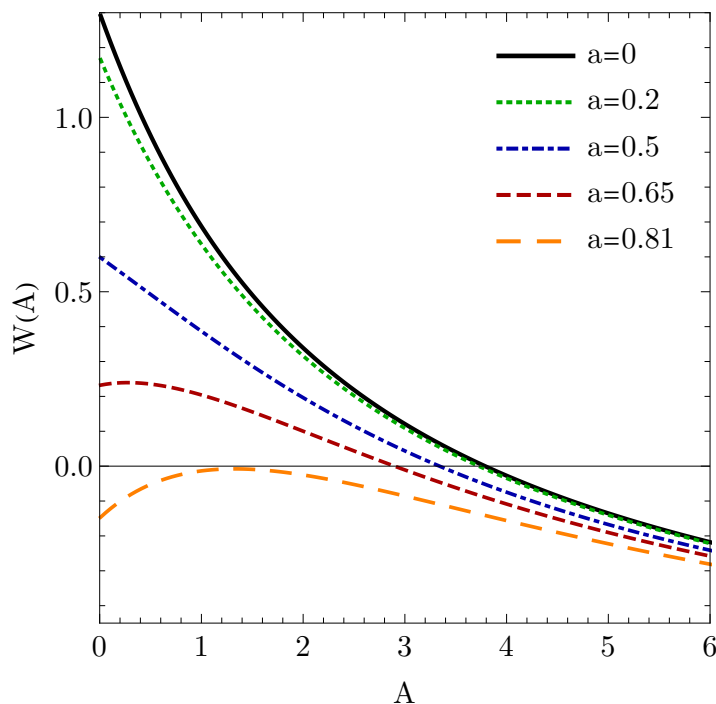


Рис. 4.6 Залежності функції $W(A)$, пропорційної коефіцієнту накачки $\bar{\eta}(A, \phi)$, для різних значень параметра асиметрії $|a| = 0$ (чорна товста крива, симетричний випадок); 0.2 (зелена пунктирна крива); 0.5 (синя пунктирна крива); 0.65 (червона щільна пунктирна крива); 0.81 (помаранчева нещільна пунктирна крива) для $\phi = \pi$ та $\tilde{\varepsilon}_d = 1/\sqrt{3}$. Нулі функцій відповідають амплітуді граничного циклу. Інші параметри наступні: $\tilde{\Delta}_d = 1, \kappa = +1$.

Рисунок 4.7 демонструє випадок $\phi = 0$, коли ефективна накачка нехтовно мала і, як наслідок, граничний цикл самопідтримних коливань не виникає.

4.1.8. Транзисторна та діодна поведінка електричного струму.

Розглянуті вище самопідтримні коливання специфічно проявляються в транспортних характеристиках. Це підвищує можливість виявлення механічної нестійкості за допомогою вимірювання електричного струму. Щоб дослідити таку можливість, розглянемо електричний струм через систему, I_n , визначений стандартним чином,

$$I_n = e\kappa \text{Tr} \left\{ \hat{N} \hat{\rho} \right\}, \quad (4.78)$$

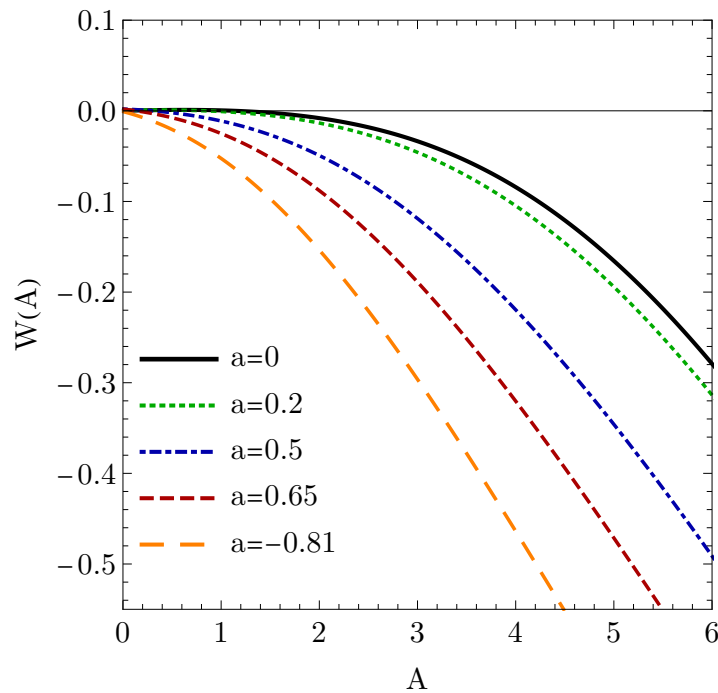


Рис. 4.7 Залежності функції $W(A)$, пропорційної коефіцієнту накачки $\bar{\eta}(A, \phi)$, для різних значень параметра асиметрії $|a| = 0$ (чорна товста крива, симетричний випадок); 0.2 (зелена пунктирна крива); 0.5 (синя пунктирна крива); 0.65 (червона щільна пунктирна крива); 0.81 (помаранчева нещільна пунктирна крива) для $\phi = 0$ та $\tilde{\varepsilon}_d = 1/\sqrt{3}$. Інші параметри такі: $\tilde{\Delta}_d = 1$, $\kappa = +1$, $\gamma = 10^{-5}$. Функції набувають невід'ємних значень, що відповідає відсутності самопідтримних коливань у граничному циклі.

де

$$\hat{N} = i \left[\hat{H}, \hat{N} \right], \quad \hat{N} = \sum_{k\sigma} a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} \quad (4.79)$$

позначає оператор числа електронів у нормальному електроді. У розглянутому вище режимі ($\Delta_s \rightarrow \infty$) струмом квазічастинок можна знехтувати, оскільки він експоненціально малий. Як наслідок, у режимі високої напруги зміщення при $\kappa = +1$, коли тунелювання електронів з КТ до нормальних електродів заборонено, вираз для I_n можна легко отримати, аналізуючи рис. 4.2. З цих графіків видно, що зменшення числа електронів в нормальному електроді визначається двома різними процесами. Перший — це тунелювання електрона зі спіном вгору або вниз на порожню гранулу. Швидкість цього процесу дорівнює $2\Gamma_n \rho_0$, де $\rho_0 = (R_0 + R_3)/2$ — ймовірність того, що КТ незаповнена. Другий — тунелювання електрона на квантову точку, зайняту одним еле-

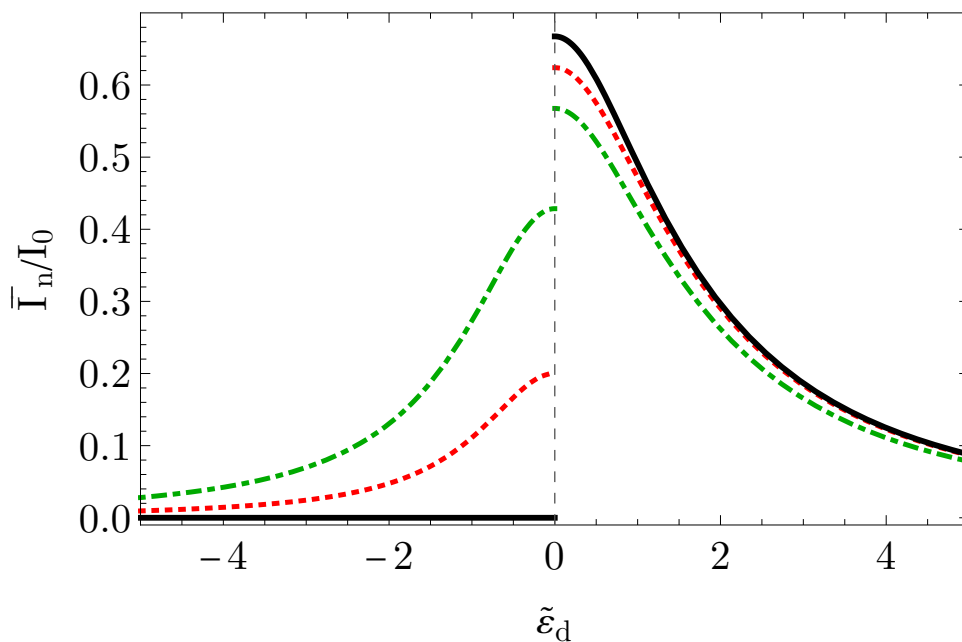


Рис. 4.8 Залежності постійного електричного струму \bar{I}_n (нормованого до $I_0 = e\Gamma_n$) від відносного положення КТ енергетичного рівня $\tilde{\epsilon}_d$ для різних значень різниці фаз $\phi = \pi/3$ (зелена пунктирна крива), $2\pi/3$ (червона пунктирна) і π (чорна суцільна) для $\tilde{\Delta}_d = 1$ і $\kappa = +1$. Максимальний ефект має місце при $\phi = \pi$ за відсутності постійного струму в статичному режимі, тоді як він близький до максимального в стійкому стаціонарному режимі самопідтримних коливань.

ктроном зі спіном вгору або вниз. Швидкість цього процесу дорівнює $2\Gamma_n\rho_e$. З урахуванням умови нормалізації $2\rho_e + R_0 = 1$, і використовуючи аналогічне припущення для $eV_b < 0$, одержимо з рівняння (4.44) наступне рівняння для I_n :

$$I_n(t) = \kappa I_0 (1 + \kappa R_3), \quad (4.80)$$

де $I_0 = e\Gamma_n$. В адіабатичній границі можна використати розклад для \vec{R} в теорії збурень за параметром адіабатичності α , рівняння (4.44), і отримати для струму наступний вираз:

$$I_n(t) = \kappa I_0 \left[\frac{|\Delta_d(x, \phi)|^2}{\mathcal{D}^2(x, \phi)} + \alpha \dot{x} f(x) + \mathcal{O}(\alpha^2) \right]. \quad (4.81)$$

У стаціонарному режимі, що відповідає генерації самопідтримних коливань з амплітудою $\sqrt{A_c}$, усереднений за період коливань електричний струм

\bar{I}_n визначається як:

$$\bar{I}_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} I_n[x(t)] dt. \quad (4.82)$$

Після інтегрування рівняння (4.81) основний внесок у струм з точністю α^2 (оскільки член першого порядку усереднюється) має вигляд:

$$\bar{I}_n(\kappa, \varepsilon_d) = \kappa I_0 \left[\frac{\Delta_d^2 \cos^2(\phi/2)}{\Delta_d^2 \cos^2(\phi/2) + \Gamma_n^2 + \varepsilon_d^2} + \theta(\kappa \varepsilon_d) \delta \bar{I}(A_c) \right]. \quad (4.83)$$

Тут перший доданок відповідає статичному постійному струму, який критично залежить від різниці фаз ϕ . Зокрема, перший доданок дорівнює нулю при $\phi = \pi$, на відміну від другого доданка,

$$\delta \bar{I}(A_c) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Delta_d^2 (\Gamma_n^2 + \varepsilon_d^2)}{\mathcal{D}^2(0, \phi)} \int_0^{2\pi} d\psi \frac{\sinh^2(\sqrt{A_c} \sin \psi)}{\mathcal{D}^2(\sqrt{A_c} \sin \psi, \phi)} > 0, \quad (4.84)$$

що виникає виключно за рахунок самопідтримних коливань і дорівнює нулю, якщо статичний стан є стійким, на що вказує ступінчаста функція Хевісайда $\theta(\kappa \varepsilon_d)$. Максимальне значення струму $\delta \bar{I}_n(A_c)$ можна оцінити як:

$$\delta \bar{I}_n^{max} \approx \frac{\Delta_d^2 \sinh^2 \sqrt{A_c}}{\Delta_d^2 \sinh^2 \sqrt{A_c} + \Gamma_n^2 + \varepsilon_d^2}. \quad (4.85)$$

Залежності струму \bar{I}_n від ε_d при $\tilde{\Delta}_d = 1$ та $\phi = \pi/3, 2\pi/3, \pi$ представлені на рис. 4.8, 4.9. З цих графіків видно, що наномеханічна нестійкість призводить до виникнення значних діодних і транзисторних ефектів. Ефекти найбільш виражені при $\phi = \pi$, коли в статичному режимі $A_c = 0$, де повністю блокується обмін куперівськими парами між точкою і надпровідними електродами. В такій ситуації стрибок середнього струму від нуля до скінченного значення $\sim I_0$ (або навпаки) відбувається при зміні напрямку напруги (ефект діода: за одного напрямку тягнучої напруги струм присутній, а за іншого — відсутній), див. рис. 4.9 або якщо положення енергетичного рівня квантової точки ε_d , керованого напругою на затворі (третього електрода в транзисторі), проходить через нуль (транзисторний ефект), див. рис. 4.8. Зауважимо, що розрив середнього струму як функції ε_d необхідно враховувати з точністю до ξ .

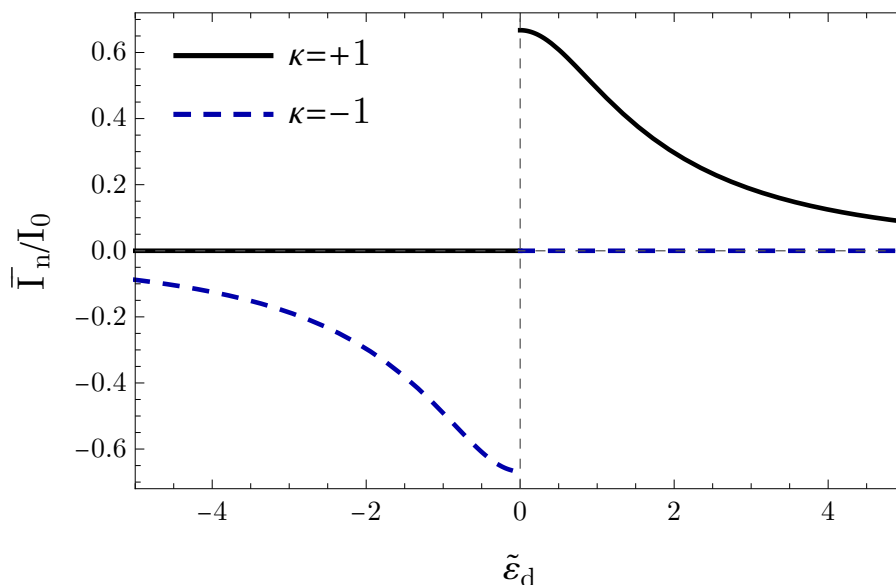


Рис. 4.9 Залежності постійного електричного струму \bar{I}_n (нормованого до $I_0 = e\Gamma_n$) від відносного положення енергетичного рівня КТ $\tilde{\epsilon}_d$ для $\kappa = +1$ (чорна суцільна крива, пов'язана з аналогічною на рис. 4.8) і для $\kappa = -1$, коли тягнуча напруга прикладена в протилежному напрямку (синя пунктирна крива), що представляє діодоподібну поведінку струму. Інші параметри: $\phi = \pi$.

4.1.9. Результати чисельних розрахунків.

Описана вище аналітична процедура виконана в припущенні адіабатичному $\alpha = \omega/(2\Gamma_n) \ll 1$. Однак, з метою розширення діапазону параметрів, для яких справедливі прогнозовані ефекти, чисельно розв'язано систему рівнянь для елементів матриці густини квантової точки, пов'язану з рівнянням для зміщення КТ, рівняння (4.21)-(4.22).

