

**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

**Шкоп Анастасія Дмитрівна**

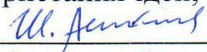
УДК 538.93

**ДИСЕРТАЦІЯ**

**ЕФЕКТИ ЕЛЕКТРОН-ЕЛЕКТРОННОЇ ТА ЕЛЕКТРОН-ВІБРОННОЇ  
ВЗАЄМОДІЇ В ТРАНСПОРТІ ЗАРЯДУ ТА СПІНУ В ТУНЕЛЬНИХ  
НАНОСТРУКТУРАХ**

01.04.02 – теоретична фізика

Подається на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів та текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело  А. Д. Шкоп  
(підпис здобувача)

**Науковий керівник: Криве Ілля Валентинович,  
доктор фізико-математичних наук, професор**

Харків 2020

## АНОТАЦІЯ

**Шкоп А.Д. Ефекти електрон-електронної та електрон-вібронної взаємодії в транспорті заряду та спіну в тунельних наноструктурах. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. – Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б.І. Веркіна НАН України, Харків, 2020.

Дисертація присвячена теоретичному дослідженню тунельного транспорту електронів в вуглецевих нанотрубках та молекулярних транзисторах при врахуванні електрон-електронної та електрон-вібронної взаємодії.

Досліджено тунельний транспорт в мезоскопічному транзисторі на основі майоранівського нанодроту. Знайдено особливості струму та кондуктансу системи контактів «метал–майоранівський нанодріт–метал», що зумовлені сильною асиметрією за тунельними зв'язками. Майоранівський нанодріт – це топологічний надпровідник, сформований на основі одновимірного ланцюжку, що розташований на поверхні надпровідника. На кінцях нанодроту утворюється пара майоранівських зв'язаних станів – квазічастинкових станів з енергією нижче надпровідникової щілини. При низьких напругах вони забезпечують тунельний транспорт. Методом рівнянь руху отримано вирази для середнього струму при двох конфігураціях пристрою. Для системи контактів «метал–заземлений майоранівський нанодріт–метал» досліджено диференціальний кондуктанс. Показано, що завдяки сильній асиметрії системи за тунельними контактами за наявності розщеплення пари майоранівських станів за енергією кондуктанс досягає максимуму при нульовій напрузі. Зауважимо, що максимум кондуктансу при нульовій напрузі є зручною для експериментаторів ознакою присутності майоранівських станів у системі. Але, як відомо, коли ці стани розщеплені, в пристроях з іншою геометрією максимум зміщується в область більших енергій і при нульовій напрузі не спостерігається. Для системи «метал–незаземлений майоранівський нанодріт–метал», асиметричної за тунельними зв'язками, отримано вольт-амперні характеристики за довільних значень енергії

розщеплення станів. Для нульового розщеплення показано, що, уразі сильної асиметрії, криві насичуються при нижчих напругах, ніж при резонансному електронному тунелюванні в асиметричній системі без майоранівських станів. Визначено характерну властивість температурної залежності кондуктансу сильно асиметричної майоранівської системи і показано, що кондуктанс швидко спадає на аномально низьких енергіях, порівняно з кондуктансом при симетричному зв'язку.

В дисертаційній роботі приділено увагу таким важливим низьковимірним системам як вуглецеві нанотрубки. Відомо, що в металевій одношаровій вуглецевій нанотрубці електрон-фононна взаємодія має матричну форму. В дисертації показано, що, разом з тим, що в спектрі електронів утворюється щілина пайерлсівської природи, яка формується в стаціонарному полі зміщень за рахунок електрон-фононної взаємодії, має місце ефект, що електрон-електронні кореляції, викликані електрон-фононною взаємодією, також приводять до появи енергетичної щілини. Методом рівнянь Хартрі-Фока визначено вираз для цієї щілини, що залежить, зокрема, від кута хіральності нанотрубки. Поява щілини в спектрі порушує умови для парадоксу Клейна, тобто умови для проходження електронів крізь плавні електростатичні потенціали в нанотрубках без відбиття назад при будь-яких енергіях. Розглянуто тунелювання через локальний електростатичний потенціал в нанотрубці. З рівняння Хартрі-Фока з розсіювачем при подальшому застосуванні методу ренормгрупи отримано коефіцієнт проходження, перенормований електрон-електронними кореляціями. Він залежить від кута хіральності нанотрубки. Це призводить до ефекту хірального тунелювання. Зокрема, при нульовому хіральному куті перенормування відсутнє і в системі відновлюється парадокс Клейна.

Ще однією задачею, розглянутою в дисертаційній роботі, є струм взаємодіючих електронів у спітронному молекулярному транзисторі в зовнішньому магнітному полі. Вивчається наступна система. Молекула, яка представлена однорівневою вібруючою квантовою точкою, поміщена між електродами, що повністю поляризовані за спіном у протилежних напрямках.

Коливання центру мас квантової точки моделюються коливаннями гармонічного осцилятора. Зовнішнє магнітне поле спрямоване перпендикулярно векторам намагніченості електродів. В такій геометрії при нульовій величині зовнішнього магнітного поля струм відсутній, наявна «спінова блокада» струму. Зовнішнє магнітне поле індукує перевероти спіну на точці та знімає «спінову блокаду». Зв'язок вібронної та електронної підсистем враховано як енергію заряджених частинок, накопичених на квантовій точці, при зміщенні в електричному полі електродів під напругою. Взято до уваги кулонівські кореляції в системі.

При слабкому тунельному зв'язку методом матриці густини в теорії збурень за  $\Gamma \ll \max\{T, eV\}$ , де  $\Gamma$  – тунельна ширина рівня енергії на точці (однакова для обох контактів в симетричній системі),  $T$  – температура системи (в енергетичних одиницях),  $e$  – елементарний заряд,  $V$  – тягнуча напруга, знайдено середній струм через квантову точку. Чисельними методами розраховано вольт-амперні характеристики та залежності кондуктансу від температури. Поряд із можливістю пружного тунелювання, електрони можуть тунелювати непружно, випускаючи або поглинаючи віброни. Відповідно до відомих результатів, в молекулярному транзисторі при низьких температурах залежність струму від тягнучої напруги має вигляд ступінчастої функції. Стрибки струму (сходинок Франка-Кондона) виникають при відкритті нових непружних каналів тунелювання.

Отримано, що залежності струму в нашій моделі мають подвоєну кількість сходинок Франка-Кондона, порівняно зі звичайним молекулярним транзистором. Кожний інтервал напруг  $eV = 2\hbar\omega$  ( $\omega$  – частота коливань квантової точки,  $\hbar$  – стала Планка, подання напруги симетричне) має дві сходинок. Подвоєння пояснюється тим, що в системі із зеєманівським розщепленням подвоюється число пружних каналів, на кожному з яких базуються непружні канали.

