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

ІЛЬЇНСЬКА Ольга Олександрівна

УДК 538.93

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

01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Харків – 2018

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Фізико-технічному інституті низьких температур ім. Б.І. Вєркіна НАН України, м. Харків.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Кріве Ілля Валентинович,
Фізико-технічний інститут низьких температур
ім. Б.І. Вєркіна НАН України,
завідувач відділу теоретичної фізики.

Офіційні опоненти: член-кореспондент НАН України,
доктор фізико-математичних наук, професор
Клепіков Вячеслав Федорович,
Інститут електрофізики і радіаційних
технологій НАН України,
директор;

доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник
Філь Дмитро Вячеславович,
Інститут монокристалів НАН України,
провідний науковий співробітник
відділу теорії конденсованого стану речовини.

Захист відбудеться «11» грудня 2018 року о 15^{00} годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 64.175.02 при Фізико-технічному інституті низьких температур ім. Б.І. Вєркіна НАН України за адресою: 61103, м. Харків, проспект Науки, 47.

З дисертацією можна ознайомитись в бібліотеці Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б.І. Вєркіна НАН України за адресою: 61103, м. Харків, проспект Науки, 47.

Автореферат розісланий «7» листопада 2018 року.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 64.175.02,
доктор фізико-математичних наук Богдан М.М.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

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

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

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

Перевага одноелектронних наноелектромеханічних систем перед стандартним одноелектронним транзистором полягає, зокрема, в тому, що в наноелектромеханічній системі в кожний момент часу «відкритий» лише один тунельний бар'єр, таким чином, одночасне тунелювання двох електронів заборонене та точність транспортних вимірювань підвищена. Крім того, якщо наноелектромеханічна система працює в шатлівському режимі (тобто перенос електронів здійснюється рухомою гранулою при періодичному механічному русі), то електричний струм визначається частотою механічних коливань гранули, а не частотою тунельних переходів і може бути на декілька порядків вищий тунельного струму.

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

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

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

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

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

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

Об'єктом дослідження дисертаційної роботи є квантовий транспорт спін-поляризованих електронів у молекулярних транзисторах.

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

Методи дослідження. Результати дисертаційної роботи отримані з використанням аналітичних методів теоретичної фізики конденсованого стану. Для знаходження областей шатлівської нестійкості та врахування впливу електрон-електронної взаємодії на термоелектричну добротність спінтронного

транзистора використано метод матриці густини та теорію збурень. Для отримання коефіцієнту проходження спінтронного транзистора використано метод рівнянь руху Гейзенберга. Метод зшивки хвильових функцій при розв'язанні рівняння Дірака використано для розрахунку коефіцієнта проходження електронів при їх хіральному тунелюванні через одностінну металічну вуглецеву нанотрубку. Для знаходження термоелектричних коефіцієнтів за відомим коефіцієнтом проходження застосовано підхід Ландауера—Бюттікера.

Наукова новизна отриманих результатів.

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

Практичне значення результатів дисертації. Результати досліджень, які представлені в дисертаційній роботі, мають фундаментальне значення, оскільки поглиблюють і поширюють знання щодо транспорту електронів у наноелектромеханічних системах. Передбачені в роботі ефекти, такі як зникнення вібронної області механічних коливань при зменшенні ступеня поляризації електронів в електричному шатлі, поява нижнього критичного

магнітного поля в магнітному шатлі з неповною поляризацією електронів, спостереження шатлівської нестійкості в наноелектромеханічній системі з тепловим джерелом енергії, стимулюють проведення експериментів. На основі досліджень термоелектричних властивостей нанотранзисторів можуть бути розроблені одноелектронні термоелектричні пристрої – спінтронні та такі, що побудовані на основі металічних вуглецевих нанотрубок.

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

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

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

Публікації. Результати дисертаційної роботи опубліковані в 14 наукових працях, у тому числі в 6 статтях у провідних фахових наукових виданнях [1 – 6] і в 8 тезах доповідей у збірниках праць міжнародних і вітчизняних наукових конференцій [7 – 14].

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

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ ДИСЕРТАЦІЇ

В **анотаціях** державною та англійською мовами стисло викладено основний зміст і висновки дисертації. Представлено основні результати досліджень із зазначенням наукової новизни. Сформульовано найсуттєвіші положення по кожному з розділів дисертації.

У **вступі** наведене обґрунтування актуальності проблеми, сформульовані мета і завдання досліджень, наведені основні отримані автором наукові результати, визначена їх новизна і практичне значення, наведені дані щодо апробації і публікації результатів досліджень.

У **першому розділі** «Шатлівський і тепловий транспорт електронів у наноструктурах» наданий огляд наукової літератури з тематики дисертації. Введені поняття шатлівської нестійкості і шатлівського транспорту електронів у наноелектромеханічних системах. Обговорені поняття кулонівської блокади та теоретична можливість існування одноелектронного шатлу. Описана можливість керування шатлівською нестійкістю за допомогою зовнішнього магнітного поля, і наведений гамільтоніан шатлівської системи з повністю поляризованими за спіном електронами в електродах, в якій можна здійснити таке керування. Введені поняття електричного і магнітного шатлу та виписані області шатлівської нестійкості для електричного і магнітного шатлу з повністю поляризованими за спіном електронами. Обґрунтована необхідність дослідження шатлівських систем з частковою поляризацією електронів за спіном, а також системи з тепловим, а не електричним джерелом енергії (ці задачі не були вирішені до початку виконання даної дисертаційної роботи). Наведений опис найбільш близьких до даної дисертаційної роботи експериментів.

Також введені вступні поняття, що стосуються теорії термоелектричних систем, такі як термоелектричні коефіцієнти, ефективність, потужність. Наведене визначення термоелектричної добротності (ZT) твердотільного термоелектрика. Обговорені різні способи максимізації потужності. Обґрунтовано інтерес до задач, вирішених у даній дисертаційній роботі: дослідження спінтронної тунельної термоелектричної системи на основі квантової точки та термоелектричної системи на основі пружно деформованої металічної вуглецевої нанотрубки.