На рисунку 4.10 продемонстровано результати чисельних розв'язків для часової еволюції зміщення КТ після невеликої початкової спонтанної флуктуації положення нанотрубки, $x_0 = 0.01$, у трьох різних режимах. Стійкий режим представлений на рис. 4.10а. Рисунок 4.10б відповідає критичному значенню енергетичного рівня $\tilde{\epsilon}_d = 0$ (такому ж, як і для $\phi = 2\pi n$, де n — ціле число), коли стан механічної підсистеми є ні стійким, ні нестійким. Нарешті, в режимі наявності механічної нестійкості, рис. 4.10в, амплітуда коливань точки починає експоненціально зростати після невеликого зсуву від положення рівноваги. Однак через деякий час амплітуда коливань насичується і настає стійкий режим самопідтримних коливань нанотрубки. Він виникає навіть без

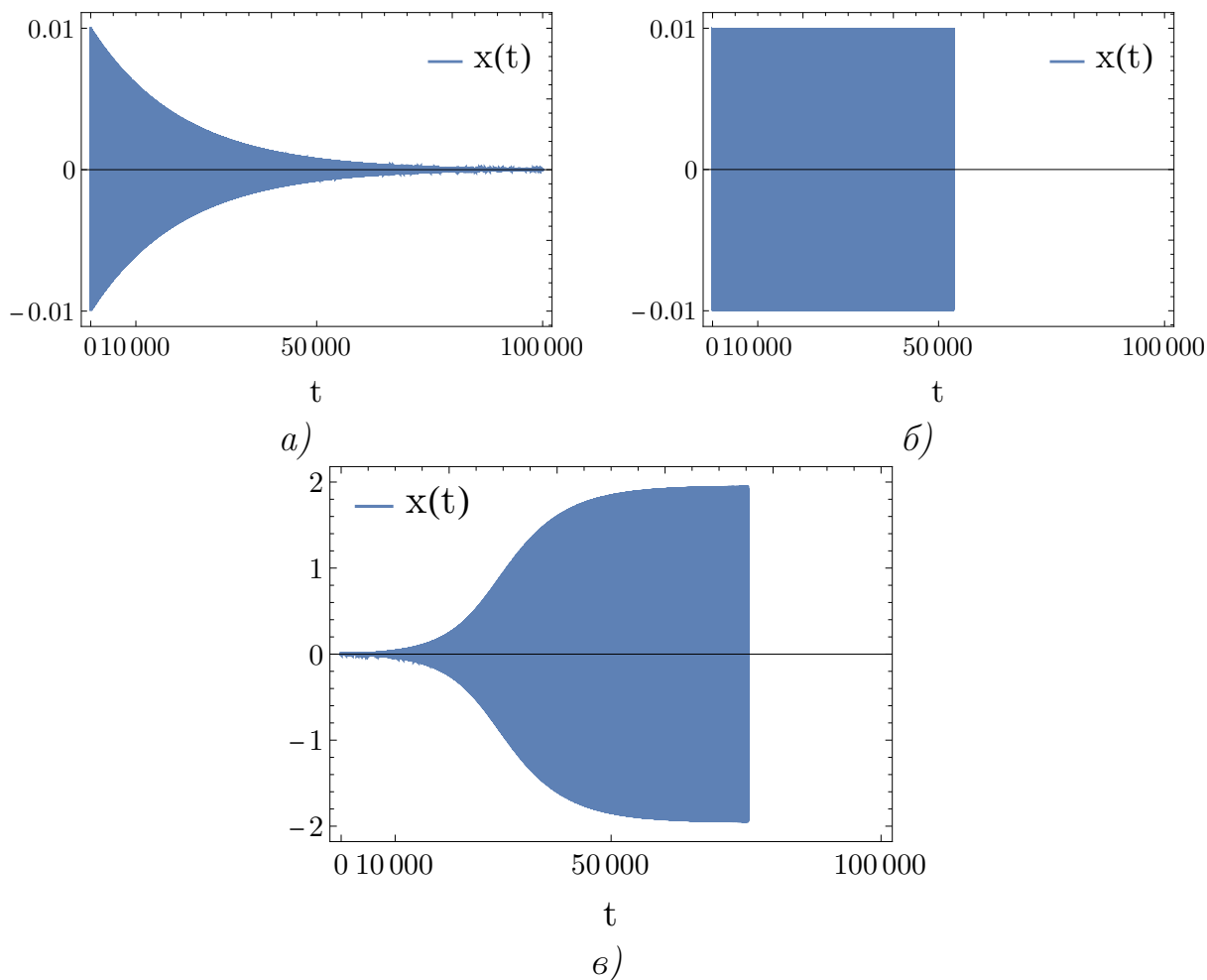


Рис. 4.10 Залежності зміщення x (в одиницях тунельної довжини λ) КТ у трьох різних режимах, реалізованих для системи, від часу (в одиницях ω). Рисунок (а) відповідає стійкому до початкового спонтанного коливання ($x_0 = 0.01$) від положення рівноваги режиму, $\tilde{\varepsilon}_d < 0$. Рисунок (б) відповідає критичному значенню $\tilde{\varepsilon}_d = 0$, коли стан механічної підсистеми також є нестійким. А рисунок (в) демонструє часову еволюцію коливань добротності в режимі, коли має місце механічна нестійкість, $\tilde{\varepsilon}_d = +1/\sqrt{3}$. Останній випадок представлений на рис. 4.4, 4.5 чорною кривою. Інші параметри, використані в чисельних розрахунках: $\phi = \pi$, $\tilde{\Delta}_d = 1$, $\alpha = 0.05$, $\xi = 10^{-2}$.

додавання зовнішнього тертя, $\gamma = 0$. Останній факт пов'язаний з ефектом самонасичення, що має місце для розглянутої гібридної системи. Зауважимо, що рис. 4.10 отримано для випадку слабого електромеханічного зв'язку $\xi \ll 1$, в адіабатичному режимі $\alpha \ll 1$, а для інших параметрів, які збігаються з параметрами чорної кривої на рис. 4.4-4.7, отримано з аналітичних розрахунків. Видно, що амплітуді $\sqrt{A_c}$ граничного циклу, взятої з рис. 4.4,

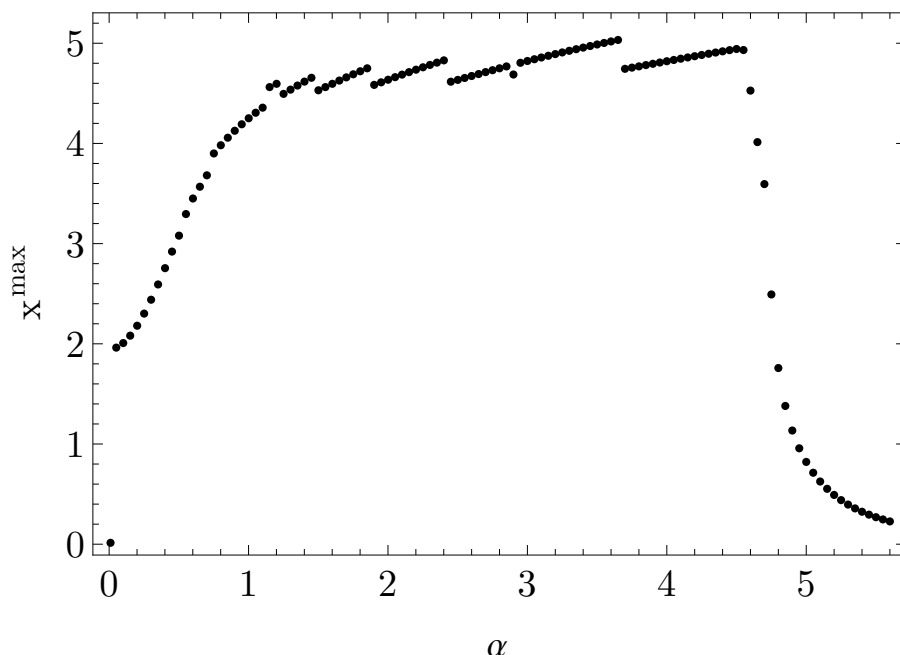


Рис. 4.11 *Залежність амплітуди $\sqrt{A_c}$ власних коливань КТ (нормованої на тунельну довжину λ) від параметра адіабатичності α . Можна відзначити, що величина амплітуди точкових коливань максимальна при $\omega \sim \Gamma_n$ і прямує до нуля в діабатичному режимі. Інші параметри, використані в чисельних розрахунках:*

$$\kappa = +1, \tilde{\varepsilon}_d = 1/\sqrt{3}, \phi = \pi, \tilde{\Delta}_d = 1, \xi = 10^{-2}.$$

відповідає амплітуда коливань, взята з рис. 4.10в, $\sqrt{A_c} \approx x^{max} \approx 2$. Це є проявом високої обґрунтованості аналітичних розрахунків.

На рисунку 4.11 показано залежність амплітуди $\sqrt{A_c}$ (x^{max}) власних коливань нанотрубки (нормованої на довжину тунелювання λ) в граничному циклі від параметра адіабатичності α . Вона отримана з чисельних розв'язків системи диференціальних рівнянь першого порядку для матричних елементів оператора густини квантової точки, рівняння (4.22), пов'язаної з системою другого порядку для зміщення, рівняння (4.21). Можна відзначити, що амплітуда максимальна в резонансному випадку, коли частота (в енергетичних одиницях) коливань КТ дорівнює різниці енергій між андреевськими рівняннями. Останнє знаходиться у відповідному узгодженні з передбаченнями для електричної [169] та магнітної НЕМ системи [118]. Крім того, слід врахувати, що для випадку електричного електромеханічного зв'язку для отримання граничного циклу необхідно враховувати термодинамічне тертя (демпфування), $\gamma = 10^{-4} - 10^{-6}$ (для високоякісних наномеханічних резонаторів). Причому, максимальні значення амплітуди для механічно *нестійкого* випадку

назначно більші, ніж для адіабатичного режиму, точніше, приблизно вдвічі більші. Проте амплітуда є мізерно малою в діабатичній (антиадіабатичній) границі $\alpha \gg 1$, що означає *стійкість* положення рівноваги нанотрубки в цьому режимі. Адіабатичний режим відповідає випадку, коли зміщення нанотрубки змінюється дуже мало за один акт тунелювання електронів, що зазвичай реалізується в експериментах [137].

4.2. Охолодження наномеханічних коливань за допомогою андрєєвського тунелювання

У цьому підрозділі обговорюється вирішальний вплив процесів електронного тунелювання на стан механічної підсистеми. Виявлено ефект охолодження до основного стану коливань нанотрубки. Продемонстрована можливість спостереження ефекту охолодження в експерименті.

4.2.1. Квантовомеханічний опис механічної підсистеми.

У попередньому розділі розглянуто наноелектромеханічну систему, що складається з вуглецевої нанотрубки, підвішеної над траншеєю в металевому електроді і розміщеної в зазорі між двома надпровідними електродами. Така установка є узагальненням експериментально реалізованої [153], де ВНТ підвішена над проміжком між звичайним і надпровідним електродами. Нанотрубку розглянуто як рухому однорівневу квантову точку, в якій індуковано залежний від зміщення надпровідний параметр порядку внаслідок тунелювання куперівських пар. Показано, що в такій системі можуть виникати самопідтримні згинальні коливання, якщо між звичайним і надпровідним електродами прикласти постійну тягнучу напругу. Такий процес переносу електронів, який полягає в андрєєвському тунелюванні [149, 150] нормальних електронів (та дірок відповідно) з утворенням в результаті куперівських пар, ми назвали андрєєвським інжектуванням. Як наслідок, взаємодія між когерентним двоелектронним (куперівська пара) та некогерентним одноелектронним тунелюванням в/з рухомої частини НЕМС може призвести до ефекту накачки або охолодження [151].

Однак з рівняння (4.81) можна помітити, що еклетичний струм має внесок $\propto x^2$. Це означає, що важливо враховувати флуктуації зміщення нанотрубки, пропущені в рамках напівкласичного підходу, розглянутого в попе-

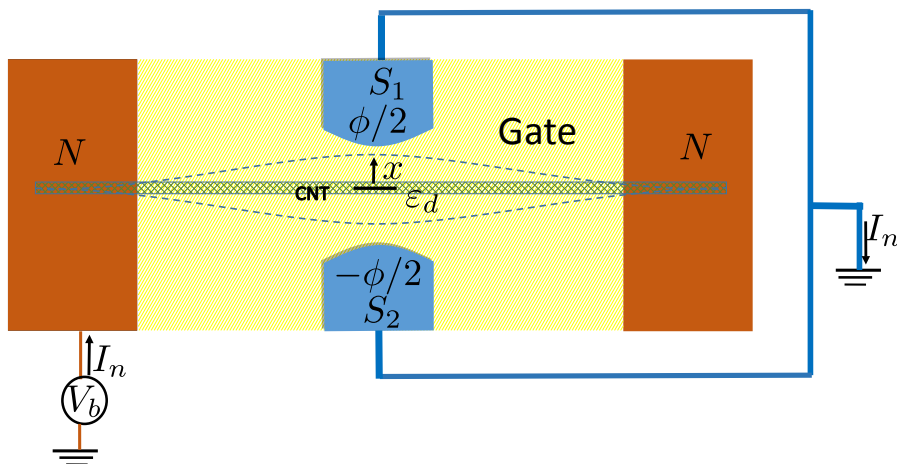


Рис. 4.12 Ескіз наноелектромеханічного пристрою, що розглядається. Вуглецева нанотрубка (ВНТ) підвішена в зазорі між двома кінцями нормального електрода (N) і тунельно з'єднана з ними. Також ВНТ коливається в напрямку x між двома надпровідними електродами ($S_{1,2}$). Цей процес впливає на величини тунельних бар'єрів між НТ і надпровідними електродами. Нормальний електрод знаходиться під напругою V_b .

редньому підрозділі, 4.1. У цьому підрозділі ми розглядаємо згинальні коливання нанотрубки квантовомеханічно, що дозволяє дослідити роботу такого НЕМ пристрою в режимі охолодження.

На рисунку 4.12 наведено ще одне схематичне зображення системи, що розглядається. Гамільтоніан системи складається з чотирьох доданків,

$$H = H_d + H_v + H_l + H_t, \quad (4.86)$$

де гамільтоніан H_d однорівневої КТ, гамільтоніан $H_l = H_l^n + H_l^s$ нормального і надпровідного електродів, тунельний гамільтоніан $H_t = H_t^n + H_t^s$ визначаються рівняннями (4.3)-(4.6) відповідно. Необхідно підкреслити, що тепер зміщення \hat{x} є оператором. Гамільтоніан \hat{H}_v ,

$$\hat{H}_v = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (4.87)$$

описує механічну динаміку квантової точки, p і x — канонічно спряжені імпульс та координата, $[p, x] = -i\hbar$; m, ω — маса та власна частота квантової точки відповідно.

4.2.2. Рівняння для функцій розподілу Вігнера.

Часова еволюція матриці густини системи $\hat{\rho}$ описується рівнянням Ліувілля-фон Неймана, рівняння (4.9). Використано наближення редукованої матриці густини, згідно з яким повна матриця густини системи $\hat{\rho}$ факторизується до тензорного добутку рівноважних матриць густини нормального та надпровідних берегів, а також матрицю густини КТ:

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_n \otimes \hat{\rho}_s \otimes \hat{\rho}_d. \quad (4.88)$$

Тут у гільбертовому просторі, який можна представити у вигляді тензорного добутку нескінченновимірному простору гармонічного осцилятора та простору однорівневої квантової точки, діє приведений оператор густини КТ $\hat{\rho}_d$.