Виявлено, що при сильній кулонівській взаємодії має місце пригнічення висоти сходинок Франка-Кондона та поява областей без сходинок на вольт-амперних характеристиках (мається на увазі, що наявні в цих областях сходинок нехтовно малі за висотою, порівняно з першою сходиною). Ефекти зумовлені

взаємною процесів зняття блокади Франка-Кондона та кулонівської блокади тягнуною напругою. Для окремого пружного каналу блокада Франка-Кондона знімається за певну кількість суттєвих сходинок. Пригнічення висоти сходинок або їх зникнення має місце, коли кулонівська взаємодія настільки велика, що блокада Франка-Кондона з відкритих каналів знімається раніше, ніж відкривається новий пружний канал. Області без сходинок також мають місце для системи в сильному зовнішньому магнітному полі.

При цьому, як показано в дисертаційній роботі, зняття кулонівської блокади тягнуною напругою відбувається поетапно, так як наявні два пружні канали тунелювання другого електрону на квантову точку, і один з цих каналів відкривається раніше іншого за енергією. Етапи розділені інтервалом напруг, що дорівнює енергії розщеплення в зовнішньому магнітному полі.

Розраховано залежність кондуктансу від температури. Отримано, що температурна залежність кондуктансу спітронного молекулярного транзистора при сильній електрон-вібронній взаємодії є аномально немонотонною в області середніх температур в широкому діапазоні значень зовнішнього магнітного поля та при довільній кулонівській енергії. Аномальна залежність зумовлена збільшенням кондуктансу за рахунок появи термоіндукованих вібронів на квантовій точці, при тому, що присутнє сильне пригнічення через сильну електрон-вібронну взаємодію. Показано, що величина збільшення кондуктансу залежить від енергії кулонівської взаємодії та величини магнітного поля.

У граничному випадку відсутності кулонівської взаємодії середній струм в спітронному молекулярному транзисторі отримано методом рівнянь руху. За допомогою аналітичного виразу побудовано вольт-амперні характеристики та залежність кондуктансу від температури, яка має аномально немонотонну поведінку. Отримано асимптотичні вирази для температурної залежності кондуктансу при низьких та високих температурах з урахуванням зовнішнього магнітного поля.

Спітронний молекулярний транзистор також розглянуто як основу наноелектромеханічної системи. В такій системі, якщо дисипація слабка,

можливе виникнення електронного шатлювання – човникового транспорту, при якому перенос заряду та спіну здійснюється квантовою точкою при періодичному механічному русі. Досліджується виникнення термоіндукованого магнітнокерowanego шатлювання. Магнітний шатл зумовлений обмінною взаємодією між спіном електрону на квантовій точці та намагніченостями електродів. При термоіндукованому шатлюванні джерелом енергії служить не зовнішня напруга, а різниця температур електродів. Електрон-вібронна взаємодія проявляється в залежності обмінної енергії та тунельної амплітуди від зміщення квантової точки.

З використанням методу матриці густини в теорії збурень за параметром  $\Gamma_\alpha / T_\alpha \ll 1$ , де  $\Gamma_\alpha$  – ширина рівня енергії на точці при тунелюванні з електроду  $\alpha = (L, R)$ ,  $T_\alpha$  – температура відповідного електроду, знайдено систему рівнянь для матричних елементів матриці густини, за допомогою якої знайдено рівняння руху для координати центру мас квантової точки. Показано, що кулонівська взаємодія сприяє термоіндукованому магнітнокерowanego шатлюванню. Чисельно знайдене критичне (порогове) значення енергії кулонівської взаємодії, при якому відбувається перехід до режиму шатлювання, тобто коли замість коливань, що загасають, в системі мають місце коливання з великою амплітудою. Виявлено, що термоіндукований магнітний шатл – порогове явище за різницею температур електродів, величиною кулонівської взаємодії і зовнішнього магнітного поля.

**Ключові слова:** кулонівська взаємодія, електрон-вібронна взаємодія, майоранівські ферміони, хіральне тунелювання, парадокс Клейна, молекулярний транзистор, блокада Франка-Кондона, електронний шатл.

## ABSTRACT

**Shkop A.D. Effects of electron-electron and electron-vibron interaction in charge and spin transport in tunnel nanostructures. – Manuscript.**

Thesis for a candidate's degree in physics and mathematics on speciality 01.04.02 – theoretical physics. – B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering, NAS of Ukraine, Kharkiv, 2020.

The thesis is devoted to theoretical investigation of tunnel transport of electrons in carbon nanotubes and molecular transistors taking into account electron-electron and electron-vibron interaction.

The tunnel transport in the mesoscopic transistor based on Majorana nanowire has been investigated. The features of the current and conductance of a system of contacts “metal–Majorana nanowire–metal”, caused by strong asymmetry over the tunnel couplings, have been found. The Majorana nanowire is a topological superconductor formed by one-dimensional chain placed on the surface of the superconductor. At the ends of the nanowire a pair of Majorana bound states – quasiparticle states with the energy below the superconducting gap, is formed. At low voltages they provide tunnel transport. Using the equations of motion method, the expressions for the average current for two configurations of the device have been obtained. For the system “metal–grounded Majorana nanowire–metal” the differential conductance has been investigated. It has been shown that due to the strong asymmetry of the system over tunnel contacts in presence of the splitting of the pair of Majorana states over the energy the conductance reaches its maximum at zero voltage. Note that the maximum of the conductance at zero voltage (zero-bias peak, ZBP) is convenient fingerprint of the presence of Majorana states in the system for the experimenters. But, as it is known, when these states are split, in the devices with a different geometry the maximum is shifted to larger energies and not observed at zero voltage. For the “metal–ungrounded Majorana nanowire–metal” system, asymmetric over tunnel couplings, the current-voltage characteristics for arbitrary values of splitting energy have been obtained. For zero splitting it has been shown that in the case of strong asymmetry the curves are saturated at lower voltages than for resonant electron

tunneling in an asymmetric system without Majorana states. The feature of the temperature dependence of the conductance of a strongly asymmetric Majorana system has been determined and it is shown that the conductance decreases rapidly at anomalously low energies compared to the conductance for symmetric coupling.

In the thesis we pay attention to such an interesting low-dimensional objects as carbon nanotubes. It is known that in a metal single-wall carbon nanotube the electron-phonon interaction has a matrix form. In the thesis it has been shown that, along with the fact, that in electron spectrum appears the gap of the Peierls nature, formed in a stationary field of displacements due to electron-phonon interaction, there is an effect, that electron-electron correlations caused by electron-phonon interaction also result in energy gap. Using Hartree-Fock equation method the expression for the gap and its dependence, in particular, on the chiral angle of the nanotube, have been determined. The appearance of a gap in the spectrum violates the conditions for the Klein paradox, i.e. the conditions for the transmission of the electrons through smooth electrostatic potentials without backscattering for all energies. The tunneling through local electrostatic potential in the nanotube has been considered. From the Hartree-Fock equation with the scatterer with farther using of the renormgroup method the transmission coefficient renormalized by electron-electron correlations has been obtained. It depends on the chiral angle of the nanotube. This results in the chiral tunneling effect. In particular, at zero chiral angle, the renormalization is absent and the Klein paradox is restored in the system.