У **другому розділі** «Шатлівська нестійкість у транспорті поляризованих за спіном електронів у наноелектромеханічних структурах» досліджений вплив

часткової поляризації за спіном електронів в електродах на області шатлівської нестійкості електричного і магнітного шатлу.

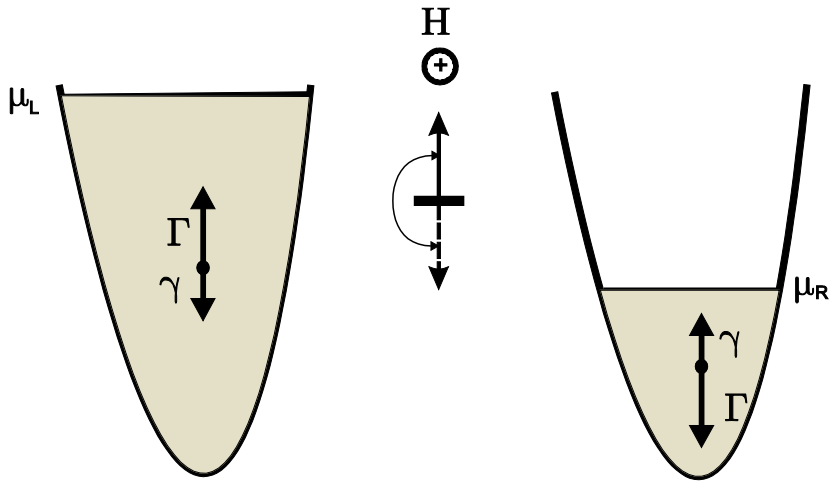

Рис. 1. Ескіз моделі електричного шатлу з неповною поляризацією.

У *підрозділі 2.1* розглянуто електричний шатл, модель якого зображена на рис. 1. Квантова точка, що вібрує, з одним виродженим за спіном електронним рівнем тунельно зв'язана з електродами, електрони в яких частково поляризовані за спіном. Γ і γ – це парціальні ширини рівня електронів. Різниця потенціалів між електродами $\mu_L - \mu_R = |e|V$ створюється електричною напругою V. Зовнішнє магнітне поле H викликає перевороти спіну електронів на точці. Гамільтоніан системи $\hat{H} = \hat{H}_l + \hat{H}_d + \hat{H}_v + \hat{H}_{tun}$ складається з чотирьох доданків. Гамільтоніан електродів наступний:

$$\hat{H}_l = \sum_{k,\sigma,j} \varepsilon_{k,\sigma,j} a^{\dagger}_{k,\sigma,j} a_{k,\sigma,j}. \qquad (1)$$

В електроді j, де $j = L(=-1)$ і $j = R(=1)$, у загальному випадку є електрони зі спіном $\sigma = \uparrow$ і зі спіном $\sigma = \downarrow$. У формулі (1) $a_{k,\sigma,j}$ – оператор знищення електронного стану з імпульсом k і спіном σ в електроді j, $\varepsilon_{k,\sigma,j}$ – відповідна енергія електронів. Гамільтоніан квантової точки має вигляд:

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

У формулі (2) c_{σ} – оператор знищення електронного стану зі спіном σ на квантовій точці, ε_0 – енергія рівня електрона на квантовій точці, $\hat{x}$ – оператор координати центру мас квантової точки; E і H – напруженості зовнішнього електричного і магнітного поля (e – заряд електрона, μ_B – магнетон Бора, g – гіромагнітне відношення); U – енергія міжелектронної взаємодії. Коливання квантової точки біля положення рівноваги описуються гамільтоніаном квантового гармонічного осцилятора:

$$\hat{H}_v = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}, \tag{3}$$

де $\hat{p}$ – оператор імпульсу центру мас квантової точки, канонічно спряжений оператору координати, $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$; m і ω – маса квантової точки і частота коливань її центру мас. У тунельному гамільтоніані

$$\hat{H}_{tun} = \sum_{k,\sigma,j} t_j(\hat{x}) a^{\dagger}_{k,\sigma,j} c_\sigma + H.c. \tag{4}$$

$t_j(\hat{x}) = t_j \exp(j\hat{x}/\lambda)$ – тунельна амплітуда, залежність якої від координати припускається експоненціальною (λ – тунельна довжина).

Параметри системи, при яких амплітуда коливань квантової точки експоненціально зростає, визначають область шатлівської нестійкості. З використанням методу матриці густини і теорії збурень за параметром $\Gamma/(|e|V)$, де Γ – ширина рівня (розмірності енергії), V – напруга, що прикладена до електродів, було виведене в режимі кулонівської блокади ($U \to \infty$) рівняння руху

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + m\omega^2 x = -eE\rho_0\{x(t)\} \tag{5}$$

для класичної координати x центру мас квантової точки. У формулі (5) ρ_0 – це матричний елемент зведеної матриці густини квантової точки, що відповідає незаповненому електронному рівню на точці. Цей матричний елемент є функціоналом координати і може бути знайдений з системи кінетичних рівнянь.

Отримана нерівність, що визначає область шатлівської нестійкості:

$$h^6 + C_{14}h^4 + C_{12}h^2 + C_{10} > 0, \tag{6}$$

де

$$C_{14} = \frac{1}{2}(\Gamma^2 + \gamma^2) + 2(\Gamma\gamma - 1), \tag{7}$$

$$C_{12} = \frac{3}{4}\Gamma\gamma(\Gamma^2 + \gamma^2) - \frac{1}{2}(\Gamma^4 + \gamma^4 - \Gamma^2 - \gamma^2) + 5\Gamma^2\gamma^2 - \Gamma\gamma + 1, \tag{8}$$

$$C_{10} = \frac{1}{4}\Gamma\gamma(\Gamma^4 + \gamma^4) + \frac{1}{4}(\Gamma^2\gamma^2 + 5\Gamma\gamma)(\Gamma^2 + \gamma^2) - \frac{1}{2}\Gamma^2\gamma^2 + \Gamma\gamma. \tag{9}$$

У формулах (6)—(9) $h = g\mu_B H/(\hbar\omega)$ – безрозмірне магнітне поле, Γ і γ – аналогічним чином обезрозмірені парціальні ширини рівня: $\Gamma = 2\pi\nu_\uparrow |t_L|^2/(\hbar\omega) = 2\pi\nu_\downarrow |t_R|^2/(\hbar\omega)$, $\gamma = 2\pi\nu_\downarrow |t_L|^2/(\hbar\omega) = 2\pi\nu_\uparrow |t_R|^2/(\hbar\omega)$, де $\nu_\uparrow$, $\nu_\downarrow$ – густини станів електронів в електродах з відповідним напрямком спіну.