Дотримуючись процедури, введеної в пункті 4.1.2, розглянемо стаціонарний стан системи у випадку $\Delta_s \gg |eV_b|$. ($\gg \Delta_d, \Gamma_n$, де $\Delta_d = 2\pi\nu_s |t_0^s|^2$, $\Gamma_n = 2\pi\nu_n |t_0^n|^2$ ($\nu_{s(n)}$ — густина станів в надпровідному (нормальному) електроді)). Використовуючи стандартну процедуру [45], можна взяти слід за ступенями свободи електродів і отримати наступне рівняння для приведеної матриці густини $\hat{\rho}_d$:

$$-i [H_d^{\text{eff}} + H_v, \hat{\rho}_d] + \mathcal{L}_n\{\hat{\rho}_d\} + \mathcal{L}_\gamma\{\hat{\rho}_d\} = 0, \quad (4.89)$$

де ефективний гамільтоніан H_d^{eff} представлено в рівнянні (4.11) з недіагональним параметром порядку КТ, рівняння (4.12), індукованим надпровідним ефектом близькості, який тепер є оператором:

$$\Delta_d(\hat{x}, \phi) = \Delta_d \cosh(\hat{x}/\lambda + i\phi/2). \quad (4.90)$$

Член $\mathcal{L}_n\{\hat{\rho}_d\}$ у рівнянні (4.89) індукований некогерентним електронним обміном між нормальним берегом і КТ в режимі високої тягнучої напруги, $|eV_b| \gg \varepsilon_0, \hbar\omega, T$, приймає вигляд рівняння (4.13). Також у рівнянні (4.10) феноменологічно введено дисипативний член $\mathcal{L}_\gamma\{\hat{\rho}_d\}$ [170],

$$\mathcal{L}_\gamma\{\hat{\rho}\} = -m\omega\gamma (n_B + 1/2) [x, [x, \hat{\rho}]] - i(\gamma/2) [x, \{p, \hat{\rho}\}], \quad (4.91)$$

де γ — затування, n_B — функція розподілу Бозе-Ейнштейна,

$$n_B = \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1}, \quad (4.92)$$

де T — температура термодинамічного середовища.

Матриця густини КТ $\hat{\rho}_d$ діє в гільбертовому просторі з на векторами станів $|0\rangle, d_\uparrow^\dagger(d_\downarrow^\dagger)|0\rangle = |\uparrow(\downarrow)\rangle, d_\uparrow^\dagger d_\downarrow^\dagger|0\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle \equiv |2\rangle$. Це означає, що матриця густини КТ може бути представлена у вигляді:

$$\hat{\rho}_d = \hat{\rho}_d(x, x') = \begin{pmatrix} \hat{\rho}_0 & \hat{\rho}_{02} & 0 & 0 \\ \hat{\rho}_{20} & \hat{\rho}_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{\rho}_\uparrow & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{\rho}_\downarrow \end{pmatrix}. \quad (4.93)$$

Отримуємо наступну систему рівнянь руху для компонентів матриці густини КТ $\hat{\rho}_d$ ($\kappa = +1$):

$$\partial_t \rho_0 = -i [H_v, \rho_0] - 4\Gamma_n \rho_0 - i\Delta_d(x, \phi) \rho_{20} + i\rho_{02} \Delta_d^*(x, \phi) + \mathcal{L}_\gamma \{\hat{\rho}_0\}, \quad (4.94)$$

$$\partial_t \rho_\uparrow = -i [H_v, \rho_\uparrow] + 2\Gamma_n (\rho_0 - \rho_\uparrow) + \mathcal{L}_\gamma \{\hat{\rho}_\uparrow\}, \quad (4.95)$$

$$\partial_t \rho_\downarrow = -i [H_v, \rho_\downarrow] + 2\Gamma_n (\rho_0 - \rho_\downarrow) + \mathcal{L}_\gamma \{\hat{\rho}_\downarrow\}, \quad (4.96)$$

$$\partial_t \rho_{02} = -i [H_v, \rho_{02}] + 2i\varepsilon_d \rho_{02} - 2\Gamma_n \rho_{02} - i\Delta_d(x, \phi) \rho_2 + i\rho_0 \Delta_d(x, \phi) + \mathcal{L}_\gamma \{\hat{\rho}_{02}\} \quad (4.97)$$

$$\partial_t \rho_{20} = -i [H_v, \rho_{20}] - 2i\varepsilon_d \rho_{20} - 2\Gamma_n \rho_{20} - i\Delta_d^*(x, \phi) \rho_0 + i\rho_2 \Delta_d^*(x, \phi) + \mathcal{L}_\gamma \{\hat{\rho}_{20}\} \quad (4.98)$$

$$\partial_t \rho_2 = -i [H_v, \rho_2] + 2\Gamma_n (\rho_\uparrow + \rho_\downarrow) + i\rho_{20} \Delta_d(x, \phi) - i\Delta_d^*(x, \phi) \rho_{02} + \mathcal{L}_\gamma \{\rho_2\}. \quad (4.99)$$

У даному випадку порядок операторів $\hat{\rho}_{ii}$ та $\hat{\Delta}_d(\hat{x}, \phi)$ є важливим. Для того, щоб отримати рівняння для випадку протилежного знаку тягнучої напруги, $\kappa = -1$, необхідно замінити $0 \Leftrightarrow 2$, тобто,

$$\partial_t \rho_0 = -i [H_v, \rho_0] + 2\Gamma_n (\rho_\uparrow + \rho_\downarrow) + i\rho_{02} \Delta_d(x, \phi) - i\Delta_d^*(x, \phi) \rho_{20} + \mathcal{L}_\gamma \{\rho_0\}. \quad (4.100)$$

$$\partial_t \rho_\uparrow = -i [H_v, \rho_\uparrow] + 2\Gamma_n (\rho_2 - \rho_\uparrow) + \mathcal{L}_\gamma \{\hat{\rho}_\uparrow\}, \quad (4.101)$$

$$\partial_t \rho_\downarrow = -i [H_v, \rho_\downarrow] + 2\Gamma_n (\rho_2 - \rho_\downarrow) + \mathcal{L}_\gamma \{\hat{\rho}_\downarrow\}, \quad (4.102)$$

$$\partial_t \rho_{02} = -i [H_v, \rho_{02}] - 2i\varepsilon_d \rho_{02} - 2\Gamma_n \rho_{02} - i\Delta_d^*(x, \phi) \rho_2 + i\rho_0 \Delta_d^*(x, \phi) + \mathcal{L}_\gamma \{\hat{\rho}_{02}\}, \quad (4.103)$$

$$\partial_t \rho_{20} = -i [H_v, \rho_{20}] + 2i\varepsilon_d \rho_{20} - 2\Gamma_n \rho_{20} - i\Delta_d(x, \phi) \rho_0 + i\rho_2 \Delta_d(x, \phi) + \mathcal{L}_\gamma \{\hat{\rho}_{20}\}, \quad (4.104)$$

$$\partial_t \rho_2 = -i [H_v, \rho_2] - 4\Gamma_n \rho_2 - i\Delta_d(x, \phi) \rho_{02} + i\rho_{20} \Delta_d^*(x, \phi) + \mathcal{L}_\gamma \{\hat{\rho}_0\}, \quad (4.105)$$

Досить зручно ввести лінійні комбінації елементів матриці густини наступним чином:

$$\begin{aligned} R_v &= \rho_0 + \rho_\uparrow + \rho_\downarrow + \rho_2, & R_0 &= \rho_0 + \rho_2, \\ R_1 &= \rho_{20} + \rho_{02}, & R_2 &= \imath(\rho_{02} - \rho_{20}), & R_3 &= \rho_0 - \rho_2. \end{aligned} \quad (4.106)$$

Тоді рівняння для матричних елементів матриці густини КТ, рівняння (4.94)-(4.99), приймають наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \partial_t R_0 &= -\imath[H_v, R_0] + 2\Gamma_n(R_v - 2R_0 - \kappa R_3) + \imath[R_1, \Delta'(x, \phi)] - \imath[R_2, \Delta''(x, \phi)] \\ &\quad + \mathcal{L}_\gamma\{R_0\}, \end{aligned} \quad (4.107)$$

$$\begin{aligned} \partial_t R_3 &= -\imath[H_v, R_3] - 2\Gamma_n(\kappa R_v + R_3) + \{R_1, \Delta''(x, \phi)\} + \{R_2, \Delta'(x, \phi)\} \\ &\quad + \mathcal{L}_\gamma\{R_3\}, \end{aligned} \quad (4.108)$$

$$\begin{aligned} \partial_t R_1 &= -\imath[H_v, R_1] + 2\varepsilon_d R_2 - 2\Gamma_n R_1 + \imath[R_0, \Delta'(x, \phi)] - \{R_3, \Delta''(x, \phi)\} \\ &\quad + \mathcal{L}_\gamma\{R_1\}, \end{aligned} \quad (4.109)$$

$$\begin{aligned} \partial_t R_2 &= -\imath[H_v, R_2] - 2\varepsilon_d R_1 - 2\Gamma_n R_2 - \imath[R_0, \Delta''(x, \phi)] - \{R_3, \Delta'(x, \phi)\} \\ &\quad + \mathcal{L}_\gamma\{R_2\}, \end{aligned} \quad (4.110)$$

$$\partial_t R_v = -\imath[H_v, R_v] + \imath[R_1, \Delta'(x, \phi)] - \imath[R_2, \Delta''(x, \phi)] + \mathcal{L}_\gamma\{R_v\}. \quad (4.111)$$

Стан механічної підсистеми повністю описується редукованою матрицею густини,

$$\hat{\rho}_v = \text{Tr} \hat{\rho}_d, \quad (4.112)$$

де операція сліду виконується над електронними ступенями свободи на КТ. Очевидно, що у граничному випадку $\lambda \rightarrow \infty$ електронна та вібронна підсистеми є незалежними, а приведена вібронна матриця густини має вигляд рівноважної матриці густини з ефективною температурою, яка визначається навколишнім середовищем з температурою T .

Зручно і досить природно в даному випадку користуватися описом в термінах функцій розподілу Вігнера,

$$W_i(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int d\xi e^{-\imath p \xi} \left\langle x + \frac{\xi}{2} | \hat{\rho}_i | x - \frac{\xi}{2} \right\rangle, \quad (4.113)$$

див. також підрозділ 3.5. Загалом, функція Вігнера дає розподіл ймовірностей як:

$$\int dp W(x,p) = \langle x | \hat{\rho} | x \rangle, \quad (4.114)$$

$$\int dx W(x,p) = \langle p | \hat{\rho} | p \rangle, \quad (4.115)$$

і є обмеженою функцією,

$$-2/\hbar \leq W(x,p) \leq 2/\hbar, \quad (4.116)$$

що є свідченням принципу невизначеності. Крім того, рівняння (4.113) можна переписати наступним чином:

$$W_i(x,p) = \frac{1}{2\pi} \int d\xi e^{ix\xi} \left\langle p + \frac{\xi}{2} | \hat{\rho}_i | p - \frac{\xi}{2} \right\rangle. \quad (4.117)$$

Зауважимо, що тут і далі ми вводимо безрозмірні змінні: $x/x_0 \rightarrow x$, $px_0/\hbar \rightarrow p$, де x_0 — амплітуда нульових коливань КТ, всі енергетичні параметри вимірюються в одиницях $\hbar\omega$, тунельна довжина λ вимірюється в одиницях x_0 , $\gamma/\omega \rightarrow \gamma$.

Нас цікавить стаціонарний режим механічної підсистеми в наближенні слабкого електромеханічного зв'язку $1/\lambda \ll 1$. Для знаходження форми рівнянь (4.107)-(4.111) у представленні Вігнера-Мойаля до головного порядку за цим параметром можна використати такі вирази:

$$[H_v, \hat{R}_i] \rightarrow (x\partial_p - p\partial_x)W_i(x,p), \quad (4.118)$$

$$[\hat{x}, [\hat{x}, \hat{R}_i]] \rightarrow -\partial_p^2 W_i(x,p), \quad (4.119)$$

$$[\hat{x}, \{\hat{p}, \hat{R}_i\}] \rightarrow 2\imath\partial_p p W_i(x,p); \quad (4.120)$$

$$e^{\hat{x}/\lambda} \hat{R}_i \rightarrow e^{x/\lambda} W_i(x, p + \imath/(2\lambda)) \approx W_i(x,p) + \frac{\imath}{2\lambda} \partial_p W_i(x,p), \quad (4.121)$$

$$\hat{R}_i e^{\hat{x}/\lambda} \rightarrow e^{x/\lambda} W_i(x, p - \imath/(2\lambda)) \approx W_i(x,p) - \frac{\imath}{2\lambda} \partial_p W_i(x,p). \quad (4.122)$$

Як результат, стаціонарне рівняння для вігнерівської функції розподілу, яка описує механічну ступінь свободи, $W_v(x,p)$, має наступний вигляд (включаю-

чи члени до другого порядку за параметром $1/\lambda$),

$$\{(x\partial_p - p\partial_x) + \mathcal{L}_\gamma\} W_v = -\frac{x}{\lambda^2} \Delta_d \cos(\phi/2) \partial_p W_1 + \frac{1}{\lambda} \Delta_d \sin(\phi/2) \partial_p W_2 \quad (4.123)$$

Тут ми припускаємо, що $\gamma \sim (1/\lambda^2)$. Дане рівняння зв'язане зі стаціонарним рівнянням для вектор-функції $\vec{W} = (W_0, W_1, W_2, W_3)^T$, які мають наступний вигляд (включаючи члени до першого порядку малості за параметром $1/\lambda$):

$$(x\partial_p - p\partial_x) \vec{W} + 2\hat{M} \vec{W} = \vec{F}, \quad (4.124)$$

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} -2\Gamma_n & 0 & 0 & -\kappa\Gamma_n \\ 0 & -\Gamma_n & \varepsilon_d & 0 \\ 0 & -\varepsilon_d & -\Gamma_n & -\Delta_d \cos(\phi/2) \\ 0 & 0 & \Delta_d \cos(\phi/2) & -\Gamma_n \end{pmatrix},$$

$$\vec{F} = -2\Gamma_n W_v \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -\kappa \end{pmatrix} + \frac{\Delta_d}{\lambda} \sin(\phi/2) \begin{pmatrix} \partial_p W_2 \\ 2xW_3 \\ \partial_p W_0 \\ -2xW_1 \end{pmatrix}.$$

Більш того, досить зручно в даному випадку перейти від декартових (x, p) до полярних координат (A, φ) , тобто, $x - \bar{x} = A \sin \varphi$ та $p = A \cos \varphi$, де $\bar{x} \sim (1/\lambda)$ відповідає рівноважному положенню квантової точки. Тоді рівняння (4.123)-(4.124) приймають наступну форму:

$$-\frac{\partial W_v}{\partial \varphi} + \bar{x} \hat{T} W_v + \gamma (n_B + 1/2) \hat{T}^2 W_v + \gamma (W_v + A \cos \varphi \hat{T} W_v) -$$

$$-\frac{\Delta_d}{\lambda} \sin(\phi/2) \hat{T} W_2 + \frac{\Delta_d A}{\lambda^2} \cos(\phi/2) \sin \varphi \hat{T} W_1 = 0; \quad (4.125)$$

$$-\frac{\partial \vec{W}}{\partial \varphi} + 2\hat{M}\vec{W} = \vec{F}, \quad (4.126)$$

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} -2\Gamma_n & 0 & 0 & -\kappa\Gamma_n \\ 0 & -\Gamma_n & \varepsilon_d & 0 \\ 0 & -\varepsilon_d & -\Gamma_n & -\Delta_d \cos(\phi/2) \\ 0 & 0 & \Delta_d \cos(\phi/2) & -\Gamma_n \end{pmatrix},$$

$$\vec{F} = -\vec{x}\hat{T}\vec{W} - 2\Gamma_n W_v \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -\kappa \end{pmatrix} + \frac{\Delta_d}{\lambda} \sin(\phi/2) \begin{pmatrix} \hat{T}W_2 \\ 2A \sin \varphi W_3 \\ \hat{T}W_0 \\ -2A \sin \varphi W_1 \end{pmatrix}.$$

Тут диференціальний оператор \hat{T} визначений згідно з виразом:

$$\hat{T} \equiv \partial_p = \cos \varphi \frac{\partial}{\partial A} - \frac{\sin \varphi}{A} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (4.127)$$

Також можна прийняти до уваги, що $(x\partial_p - p\partial_x) = -\partial_\varphi$, $\partial_p^2 = (1/2A)\partial_A A \partial_A$ та $\partial_p p = (1/2A)\partial_A A^2$. Рівняння (4.125)-(4.126) повинні розглядатися разом з періодичними граничними умовами,

$$W_v(A, \varphi + 2\pi) = W_v(A, \varphi), \quad \vec{W}(A, \varphi + 2\pi) = \vec{W}(A, \varphi). \quad (4.128)$$

Для того, щоб отримати роз'язки даних рівнянь, виростовуємо теорію збурень та наступний розклад для вігнерівських функцій розподілу:

$$W_i(A, \varphi) = W_i^{(0)}(A, \varphi) + W_i^{(1)}(A, \varphi) + \dots, \quad (4.129)$$

($i = v, 0, 1, 2, 3$), де $W_i^{(n)}$ є n -м порядком за параметром $1/\lambda \simeq 10^{-2} - 10^{-3}$ [161] (або параметром електромеханічного зв'язку, $\Delta_d/\lambda \ll 1$).