Another problem discussed in the thesis is the current of interacting electrons in a spintronic molecular transistor in an external magnetic field. The following system has been considered. A molecule, represented by a single-level vibrating quantum dot, is placed between electrodes, which are fully spin-polarized in opposite directions. The vibrations of the center of mass of the quantum dot are modeled by the vibrations of a harmonic oscillator. The external magnetic field is directed perpendicular to the electrode magnetization vectors. In such geometry, at zero external magnetic field the current is absent, the “spin blockade” is present in the system. An external magnetic field induces spin flips and removes the “spin blockade”. The coupling of the vibronic



and electronic subsystems has been taken into account as the energy of charged particles, accumulated in the quantum dot, when they are displaced in the electrostatic field of biased electrodes. The Coulomb correlations in the system are taken into account.

For weak tunnel couplings using the density matrix method in perturbation theory over  $\Gamma \ll \max\{T, eV\}$ , where  $\Gamma$  is the tunnel width of the energy level in the dot (the same for both contacts in the symmetric system),  $T$  is the temperature of the system (in energy units),  $e$  is the elementary charge,  $V$  is the bias voltage, the average current through the quantum dot has been found. Current-voltage characteristics and the dependences of the conductance on temperature have been calculated using numerical methods. Along with the possibility of elastic tunneling, the electrons can tunnel inelastically, emitting or absorbing vibrons. According to known results? the dependence of the current on bias voltage in the molecular transistor at low temperatures have the form of step-like function. Current jumps (Franck-Condon steps) occur, when new inelastic tunnel channels open.

It has been obtained that the current dependences in our model have doubled number of Franck-Condon steps compared to a conventional molecular transistor. Every voltage interval  $eV = 2\hbar\omega$  ( $\omega$  is the frequency of dot oscillations,  $\hbar$  is the Planck's constant, the voltage is applied symmetrically) has two steps. The doubling is explained by the fact that the system with Zeeman splitting has doubled number of elastic channels, with the inelastic channels based on it.

It has been revealed that at strong Coulomb interaction the Frank-Condon steps are suppressed and the regions without steps on the current-voltage characteristics appears (meaning that the steps in these regions are negligibly small compared to first step). The effects are caused by the interplay of Franck-Condon and Coulomb blockade lifting by bias voltage. For a single elastic channel the Frank-Condon blockade is lifted after a certain number of essential steps. The suppression of the steps or their disappearance takes place when the Coulomb interaction is so large, that the Frank-Condon blockade from the open channels is lifted before new elastic channel

open. The regions without steps also occur for the system in a strong external magnetic field.

At the same time, as has been shown in the thesis, the lifting of the Coulomb blockade by bias voltage proceeds in stages – there are two elastic channels for tunneling of the second electron to the quantum dot, and one of these channels opens earlier than the other in energy. The steps are separated by a voltage interval equal to energy splitting in an external magnetic field.

The dependence of the conductance on temperature has been calculated. It has been obtained that the temperature dependence of the conductance of spintronic molecular transistor at strong electron-vibron interaction is anomalously non-monotonic in the region of intermediate temperatures in a wide range of external magnetic fields and at arbitrary Coulomb energy. The anomalous dependence is caused by an increase of the conductance due to the appearance of thermally induced vibrons in the quantum dot along with strong suppression due to strong electron-vibron interaction. It has been shown that the magnitude of the growth of the conductance depends on the Coulomb interaction and the external magnetic field.

In the limiting case of the absence of Coulomb interaction, the average current in spintronic molecular transistor has been obtained using the equations of motion method. The analytical expression has been used to calculate the current-voltage characteristics and the dependence of the conductance on temperature. Asymptotic expressions for the temperature dependence of the conductance at low and high temperatures, taking into account the external magnetic field, have been obtained.

The spintronic molecular transistor has been also considered as the basis for nanoelectromechanical system. In such a system, if the dissipation is weak, electronic shuttling became possible, and charge and spin transfer is carried out by periodic mechanical motion of the quantum dot. The emergence of thermo-induced magnetically controlled shuttling has been investigated. The oscillations of the magnetic shuttle are caused by the exchange interaction of the magnetizations of the electrodes with the magnetic moment associated with the spin in the quantum dot. In thermo-induced shuttling the energy source is not the external voltage, but the

difference of the temperatures of the electrodes. The electron-vibron interaction is manifested in the dependence of the exchange energy and the tunneling amplitude on the displacement of the quantum dot.

Using the density matrix method in the theory of perturbations over the parameter  $\Gamma_\alpha / T_\alpha \ll 1$ , where  $\Gamma_\alpha$  is the width of energy level in the dot for tunneling from the electrode  $\alpha = (L, R)$ ,  $T_\alpha$  is the temperature of the corresponding electrode, the system of equations for density matrix elements has been found. With the help of it we obtain the equation of motion for the coordinate of the center of mass of the quantum dot. It has been shown that the Coulomb interaction promotes thermo-induced magnetic shuttling. It has been found the critical (threshold) value of the Coulomb interaction energy, which corresponds to the transition to shuttling regime, that is there are oscillations with large amplitude in the system instead damped oscillations. It has been shown that thermo-induced magnetic shuttle is a threshold phenomenon over the parameters of the difference of the temperatures of the electrodes, the magnitude of the Coulomb interaction, and the external magnetic field.

**Keywords:** Coulomb interaction, electron-vibron interaction, Majorana fermions, chiral tunneling, Klein paradox, molecular transistor, Frank-Condon blockade, electron shuttle.

### Список публікацій здобувача

1. Low-energy anomalies in electron tunneling through strongly asymmetric Majorana nanowire / **A.D. Shkop**, A.V. Parafilo, I.V. Krive, R.I. Shekhter // *Low Temp. Phys.* – 2016. – V. 42, No. 4. – P. 308–312.
2. Индуцированная взаимодействием щель в спектре электронов и киральные эффекты в металлических углеродных нанотрубках / **А.Д. Шкоп**, С.И. Кулинич, А.В. Парафило, И.В. Криве // *ФНТ.* – 2017. – Т. 43, № 12. – С. 1745–1753.
3. **Shkop A.D.** Effects of the Franck-Condon blockade in tunneling of spin-polarized electrons in a molecular transistor / **A.D. Shkop**, O.M. Bahrova // *Вісник ХНУ, серія «Фізика».* – 2017. – № 27. – С. 53–58.
4. Coulomb effects on thermally induced shuttling of spin-polarized electrons / O.A. Plinskaya, **A.D. Shkop**, D. Radic, H.C. Park, I.V. Krive, R.I. Shekhter, M. Jonson // *ФНТ.* – 2019. – Т. 45, № 9. – С. 1208–1216.
5. Interplay of vibration and Coulomb effects in transport of spin-polarized electrons in a single-molecule transistor / **A.D. Shkop**, O.M. Bahrova, S.I. Kulinich, I.V. Krive // *Superlattices and Microstructures.* – 2020. – V. 137, No. 1. – P. 106356-1–106356-11.
6. **Shkop A.D.** Manifestation of the Majorana fermions in transport through asymmetric single-charge transistor / **A.D. Shkop**, A.V. Parafilo // VI International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 2 – 5, 2015: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2015. – P. 31.
7. **Шкоп А.Д.** Низкоэнергетическая аномалия в электронном транспорте через квантовый дот с майорановскими фермионами / **А.Д. Шкоп**, А.В. Парафило, И.В. Криве // XII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах», 1 – 4 грудня, 2015: тези доповідей. – Україна, Харків, 2015. – С. 50.
8. **Shkop A.D.** Interaction-induced gap and chiral effects in single-wall carbon nanotube / **A.D. Shkop**, S.I. Kulinich, I.V. Krive // VIII International

- Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, May 29 – June 2, 2017: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2017. – P. 57.
9. Can acoustic phonons generate energy gap in 1D metallic systems? / **A.D. Shkop**, S.I. Kulinich, A.V. Parafilo, I.V. Krive // XIII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» присвячена 100-річчю з дня народження академіка І.М. Ліфшиця, 5 – 8 грудня, 2017: тези доповідей. – Україна, Харків, 2017. – С. 108.
  10. Bahrova O.M. Effects of Franck-Condon blockade in tunneling of spin-polarized electrons in a molecular transistor / O.M. Bahrova, **A.D. Shkop** // XIII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» присвячена 100-річчю з дня народження академіка І.М. Ліфшиця, 5 – 8 грудня, 2017: тези доповідей. – Україна, Харків, 2017. – С. 97.
  11. **Shkop A.D.** Effects of magnetopolaronic blockade in transport of spin-polarized electrons / **A.D. Shkop**, O.M. Bahrova // IX International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 4 – 8, 2018: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2018. – P. 185.
  12. **Shkop A.D.** Effects of Coulomb interaction and Franck-Condon blockade in tunneling of spin-polarized electrons in a molecular transistor / **A.D. Shkop**, O.M. Bahrova, I.V. Krive // X International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 3 – 7, 2019: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2019. – P. 155.
  13. Ilinskaya O.A. Coulomb effects in a thermally driven magnetic shuttle / O.A. Ilinskaya, **A.D. Shkop**, I.V. Krive // VII International Conference “Nanotechnology and Nanomaterials”, August 27 – 30, 2019: book of abstr. – Ukraine, Lviv, 2019. – P. 562.

## ЗМІСТ

|   |    |
|---|----|
| ВСТУП.....  | 16 |
| РОЗДІЛ 1. ТРАНСПОРТ ВЗАЄМОДІЮЧИХ ЕЛЕКТРОНІВ В<br>НАНОСТРУКТУРАХ (ОГЛЯД). .....  | 22 |
| 1.1. Тунельний транспорт в транзисторі на основі майоранівського квантового<br>дроту. ....  | 22 |
| 1.2. Вплив взаємодії електронів на тунелювання крізь потенціальні бар'єри в<br>хіральних вуглецевих наторубках. ....                                | 25 |
| 1.3. Транспорт заряду та спіну в молекулярному транзисторі. ....  | 28 |
| 1.4. Тунелювання електронів в наноелектромеханічних системах. ....  | 33 |
| РОЗДІЛ 2. НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНІ АНОМАЛІЇ ПРИ ТУНЕЛЮВАННІ<br>ЕЛЕКТРОНІВ КРІЗЬ СИЛЬНО АСИМЕТРИЧНИЙ МАЙОРАНІВСЬКИЙ<br>НАНОДРІТ .....                       | 37 |
| 2.1. Рівняння руху та парціальні струми. ....   | 37 |
| 2.2. Диференціальний кондуктанс. Пік в кондуктансі при нульовій напрузі. ..   | 41 |
| 2.3. Незаземлений майоранівський нанодріт. ....   | 44 |
| Висновки. ....  | 48 |
| РОЗДІЛ 3. ІНДУКОВАНА ВЗАЄМОДІЄЮ ЩІЛИНА В СПЕКТРІ ЕЛЕКТРОНІВ<br>ТА ХІРАЛЬНІ ЕФЕКТИ В МЕТАЛЕВИХ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБКАХ .....                          | 50 |
| 3.1. Розсіяння електронів на акустичних фононах в межах однієї долини.<br>Пайєрлсівська щілина. ....  | 50 |
| 3.2. Індукована електрон-електронними кореляціями хіральна щілина. ....   | 56 |
| 3.3. Коефіцієнт проходження $\delta$ -функціонального бар'єру. ....   | 60 |
| 3.4. Перенормування коефіцієнта проходження локального електростатичного<br>потенціалу. ....  | 62 |
| Висновки. ....  | 66 |
| РОЗДІЛ 4. ЕФЕКТИ ЕЛЕКТРОН-ВІБРОННОЇ ТА КУЛОНІВСЬКОЇ ВЗАЄМОДІЇ<br>ПРИ ТУНЕЛЮВАННІ СПІН-ПОЛЯРИЗОВАНИХ ЕЛЕКТРОНІВ В<br>МОЛЕКУЛЯРНОМУ ТРАНЗИСТОРІ ..... | 67 |
| 4.1. Ефекти блокади Франка-Кондона при тунелюванні спін-поляризованих<br>електронів в молекулярному транзисторі. ....                               | 67 |
| 4.1.1. Модель, гамільтоніан та рівняння руху. ....  | 67 |
| 4.1.2. Струм та кондуктанс в спітронному молекулярному транзисторі. ...   | 72 |
| 4.2. Вплив кулонівської взаємодії на транспортні характеристики<br>молекулярного транзистора зі спін-поляризованими електродами. ....               | 79 |

|  |            |
|--|------------|
|  | 15         |
| 4.2.1. Рівняння для елементів матриці густини.....   | 80         |
| 4.2.2. Струм спіно-поляризованих електронів в молекулярному транзисторі. ....  | 83         |
| 4.2.3. Результати чисельних розрахунків струму і кондуктансу та дискусія.....  | 86         |
| Висновки.....  | 100        |
| <b>РОЗДІЛ 5. ВПЛИВ ЕЛЕКТРОН-ЕЛЕКТРОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ НА ТЕРМОІНДУКОВАНЕ ШАТЛЮВАННЯ ПОЛЯРИЗОВАНИХ ЗА СПІНОМ ЕЛЕКТРОНІВ .....</b>     | <b>101</b> |
| 5.1. Модель, гамільтоніан та кінетичні рівняння. ....  | 101        |
| 5.2. Вплив електрон-електронної взаємодії на електронне шатлювання в системі, де прикладено зовнішню напругу до електродів. .... | 109        |
| 5.3. Ефекти кулонівської взаємодії при термоіндукованому магнітокерованому шатлюванні. ....                                      | 114        |
| Висновки.....  | 120        |
| <b>ВИСНОВКИ .....</b>  | <b>122</b> |
| <b>СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ .....</b>  | <b>124</b> |
| <b>ДОДАТОК А. СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ.....</b>   | <b>133</b> |
| <b>ДОДАТОК Б. ВІДОМОСТІ ПРО АПРОБАЦІЮ РЕЗУЛЬТАТІВ ДИСЕРТАЦІЇ.....</b>  | <b>135</b> |

## ВСТУП

**Актуальність теми.** Теоретичні дослідження транспорту заряду та спіну у нанорозмірних системах, зокрема, в мезоскопічних транзисторах, формують новий напрямок у фізиці конденсованого стану у зв'язку з розвитком нанотехнологій у мікроелектроніці та розробкою квантових комп'ютерів. При цьому при розгляді теоретичних моделей суттєвим стає врахування можливих типів взаємодії між електронними, спіновими та пружними збудженнями, що максимально наближає такі моделі до реальних систем. Опис транспортних явищ за наявності такої взаємодії дозволяє узагальнити раніше відомі ефекти та передбачити нові явища в сильно корельованих електронних системах.