Показано, що керувати за допомогою магнітного поля переходом між шатлівською областю електронного транспорту (областю параметрів, у якій будь-яке початкове коливання квантової точки експоненціально зростає) і

вібронною областю (в якій будь-яке початкове коливання точки згасає) можна лише при достатньо високому ступені поляризації електронів $\eta \simeq (\Gamma - \gamma)/(\Gamma + \gamma)$. Чисельно розраховане відповідне критичне значення ступеня поляризації: $\eta \sim 64\%$. Залежність порогового (threshold) магнітного поля, що розділяє шатлівську і вібронну області електронного транспорту, від відношення парціальних ширин рівня γ/Γ зображена на рис. 2. Вібронна область знаходиться всередині кривої, і абсциса точки M визначає критичне значення ступеня поляризації.

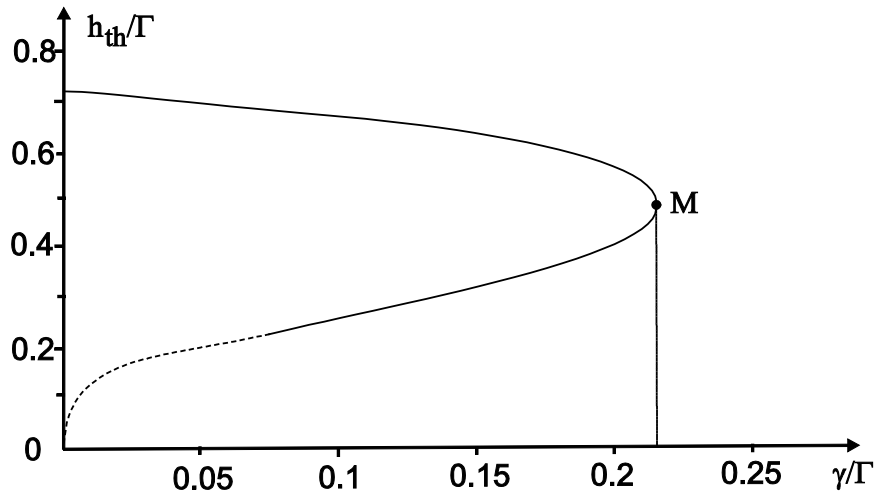

Рис. 2. Залежність порогового магнітного поля від відношення парціальних ширин рівня для електричного шатлу.

У *підрозділі 2.2* побудована теорія магнітного шатлу з неповною поляризацією електронів. У гамільтоніані $\hat{H} = \hat{H}_l + \hat{H}_d + \hat{H}_v + \hat{H}_{tun}$ даної системи перший, третій і четвертий доданки описуються формулами (1), (3), (4) відповідно, а другий доданок (гамільтоніан квантової точки) тепер описується формулою:

$$\hat{H}_d = \left(\varepsilon_0 - \frac{J(\hat{x})}{2}\right)c_\uparrow^\dagger c_\uparrow + \left(\varepsilon_0 + \frac{J(\hat{x})}{2}\right)c_\downarrow^\dagger c_\downarrow - \frac{g\mu_B H}{2}(c_\uparrow^\dagger c_\downarrow + c_\downarrow^\dagger c_\uparrow) + U c_\uparrow^\dagger c_\uparrow c_\downarrow^\dagger c_\downarrow, \quad (10)$$

де $J(\hat{x})$ – залежна від положення квантової точки енергія обмінної взаємодії, що є різницею енергій взаємодії між спіном електрона на точці і лівим/правим магнітним електродом відповідно, а інші позначення описані вище. Припускається, що залежність обмінної енергії від оператору координати при малих відхиленнях квантової точки від положення рівноваги ($x = 0$) має вигляд: $J(\hat{x}) \approx -\alpha\hat{x}$, де $\alpha > 0$.

Область шатлівської нестійкості магнітного шатлу знайдена методом матриці густини, який описаний у підрозділі 2.1. Для цього було виведене і вирішене рівняння руху

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + m\omega^2 x = -\frac{\alpha}{2}\left(\rho_\uparrow\{x(t)\} - \rho_\downarrow\{x(t)\}\right). \quad (11)$$

У формулі (11) $\rho_{\uparrow}$ і $\rho_{\downarrow}$ – матричні елементи зведеної матриці густини квантової точки, які відповідають одноелектронному стану на точці (зі спіном «вгору» та «вниз» відповідно). Область нестійкості є наступною:

$$h^4 + C_{22}h^2 + C_{20} < 0, \tag{12}$$

$$C_{22} = -3\left(\Gamma_+^2 + 1\right) - \frac{\Gamma_+^2 - \Gamma_-^2}{8\Gamma_+^2}\left(5\Gamma_+^2 + 4\right), \tag{13}$$

$$C_{20} = \frac{\left(\Gamma_+^2 - \Gamma_-^2\right)\left(\Gamma_+^2 + 4\right)}{8\Gamma_+^2}\left(\Gamma_+^2 + 1 + \frac{\Gamma_+^2 - \Gamma_-^2}{4}\right), \tag{14}$$

де $\Gamma_{\pm} = \Gamma \pm \gamma$, магнітне поле h і ширини рівня обезрозмірені таким самим чином, як і в формулах (6)—(9).