В нульовому наближенні теорії збурень з рівняння (4.125)-(4.126) отримуємо, що функції $W_v^{(0)}(A, \varphi)$, $\vec{W}^{(0)}(A, \varphi)$ не залежать від φ . Таким чином,

$W_v^{(0)}(A, \varphi) = W_v^{(0)}(A)$ та

$$W_0^{(0)} = \frac{\varepsilon_d^2 + \Gamma_n^2 + (\Delta_d^2/2) \cos(\phi/2)}{D^2} W_v^{(0)}, \quad (4.130)$$

$$W_1^{(0)} = \kappa \frac{\Delta_d \varepsilon_d \cos(\phi/2)}{D^2} W_v^{(0)}, \quad (4.131)$$

$$W_2^{(0)} = \kappa \frac{\Delta_d \Gamma_n \cos(\phi/2)}{D^2} W_v^{(0)}, \quad (4.132)$$

$$W_3^{(0)} = -\kappa \frac{\varepsilon_d^2 + \Gamma_n^2}{D^2} W_v^{(0)}, \quad (4.133)$$

де

$$D^2 = \varepsilon_d^2 + \Gamma_n^2 + \Delta_d^2 \cos^2(\phi/2). \quad (4.134)$$

Використовуючи рівність $W_v^{(1)}(A, \varphi) = W_v^{(1)}(A)$ для першого порядку теорії збурень, рівняння (4.125), визначаємо рівноважне положення квантової точки,

$$\bar{x} = \kappa \frac{\Delta_d^2}{\lambda D} \sin(\phi/2) \cos(\phi/2). \quad (4.135)$$

В рамках другого порядку теорії збурень з рівняння (4.125) отримуємо:

$$-\frac{\partial W_v^{(2)}}{\partial \varphi} - \frac{\Delta_d}{\lambda} \sin(\phi/2) \hat{T} W_2^{(1)} + \frac{\Delta_d}{\lambda} \cos(\phi/2) A \sin \varphi \hat{T} W_1^{(0)} + \bar{x} \hat{T} W_v^{(1)} + \mathcal{L}_\gamma \{W_v^{(0)}\} = 0. \quad (4.136)$$

Наступним кроком нескладні розрахунки з усереднення даного рівняння за змінною φ ,

$$\langle W(A, \varphi) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi W(A, \varphi), \quad (4.137)$$

та підстановка рівняння (4.127) в рівняння (4.137) приводить до наступного виразу:

$$\langle \hat{T} W(A, \varphi) \rangle = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial A} (A \langle \cos \varphi W(A, \varphi) \rangle). \quad (4.138)$$

З даних рівнянь можна бачити, що перший, третій та четвертий доданки в правій частині рівняння (4.136) не дають вкладу, отже отримуємо наступне

рівняння для $W_v^{(0)}$,

$$-\frac{\Delta_0 \sin(\phi/2)}{\lambda A} \frac{\partial}{\partial A} \left(A \langle \cos \varphi W_2^{(1)} \rangle \right) + \frac{\gamma}{2A} \frac{\partial}{\partial A} \left(A^2 W_v^{(0)} \right) + \frac{\gamma(n_B + 1/2)}{2A} \frac{\partial}{\partial A} \left(A \frac{\partial W_v^{(0)}}{\partial A} \right) = 0. \quad (4.139)$$

Таким чином, для того щоб знайти замкнуте рівняння для функції $W_v^{(0)}(A)$, необхідно знайти функцію $W_2^{(1)}(A, \varphi)$. Вона може бути визначена з рівняння (4.126) яке в першому порядку теорії збурень приймає вигляд:

$$-\frac{\partial \vec{W}^{(1)}}{\partial \varphi} + 2\hat{M}\vec{W}^{(1)} = \vec{F}, \quad (4.140)$$

де \hat{W} позначає зведену вектор-функцію $\hat{W} = (W_1, W_2, W_3)^T$ так як в першому порядку теорії збурень рівняння для вігнерівської функції розподілу $W_0^{(1)}$ не зв'язане з іншими рівняннями та не відіграє ключової ролі. На додачу,

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} -\Gamma_n & \varepsilon_d & 0 \\ -\varepsilon_d & -\Gamma_n & -\Delta_d \cos(\phi/2) \\ 0 & \Delta_d \cos(\phi/2) & -\Gamma_n \end{pmatrix},$$

$$\vec{F} = -\bar{x} \hat{T} \vec{W}^{(0)} - 2\Gamma_n W_v^{(1)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\kappa \end{pmatrix} + \frac{\Delta_d}{\lambda} \sin(\phi/2) \begin{pmatrix} 2A \sin \varphi W_3^{(0)} \\ \hat{T} W_0^{(0)} \\ -2A \sin \varphi W_1^{(0)} \end{pmatrix}.$$

Система диференціальних рівнянь першого порядку, (4.140), може бути розв'язана використовуючи перетворення Фур'є, так як рівняння включають в себе функції, які є періодичними з періодом 2π , $W(A, \varphi + 2\pi) = W(A, \varphi)$,

$$W_i^{(1)}(A, \varphi) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} w(n) e^{in\varphi}, \quad w(n) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} W_i^{(1)}(\varphi) e^{-in\varphi} d\varphi. \quad (4.141)$$

Більш того, аналізуючи структуру рівняння (4.139), приходимо до висновку, що тільки перші гармоніки ($n = \pm 1$) ряду Фур'є, рівняння (4.141) дають

вклад,

$$\begin{aligned} \langle \cos \varphi W_2^{(1)}(A, \varphi) \rangle &= \sum_n w_2(n) [\langle \cos \varphi \cos(n\varphi) \rangle + i \langle \cos \varphi \sin(n\varphi) \rangle] = \\ &= \sum_n w_2(n) \begin{cases} 0, & n \neq \pm 1, \\ 1/2, & n = \pm 1; \end{cases} = \frac{1}{2}(w_2(1) + w_2(-1)) = \text{Re}w_2(1). \end{aligned} \quad (4.142)$$

Таким чином, обчислення приводять до наступної форми рівняння (4.139):

$$\mathcal{D}_1 \frac{\partial}{\partial A} \left(A^2 W_v^{(0)} \right) + \mathcal{D}_2 \frac{\partial}{\partial A} \left(A \frac{\partial W_v^{(0)}}{\partial A} \right) = 0, \quad (4.143)$$

тобто до стаціонарного рівняння Фоккера-Планка для вігнерівської функції розподілу $W_v^{(0)}(A)$, яка описує стан механічної підсистеми, з коефіцієнтами дрейфу \mathcal{D}_1 та дифузії \mathcal{D}_2 ,

$$\mathcal{D}_1 = -\kappa \frac{\Delta_d^2 \Gamma_n \varepsilon_d}{\lambda^2 D_1} \sin^2(\phi/2) + \gamma, \quad (4.144)$$

$$\mathcal{D}_2 = \frac{\Delta_d^2 \Gamma_n C}{\lambda^2 D_1} \sin^2(\phi/2) + \gamma (n_B + 1/2). \quad (4.145)$$

У цьому рівнянні,

$$D^2 = \varepsilon_d^2 + \Gamma_n^2 + \Delta_d^2 \cos^2(\phi/2), \quad (4.146)$$

$$D_1 = (D^2 - 1/4)^2 + \Gamma_n^2, \quad (4.147)$$

$$C = \frac{(D^2 + 1/4)(D^2 + \varepsilon_d^2 + \Gamma_n^2) - 4\Delta_d^2 \Gamma_n^2 \cos^2(\phi/2)}{4D^2}. \quad (4.148)$$

Розв'язок рівняння (4.143) при малих (порівняно з λ) значеннях амплітуди має вигляд функції розподілу Больцмана,

$$W_v^{(0)}(x, p) = (\beta/\pi) \exp[-\beta(x^2 + p^2)], \quad (4.149)$$

де коефіцієнт $\beta = \mathcal{D}_1/2\mathcal{D}_2$.

Рівняння (4.144), (4.145), визначають рамки допустимості нашого розгляду. З рівнянь (4.144)-(4.148) випливає, що в області, яка пов'язана з максимальним ефектом охолодження, як ми покажемо в наступному пункті, 4.2.3,

(діапазон значень параметрів (ϕ, ε_d) біля точки $\varepsilon_d = 1/2, \phi = \pi$) величини ширини рівня обмежені знизу, $\Gamma_n \geq \Gamma_n^{(0)} = \Delta_d^2/\lambda^2$.

4.2.3. Охолодження до основного стану наномеханічних коливань.

На сьогодні наномеханічні резонатори зі значним значенням добротності досягаються в експериментах [164, 171]. Для такого випадку електромеханічний зв'язок домінує над зв'язком з термодинамічним оточенням, $1/\lambda \gg \gamma$. Отже, розглянемо випадок $\gamma \rightarrow 0$. З рівнянь (4.144)-(4.145) випливає, що знак коефіцієнта β визначається знаком $\kappa\varepsilon_d$. Якщо $\kappa\varepsilon_d$ позитивний, то β стає від'ємним. Така ситуація відповідає *механічній нестійкості* системи і вона обговорювалася в роботі [3], а також підрозділ 4.1. Надалі ми розглядаємо вібронний (стійкий) режим, коли $\kappa = -1, \varepsilon_d > 0$ (те саме для $\kappa = +1, \varepsilon_d < 0$).

Коефіцієнт β визначає ймовірність P_0 того, що система знаходиться в основному стані. В термінах вігнерівської функції розподілу ця ймовірність має вигляд:

$$P_0 = 2\pi \int dx dp W_v^{(0)}(x,p) W_0(x,p) = \frac{2\beta}{\beta + 1}, \quad (4.150)$$

де

$$W_0(x,p) = (1/\pi) \exp[-(x^2 + p^2)] \quad (4.151)$$

є функцією Вігнера основного стану гармонічного осцилятора. Зауважимо, що згідно з принципом невизначеності Гейзенберга максимальне значення параметра β дорівнює одиниці, тобто $\beta < \beta_{\max} = 1$.

Залежності ймовірності P_0 як функції різниці фаз ϕ для різних значень енергетичного рівня квантової точки ε_d наведено на рис. 4.13. . Можемо бачити, що максимальний ефект охолодження має місце в області $\phi \simeq \pi, \varepsilon_d \simeq 1/2$, ступінь охолодження досягає значних значень, $P_0 \simeq 0.95$. Його можна оцінити так:

$$P_0 = \frac{2\varepsilon_d}{\varepsilon_d + \varepsilon_d^2 + \Gamma_n^2 + 1/4}, \quad (4.152)$$

і, отже, зауважимо, що максимальне охолодження відбувається в антиадиабатичному режимі, $\Gamma_n \simeq 0.2 < 1$. Точніше, екстремуми функції β мають такий

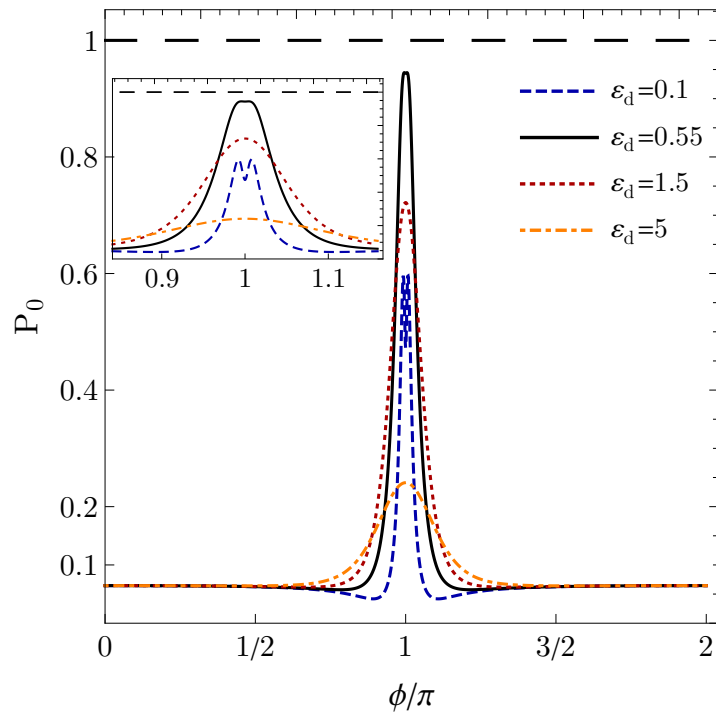


Рис. 4.13 Залежність ймовірності знаходження в основному стані P_0 від різниці фаз між надпровідними берегами ϕ для різних значень енергетичного рівня квантової точки: $\varepsilon_d = 0.1$ (синя штрихова крива), 0.56 (чорна суцільна), 1.5 (червона пунктирна), 5 (помаранчева пунктирна). Чорною пунктирною лінією позначено максимальне значення ймовірності. Вставка: збільшений центральний регіон, де охолодження досягає максимуму при $\phi = \pi$. Інші параметри: $\Gamma_n = 0.2$; $\Delta_d = 25$; $\lambda = 100$; $\gamma = 10^{-5}$, $T = 15\hbar\omega$.

ВИГЛЯД:

$$\phi_{extr,n} = \pi n; \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (4.153)$$

$$\phi_{extr,\pm} = 2 \arccos \frac{\pm \sqrt{\sqrt{(\varepsilon_d^2 + \Gamma_n^2)(16\Gamma_n^2 + 1)} - 2(\varepsilon_d^2 + \Gamma_n^2)}}{\sqrt{2}\Delta_d}, \quad (4.154)$$

і пов'язані з тими, що зображені на рис. 4.13.

Додатково обчислимо розподіл ймовірностей P_n . Ймовірність знайти механічну підсистему у стані n визначається як:

$$P_n = 2\pi \int dx dp W_v^{(0)}(x,p) W_n(x,p), \quad (4.155)$$

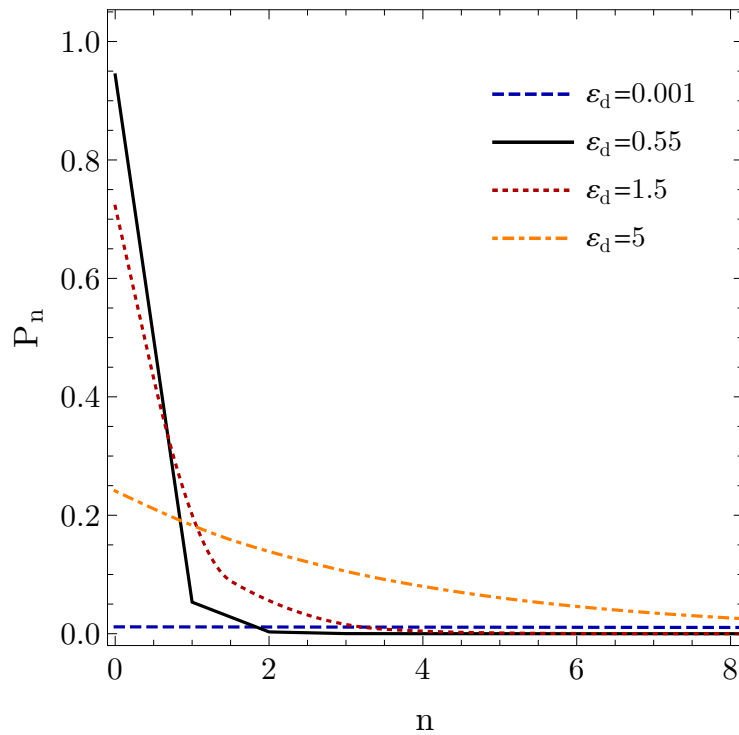


Рис. 4.14 Розподіл ймовірностей P_n для різних значень енергетичного рівня квантової точки: $\varepsilon_d = 0.001$ (синя пунктирна крива), 0.56 (чорна товста), 1.5 (червона пунктирна), 5 (помаранчева пунктирна) для $\phi = \pi$. Чорною пунктирною лінією позначено максимальне значення ймовірності.