Пошук нових підходів до створення квантового комп'ютера стимулює інтерес до вивчення майоранівських станів, які утворюються, наприклад, на кінцях нанодроти на поверхні надпровідника. Це ставить задачу їх виявлення за допомогою тунельних експериментів. Невирішеною задачею в теорії постає аналіз транспортних властивостей системи контактів «метал–майоранівський нанодріт–метал», що має сильну асиметрію за тунельними зв'язками.

Становить також принциповий інтерес питання впливу електрон-електронної та електрон-фононої взаємодії на транспорт заряду в таких важливих низьковимірних системах, як вуглецеві нанотрубки. Зокрема, слід очікувати, що електрон-фононна взаємодія в металевій одношаровій вуглецевій нанотрубці зумовить появу ефективної електрон-електронної взаємодії та суттєво вплине на діраківський спектр електронів. Це може привести до появи енергетичної щілини, що порушує умови для парадоксу Клейна, тобто умови проходження плавних електростатичних потенціалів без відбиття назад за будь-яких енергій. Слід також очікувати, що взаємодія електронів здатна призвести до зменшення коефіцієнту проходження енергетичного бар'єру в нанотрубці.

Вбачається важливим вивчення тунельного транспорту взаємодіючих електронів в молекулярному транзисторі. На транспортні характеристики транзистора, в якому квантова точка (молекула) має коливальні ступені свободи,



суттєво впливає електрон-вібронна взаємодія. В спінтронному молекулярному транзисторі з поляризованими за спіном електронами важливо проаналізувати вплив зовнішнього магнітного поля на вольт-амперні характеристики. Слід очікувати, що кулонівська взаємодія може призвести до пригнічення струму в пристрої.

Важливою задачею є також дослідження електронного шатлювання – човникового транспорту заряду та спіну в транзисторі, коли перенос електронів здійснюється рухомою квантовою точкою при періодичному механічному русі. За наявності обмінних сил в спінтронному молекулярному транзисторі можливе термоіндуковане магнітокероване шатлювання, в якому вирішальну роль відіграє кулонівська взаємодія, що приводить до нових транспортних ефектів.

Описане вище коло важливих невирішених питань, що стосуються теоретичного дослідження транспортних властивостей наносистем при врахуванні різних типів взаємодії, визначає **актуальність** даної дисертаційної роботи.

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

**Мета і завдання досліджень.** *Метою* дисертаційної роботи є теоретичний опис впливу електрон-електронної та електрон-вібронної взаємодії на тунельний транспорт заряду та спіну в вуглецевих нанотрубках та молекулярних транзисторах.

Для досягнення поставленої мети в дисертаційній роботі вирішувались наступні **завдання**:

- отримати коефіцієнт проходження енергетичного бар'єру в вуглецевій нанотрубці для електронів зі щілиною в спектрі, що індукована електрон-фононною та електрон-електронною взаємодією;
- розрахувати залежності струму від напруги та кондуктансу від температури для спітронного молекулярного транзистора в зовнішньому магнітному полі та проаналізувати їх особливості;
- знайти оптимальні умови для спостереження максимуму кондуктансу при нульовій напрузі в системі з майоранівськими станами;
- отримати порогові значення енергії кулонівської взаємодії, зовнішнього магнітного поля та різниці температур в електродах для термоіндукованого магнітнокерованого човникового транспорту в спітронному молекулярному транзисторі.

**Об'єктом дослідження** дисертаційної роботи є квантовий транспорт взаємодіючих електронів у вуглецевих нанотрубках та молекулярних транзисторах.

**Предметом дослідження** є процеси тунелювання електронів у вуглецевих нанотрубках та молекулярних транзисторах за наявності електрон-електронної та електрон-вібронної взаємодії.

**Методи дослідження.** При виконанні дисертаційної роботи використовувались аналітичні та чисельні методи. Методом матриці густини та теорії збурень отримано струм через спітронний молекулярний транзистор за наявності електрон-електронної взаємодії, а також рівняння руху для центру мас молекули в режимі шатлювання. Для отримання виразу для щілини в спектрі електронів у нанотрубці використано метод Хартрі-Фока. Коефіцієнт проходження бар'єру в нанотрубці отримано з використанням методу ренормгрупи. Для знаходження струму через майоранівський квантовий нанодріт, а також спітронний молекулярний транзистор без врахування кулонівської взаємодії використовувався метод рівнянь руху.

### **Наукова новизна отриманих результатів.**

1. Вперше виявлено, що в металевій одношаровій вуглецевій нанотрубці електрон-електронна взаємодія приводить до появи енергетичної щілини в спектрі електронів. Визначено, що в такій системі коефіцієнт проходження електростатичного бар'єру залежить від кута хіральності нанотрубки.

2. Вперше показано, що вольт-амперні характеристики спітронного молекулярного транзистора мають подвоєну кількість сходинок струму у порівнянні зі звичайним молекулярним транзистором. Встановлено, що при сильній кулонівській взаємодії або в сильному зовнішньому магнітному полі з'являються області без сходинок. Виявлено поетапне зняття кулонівської блокади тягнуchoю напругою.

3. Вперше встановлено, що кондуктанс спітронного молекулярного транзистора при сильній електрон-вібронній взаємодії є немонотонною функцією температури в широкому діапазоні значень зовнішнього магнітного поля та при довільній кулонівській енергії.

4. Вперше показано, що в системі «метал–заземлений майоранівський нанодріт–метал», сильно асиметричній за тунельними зв'язками, за наявності розщеплення пари майоранівських станів кондуктанс досягає максимуму при нульовій напрузі.

5. Вперше виявлено, що в сильно асиметричній системі «метал–незаземлений майоранівський нанодріт–метал» струм насичується при нижчих напругах, ніж при резонансному електронному тунелюванні в системі без майоранівських станів.

6. Вперше встановлено області існування термоіндукованого магнітнокерованого човникового транспорту в спітронному молекулярному транзисторі та виявлено пороговий характер цього явища за параметрами величини кулонівської взаємодії, зовнішнього магнітного поля та різниці температур електродів.