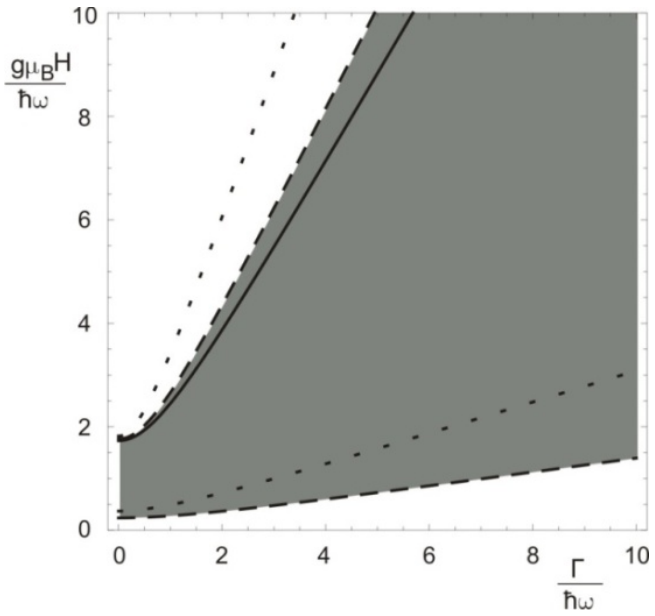

Рис. 3. Верхнє (верхній набір кривих) і нижнє (нижній набір кривих) критичне магнітне поле для магнітного шатлу.

Показано, що наявність неповної поляризації зумовлює появу нижньої гілки на залежності (див. рис. 3) критичного (порогового) магнітного поля від ширини рівня. На рис. 3 суцільна крива відповідає повній поляризації (в цьому випадку нижня гілка співпадає з віссю абсцис), пунктирні криві побудовані для ступеня поляризації $\eta = 0.8$ (область нестійкості затемнена), а короткопунктирні – для $\eta = 0.3$. Виникнення нижнього критичного магнітного поля пояснюється відкриттям додаткового каналу транспорту – без перевороту спіну. При достатньо малих магнітних полях електрон тунелює з квантової точки до стоку в середньому раніше, ніж перевернеться його спін, а для виникнення шатлівської нестійкості необхідні сили відштовхування квантової точки від електрода, які виникають лише при перевороті спіну.

У **третьому розділі** «Термоіндуктований одноелектронний шатл» на прикладі простої моделі магнітного шатлу з повністю поляризованими за спіном електронами показана можливість існування одноелектронного шатлу з тепловим джерелом енергії. Гамільтоніан цієї моделі відрізняється від гамільтоніану системи, що була розглянута в підрозділі 2.2, лише відсутністю незалежного спінового індексу в операторах електронів в електродах (спіновий індекс у даному випадку співпадає з індексом електрода). Електроди підтримуються при однакових хімічних потенціалах, але при різних температурах (для спрощення розрахунків припускається, що температура в стоці дорівнює нулю).

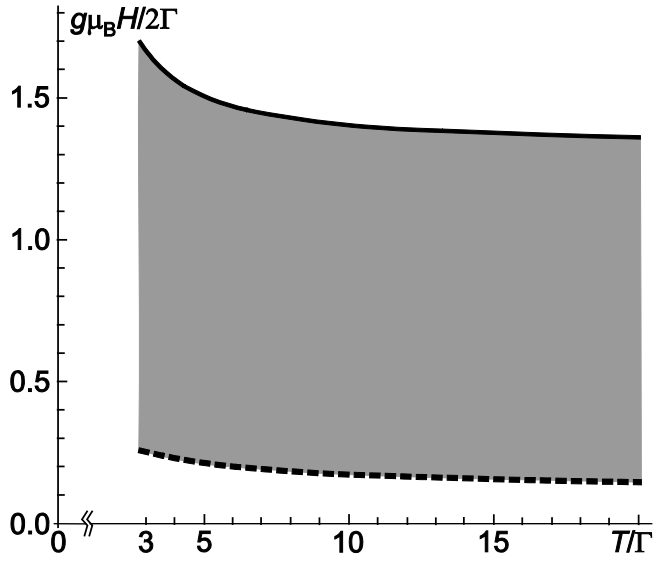

Рис. 4. Залежність критичного магнітного поля термоіндукторованого одноелектронного шатлу від різниці температур між електродами, нормованої на ширину рівня.

Для знаходження області шатлівської нестійкості необхідно розв’язати рівняння руху (11). Рівняння для елементів зведеної матриці густини квантової точки отримані з використанням теорії збурень за параметром відношення ширини рівня до середньої температури в системі. Область шатлівської нестійкості визначається наступною нерівністю:

$$C_{T4}\left(\Omega_H / \Gamma\right)^4 - C_{T2}\left(\Omega_H / \Gamma\right)^2 + C_{T0} < 0, \tag{15}$$

де $\Omega_H = g\mu_B H / 2$ і

$$\begin{aligned} C_{T4} = {} & 2f_+^3(2-f_+)^3 - f_+ f_-^2(2-f_+)^2(4-5f_+) \\ & - 4f_-^4(2-f_+)(1-f_+) - f_-^4(4-f_-^2), \end{aligned} \tag{16}$$

$$C_{T2} = \frac{2 - f_+}{2}[\, f_+^2(2 - f_+)^2(4 - f_+) - f_-^2(2 - f_+)(4 - f_+)(1 - 2f_+) + f_-^4(5 - f_+)], \tag{17}$$

$$C_{T0} = \frac{(2 - f_+)^3(4 - f_+) f_-^2}{16}. \tag{18}$$

У формулі (15), на відміну від формул (7)—(9), Γ – розмірна ширина рівня. У формулах (16)—(18) введені позначення

$$f_\pm = \frac{f(E_-) \pm f(E_+)}{2}, \tag{19}$$

де

$$E_\pm = \varepsilon_0 \pm \frac{\sqrt{J^2(x) + 4\Omega_H^2}}{2}. \tag{20}$$

Залежність критичного магнітного поля від різниці температур витоку і стоку зображена на рис. 4 (область шатлівської нестійкості затемнена). Показано, що в границі високих температур верхнє критичне магнітне поле (нормоване на ширину рівня Γ) прямує до числа $\sqrt{7}/2$. Залежність нижнього критичного магнітного поля від температури витоку T (в даній моделі ця температура співпадає з різницею температур) пов'язана з наявністю в системі, що вивчається, внутрішнього тертя. Це тертя виникає, завдяки тунельному зв'язку квантової точки, що вібрує, з електродом, який підтримується при відмінній від нуля температурі, і дії між ними обмінних сил. Отримана наступна формула для коефіцієнта тертя $\gamma_i(T)$ (i – internal):

$$\gamma_i(T) = -\frac{\hbar\alpha^2}{16m}\frac{\Gamma}{\Gamma^2 + (\hbar\omega)^2}\frac{1}{T}\cosh^{-2}\left(\frac{\delta\varepsilon}{2T}\right), \tag{21}$$