Інші параметри такі ж, як на рис. 4.13:

$$\Gamma_n = 0.2; \Delta_d = 25; \lambda = 100; \gamma = 10^{-5}, T = 15\hbar\omega.$$

де тепер $W_n(x,p)$ позначає функцію Вінгера гармонічного осцилятора, що відповідає n -му фоківському стану,

$$W_n(x,p) = \frac{(-1)^n}{\pi} e^{-(x^2+p^2)} L_n[2(x^2 + p^2)], \quad (4.156)$$

де $L_n(x)$ позначає n -й поліном Лагерра. Таким чином, $n = 0$ ($L_0(x) = 1$) дає окремий випадок рівняння (4.151). Нескладні обчислення приводять до наступного виразу для ймовірності P_n :

$$P_n = \frac{2\beta(1-\beta)^n}{(1+\beta)^{n+1}} = \left(\frac{1-\beta}{1+\beta}\right)^n P_0, \quad (4.157)$$

де P_0 визначається рівнянням (4.150).

4.2.4. Немонотонна поведінка залежностей електричного струму.

Ефект охолодження механічних коливань можна можна дослідити за допомогою вимірювань постійного струму. Функція розподілу Вігнера дає можливість обчислювати різні фізичні величини. Електричний струм через систему можна визначити стандартним чином як зміну числа електронів у нормальному провіднику, див. рівняння (4.78). Таким чином, можна отримати наступний вираз для електричного струму в термінах функцій Вігнера, аналогічний рівнянню (4.80),

$$I/I_0 = \kappa \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dAA[W_v(A,\varphi) + \kappa W_3(A,\varphi)], \quad (4.158)$$

де $I_0 = e\Gamma_n/\hbar$. У нульовому порядку теорії збурень за параметром електро-механічного зв'язку, використовуючи рівняння (4.130) і (4.149), отримаємо вираз для статичного струму (див. перший член у правій частині рівняння (4.1.8)),

$$I_n^{(0)} = I_0 \frac{\Delta_d^2 \cos^2(\phi/2)}{\Gamma_n^2 + \varepsilon_d^2 + \Delta_d^2 \cos^2(\phi/2)}. \quad (4.159)$$

З цього рівняння бачимо, що член $I_n^{(0)}$ дорівнює нулю при $\phi = \pi$, незважаючи на те, що саме в цьому режимі нас найбільше цікавить максимальний ефект охолодження. Тому потрібно розглянути поправки наступного порядку. З рівняння (4.158) видно, що для знаходження членів наступного порядку збурення необхідно знати функції $W_v^{(1),(2)}$ і $W_3^{(1),(2)}$. Ця обставина призводить до вимоги включення в рівняння (4.123),(4.124) внеску з наступного порядку теорії збурень. Однак цього можна не робити, оскільки в силу геометрії нашої системи нормальний струм дорівнює сумі парціальних струмів, що відповідають надпровідним берегам, $I_n = I_1^{(s)} + I_2^{(s)}$. Тут струм у надпровідному електроді j визначається зміною числа куперівських пар і може бути представлений у вигляді:

$$I_j^{(s)} = \frac{2e}{\hbar} \text{Tr} \left(\frac{\partial H_d^{\text{eff}}}{\partial \phi_j} \hat{\rho}_d \right), \quad (4.160)$$

де слід врахувати, що у більш загальному випадку вираз для параметра порядку КТ має вигляд:

$$\Delta_d(x,\phi) = \frac{1}{2} \Delta_d (e^{-x/\lambda - i\phi_1} + e^{x/\lambda - i\phi_2}). \quad (4.161)$$

Таким чином,

$$I_j = i e \omega \Delta_d \text{Tr} \left\{ e^{(-1)^j x/\lambda} (e^{i\phi_j} \rho_{02} - e^{-i\phi_j} \rho_{20}) \right\}. \quad (4.162)$$

В термінах вігнерівських функцій розподілу вираз для електричного струму приймає вигляд:

$$I_n = e \omega \int dx dp [\Delta_d \sin(\phi/2) \sinh(x/\lambda) W_1 + \Delta_d \cos(\phi/2) \cosh(x/\lambda) W_2], \quad (4.163)$$

та може бути зручно записаний для полярних координат (представлення кут-дія (з *англ.* — angle-action representation)) до другого порядку теорії збурень як:

$$I_n = e \omega \Delta_d \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dA A \left\{ \sin(\phi/2) \left[\frac{A \sin \varphi}{\lambda} W_1^{(0)} + \frac{A \sin \varphi}{\lambda} W_1^{(1)} \right] + \cos(\phi/2) \left[W_2^{(0)} + W_2^{(2)} + \frac{A^2 \sin^2 \varphi}{2\lambda^2} W_2^{(0)} \right] \right\}. \quad (4.164)$$

З цього рівняння можна знайти, що члени нульового порядку дають рівняння (4.159), внесок поправок першого порядку дорівнює нулю, а ненульовий внесок другого порядку (другий член в інтегралі) при $\phi = \pi$ дорівнює,

$$I_n^{(2)} = e \omega 2\pi \frac{\Delta_d}{\lambda} \int_0^\infty dA A^2 \text{Im} w_1(1). \quad (4.165)$$

Таким чином, при $\phi = \pi$ струм визначається механічними коливаннями і в головному порядку (другому) за параметром електромеханічного зв'язку він має вигляд:

$$I_n = I_0 \left(\frac{\Delta_d}{\lambda} \right)^2 \frac{(\Gamma_n^2 + \varepsilon_d^2 + 1/4) \langle x^2 \rangle + \varepsilon_d/2}{(\Gamma_n^2 + \varepsilon_d^2 - 1/4)^2 + \Gamma_n^2}, \quad (4.166)$$

де $\langle \dots \rangle$ позначають середні значення у фазовому просторі з $W_v^{(0)}(x, p)$ і

$$\langle x^2 \rangle = (2\beta)^{-1}. \quad (4.167)$$

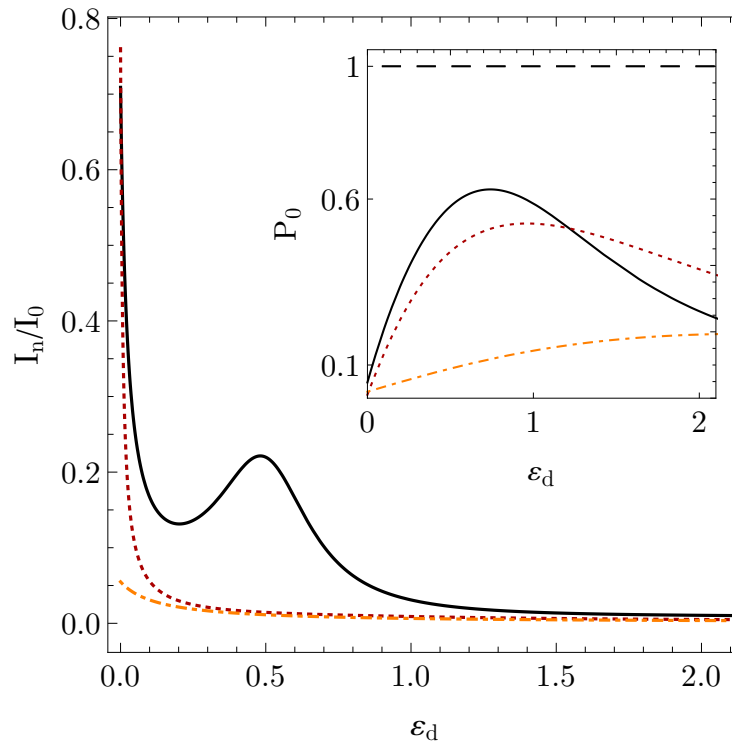


Рис. 4.15 Залежність електричного струму (нормованого до I_0) від енергії квантового рівня точки ε_d при $\phi = \pi$ для різних значень Γ_n : $\Gamma_n = 0.2$ (чорна товста крива), $\Gamma_n = 1$ (червона пунктирна), $\Gamma_n = 3$ (помаранчева помаранчева пунктирна). Вставка: залежність ймовірності зайняття основного стану від енергії рівня квантової точки. Інші параметри: $\Delta_d = 5, \lambda = 50, \gamma = 5 \times 10^{-5}, T = 15$.

На рисунку 4.15 представлена залежність електричного струму від енергії рівня квантової точки ε_d для різних значень Γ_n при $\phi = \pi$. Ми бачимо яскраво виражене падіння струму, що відповідає режиму охолодження, як можна помітити на вставці, де в цьому випадку відбувається зростання ймовірності знаходження в основному стані. Ця максимально-мінімальна структура зникає в режимі нагрівання ($P_0 \lesssim 0.5$). Також можна бачити максимум струму у випадку $2\varepsilon_d = \Gamma_n$ при $\Gamma_n \rightarrow 0$. Він є резонансним піком і тому має відмінну від охолодження природу і обговорюється, наприклад, в роботі [151] для гібридного N-QD-S приладу. Таким чином, наведені вище факти можуть слугувати критерієм того, що система знаходиться в режимі охолодження.

Висновки

У цьому розділі розглянуто наномеханічну систему, яка включає в себе вуглецеву нанотрубку, підвішену між двома нормальними електродами та

знаходиться під дією постійної тягнучої напруги. Нанотрубка, яка розглядається як однорівнева квантова точка, здійснює згинальні коливання в зазорі між двома надпровідними електродами. Зв'язок між електронними та механічними ступенями свободи виникає за рахунок надпровідного ефекту близькості, який проявляється у появі залежного від положення параметра порядку квантової точки.

З одного боку, в першому підрозділі показано, що в такій системі статична пряма конфігурація нанотрубки є *нестійкою* відносно виникнення самопідтримних згинних коливань у широкому діапазоні параметрів, якщо між нормальним і надпровідним електродами прикладена тягнуча напруга. Показано, що виникнення цієї механічної нестійкості вирішальним чином залежить від напрямку тягнучої напруги та відносного положення рівня КТ. Показано також, що поява самопідтримних механічних коливань сильно впливає на постійний струм через систему, що приводить до транзисторного і діодного ефектів. Останні можуть бути використані для безпосереднього експериментального спостереження прогнозованих явищ.

З іншого боку, у другому підрозділі, використовуючи наближення матриці густини, встановлено, що при певному напрямку прикладеної напруги зміщення стаціонарний стан механічної підсистеми має вигляд больцманівської функції розподілу. Більш того, показано, що ймовірність знаходження системи в основному стані дорівнює $P_0 \lesssim 1$. Тобто, можна говорити про режим охолодження системи. До того ж, ймовірність суттєво залежить від різниці фаз та відносного положення енергетичного рівня КТ. Також продемонстровано, що поведінка надійності постійного електричного струму відображає стаціонарний стан системи.

Таким чином, показана можливість керування режимом роботи приладу, змінюючи зміщення і напругу на затворі та запропонована схема для експериментального виявлення прогнозованих ефектів.

Основні результати цього розділу опубліковані в роботах [3, 4, 9, 10].

ВИСНОВКИ

В роботах, на яких базується дана дисертаційна робота, досліджуються явища, які виникають за рахунок електромеханічної взаємодії в наноструктурах на основі рухомої квантової точки.

Основні результати полягають у наступному:

1. Теоретично досліджено транспорт електронів через одномолекулярний транзистор з когерентними вібронами. Показано, що вольт-амперні характеристики такого нанорозмірного транзистора є ступінчастими функціями тягнутої напруги, подібно до випадку поляронних сходинок. Однак, зняття цієї індукованої когерентними коливаннями блокади відбувається за напруг, значно менших за ті, що передбачаються теорією Франка-Кондона.
2. Показана можливість генерації квантової запутаності між зарядовими станами кубіта та механічними когерентними станами в наноелектромеханічній системі. Запропоновано експериментально простий спосіб (протокол) маніпуляції тягнутою напругою, який приводить до появи запутаних станів, що включають так звані "cat states".
3. Теоретично досліджено нетривіальну поведінку гібридного наноелектромеханічного пристрою, який включає в себе нормальний та надпровідні електроди. Описані явища виникають завдяки принципово новому типу електромеханічного зв'язку, який базується на квантовій делокалізації куперівських пар. Теоретично знайдена область існування механічної нестійкості в такій системі. До того ж, нестійкість призводить до генерації самопідтримних механічних коливань за рахунок ефекту самонасичення.
4. Досліджено режим, в якому стаціонарний стан механічної підсистеми гібридної наноелектромеханічної системи має вигляд больцманівської функції розподілу, що визначається параметрами пристрою. Показано, що в цьому випадку ймовірність знаходження системи в основному стані є достатньо великою, що відповідає ефекту охолодження в системі. Більш того, має місце охолодження до основного стану.
5. Теоретично показано, що механічні коливання в гібридному наноелектромеханічному пристрої сильно впливають на постійний електри-

чний струм через таку наносистему. Останнє дозволяє експериментально дослідити наявність та характеристики предбачених самопідтримних осциляцій, а також ефект охолодження (зокрема, до основного стану).

Подяки

Здобувач висловлює подяку Сергію Івановичу Кулінічу та Іллі Валентиновичу Криве за чудове наукове керівництво та цінні поради. Також здобувач красно дякує за численні обговорення та підтримку Леоніду Юрійовичу Гореліку.

Здобувач висловлює теплі слова подяки Сергію Миколайовичу Шевченко за всесторонню підтримку.

Також здобувач від чистого серця висловлює глибоку подяку Ользі Львівській та Антону Парафіло, а також Анастасії Шкоп, Хі Чул Парку та Роберту Ісааковичу Шехтеру за плідні обговорення, співпрацю і корисні та практичні поради.

Не меншою мірою здобувач висловлює щирі подяку Сергію Коняхіну за всебічну допомогу.

Окрім цього, здобувач дякує за підтримку відділ 26 теоретичної фізики під керівництвом д. ф.-м.н. В.В. Славіна Фізико-технічного інституту низьких температур імені Б.І. Веркіна Національної академії наук України, зокрема вченого секретаря інституту, канд. ф.-м. наук О.М. Калиненко (Харків, Україна), а також Центр теоретичної фізики складних систем під керівництвом проф. Сергія Флаха Інституту фундаментальних наук (Теджон, Республіка Корея).

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] **O.M. Bahrova**, S.I. Kulinich та I.V. Krive. “Polaronic effects induced by non-equilibrium vibrons in a single-molecule transistor”. *Low Temperature Physics* **46.7** (2020), с. 671—676. DOI: 10.1063/10.0001362. arXiv: 2111.15216 [cond-mat.mes-hall].
- [2] **O.M. Bahrova**, L.Y. Gorelik та S.I. Kulinich. “Entanglement between charge qubit states and coherent states of nanomechanical resonator generated by ac Josephson effect”. *Low Temp. Phys.* **47.4** (2021), с. 287—293. DOI: 10.1063/10.0003739. arXiv: 2112.00204 [cond-mat.mes-hall].
- [3] **O. M. Bahrova** та ін. “Nanomechanics driven by the superconducting proximity effect”. *New Journal of Physics* **24.3** (2022), с. 033008. DOI: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/ac5758>.
- [4] **O.M. Bahrova** та ін. “Cooling of nanomechanical vibrations by Andreev injection”. *Low Temp. Phys. [Fiz. Nizk. Temp. vol.48, No.6, pp. 535-541]* **48.6** (2022), с. 476—482. DOI: 10.1063/10.0010443.
- [5] **O.M. Bahrova** та 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*. Kharkiv, 2018, с. 3.
- [6] **O. M. Bahrova**, S. I. Kulinich та I. V. Krive. “Polaronic effects induced by coherent vibrons in a single-molecule transistor”. *I International Advanced Study Conference Condensed matter & Low Temperature Physics*. Ukraine, Kharkiv, с. 183.
- [7] A.D. Shkop та **O.M. Bahrova**. “Coulomb and vibration effects in spin-polarized current through a single-molecule transistor”. *XI Conference of Young Scientists “Problems of Theoretical Physics”*. Kyiv, Ukraine, с. 15—16.
- [8] **O.M. Bahrova**, L.Y. Gorelik та 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*. Kharkiv, Ukraine, с. 201.