**Практичне значення результатів дисертації.** Результати теоретичних досліджень, представлені в дисертаційній роботі, мають фундаментальне

значення, оскільки розширюють знання щодо впливу електрон-електронної та електрон-вібронної взаємодії на транспорт заряду та спіну в наноструктурах. Максимум кондуктансу при нульовій напрузі при сильній асиметрії системи може бути використаний для аналізу експериментів з виявлення майоранівських станів. Передбачений ефект зменшення коефіцієнту проходження енергетичного бар'єру в нанотрубці при її пружних деформаціях може бути виявлений і практично використаний в експериментах. Проведений аналіз особливостей вольт-амперних характеристик спітронного молекулярного транзистора може пояснити експериментальні дані реальних систем та мати застосування в спектроскопії молекул.

**Особистий внесок здобувача.** У всіх роботах, які були виконані в співавторстві та увійшли до дисертації, автором самостійно виконано усі аналітичні та чисельні розрахунки. Автор брала активну участь в обговоренні та трактовці отриманих аналітичних і чисельних залежностей, формуванні висновків та написанні статей. Зокрема, дисертантка особисто обчислила струм через майоранівський нанодріт, вираз для щільності в спектрі електронів та коефіцієнт проходження бар'єру в нанотрубці, залежності струму та кондуктансу спітронного молекулярного транзистора від напруги при різних значеннях температури системи, кулонівської взаємодії та магнітного поля, а також порогові значення таких чинників для термоіндукованого магнітнокерованого човникового транспорту. Таким чином, особистий внесок здобувача в вирішення теоретичних задач, які розглянуті в дисертації, є визначальним.

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

- VI International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, June 2 – 5, 2015);
- XII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» (Харків, Україна, 1 – 4 грудня, 2015);

- Conference on Interactions and Topology in Dirac Systems (Trieste, Italy, August 3 – 9, 2016)
- VIII International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, May 29 – June 2, 2017);
- XIII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» присвячена 100-річчю з дня народження академіка І.М. Ліфшиця (Харків, Україна, 5 – 8 грудня, 2017);
- IX International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, June 4 – 8, 2018);
- X International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, June 3 – 7, 2019);
- VII International Conference “Nanotechnology and Nanomaterials” (Lviv, Ukraine, August 27 – 30, 2019).

**Публікації.** Результати дисертаційної роботи опубліковані в 5 статтях у провідних наукових виданнях [1–5] і в 8 тезах доповідей конференцій [6–13].

## РОЗДІЛ 1

### ТРАНСПОРТ ВЗАЄМОДІЮЧИХ ЕЛЕКТРОНІВ В НАНОСТРУКТУРАХ (ОГЛЯД).

#### 1.1. Тунельний транспорт в транзисторі на основі майоранівського квантового дроту.

Пошук особливостей тунельного транспорту в мезоскопічних транзисторах, де між електродами поміщено топологічний об'єкт з майоранівськими ферміонами, є проблемою, що активно вивчається в сучасній науці. Майоранівські ферміони, вперше передбачені Е. Майорана як частинка-ферміон, яка збігається з власною античастинкою [14], з'являються у фізиці конденсованих середовищ у формі майоранівських зв'язаних станів, МЗС (Majorana bound states, MBS) – безспінових квазічастинкових станів з енергією нижче надпровідникової щілини [15] (зокрема, з нульовою енергією), що знаходяться на краях топологічних об'єктів [16]. Інтерес до МЗС пов'язаний з тим, що їх планується використовувати для створення квантових комп'ютерів, захищених від помилки дефазування [15]. В оглядах [17, 18] з урахуванням піонерських робіт [16, 15] зазначено, що утворення пари МЗС (які ще називаються майоранівськими крайовими станами) очікується на краях топологічних областей, наприклад, в надпровіднику  $p$ -типу з певним співвідношенням між значеннями надпровідникової щілини та хімічного потенціалу. Зважаючи на рідкість надпровідників  $p$ -типу, запропоновано модель для реалізації одновимірної системи з майоранівськими станами на основі напівпровідного дроту на поверхні звичайного надпровідника  $s$ -типу, коли ефект близькості, керований хімпотенціал, сильна спін-орбітальна взаємодія та зовнішнє магнітне поле спільно утворюють ефективно безспіновий режим електронного транспорту при енергіях нижче надпровідникової щілини.

Майоранівський нанодріт – це одновимірний ланцюжок на поверхні надпровідника  $s$ -типу, на кінцях якого формуються МЗС. За визначенням, оператори народження та знищення майоранівських ферміонів збігаються,

$\gamma_j^+ = \gamma_j$ ,  $\{\gamma_i, \gamma_k\} = 2\delta_{ik}$ . Два майоранівських стани, що локалізовані на протилежних кінцях топологічного надпровідника, утворюють сильно нелокальний ферміон Дірака, оператор народження якого запишеться як  $d = (\gamma_1 + i\gamma_2)/2$ , з  $d^2 = (d^+)^2 = 0$ . Ця нелокальність приводить до незвичайного електронного транспорту через майоранівські стани. Зокрема, тунелювання електронів у майоранівських системах може сильно відрізнитись від резонансного тунелювання електронів навіть у випадку, коли враховується гібридизація майоранівських станів  $\varepsilon_M \gamma_1 \gamma_2$ , де  $\varepsilon_M \sim \exp(-l/\xi_0)$  – енергія, на яку розщеплена пара майоранівських станів відносно рівня Фермі надпровідника, вона характеризує перекриття майоранівських хвильових функцій ( $l$  – це довжина майоранівського нанодроту,  $\xi_0$  – це довжина когерентності надпровідника). При цьому наявність надпровідника-підкладки приводить до появи додаткових (андріївських) каналів тунелювання та впроваджує електронно-діркову симетрію. Обидві ці властивості приводять до того, що тунелювання електронів через МЗС сильно відрізняється від звичайного резонансного тунелювання електронів, що описується ймовірністю проходження Брейта – Вігнера.

Численні теоретичні дослідження цих топологічних об'єктів, спрямовані, зокрема, на те, як відрізнити їх в експерименті від «звичайних» збуджень, які можуть імітувати властивості МЗС (домішки, резонанси пов'язані з ефектом Кондо, тощо [17]). Перспективним напрямком для виявлення майоранівських ферміонів є тунельні експерименти, де МЗС забезпечують канал для електричного струму при низьких напругах.

В [19] показано, що майоранівські ферміони приводять до нового транспортного явища – резонансного андріївського відбиття, при якому пік (максимум) в диференціальному кондуктансі досягається при нульовій напрузі (zero bias peak, ZBP) для контакту «нормальний метал–топологічний надпровідник». Пік в диференціальному кондуктансі як свідок утворення МЗС неодноразово спостерігався експериментально (наприклад, [20, 21])

Властивості електронного тунельного транспорту через майоранівські зв'язані стани наразі теоретично досліджені, зокрема, для систем «метал–майоранівський нанодріт» [22, 23] та «метал–майоранівський нанодріт–метал» [24, 25, 26].