де $\delta\varepsilon = \varepsilon_0 - \mu$ (μ – хімічний потенціал, ε_0 – енергія рівня електрона на точці). Формула (21), що виведена за умови $T \gg \Gamma$, показує, що коефіцієнт тертя прямує до нуля в границі високих температур. З фізичних міркувань очевидно, що в границі низьких температур коефіцієнт тертя також прямує до нуля. Таким чином, показано, що коефіцієнт внутрішнього тертя немонотонно залежить від температури.

Аналогічна формула для коефіцієнта внутрішнього тертя отримана також для наноелектромеханічної системи, в якій між квантовою точкою, що вібрує, і «гарячим» електродом діють лише кулонівські сили; формула для коефіцієнта тертя може бути отримана з формули (21) формальною заміною обмінної сили на електричну, а саме: $\alpha/2 \to eE$. Таким чином, розглянутий нами новий механізм тертя не залежить від природи сил у наноелектромеханічній системі.

У **четвертому розділі** «Оптимальна термоелектрична добротність і термоелектричні ефекти в спінтронному транзисторі» вивчені термоелектричні характеристики в режимі лінійного відгуку двох типів нанотранзисторів – спінтронного транзистора на основі квантової точки і молекулярного транзистора на основі металічної вуглецевої нанотрубки.

У *підрозділі 4.1* досліджені термоелектричні ефекти для транзистора, в якому квантова точка з одним виродженим за спіном рівнем тунельно зв'язана з повністю поляризованими за спіном витоком і стоком електронів. Головним параметром, за яким проводиться оптимізація термоелектричних характеристик, є зовнішнє магнітне поле, яке не є колінеарним намагніченості електродів і обумовлює перевороти спіну електронів на квантовій точці.

Гамільтоніан даної системи відрізняється від гамільтоніану електричного шатлу (1) – (4) відсутністю незалежного спінового індексу в операторах електронів в електродах. Ми також у даному розділі розглядаємо нерухому квантову точку, і тому тепер тунельний матричний елемент і енергія електронного рівня на квантовій точці є заданими параметрами системи.

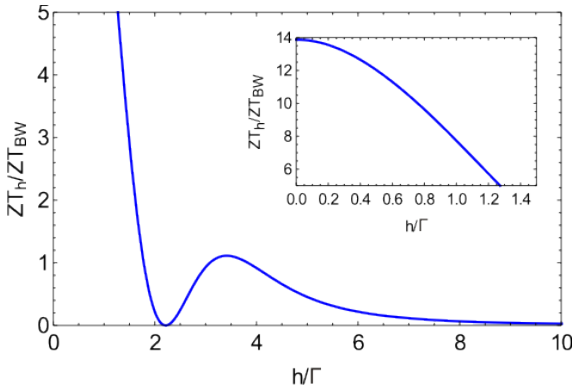

Рис. 5. Відношення термоелектричної добротності спінтронного транзистора ZT_h до термоелектричної добротності транзистора з неполяризованими електронами ZT_{BW} в залежності від магнітного поля, нормованого на ширину рівня.

Методом рівнянь руху Гейзенберга для електронів без взаємодії розрахований коефіцієнт проходження як функція енергії ε і магнітного поля $h \equiv g\mu_B H$:

$$D(\varepsilon;h) = \frac{\frac{1}{4}\Gamma^2 h^2}{\left[(\varepsilon-\varepsilon_1)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2\right]\left[(\varepsilon-\varepsilon_2)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2\right]}, \qquad (22)$$

де $\varepsilon_{1(2)} = \varepsilon_0 \pm h/2$. Зауважимо, що, на відміну від формул (6) і (12), у даному підрозділі величина h має розмірність енергії. Знаючи коефіцієнт проходження (22) і використовуючи підхід Ландауера—Бюттікера, легко розрахувати

термоелектричні коефіцієнти – електричний кондуктанс G, тепловий кондуктанс K, термоерс S (коефіцієнт Зеєбека).

Чисельно знайдені оптимальні параметри системи – магнітне поле, середня температура і відхилення від резонансу $\delta\varepsilon = \varepsilon_0 - \mu$, – при яких потужність при максимальній ефективності

$$P_{me} = \eta_C^2 \frac{TK}{\sqrt{ZT+1}} \frac{\sqrt{ZT+1}-1}{\sqrt{ZT+1}+1} \tag{23}$$

максимальна: $h/\Gamma \approx 1.15$, $T/\Gamma \approx 0.15$, $\delta\varepsilon/\Gamma \approx 0.9$. У формулі (23) η_C – ефективність Карно, $ZT = GS^2T/K_e$ – термоелектрична добротність, T – середня температура в системі. (Теплокондуктанс K_e, що входить до визначення термоелектричної добротності, пов'язаний зі стандартним визначенням теплокондуктансу формулою $K_e = K - GS^2T$. Внеском фононного теплокондуктансу в термоелектричну добротність нехтуємо.)

Термоелектрична добротність, що відповідає максимальній потужності (23), приблизно дорівнює $ZT \approx 0.44$, а максимальна ефективність

$$\eta_m = \eta_C \frac{\sqrt{ZT+1}-1}{\sqrt{ZT+1}+1} \tag{24}$$

приблизно дорівнює $\eta_m \approx 0.1\eta_C$. Показано, що термоелектрична добротність спінтронного транзистора в певному інтервалі магнітних полів, зокрема в режимі максимальної потужності, в декілька разів перевищує термоелектричну добротність транзистора з неполяризованими електронами (див. рис. 5).