- [9] **O.M. Bahrova** та ін. “Self-sustained mechanical oscillations promoted by superconducting proximity effect”. *The International Symposium on Novel Materials and quantum Technologies*, с. 134.
- [10] **O.M. Bahrova** та ін. “Nanomechanics provoked by Andreev injection”. *29th International Conference on Low Temperature Physics*.
- [11] I. V. Krive та ін. “Resonant tunneling of electrons in quantum wires (Review)”. *Low Temperature Physics* **36.2** (2010), с. 119–141. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3319350>.
- [12] Hermann Grabert та Michel H. Devoret, ред. *Single Charge Tunneling. Coulomb Blockade Phenomena In Nanostructures*. Springer US, 1992, с. 335. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-1-4757-2166-9>.
- [13] Supriyo Datta. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge, UK New York: Cambridge University Press, 1997. ISBN: 9780521416047.
- [14] Yuli Nazarov та Yaroslav Blanter. *Quantum Transport*. Cambridge University Press, 2013. 590 с. ISBN: 978-0-521-83246-5.
- [15] Dmitry Ryndyk. *Theory of Quantum Transport at Nanoscale*. Springer International Publishing, 2019. 260 с. ISBN: 9783319795775.
- [16] R. Landauer. “Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction”. *IBM Journal of Research and Development* **1.3** (1957), с. 223–231. DOI: 10.1147/rd.13.0223.
- [17] M. Büttiker. “Role of quantum coherence in series resistors”. *Physical Review B* **33.5** (1986), с. 3020–3026. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.3020>.
- [18] Henk van Houten та Carlo Beenakker. “Quantum Point Contacts”. *Physics Today* **49.7** (1996), с. 22–27. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.881503>.
- [19] Москалец М. В. *Основы мезоскопической физики: Учебное пособие*. Харьков: НТУ «ХПИ», 2010, с. 180.
- [20] Hongkun Park та ін. “Nanomechanical oscillations in a single- C_{60} transistor”. *Nature* **407.6800** (2000), с. 57–60. DOI: 10.1038/35024031.
- [21] S. C. ten Kate та ін. “Large even-odd spacing and g -factor anisotropy in PbTe quantum dots” (2022). DOI: 10.48550/arXiv.2205.06753.

- [22] Renaud Leturcq та ін. “Franck–Condon blockade in suspended carbon nanotube quantum dots”. *Nature Physics* **5.5** (2009), с. 327–331. DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys1234>.
- [23] Dongsung T. Park та ін. “Significant energy relaxation of quantum dot emitted hot electrons”. *Physical Review Research* **3.3** (2021), с. 033015. DOI: [10.1103/PhysRevResearch.3.033015](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.3.033015).
- [24] Xinhe Wang та ін. “Stressed carbon nanotube devices for high tunability, high quality factor, single mode GHz resonators”. *Nano Research* **11.11** (2018), с. 5812–5822. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12274-018-2085-x>.
- [25] F. R. Braakman та ін. “Long-distance coherent coupling in a quantum dot array”. *Nature Nanotechnology* **8.6** (2013), с. 432–437. DOI: <https://doi.org/10.1038/nnano.2013.67>.
- [26] Gianluca Rastelli та Michele Governale. “Single atom laser in normal-superconductor quantum dots”. *Physical Review B* **100.8** (2019), с. 085435. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.085435>.
- [27] Wen-Yao Wei та ін. “Observation of Collective Coulomb Blockade in a Gate-controlled Linear Quantum-dot Array” (2016). DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1603.04625>.
- [28] Yuli V. Nazarov, ред. *Quantum Noise in Mesoscopic Physics*. Springer Netherlands, 2003, с. 524. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-94-010-0089-5>.
- [29] G. Rastelli та ін. “Interplay of magneto-elastic and polaronic effects in electronic transport through suspended carbon-nanotube quantum dots”. *Comptes Rendus Physique* **13.5** (2012), с. 410–425. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.crhy.2012.03.001>.
- [30] Yigal Meir та Ned S. Wingreen. “Landauer formula for the current through an interacting electron region”. *Physical Review Letters* **68.16** (1992), с. 2512–2515. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.68.2512>.
- [31] Antti-Pekka Jauho, Ned S. Wingreen та Yigal Meir. “Time-dependent transport in interacting and noninteracting resonant-tunneling systems”. *Physical Review B* **50.8** (1994), с. 5528–5544. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.5528>.

- [32] Ned S. Wingreen, Antti-Pekka Jauho ta Yigal Meir. “Time-dependent transport through a mesoscopic structure”. *Physical Review B* **48.11** (1993), c. 8487–8490. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.48.8487>.
- [33] Ned S. Wingreen, Karsten W. Jacobsen ta John W. Wilkins. “Inelastic scattering in resonant tunneling”. *Physical Review B* **40.17** (1989), c. 11834–11850. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.11834>.
- [34] L.I. Glazman ta R.I. Shekhter. “Inelastic resonant tunneling of electrons through a potential barrier. Sov.Phys. JETP **67,163**”. *Sov. Phys. JETP* **67.1** (1988), c. 163.
- [35] S. M. Lindsay ta M. A. Ratner. “Molecular Transport Junctions: Clearing Mists”. *Advanced Materials* **19.1** (2007), c. 23–31. DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.200601140>.
- [36] Michael Galperin, Mark A. Ratner ta Abraham Nitzan. “Molecular transport junctions: vibrational effects”. *Journal of Physics: Condensed Matter* **19.10** (2007), c. 103201. DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/10/103201>.
- [37] Yu. G. Naidyuk ta I. K. Yanson. *Point-Contact Spectroscopy*. Springer New York, 2005. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-1-4757-6205-1>.
- [38] Pawel Utko ta ih. “Nanoelectromechanical coupling in fullerene peapods probed by resonant electrical transport experiments”. *Nature Communications* **1.1** (2010). DOI: [10.1038/ncomms1034](https://doi.org/10.1038/ncomms1034).
- [39] Menno Poot ta Herre S.J. van der Zant. “Mechanical systems in the quantum regime”. *Physics Reports* **511.5** (2012), c. 273–335. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2011.12.004>.
- [40] B. Babić ta ih. “Intrinsic Thermal Vibrations of Suspended Doubly Clamped Single-Wall Carbon Nanotubes”. *Nano Letters* **3.11** (2003), c. 1577–1580. DOI: <https://doi.org/10.1021/nl0344716>.
- [41] Jens Koch ta Felix von Oppen. “Franck-Condon Blockade and Giant Fano Factors in Transport through Single Molecules”. *Physical Review Letters* **94.20** (2005), c. 206804. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.206804>.

- [42] L. G. Lang та Y. A. Firsov. “Kinetic Theory of Semiconductors with Low Mobility”. *Sov. Phys. JETP* **16** (1963), c. 1301.
- [43] A.D. Shkop **O. M. Bahrova**, S. I. Kulinich та I. V. Krive. “Interplay of Vibration and Coulomb Effects in Transport of Spin-Polarized Electrons in a Single-Molecule Transistor”. *Superlattices and Microstructures* **137** (2021), c. 106353. DOI: 10.1016/j.spmi.2019.106356. arXiv: 2103.12001 [cond-mat.mes-hall].
- [44] D. Fedorets. “Quantum description of shuttle instability in a nanoelectromechanical single-electron transistor”. *Physical Review B* **68.3** (2003), c. 033106. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.033106.
- [45] Tomáš Novotný, Andrea Donarini та Antti-Pekka Jauho. “Quantum Shuttle in Phase Space”. *Physical Review Letters* **90.25** (2003), c. 256801. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.256801>.
- [46] Urban Lundin та Ross H. McKenzie. “Temperature dependence of polaronic transport through single molecules and quantum dots”. *Physical Review B* **66.7** (2002), c. 075303. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.075303>.
- [47] Gerald D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Springer US, 2013. 785 c. ISBN: 978-1-4757-5714-9. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-1-4757-5714-9>.
- [48] G. A. Skorobagatko та ін. “Magnetopolaronic effects in electron transport through a single-level vibrating quantum dot”. *Low Temperature Physics* **37.12** (2011), c. 1032–1037. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3674185>.
- [49] I. M. Ryzhik I. S. Gradshteyn. *Table of Integrals, Series, and Products*. Boston: Elsevier Science & Techn., 2014. 1206 c. ISBN: 9781483265643.
- [50] Felix von Oppen та Jens Koch. “Novel Quantum Transport Effects in Single-Molecule Transistors”. *Advances in Solid State Physics*. Springer Berlin Heidelberg, 2008, c. 99–109. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-540-38235-5_8.
- [51] A. N. Pasupathy та ін. “Vibration-Assisted Electron Tunneling in C_{140} Transistors”. *Nano Letters* **5.2** (2005), c. 203–207. DOI: 10.1021/nl048619c.

- [52] Yu D. Zubov та ін. “Transport properties and enhanced figure of merit of quantum dot-based spintronic thermoelectric device”. *Journal of Physics Condensed Matter* **30.31**, 315303 (2018), с. 315303. DOI: 10.1088/1361-648X/aacc07.
- [53] A. D. Shkop та **O. M. Bahrova**. “Effects of magnetopolaronic blockade in transport of spin-polarized electrons”. *IX International Conference on Low Temperature Physics*. Kharkiv, Ukraine.
- [54] A. D. Shkop та **O. M. Bahrova**. “Effects of the Franck-Condon blockade in tunneling of spin-polarized electrons in a molecular transistor”. *Journal of V.N. Karazin Kharkiv National University, series "Physics"* **27** (2018), с. 53.
- [55] A.D. Shkop, **O.M. Bahrova** та I.V. Krive. “Effects of Coulomb interaction and Franck-Condon blockade in tunneling of spin-polarized electrons in a molecular transistor”. *X International Conference on Low Temperature Physics*. Kharkiv, Ukraine, с. 155.
- [56] A. D. Shkop. “Thermoelectric Effects in Tunneling of Spin-Polarized Electrons in a Molecular Transistor”. *Journal of Low Temperature Physics* **208.3-4** (2022), с. 248–270. DOI: 10.1007/s10909-022-02758-0.
- [57] Jonas N. Pedersen, Jesper Q. Thomassen та Karsten Flensberg. “Noncollinear magnetoconductance of a quantum dot”. *Physical Review B* **72.4** (2005), с. 045341. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.045341>.
- [58] D. M. Kennes, D. Schuricht та V. Meden. “Efficiency and power of a thermoelectric quantum dot device”. *EPL (Europhysics Letters)* **102.5** (2013), с. 57003. DOI: <https://doi.org/10.1209/0295-5075/102/57003>.
- [59] Jaekuk U. Kim, Ilya V. Krive та Jari M. Kinaret. “Nonequilibrium Plasmons in a Quantum Wire Single-Electron Transistor”. *Physical Review Letters* **90.17** (2003), с. 176401. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.176401>.
- [60] A. Mitra, I. Aleiner та A. J. Millis. “Phonon effects in molecular transistors: Quantal and classical treatment”. *Physical Review B* **69.24** (2004), с. 245302. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.245302>.

- [61] Weici Liu та ін. “Full Counting Statistics of Electrons through Interaction of the Single Quantum Dot System with the Optical Field”. *Nanomaterials* **9.3** (2019), с. 394. DOI: <https://doi.org/10.3390/nano9030394>.
- [62] Weici Liu та ін. “Negative Differential Conductance Assisted by Optical Fields in a Single Quantum Dot with Ferromagnetic Electrodes”. *Nanomaterials* **9.6** (2019), с. 863. DOI: <https://doi.org/10.3390/nano9060863>.
- [63] D. Boese та H. Schoeller. “Influence of nanomechanical properties on single-electron tunneling: A vibrating single-electron transistor”. *Europh. Lett.* **54.5** (2001), с. 668—674. DOI: <https://doi.org/10.1209/epl/i2001-00367-8>.
- [64] Kevin D. McCarthy, Nikolay Prokof'ev та Mark T. Tuominen. “Incoherent dynamics of vibrating single-molecule transistors”. *Physical Review B* **67.24** (2003), с. 245415. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.245415>.
- [65] Yiwen Chu та ін. “Creation and control of multi-phonon Fock states in a bulk acoustic-wave resonator”. *Nature* **563.7733** (2018), с. 666—670. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0717-7>.
- [66] Г. Бейтмен та А. Эрдейи. *Высшие трансцендентные функции*. Т. 2. Москва: Наука, 1966, с. 297.
- [67] Jean-Pierre Gazeau. *Coherent States in Quantum Physics*. Wiley, 2009. DOI: [10.1002/9783527628285](https://doi.org/10.1002/9783527628285).
- [68] A.I. Baz, Y.B. Zeldovich та A.M. Perelomov. *Scattering Reactions and Decays in Non-Relativistic Quantum Mechanics*. Jerusalem: Israel Programm for Scientific Transaction, 1969.
- [69] A. Zazunov, D. Feinberg та T. Martin. “Phonon Squeezing in a Superconducting Molecular Transistor”. *Physical Review Letters* **97.19** (2006), с. 196801. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.196801>.
- [70] S. M. Girvin. “Schrodinger Cat States in Circuit QED”. *arXiv:1710.03179 [quant-ph]* (2017). DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1710.03179>.
- [71] K. L. Ekincia та M. L. Roukes. “Nanoelectromechanical systems”. *Review of Scientific Instruments* **76.6** (2005), с. 061101. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1927327>.

- [72] Y. Nakamura, Yu. A. Pashkin та J. S. Tsai. “Coherent control of macroscopic quantum states in a single-Cooper-pair box”. *Nature* **398**.6730 (1999), c. 786—788. DOI: <https://doi.org/10.1038/19718>.
- [73] G. Wendin та V. S. Shumeiko. “Quantum bits with Josephson junctions (Review Article)”. *Low Temperature Physics* **33**.9 (2007), c. 724—744. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2780165>.
- [74] Yu. A. Pashkin та ін. “Josephson charge qubits: a brief review”. *Quantum Information Processing* **8**.2-3 (2009), c. 55—80. DOI: [10.1007/s11128-009-0101-5](https://doi.org/10.1007/s11128-009-0101-5).
- [75] Antti Ranni та ін. “Real-time observation of Cooper pair splitting showing strong non-local correlations”. *Nature Communications* **12**.1 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-021-26627-8>.
- [76] Bas Hensen та ін. “A silicon quantum-dot-coupled nuclear spin qubit”. *Nature Nanotechnology* **15**.1 (2019), c. 13—17. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41565-019-0587-7>.
- [77] E. Dupont-Ferrier та ін. “Coherent Coupling of Two Dopants in a Silicon Nanowire Probed by Landau-Zener-Stückelberg Interferometry”. *Physical Review Letters* **110**.13 (2013), c. 136802. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.136802>.
- [78] Oleh V. Ivakhnenko, Sergey N. Shevchenko та Franco Nori. “Nonadiabatic Landau-Zener-Stückelberg-Majorana transitions, dynamics, and interference”. *Physics Reports* **995** (січ. 2023), c. 1—89. DOI: [10.1016/j.physrep.2022.10.002](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2022.10.002).
- [79] Yan Xue та ін. “Split-ring polariton condensates as macroscopic two-level quantum systems”. *Physical Review Research* **3**.1 (2021), c. 013099. DOI: [10.1103/PhysRevResearch.3.013099](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.3.013099).
- [80] Sanjib Ghosh та Timothy C. H. Liew. “Quantum computing with exciton-polariton condensates”. *npj Quantum Information* **6**.1 (2020). DOI: <https://doi.org/10.1038/s41534-020-0244-x>.
- [81] S.N. Shevchenko, S. Ashhab та Franco Nori. “Landau-Zener-Stückelberg interferometry”. *Physics Reports* **492**.1 (2010), c. 1—30. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2010.03.002>.