В роботі [23] розглянуто контакт масивного електроду з ланцюжком майоранівських станів. Показано, що при тунелюванні на поодинокій майоранівській крайовий стан залежність кондуктансу від напруги має вигляд

$$G = 2G_0 \frac{4\Gamma^2}{(eV)^2 + 4\Gamma^2}, \quad (1.1)$$

де  $G_0 = e^2 / 2\pi\hbar$ , і при нульовій напрузі має місце пік в кондуктансі. Особливістю, підкресленою в роботі, є зникнення піку при нульовій напрузі, якщо врахувати розщеплення за енергією, тобто зв'язок з другим майоранівським станом в ланцюжку.

В роботі [25] вивчалася система контактів «метал–майоранівський нанодріт–метал», симетрична за тунельними зв'язками. Тунельний зв'язок характеризується величиною  $\Gamma$ , шириною рівня енергії на точці при тунелюванні з електроду. Вона покладається однаковою для обох контактів в симетричній системі. Отримано вираз для електричного струму у вигляді

$$I = \frac{e}{2\pi\hbar} \int d\varepsilon \mathcal{T}(\varepsilon) [f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)], \quad (1.2)$$

де

$$\mathcal{T}(\varepsilon) = \frac{4\Gamma^2(4\Gamma^2 + \varepsilon^2 + \varepsilon_M^2)}{(\varepsilon^2 + 4\Gamma^2)^2 + \varepsilon_M^2[\varepsilon_M^2 - 2(\varepsilon^2 - 4\Gamma^2)]}. \quad (1.3)$$

Досліджено тепловий струм та особливості термотранспорту, зокрема, пригнічення термоструму в такій моделі незалежно від величини розщеплення майоранівських станів за енергією.

Автори роботи [26] приділили увагу системі контактів «метал–майоранівський нанодріт–метал» несиметричній за тунельними зв'язками,  $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ , де  $L, R$  – індекс електроду. Досліджується струм через систему при постійній та при змінній напрузі. Нерівні струми з лівого та правого електродів



системи з заземленим майоранівським нанодротом пояснюються присутністю надпровідника-підкладки та діркового каналу транспорту. Зазначається наявність піку в кондуктансі при нульовій напрузі, якщо тунельні зв'язки одного порядку, а розщеплення пари майоранівських станів порядку меншої з ширин рівня. Величина піку менша за квант кондуктансу. Автори пропонують також використання асиметрії струму при асиметричному поданні напруги для підтвердження утворення майоранівських станів в експерименті.

Маловивченим залишається питання щодо специфічних властивостей сильно асиметричної майоранівської системи, тобто системи контактів з тунельними зв'язками, що сильно відрізняються для електродів витоку та стоку.

## **1.2. Вплив взаємодії електронів на тунелювання крізь потенціальні бар'єри в хіральних вуглецевих наторубках.**

Одношарові вуглецеві нанотрубки (single-wall carbon nanotube, SWNT) є перспективними матеріалами для наноелектроніки [27]. Спектр електронів в нанотрубці включає дві енергетичні долини, що відрізняються точками Дірака (точки, в які вироджена поверхня Фермі в графені), поблизу яких розглядаються квазіімпульси. Нанотрубка характеризується кутом хіральності, що відповідає способу згортання графена. Залежно від хірального кута SWNT можуть бути металевими і напівпровідниковими. Численні експерименти показують, що електронний транспорт в металевих SWNT є балістичним [28]. Ця важлива обставина робить вільно віброуючі вуглецеві нанотрубки (нанотрубки, підвішені на клемах) наноелектромеханічними системами, що дозволяють вивчати квантові ефекти як в електронній, так і в механічній (фононній) підсистемах [29].

Транспортні властивості металевих нанотрубок характеризуються цілою низкою незвичайних ефектів. Одновимірний характер руху електронів в нанотрубках і сильна слабоекранована кулонівська взаємодія носіїв заряду в них у багатьох випадках дозволяє розглядати електрони в металевих SWNT як латтінжерівську рідину. Ця обставина призводить до нелінійної («неомічної») залежності струму від напруги і кондуктансу від температури, що є наслідком

ефекту Кейна-Фішера [30] – сильного перенормування електрон-електронною взаємодією затравочного локального потенціалу, що розсіює електрони.

Спираючись на [31, 32, 33] зазначимо, що іншим, багато в чому протилежним ефектом, що характеризує транспортні властивості графену та металевих нанотрубок, є парадокс Клейна [34] – відсутність розсіяння одновимірних ультрарелятивістських ферміонів назад на плавних електростатичних потенціалах. Для металевих SWNT саме парадокс Клейна пояснює балістичний характер транспорту електронів в довгих нанотрубках [28]. Відсутність розсіяння назад діраківських електронів на електростатичному (скалярному) потенціалі пояснюється збереженням спіральності електронів – проекції спіну (в нанотрубках – псевдоспіну) на напрямок імпульсу частинки. Псевдоспін – це квантове число, що характеризує належність частинки до однієї з підграток графену, він проявляється у спірній структурі розв’язків рівняння Дірака для графену. Скалярний потенціал не може вплинути на псевдоспін електрона в SWNT, і розсіяння назад стає неможливим, так як при таких умовах спіральність змінювала б знак. Однак, внаслідок пружних деформацій в SWNT [35] можлива поява псевдомагнітного потенціалу, що має ненульові недіагональні матричні елементи (назва потенціалу пов’язана з тим, що за рахунок недіагональних матричних елементів він формально впливає на імпульс аналогічно до зовнішнього магнітного поля). Змінюється псевдоспін, і електрони можуть розсіюватися, змінюючи швидкість на протилежну,  $v_F \rightarrow -v_F$ . Відповідно до властивостей спектру, значення їх енергій залишаються в тій самій енергетичній долині. Внутрішньодолинне розсіяння ( $\Delta k \approx 0$ , де  $k$  – це квазіімпульс) чутливе до кута хіральності нанотрубки. Воно характеризується незвичайною (осцилюючою) залежністю амплітуди проходження від характеристик розсіювача та хірального кута. У літературі такий спосіб проходження електронів через зовнішній потенціал отримав назву хірального тунелювання. Теорія хірального тунелювання для невзаємодіючих електронів в металевих вуглецевих нанотрубках запропонована в роботі [36] (більш докладно – в [37]). В цій роботі, зокрема, знайдений вираз для щільності в спектрі

електронів, але без самоузгодження, а як результат розсіяння на потенціалі з ненульовими недіагональними компонентами.