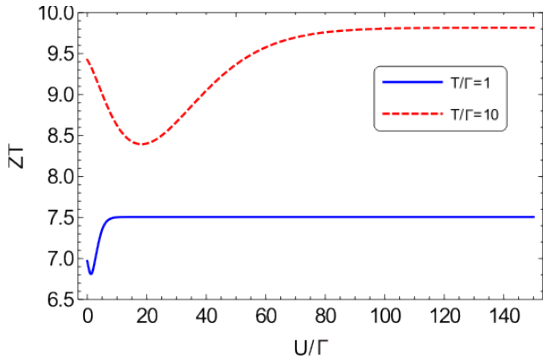

Рис. 6. Залежність термоелектричної добротності спінтронного транзистора від енергії електрон-електронної взаємодії для двох значень температури і відповідних ним оптимальних значень магнітного поля і параметра відхилення від резонансу.

Методом матриці густини в теорії збурень за параметром Γ/T (відношення ширини рівня до температури) досліджений вплив електрон-електронної взаємодії на термоелектричну добротність; відповідна залежність представлена на рис. 6. Аналогічно випадку електронів без взаємодії була максимізована потужність, але лише за магнітним полем і відхиленням від резонансу, а температуру було зафіксовано в області, де можливе застосування

теорії збурень: $T = 10\Gamma$. Було показано, що помірна електрон-електронна взаємодія несуттєво знижує термоелектричну добротність, а в режимі кулонівської блокади ($U \to \infty$) оптимальне значення термоелектричної добротності, характерне для електронів без взаємодії, відновлюється. Аналогічний результат був отриманий і для температури $T = \Gamma$, більш близької до оптимальної.

У *підрозділі 4.2* показано, що молекулярний транзистор на основі металічної пружно деформованої одностінної вуглецевої нанотрубки може мати високу термоелектричну добротність. Гамільтоніан нанотрубки, що розглядається, має вигляд:

$$\hat{H} = -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta}\partial_x \\ e^{-i\theta}\partial_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} W_d(x) & W_o(x)e^{i\varphi} \\ W_o(x)e^{-i\varphi} & W_d(x) \end{pmatrix}, \qquad (25)$$

де v_F – швидкість Фермі, x – координата вздовж осі трубки, кут θ визначає кут згортання графенового листу (вважаємо $\theta = 0$ для структури «крісло», armchair, і $\theta = \pi/6$ для структури «зигзаг»). Другий доданок у формулі (25) – це матричний потенціал розсіяння (бар'єр), створений пружною деформацією поверхні трубки. Тут W_d – це потенціал деформації, а W_o виникає, завдяки зміні інтегралу перескоку між двома атомами вуглецю під дією напруження. Припускається, що $W_d = W_o \equiv W$ і потенціал розсіяння моделюється прямокутним потенціальним бар'єром ширини a.

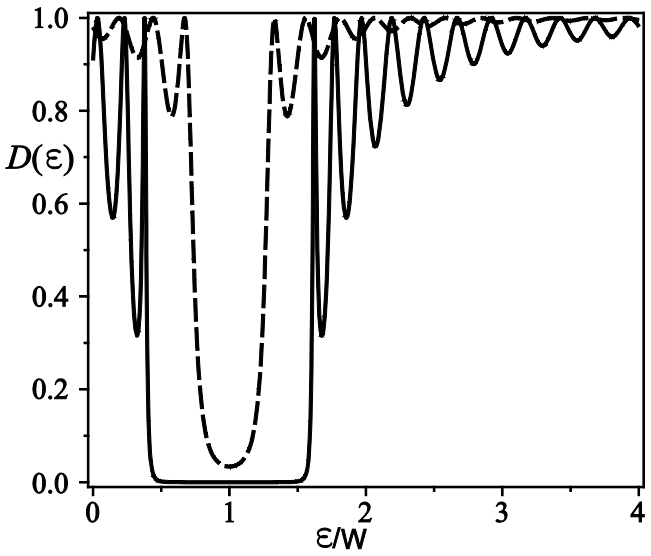

Рис. 7. Залежність коефіцієнту проходження від енергії (нормованої на потенціал W) при двох наборах параметрів: $w = 7$, $\theta_{eff} = 1.5$ *(суцільна крива);* $w = 12$, $\theta_{eff} = 0.2$ *(пунктирна крива).*

Точний розв'язок рівняння Дірака для кусочно-постійних потенціалів і зшивка хвильових функцій дають наступну залежність коефіцієнта проходження від енергії та ефективного хірального кута $\theta_{eff} \equiv \theta - \varphi$:

$$D(\varepsilon,\theta_{eff})=\left\{\cos^2(w\chi)+\frac{(1-\varepsilon/W)^2}{\chi}\sin^2(w\chi)\right\}^{-1}. \qquad (26)$$

У формулі (26) $w=Wa/(\hbar v_F)$ – безрозмірний потенціал розсіяння; $\chi=\kappa\hbar v_F/W$, де $\kappa=\sqrt{(\varepsilon-W)^2-W^2\sin^2\theta_{eff}}/(\hbar v_F)$.

Залежність коефіцієнта проходження від енергії представлена на рис. 7. Ця осцилююча залежність характеризується глибоким провалом. Наявність даного провалу призводить до порушення закону Відемана—Франца і до появи піків на залежності термоерс від хімічного потенціалу. Чисельні розрахунки дозволяють знайти значення хімічного потенціалу, коли обидва ці ефекти діють конструктивно і підвищують термоелектричну добротність. Знайдене оптимальне значення термоелектричної добротності $ZT\simeq 5$ (див. рис. 8).