- [82] Sergey N. Shevchenko. *Mesoscopic Physics meets Quantum Engineering*. WSPC, 2019. 176 c. ISBN: 978-981-12-0139-4. DOI: <https://doi.org/10.1142/11310>.
- [83] Sahel Ashhab, Olga A. Ilinskaya та Sergey N. Shevchenko. “Nonlinear Landau-Zener-Stückelberg-Majorana problem. in preparation”. *Physical Review A* **106.6** (груд. 2022), с. 062613. DOI: [10.1103/PhysRevA.106.062613](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.106.062613).
- [84] A. V. Parafilo та M. N. Kiselev. “Landau–Zener transitions and Rabi oscillations in a Cooper-pair box: beyond two-level models”. *Low Temperature Physics* **44.12** (2018), с. 1325–1330. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5078628>.
- [85] S. Schmid, L. Guillermo Villanueva та M. L. RoukesLee. *Fundamentals of Nanomechanical Resonators*. Springer International Publishing, 2016. 184 c. ISBN: 9783319286891.
- [86] K. J. Satzinger та ін. “Quantum control of surface acoustic-wave phonons”. *Nature* **563.7733** (2018), с. 661–665. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0719-5>.
- [87] A. Bienfait та ін. “Phonon-mediated quantum state transfer and remote qubit entanglement”. *Science* **364.6438** (2019), с. 368–371. DOI: [10.1126/science.aaw8415](https://doi.org/10.1126/science.aaw8415).
- [88] Yiwen Chu та ін. “Quantum acoustics with superconducting qubits”. *Science* **358.6360** (2017), с. 199–202. DOI: [10.1126/science.aao1511](https://doi.org/10.1126/science.aao1511).
- [89] M.-H. Chou та ін. “Measurements of a quantum bulk acoustic resonator using a superconducting qubit”. *Applied Physics Letters* **117.25** (2020), с. 254001. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0023827>.
- [90] M. D. LaHaye та ін. “Nanomechanical measurements of a superconducting qubit”. *Nature* **459.7249** (2009), с. 960–964. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature08093>.
- [91] L. Tian. “Entanglement from a nanomechanical resonator weakly coupled to a single Cooper-pair box”. *Physical Review B* **72.19** (2005), с. 195411. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.195411>.

- [92] L. Y. Gorelik та ін. “Coherent transfer of Cooper pairs by a movable grain”. *Nature* **411.6836** (2001), с. 454–457. DOI: <https://doi.org/10.1038/35078027>.
- [93] A. Isacsson та ін. “Mechanical Cooper Pair Transportation as a Source of Long-Distance Superconducting Phase Coherence”. *Physical Review Letters* **89.27** (2002), с. 277002. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.277002>.
- [94] Connor T. Hann та ін. “Hardware-Efficient Quantum Random Access Memory with Hybrid Quantum Acoustic Systems”. *Physical Review Letters* **123.25** (2019), с. 250501. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.250501>.
- [95] Joschka Roffe. “Quantum error correction: an introductory guide”. *Contemporary Physics* **60.3** (2019), с. 226–245. DOI: <https://doi.org/10.1080/00107514.2019.1667078>.
- [96] M. H. Devoret та R. J. Schoelkopf. “Superconducting Circuits for Quantum Information: An Outlook”. *Science* **339.6124** (2013), с. 1169–1174. DOI: [10.1126/science.1231930](https://doi.org/10.1126/science.1231930).
- [97] Weizhou Cai та ін. “Bosonic quantum error correction codes in superconducting quantum circuits”. *Fundamental Research* **1.1** (2021), с. 50–67. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fmre.2020.12.006>.
- [98] Daniel Gottesman, Alexei Kitaev та John Preskill. “Encoding a qubit in an oscillator”. *Phys. Rev. A* **64.1** (2001), с. 012310. DOI: [10.1103/PhysRevA.64.012310](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.64.012310).
- [99] Marios H. Michael та ін. “New Class of Quantum Error-Correcting Codes for a Bosonic Mode”. *Physical Review X* **6.3** (2016), с. 031006. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.6.031006>.
- [100] L. Hu та ін. “Quantum error correction and universal gate set operation on a binomial bosonic logical qubit”. *Nature Physics* **15.5** (лют. 2019), с. 503–508. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41567-018-0414-3>.
- [101] L. Y. Gorelik та ін. “Shuttle Mechanism for Charge Transfer in Coulomb Blockade Nanostructures”. *Physical Review Letters* **80.20** (1998), с. 4526–4529. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.4526>.

- [102] Gleb A. Skorobagatko, Ilya V. Krive та Robert I. Shekhter. “Polaronic effects in electron shuttling”. *Low Temperature Physics* **35.12** (2009), c. 949—956. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3276063>.
- [103] A. V. Parafilo та ін. “Nanoelectromechanics of superconducting weak links (Review Article)”. *Low Temp. Phys.* **38** (2012), c. 273—282. DOI: [10.1063/1.3699628](https://doi.org/10.1063/1.3699628).
- [104] R. I. Shekhter та ін. “Electronic spin working mechanically (Review Article)”. *Low Temperature Physics* **40.7** (2014), c. 600—614. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4887060>.
- [105] R. I. Shekhter та ін. “Shuttling of electrons and Cooper pairs”. *Journal of Physics: Condensed Matter* **15.12** (2003), R441—R469. DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/15/12/201>.
- [106] R. I. Shekhter та ін. “Nanomechanical Shuttle Transfer of Electrons”. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* **4.5** (2007), c. 860—895. DOI: <https://doi.org/10.1166/jctn.2007.2378>.
- [107] Robert I. Shekhter та ін. “Nonequilibrium and quantum coherent phenomena in the electromechanics of suspended nanowires (Review Article)”. *Low Temperature Physics* **35.8** (2009), c. 662—678. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3224725>.
- [108] D. Fedorets та ін. “Vibrational instability due to coherent tunneling of electrons”. *Europhysics Letters (EPL)* **58.1** (2002), c. 99—104. DOI: <https://doi.org/10.1209/epl/i2002-00611-3>.
- [109] D. Fedorets та ін. “Quantum Shuttle Phenomena in a Nanoelectromechanical Single-Electron Transistor”. *Physical Review Letters* **92.16** (2004), c. 166801. DOI: [10.1103/PhysRevLett.92.166801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.166801).
- [110] O. A. Ilinskaya. “On a new mechanism of friction in nanoelectromechanical systems”. *Low Temperature Physics* **44.8** (2018), c. 816—818. DOI: [10.1063/1.5049164](https://doi.org/10.1063/1.5049164).
- [111] A. V. Parafilo та ін. “Spin-mediated photomechanical coupling of a nanoelectromechanical shuttle”. *Phys. Rev. Lett.* **117** (2016), c. 057202. DOI: [10.1103/PhysRevLett.117.057202](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.057202). arXiv: [1602.03766](https://arxiv.org/abs/1602.03766) [cond-mat.mes-hall].

- [112] J. Atalaya та L. Y. Gorelik. “Spintronics-based mesoscopic heat engine”. *Physical Review B* **85.24** (2012), с. 245309. DOI: 10.1103/PhysRevB.85.245309.
- [113] S.I. Kulinich та ін. “Single-Electron Shuttle Based on Electron Spin”. *Physical Review Letters* **112.11** (2014), с. 117206. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.117206>.
- [114] O. A. Ilinskaya та ін. “Shuttling of Spin Polarized Electrons in Molecular Transistors”. *Synthetic Metals* **216** (2015), с. 83–87. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2015.11.001>. arXiv: 1507.05813 [cond-mat.mes-hall].
- [115] O. A. Ilinskaya та ін. “Magnetically controlled single-electron shuttle”. *Low Temperature Physics* **41.1** (2015), с. 70–74. DOI: 10.1063/1.4904445.
- [116] O. A. Ilinskaya та ін. “Spin-polaronic effects in electric shuttling in a single molecule transistor with magnetic leads”. *Physica E Low-Dimensional Systems and Nanostructures* **122**, 114151 (2020), с. 114151. DOI: 10.1016/j.physe.2020.114151. arXiv: 2003.01066 [cond-mat.mes-hall].
- [117] O. A. Ilinskaya та ін. “Coulomb effects on thermally induced shuttling of spin-polarized electrons”. *Low Temperature Physics* **45.9** (2019), с. 1032–1040. DOI: 10.1063/1.5121274.
- [118] O. A. Ilinskaya та ін. “Coulomb-promoted spintromechanics in magnetic shuttle devices”. *Phys. Rev. B* **100.4**, 045408 (2019), с. 045408. DOI: 10.1103/PhysRevB.100.045408. arXiv: 1902.09067 [cond-mat.mes-hall].
- [119] O. A. Ilinskaya та ін. “Mechanically Induced Thermal Breakdown in Magnetic Shuttle Structures”. *New Journal of Physics* **20.6** (2018), с. 063036. DOI: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/aac750>. arXiv: 1806.00633 [cond-mat.mes-hall].
- [120] O. A. Ilinskaya, R. I. Shekhter та M. Jonson. “Polaronic suppression of shuttle vibrations”. *Low Temperature Physics* **49.1** (січ. 2023), с. 71–75. DOI: <https://doi.org/10.1063/10.0016477>.
- [121] P. Vincent та ін. “Driving self-sustained vibrations of nanowires with a constant electron beam”. *Physical Review B* **76.8** (2007), с. 085435. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.085435>.

- [122] Dominik V. Scheible та Robert H. Blick. “Silicon nanopillars for mechanical single-electron transport”. *Applied Physics Letters* **84.23** (2004), c. 4632—4634. DOI: 10.1063/1.1759371.
- [123] Chulki Kim, Jonghoo Park та Robert H. Blick. “Spontaneous Symmetry Breaking in Two Coupled Nanomechanical Electron Shuttles”. *Physical Review Letters* **105.6** (2010), c. 067204. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.067204>.
- [124] Chulki Kim, Marta Prada та Robert H. Blick. “Coulomb Blockade in a Coupled Nanomechanical Electron Shuttle”. *ACS Nano* **6.1** (2012), c. 651—655. DOI: <https://doi.org/10.1021/nn204103m>.
- [125] Mo Zhao та Robert H. Blick. “Stochastic model of nanomechanical electron shuttles and symmetry breaking”. *Physical Review E* **93.6** (2016), c. 063306. DOI: 10.1103/PhysRevE.93.063306.
- [126] K. W. Chan та ін. “Single-electron shuttle based on a silicon quantum dot”. *Applied Physics Letters* **98.21** (2011), c. 212103. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3593491>.
- [127] Andriy V. Moskalenko та ін. “Nanomechanical electron shuttle consisting of a gold nanoparticle embedded within the gap between two gold electrodes”. *Physical Review B* **79.24** (2009), c. 241403. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.241403>.
- [128] G. A. Steele та ін. “Strong Coupling Between Single-Electron Tunneling and Nanomechanical Motion”. *Science* **325.5944** (2009), c. 1103—1107. DOI: DOI:10.1126/science.1176076.
- [129] S. Etaki та ін. “Self-sustained oscillations of a torsional SQUID resonator induced by Lorentz-force back-action”. *Nature Communications* **4.1** (2013). DOI: 10.1038/ncomms2827.
- [130] Takafumi Fujita та ін. “Coherent shuttle of electron-spin states”. *npj Quantum Information* **3.1** (2017). DOI: 10.1038/s41534-017-0024-4.
- [131] K. Jensen, Kwanpyo Kim та A. Zettl. “An atomic-resolution nanomechanical mass sensor”. *Nature Nanotechnology* **3.9** (2008), c. 533—537. DOI: <https://doi.org/10.1038/nnano.2008.200>.

- [132] F R Braakman та M Poggio. “Force sensing with nanowire cantilevers”. *Nanotechnology* **30.33** (2019), с. 332001. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab19cf>.
- [133] C. Urgell та ін. “Cooling and self-oscillation in a nanotube electromechanical resonator”. *Nature Physics* **16.1** (2019), с. 32–37. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41567-019-0682-6>.
- [134] D. R. Schmid та ін. “Magnetic damping of a carbon nanotube nano-electromechanical resonator”. *New Journal of Physics* **14.8** (2012), с. 083024. DOI: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/14/8/083024>.
- [135] D. R. Schmid та ін. “Liquid-induced damping of mechanical feedback effects in single electron tunneling through a suspended carbon nanotube”. *Applied Physics Letters* **107.12** (2015), с. 123110. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4931775>.
- [136] Jeffrey A. Weldon та ін. “Sustained Mechanical Self-Oscillations in Carbon Nanotubes”. *Nano Letters* **10.5** (2010), с. 1728–1733. DOI: <https://doi.org/10.1021/nl100148q>.
- [137] Kyle Willick та Jonathan Baugh. “Self-driven oscillation in Coulomb blockaded suspended carbon nanotubes”. *Phys. Rev. Research* **2** (3 2020), с. 033040. DOI: [10.1103/PhysRevResearch.2.033040](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.033040).
- [138] V. Meden. “The Anderson–Josephson quantum dot—a theory perspective”. *Journal of Physics: Condensed Matter* **31.16** (2019), с. 163001. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aafd6a>.
- [139] A. V. Parafilo та ін. “Manifestation of polaronic effects in Josephson currents”. *Low Temp. Phys.* **39** (2013), с. 685–694. DOI: [10.1063/1.4818791](https://doi.org/10.1063/1.4818791).
- [140] I. V. Krive та ін. “The influence of electro-mechanical effects on resonant electron tunneling through small carbon nano-peapods”. *New Journal of Physics* **10.4** (2008), с. 043043. DOI: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/10/4/043043>.
- [141] A. V. Parafilo та ін. “Polaronic effects and thermally enhanced weak superconductivity”. *Physical Review B* **89.11** (2014), с. 115138. DOI: [10.1103/PhysRevB.89.115138](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.115138).

- [142] R. I. Shekhter та ін. “Nanoelectromechanics of shuttle devices”. *Nanoelectromechanics* **1** (2013), с. 1–25. DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1303.0740>.
- [143] Tomáš Novotný, Alessandra Rossini та Karsten Flensberg. “Josephson current through a molecular transistor in a dissipative environment”. *Physical Review B* **72.22** (2005), с. 224502. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.224502>.
- [144] Jonas Sköldbberg та ін. “Spectrum of Andreev Bound States in a Molecule Embedded Inside a Microwave-Excited Superconducting Junction”. *Physical Review Letters* **101.8** (2008), с. 087002. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.087002>.
- [145] A. V. Parafilo та ін. “Nano-mechanics driven by Andreev tunneling”. *Physical Review B* **102.23** (2020), с. 235402. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.235402>. arXiv: 2009.02679 [cond-mat.mes-hall].
- [146] J Barański та T Domański. “Enhancements of the Andreev conductance due to emission/absorption of bosonic quanta”. *Journal of Physics: Condensed Matter* **27.30** (2015), с. 305302. DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/27/30/305302>.
- [147] B. Baran та T. Domański. “Quasiparticles of a periodically driven quantum dot coupled between superconducting and normal leads”. *Physical Review B* **100.8** (2019), с. 085414. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.085414>.
- [148] Ali G. Moghaddam, Michele Governale та Jürgen König. “Driven superconducting proximity effect in interacting quantum dots”. *Physical Review B* **85.9** (2012), с. 094518. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.094518>.
- [149] A.F. Andreev. “The Thermal Conductivity of the Intermediate State in Superconductors”. *Sov. Phys. JETP* **19.5** (1964), с. 1228.
- [150] I. O. Kulik. “Macroscopic Quantization and the proximity effect in S-N-S junctions”. *Sov. Phys. JETP* **30.5** (1970), с. 944.