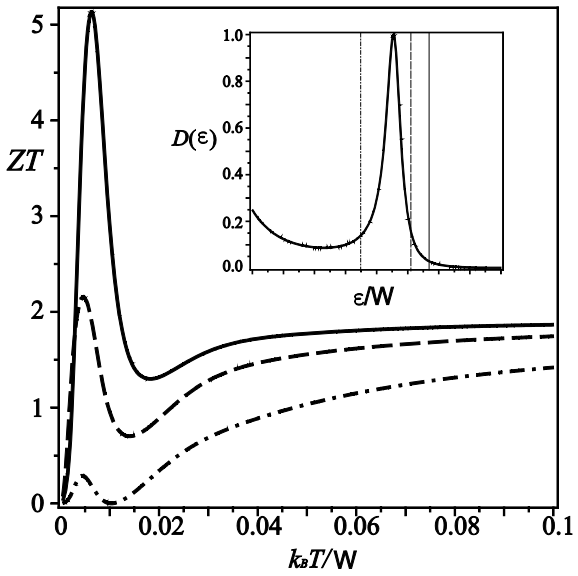

Рис. 8. Температурна залежність термоелектричної добротності при трьох значеннях хімічного потенціалу (положення хімічного потенціалу по відношенню до піку в залежності коефіцієнта проходження від енергії показане на вставці).

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішена важлива задача в області теоретичної фізики конденсованого стану, а саме: теоретично описані квантові ефекти в транспорті спін-поляризованих електронів у наноелектромеханічних системах, які побудовані на базі молекулярних транзисторів.

Основними результатами дисертаційної роботи є наступні:

1. Досліджено вплив неповної поляризації електронів за спіном на область нестійкості електричного шатлу, а також керування за допомогою зовнішнього магнітного поля переходом між шатлівським і вібронним режимами електронного транспорту. Показано, що контролювати

шатлівську нестійкість магнітним полем можна лише для достатньо високих значень ступеня поляризації (чисельно критичне значення ступеня поляризації приблизно дорівнює 64%).

2. Знайдено область нестійкості для магнітного шатлу з неповною поляризацією електронів за спіном. Показано, що при відмінній від стовідсоткової поляризації виникає нижня гілка на залежності критичного магнітного поля, яке відокремлює шатлівську область від вібронної, від ширини рівня. Якісно пояснена фізична природа нижньої гілки.
3. Показана принципова можливість існування термоіндуктованого одноелектронного шатлу та отримана для нього область шатлівської нестійкості.
4. Передбачено новий механізм тертя в наноелектромеханічних системах, що характеризується немонотонною залежністю від температури коефіцієнта тертя.
5. Досліджено термоелектричні характеристики спінтронного термоелектричного пристрою на основі квантової точки. Показано, що термоелектрична добротність (ZT) пристрою, який розглядається, в режимі максимальної потужності в декілька разів перевищує термоелектричну добротність аналогічного пристрою з неполяризованими електронами. Знайдено, що помірна електрон-електронна взаємодія несуттєво знижує термоелектричну добротність у порівнянні з випадком електронів, що не взаємодіють, а в режимі кулонівської блокади оптимальне значення термоелектричної добротності відновлюється.
6. Досліджені термоелектричні ефекти при хіральному тунелюванні електронів через металічну одностінну вуглецеву нанотрубку. Показано, що хіральне тунелювання призводить до порушення закону Відемана—Франца та до появи піків на залежності термоелектрорушійної сили від хімпотенціалу, що, в свою чергу, призводить до високих значень термоелектричної добротності ZT.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ АВТОРОМ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Magnetically controlled single-electron shuttle / **O.A. Ilinskaya**, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, and M. Jonson // ФНТ. – 2015. – Т. 41, № 1. – С. 90–95.
2. Shuttling of spin-polarized electrons in molecular transistors / **O.A. Ilinskaya**, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, Y.W. Park, and M. Jonson // Synthetic Metals. – 2016. – V. 216. – P. 83–87.

3. Mechanically induced thermal breakdown in magnetic shuttle structures / **O.A. Ilinskaya**, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, H.C. Park, and M. Jonson // New J. Phys. – 2018. – V. 20, No. 6. – P. 063036-1–063036-11, https://doi.org/10.1088/1367-2630/aac75e.
4. **Ильинская О.А.** О новом механизме трения в наноэлектромеханических системах / **О.А. Ильинская** // ФНТ. – 2018. – Т. 44, № 8. – С. 1041–1044.
5. Transport properties and enhanced figure of merit of quantum dot-based spintronic thermoelectric device / Yu.D. Zubov, **O.A. Ilinskaya**, I.V. Krive, and A.A. Krokhin // J. Phys. Condens. Matter. – 2018. – V. 30, No. 31. – P. 315303-1–315303-11.
6. Thermoelectric effects in electron chiral tunneling in metallic carbon nanotubes / A.V. Parafilo, **O.A. Ilinskaya**, I.V. Krive, and Y.W. Park // Superlattices and Microstructures. – 2015. – V. 88. – P. 72–79.
7. **Ilinskaya O.A.** The influence of spin polarization on single-electron shuttle instability in the Coulomb blockade regime / **O.A. Ilinskaya** // VI International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 2 – 5, 2015: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2015. – P. 112.
8. **Ильинская О.А.** Термоиндуцированный одноэлектронный магнитный шаттл / **О.А. Ильинская**, С.И. Кулинич, И.В. Криве // XII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах», 1 – 4 грудня, 2015: тези доповідей. – Україна, Харків, 2015. – С. 31.
9. **Ilinskaya O.A.** Shuttle instability induced by temperature gradient / **O.A. Ilinskaya** // VII International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 6 – 10, 2016: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2016. – P. 182.
10. Zubov Yu.D. Optimal efficiency of thermoelectrics based on thermomagnetic effect in tunneling of spin-polarized electrons through a quantum dot in external magnetic field / Yu.D. Zubov, **O.A. Ilinskaya** // VII International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 6 – 10, 2016: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2016. – P. 183.
11. Zubov Yu.D. Optimal performance of magnetically controlled spintronical thermoelectrics / Yu.D. Zubov, **O.A. Ilinskaya**, I.V. Krive // Международный юбилейный семинар «Современные проблемы физики твердого тела», посвященный памяти Э.А. Канера, 22 – 23 ноября, 2016: тезисы докл. – Украина, Харьков, 2016. – С. 19.
12. Zubov Yu.D. Optimal thermoelectric performance of nanodevices based on single wall carbon nanotubes and single molecule transistors / Yu.D. Zubov, **O.A. Ilinskaya**, I.V. Krive // V Наукова конференція «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології», 1 – 2 грудня, 2016: тези доповідей. – Україна, Київ, 2016. – С. 32.
13. **Ilinskaya O.A.** Influence of electron-electron correlation on figure of merit of spintronical thermoelectrics controlled by magnetic field / **O.A. Ilinskaya**, Yu.D. Zubov // VIII International Conference for Professionals & Young

Scientists “Low Temperature Physics”, May 29 – June 2, 2017: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2017. – P. 193.

14. **Ilinskaya O.A.** Temperature dependent friction in a single-electron shuttle / **O.A. Ilinskaya** // IX International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 4 – 8, 2018: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2018. – P. 184.

АНОТАЦІЯ

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

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

Дисертація присвячена теоретичному дослідженню нових ефектів у таких наноелектромеханічних системах як електричний і магнітний одноелектронні шатли з частковою поляризацією електронів і термоіндуктований одноелектронний шатл, а також побудові теорії термоелектричних ефектів у спінтронних молекулярних транзисторах. Вивчений вплив неповної поляризації на області нестійкості електричного і магнітного шатлу. Показана принципова можливість створення одноелектронного шатлу з тепловим джерелом енергії. Запропонований новий механізм тертя в наноелектромеханічних системах. Оптимізовано термоелектричну добротність спінтронного транзистора на основі квантової точки та молекулярного транзистора на основі пружно деформованої металічної вуглецевої нанотрубки.

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

АННОТАЦИЯ

Ильинская О.А. Квантовые электромеханические и термоэлектрические эффекты в наносистемах со спин-поляризованными электронами. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. – Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины, Харьков, 2018.

Диссертация посвящена теоретическому изучению новых эффектов в таких наноэлектромеханических системах как электрический и магнитный одноэлектронные шаттлы с неполной поляризацией электронов в электродах и термоиндуцированный одноэлектронный шаттл, а также построению теории термоэлектрических эффектов в спинтронных молекулярных транзисторах.

Найдена область шаттловской неустойчивости электрического шаттла с частичной поляризацией электронов по спину в режиме кулоновской блокады. Показано, что контролировать шаттловскую неустойчивость в одноэлектронном электрическом шаттле с помощью внешнего магнитного поля можно только для достаточно высокой степени поляризации электронов по спину. Численно это критическое значение степени поляризации приблизительно равно 64%. Получено, что в отсутствие кулоновской блокады управлять шаттловской неустойчивостью с помощью магнитного поля в адиабатическом режиме электронного транспорта можно только для степеней поляризации, близких к 100%.

Обнаружено, что между областями шаттловской неустойчивости одноэлектронного магнитного шаттла с полностью и частично поляризованными по спину электронами в электродах есть качественное отличие. А именно, в случае частичной поляризации появляется нижняя ветвь на зависимости критического магнитного поля, разделяющего шаттловскую и вибронную области электронного транспорта, от ширины уровня (энергии туннельной связи).

Показана принципиальная возможность создания одноэлектронного шаттла с тепловым источником энергии. Найдена область неустойчивости термоиндуцированного одноэлектронного магнитного шаттла в переменных «магнитное поле – разность температур между электродами».

Предложен новый механизм трения в наноэлектромеханических системах. Возникновение внутреннего трения связано с наличием сил (кулоновских либо обменных), действующих между вибрирующим квантовым дотом и электродом, наряду с наличием обратного туннелирования электронов в электрод, поддерживаемый при конечной температуре. Показано, что коэффициент внутреннего трения обладает немонотонной температурной зависимостью и стремится к нулю в пределе высоких температур.

Рассчитана термоэлектрическая добротность спинтронного транзистора на основе квантового дота. Показано, что для оптимального магнитного поля, которое соответствует максимальной мощности, термоэлектрическая добротность спинтронного транзистора в несколько раз превышает термоэлектрическую добротность аналогичной термоэлектрической системы с неполяризованными электронами. Изучено влияние электрон-электронного взаимодействия на термоэлектрическую добротность спинтронного транзистора, и показано, что умеренное взаимодействие понижает термоэлектрическую добротность, а в режиме кулоновской блокады (что соответствует сильному взаимодействию) достигаются оптимальные значения термоэлектрической добротности, характерные для невзаимодействующих электронов.

Изучены термоэлектрические эффекты, возникающие при киральном туннелировании электронов через упруго деформированную металлическую углеродную нанотрубку. Показано, что киральное туннелирование приводит к нарушению закона Видемана—Франца и появлению острых всплесков в

термоэдс как функции химического потенциала. Проведены численные расчеты, позволившие найти значение химпотенциала, при котором оба эти эффекта действуют конструктивно и повышают термоэлектрическую добротность. Найдено оптимальное значение термоэлектрической добротности (около 5).

Ключевые слова: наноэлектромеханические системы, киральное туннелирование, термоэлектрические эффекты, одноэлектронный шаттл, квантовый дот, молекулярный транзистор, термоэлектрическая добротность.

ABSTRACT

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

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

The thesis comprises a theoretical investigation of novel effects in nanoelectromechanical systems such as electric and magnetic single-electron shuttle with partially spin-polarized electrons and thermo-induced single-electron shuttle, as well as the construction of the theory of thermoelectric effects in spintronic molecular transistors. The influence of partial polarization on the instability domain of the electric and magnetic shuttle has been investigated. The operation principle of the thermally driven single-electron shuttle has been shown. A new friction mechanism in nanoelectromechanical systems has been proposed. Figure of merit of spintronic thermoelectric, based on a quantum dot, and of molecular transistor, based on elastically deformed metallic carbon nanotube, has been optimized.

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

Формат 60х84/16. Ум. друк. арк. 0.9. Тир. 100 прим. Зам. № 553-18.
Підписано до друку 02.11.2018. Папір офсетний.

Надруковано з макету замовника у ФОП Бровін О.В.
61022, м. Харків, вул. Трінклера, 2, корп.1, к.19. Т. (057) 758-01-08, (066) 822-71-30
Свідоцтво про внесення суб'єкта до Державного реєстру
видавців та виготовників видавничої продукції серія ДК 3587 від 23.09.09 р.

СТИЛЬ·ИЗДАТ®
ТИПОГРАФИЯ
www.stil-izdat.com