- [151] P. Stadler, W. Belzig та G. Rastelli. “Ground-State Cooling of a Mechanical Oscillator by Interference in Andreev Reflection”. *Physical Review Letters* **117.19** (2016), с. 197202. DOI: 10.1103/PhysRevLett.117.197202.
- [152] P. Stadler, W. Belzig та G. Rastelli. “Charge-vibration interaction effects in normal-superconductor quantum dots”. *Physical Review B* **96.4** (2017), с. 045429. DOI: 10.1103/PhysRevB.96.045429.
- [153] J. Gramich, A. Baumgartner та C. Schönenberger. “Resonant and Inelastic Andreev Tunneling Observed on a Carbon Nanotube Quantum Dot”. *Physical Review Letters* **115.21** (2015), с. 216801. DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.216801.
- [154] Anton V. Parafilo та ін. “Pumping and Cooling of Nanomechanical Vibrations Generated by Cooper-Pair Exchange. to be published”. *Journal of Low Temperature Physics* **210.1-2** (листоп. 2022), с. 150–165. DOI: 10.1007/s10909-022-02905-7. arXiv: 2202.07924 [cond-mat.mes-hall].
- [155] В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц та Л.П. Питаевский. *Релятивистская квантовая теория*. Т. 1. 2 т. Наука, 1968, с. 480.
- [156] О. М. Єрмолаєв та Г. І. Рашба. *Вступ до статистичної фізики і термодинаміки*. ХНУ, 2004, с. 516. ISBN: 966–623–283–9.
- [157] Alexey Bezryadin та Paul M. Goldbart. “Superconducting Nanowires Fabricated Using Molecular Templates”. *Advanced Materials* **22.10** (2010), с. 1111–1121. DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.200904353>.
- [158] Kohei Masuda та ін. “Thermal and quantum phase slips in niobium-nitride nanowires based on suspended carbon nanotubes”. *Applied Physics Letters* **108.22** (2016), с. 222601. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4952721>.
- [159] Patricio Arrangoiz-Arriola та ін. “Resolving the energy levels of a nanomechanical oscillator”. *Nature* **571.7766** (2019), с. 537–540. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41586-019-1386-x>.
- [160] Danko Radić. *Nanomechanical cat-states generated by dc-voltage driven Cooper pair box qubit*. (video conference).
- [161] A. F. Morpurgo та ін. “Gate-Controlled Superconducting Proximity Effect in Carbon Nanotubes”. *Science* **286.5438** (1999), с. 263–265.

- [162] A. V. Rozhkov та Daniel P. Arovas. “Interacting-impurity Josephson junction: Variational wave functions and slave-boson mean-field theory”. *Phys. Rev. B* **62** (10 вер. 2000), с. 6687–6691. DOI: 10.1103/PhysRevB.62.6687.
- [163] Henrik Bruus та Karsten Flensberg. *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*. OXFORD UNIV PR, 2004. 466 с. ISBN: 0198566336.
- [164] J. Moser та ін. “Nanotube mechanical resonators with quality factors of up to 5 million”. *Nature Nanotechnology* **9.12** (2014), с. 1007–1011. DOI: 10.1038/nnano.2014.234.
- [165] J. C. Cuevas, A. Martín-Rodero та A. Levy Yeyati. “Hamiltonian approach to the transport properties of superconducting quantum point contacts”. *Physical Review B* **54.10** (1996), с. 7366–7379. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.7366.
- [166] Qing-feng Sun та ін. “Electron transport through a mesoscopic hybrid multiterminal resonant-tunneling system”. *Physical Review B* **61.7** (2000), с. 4754–4761. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.4754>.
- [167] Bogoliubov N. N. та Mitropolsky Y. A. *Asymptotic methods in the theory of non-linear oscillations*. London: Gordon та Breach, 1985.
- [168] A. M. Kosevich та A. C. Kovalev. *Vvedenie v nelineinuyu fizicheskuyu mehaniku (Введение в нелинейную физическую механику)*. Kyiv: Nauk. dumka, 1989, с. 303. ISBN: 5-12-000865-8.
- [169] A. Isacsson та ін. “Shuttle instability in self-assembled Coulomb blockade nanostructures”. *Physica B: Condensed Matter* **255.1-4** (1998), с. 150–163. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(98\)00463-3](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(98)00463-3).
- [170] Heinz-Peter Breuer та Francesco Petruccione. *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford University Press, 2007. ISBN: 9780199213900.
- [171] Edward A. Laird та ін. “A High Quality Factor Carbon Nanotube Mechanical Resonator at 39 GHz”. *Nano Letters* **12.1** (2011), с. 193–197. DOI: 10.1021/nl203279v.
- [172] A. Baas та ін. “Optical bistability in semiconductor microcavities”. *Physical Review A* **69.2** (2004), с. 023809. DOI: 10.1103/PhysRevA.69.023809.

- [173] M. Amthor та ін. “Optical bistability in electrically driven polariton condensates”. *Physical Review B* **91.8** (ЛЮТ. 2015), с. 081404. DOI: 10.1103/PhysRevB.91.081404.
- [174] R. Avriller, B. Murr та F. Pistoiesi. “Bistability and displacement fluctuations in a quantum nanomechanical oscillator”. *Physical Review B* **97.15** (2018), с. 155414. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.155414.
- [175] W. Belzig та P. Samuelsson. “Full counting statistics of incoherent Andreev transport”. *Europhys. Lett.* **64, 253 (2003)** (2003). DOI: 10.1209/epl/i2003-00314-9. arXiv: cond-mat/0305249 [cond-mat.supr-con].
- [176] Marius Grundmann Bimberg та Nikolai N. Ledentsov. *Quantum Dot Heterostructures*. John Wiley & Sons, 1999. 340 с. ISBN: 0-471-97388-2.
- [177] Alexandre Blais, Steven M. Girvin та William D. Oliver. “Quantum information processing and quantum optics with circuit quantum electrodynamics”. *Nature Physics* **16.3** (2020), с. 247—256. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41567-020-0806-z>.
- [178] Alan M. Cassell та ін. “Directed Growth of Free-Standing Single-Walled Carbon Nanotubes”. *Journal of the American Chemical Society* **121.34** (1999), с. 7975—7976. DOI: <https://doi.org/10.1021/ja992083t>.
- [179] Andrew N. Cleland. *Foundations of Nanomechanics*. Springer Berlin Heidelberg, 2003. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-662-05287-7>.
- [180] A. Cottet та W. Belzig. “Dynamical Spin-Blockade in a quantum dot with paramagnetic leads”. *Europhys. Lett.* **66** (2004), с. 405. DOI: 10.1209/epl/i2004-10009-9. arXiv: cond-mat/0401456 [cond-mat.mes-hall].
- [181] John H. Davies. *The Physics of Low-dimensional Semiconductors*. Cambridge University Press, 1997. DOI: <https://doi.org/10.1017/CBO9780511819070>.
- [182] Guang-Wei Deng та ін. “Strongly Coupled Nanotube Electromechanical Resonators”. *Nano Letters* **16.9** (2016), с. 5456—5462. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b01875>.
- [183] L. Y. Gorelik та ін. “Spin-controlled nanoelectromechanics in magnetic NEM-SET systems”. *New Journal of Physics* **7** (2005), с. 242—242. DOI: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/7/1/242>.

- [184] Markus Grassl та Martin Rötteler. “Quantum Error Correction and Fault Tolerant Quantum Computing”. *Encyclopedia of Complexity and Systems Science*. За ред. Robert A. Meyers. Springer New York, 2009, с. 7324—7342. DOI: 10.1007/978-0-387-30440-3_435.
- [185] Hui Gu та ін. “Biomarkers-based Biosensing and Bioimaging with Graphene for Cancer Diagnosis”. *Nanomaterials* **9.1** (2019), с. 130. DOI: <https://doi.org/10.3390/nano9010130>.
- [186] P. Harrison. *Quantum Wells, Wires and Dots*. 2-е вид. Chichester: John Wiley&Sons, 2005. ISBN: 978-0-470-01079-2.
- [187] R. Härtle та ін. “Cooling by heating in nonequilibrium nanosystems”. *Physical Review B* **98.8** (2018), с. 081404. DOI: 10.1103/PhysRevB.98.081404.
- [188] Ryoma Hayakawa, Toyohiro Chikyow та Yutaka Wakayama. “Vertical resonant tunneling transistors with molecular quantum dots for large-scale integration”. *Nanoscale* **9.31** (2017), с. 11297—11302. DOI: <https://doi.org/10.1039/C7NR02463K>.
- [189] C. Holmqvist, W. Belzig та M. Fogelström. “Non-equilibrium charge and spin transport in superconducting-ferromagnetic-superconducting point contacts”. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. A. Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **376.2125** (2018). Id/No 20150229, с. 13. DOI: 10.1098/rsta.2015.0229.
- [190] J. Hwang та ін. “A single-molecule optical transistor”. *Nature* **460.7251** (2009), с. 76—80. DOI: 10.1038/nature08134.
- [191] Yoseph Imry. *Introduction to mesoscopic physics*. New York: Oxford University Press, 1997. ISBN: 9781602560949.
- [192] Jens Koch, Felix von Oppen та A. V. Andreev. “Theory of the Franck-Condon blockade regime”. *Physical Review B* **74.20** (2006), с. 205438. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.205438>.
- [193] P. Krantz та ін. “A quantum engineer’s guide to superconducting qubits”. *Applied Physics Reviews* **6.2** (2019), с. 021318. DOI: 10.1063/1.5089550.

- [194] Thilo Krause та ін. “Thermodynamics of the polaron master equation at finite bias”. *The Journal of Chemical Physics* **142.13** (2015), с. 134106. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4916359>.
- [195] Edward A. Laird та ін. “Quantum transport in carbon nanotubes”. *Reviews of Modern Physics* **87.3** (2015), с. 703–764. DOI: [10.1103/RevModPhys.87.703](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.87.703).
- [196] Lijun Liu та ін. “Recent progress of graphene oxide-based multifunctional nanomaterials for cancer treatment”. *Cancer Nanotechnology* **12.1** (2021). DOI: [10.1186/s12645-021-00087-7](https://doi.org/10.1186/s12645-021-00087-7).
- [197] G. Micchi, R. Avriller та F. Pistolesi. “Mechanical Signatures of the Current Blockade Instability in Suspended Carbon Nanotubes”. *Physical Review Letters* **115.20** (2015), с. 206802. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.206802>.
- [198] Michael A. Nielsen та Isaac Chuang. *Quantum computation and quantum information*. American Association of Physics Teachers, 2002.
- [199] A. V. Parafilo та ін. “Thermoelectric effects in electron chiral tunneling in metallic carbon nanotubes”. *Superlattices and Microstructures* **88** (2015), с. 72–79. DOI: [10.1016/j.spmi.2015.08.029](https://doi.org/10.1016/j.spmi.2015.08.029).
- [200] Hee Chul Park та ін. “Coulomb blockade of spin-dependent shuttling”. *Low Temperature Physics* **39.12** (2013), с. 1071–1077. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4830420>.
- [201] Mickael L. Perrin та ін. “Single-Molecule Resonant Tunneling Diode”. *The Journal of Physical Chemistry C* **119.10** (2015), с. 5697–5702. DOI: <https://doi.org/10.1021/jp512803s>.
- [202] Uri Peskin. “Quantum transport in the presence of contact vibrations”. *The Journal of Chemical Physics* **151.2** (2019), с. 024108. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5100142>.
- [203] Vladimir Popov. “Resonant Tunneling and Two-dimensional Gate Transistors”. *Different Types of Field-Effect Transistors - Theory and Applications*. InTech, 2017. DOI: [10.5772/intechopen.69069](https://doi.org/10.5772/intechopen.69069).

- [204] S. Sarpmaz та ін. “Tunneling in Suspended Carbon Nanotubes Assisted by Longitudinal Phonons”. *Physical Review Letters* **96.2** (2006), с. 026801. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.026801>.
- [205] P. Stadler, W. Belzig та G. Rastelli. “Control of vibrational states by spin-polarized transport in a carbon nanotube resonator”. *Physical Review B* **91.8** (2015), с. 085432. DOI: [10.1103/PhysRevB.91.085432](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.085432).
- [206] Jan von Delft та D.C. Ralph. “Spectroscopy of discrete energy levels in ultrasmall metallic grains”. *Physics Reports* **345.2-3** (2001), с. 61–173. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(00\)00099-5](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(00)00099-5).
- [207] Heng Wang та Guido Burkard. “Creating arbitrary quantum vibrational states in a carbon nanotube”. *Physical Review B* **94.20** (2016), с. 205413. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.205413>.
- [208] Hua Zhang та ін. “Recent advances of two-dimensional materials in smart drug delivery nano-systems”. *Bioactive Materials* **5.4** (2020), с. 1071–1086. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.bioactmat.2020.06.012>.
- [209] А. В. Свідзинський. *Математичні методи теоретичної фізики*. 3-є вид. 2 т. Луцьк: Вежа, 2004, с. 620. ISBN: 978-966-02-5132-8.

Додаток А

Список публікацій здобувача за темою дисертації

1. **O.M. 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. **O.M. 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. **O.M. 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. **O.M. 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. **O.M. 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. **O. M. 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, **O.M. 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. **O.M. 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).

Додаток Б

Відомості про апробацію результатів дисертації.

- Physics and Scientific&Technological progress: student scientific conference (Kharkiv, Ukraine, April 10-12, 2018);
- I International Advanced Study Conference Condensed matter & Low Temperature Physics (Kharkiv, Ukraine, June 8-14, 2020);
- XI Conference of Young Scientists “Problems of Theoretical Physics” (Kyiv, Ukraine (online), December 21-23, 2020);
- II International Advanced Study Conference Condensed matter & Low Temperature Physics (Kharkiv, Ukraine, June 6–12, 2021);
- The International Symposium on Novel maTerials and quantum Technologies, (Kanagawa, Japan (online), December 14–17, 2021);
- Quantum Thermodynamics Conference 2022, (Belfast, United Kingdom (online), June 27-July 1, 2022);
- 29th International Conference on Low Temperature Physics, (Sapporo, Japan (online), August 18-24, 2022);

Онлайн сервіс створення та перевірки кваліфікованого та удосконаленого електронного підпису

ПРОТОКОЛ
створення та перевірки кваліфікованого та удосконаленого електронного підпису

Дата та час: 09:52:49 27.04.2023

Назва файлу з підписом: ukr_disser_26042023.pdf.asice
Розмір файлу з підписом: 3.5 МБ

Перевірені файли:
Назва файлу без підпису: ukr_disser_26042023.pdf
Розмір файлу без підпису: 3.9 МБ

Результат перевірки підпису: Підпис створено та перевірено успішно. Цілісність даних підтверджено

Підписувач: БАГРОВА ОЛЬГА МИКОЛАЇВНА
П.І.Б.: БАГРОВА ОЛЬГА МИКОЛАЇВНА
Країна: Україна
РНОКПП: 3433510084
Організація (установа): ФІЗИЧНА ОСОБА
Час підпису (підтверджено кваліфікованою позначкою часу для підпису від Надавача): 10:52:48
27.04.2023
Сертифікат виданий: АЦСК АТ КБ «ПРИВАТБАНК»
Серійний номер: 248197DDFAB977E504000000BB0C0201B70B1A04
Алгоритм підпису: ДСТУ-4145
Тип підпису: Удосконалений
Тип контейнера: Підпис та дані в архіві (розширений) (ASiC-E)
Формат підпису: З повними даними для перевірки (XAdES-B-LT)
Сертифікат: Кваліфікований