Постає питання щодо впливу на хіральне тунелювання взаємодії електронів. У латтінжерівській рідині, як відомо, розсіяння електронів уперед не перенормується електрон-електронною взаємодією [38]. На перший погляд, цей результат робить безперспективним пошук ефектів перенормування взаємодією хірального тунелювання. Дійсно, для безмасових («металевих») діраківських ферміонів врахування ефектів взаємодії в наближенні Хартрі-Фока приводить до тривіального висновку – коефіцієнт проходження електронів через електростатичний або псевдомагнітний потенціал не перенормується взаємодією. Однак, як виявлено в дисертаційній роботі, взаємодія, яка має матричний вигляд та ненульові недіагональні матричні елементи, може приводити до появи щілини в спектрі електронів і впливати на коефіцієнт проходження. В огляді [35] показано, що потенціал електрон-фононої взаємодії в SWNT має матричну форму і включає ненульові недіагональні матричні елементи. В огляді наведено вираз для гамільтоніана електрон-фононої взаємодії, а також вираз для пружної енергії в одношаровій вуглецевій нанотрубці в термінах елементів тензора деформацій.

В дисертації отримано, що електрон-фононна взаємодія індукує електрон-електронну взаємодію в другому порядку теорії збурень за константою зв'язку, що також дає принципову можливість появи енергетичної щілини в спектрі електронів. За наявності щілини в спектрі носіїв заряду порушуються умови для парадоксу Клейна, коефіцієнт проходження електростатичного бар'єру зменшується. Для побудови теорії щодо впливу електрон-електронної взаємодії на хіральне тунелювання корисно звернутися до роботи [39], де для системи з квадратичним спектром досліджено вплив електрон-електронної взаємодії на коефіцієнт проходження електронів крізь електростатичний потенціал. В наближенні Борна із застосуванням потенціалу Хартрі та обмінного потенціалу, припускаючи слабку взаємодію, автори отримують перенормовану хвильову функцію. Густина частинок через наявність бар'єру має осцилюючу залежність

від координати. Осциляції густини, т.з. осциляції Фріделя, призводять до ефективного розширення бар'єру у просторі. Для отримання скінченного результату для перенормованого коефіцієнту проходження проводиться підсумовування сингулярних доданків в теорії збурень за допомогою методу ренормгрупи. Отримано коефіцієнт проходження у вигляді

$$T(E) = \frac{T_0 (E / D_0)^{2\alpha}}{R_0 + T_0 (E / D_0)^{2\alpha}}, \quad (1.4)$$

де  $D_0 = \hbar v_F / l_V$ ,  $l_V$  – просторовий розмір потенціалу взаємодії,  $E$  – енергія електрону, відрахована від енергії Фермі,  $T_0, R_0$  – початкові коефіцієнти проходження та відбиття,  $\alpha = V(0) / (2\pi\hbar v_F) - V(2k_F) / (2\pi\hbar v_F)$ ,  $V(k)$  – Фур'є-образ потенціалу взаємодії. Цей вираз важливий для порівняння з результатом, отриманим в цій дисертаційній роботі для електронів з лінійним спектром.

### 1.3. Транспорт заряду та спіну в молекулярному транзисторі.

Одноелектронний транзистор (single-electron transistor, SET) являє собою нанорозмірний пристрій, в якому при кожному акті тунелювання через контакт проходить один електрон. Транзистор, в якому між масивними електродами поміщено молекулу називається молекулярним. Принциповою особливістю молекулярних транзисторів є вплив коливальних ступенів свободи молекули на транспорт електронів. Існує два різних режими транспорту електронів в молекулярних транзисторах: вібронний режим і режим шатлювання (човникового транспорту). Вібронний режим має місце при сильній дисипації в механічній підсистемі, тоді амплітуда механічних коливань нехтовно мала, і розглядається вплив квантових коливань та вібронні ефекти, пов'язані з електронним тунелюванням, яке супроводжується виникненням вібронів [40, 41, 42].

Електронне шатлювання [43] має місце, коли дисипативні процеси недостатньо сильні, щоб запобігти механічним коливанням центру мас молекули.

В даному підрозділі приділимо увагу першому з цих режимів. Зауважимо, що розглядаються низькоенергетичні процеси (тунельні), тож у електрон-вібронній взаємодії грає роль саме найнижча коливальна мода – коливання молекули як цілого. За цих причин при теоретичному аналізі системи молекулу розглядають як однорівневу квантову точку в гармонічному потенціалі [44, 45]. В огляді [46] з урахуванням результатів робіт [42, 44] наведено основні ефекти передбачені для молекулярних транзисторів. В системі має місце поляронний зсув – енергія електрона на вібруючій квантовій точці зменшується через взаємодію з вібронами. При наявності ймовірності тунелювати пружно, електрони можуть тунелювати через з'єднання непружно, разом з випускненням та поглинанням вібронів. Вольт-амперні характеристики молекулярного транзистора при низьких температурах мають вигляд ступінчастих функцій. Кожне збільшення струму у вигляді сходинки трапляється, коли енергія, яка потрібна для відкриття нового непружного каналу (тунелювання з випускненням вібронів), стає доступною через збільшення вікна провідності із ростом тягнучої напруги.

Струм при тунелюванні тільки через пружний канал не досягає значення максимального струму для нерухомої квантової точки з причини зниження ймовірності тунелювання електронів. Воно зумовлене збільшенням ефективної маси електронів на точці при зв'язку з її квантовими коливаннями і формально проявляється через появу експоненціального множника перед тунельною амплітудою в ефективному тунельному гамільтоніані. Після усереднення струму та кондуктансу цей множник призводить до експоненціального зменшення тунельної ширини рівня, даючи

$$\Gamma \rightarrow e^{-\lambda^2} \Gamma, \quad (1.5)$$

так зване поляронне звуження [47, 48, 49, 50], де  $\lambda$  – це константа електрон-вібронної взаємодії. Пригнічення струму на низьких напругах при низьких температурах отримало назву блокади Франка-Кондона [44], а сходинки на вольт-амперних характеристиках називаються сходинками Франка-Кондона. При сильній електрон-вібронній взаємодії блокада Франка-Кондона призводить до

сильного пригнічення струму в системі. Зауважимо, що блокада Франка-Кондона при низьких температурах знімається тягнуchoю напругою.

В загальному випадку систему, що складається з осцилятора тунельно з'єданого з електродами, розглядають, припускаючи нерівноважність вібронної підсистеми (наприклад, [44, 51, 52]). Однак, у випадку, коли зв'язок вібронів з термостатом настільки суттєвий, що швидкість релаксації вібронної підсистеми значно більша за швидкість тунельних процесів, вібронну підсистему можна вважати рівноважною. Матриця густини вібронів на квантовій точці припускається рівноважною, наприклад, в роботах [42, 44, 49, 53].

Експериментально ефекти впливу коливальних ступенів свободи на транспорт електронів через з'єднання «метал–молекула–метал» спостерігалися в дослідженнях [54, 55, 56], що були піонерськими в цій області. В роботі [54] молекулу фулерену  $C_{60}$ , що за оцінками має характерний розмір  $7 \text{ \AA}$ , поміщено в зазор, який становить  $1 \text{ нм}$ , між сфабрикованими із золота електродами. Отримано вольт-амперні характеристики пристрою і залежності кондуктансу від тягнуchoї напруги та напруги затвору, що демонструють зв'язок квантових збуджень на молекулі з електронним транспортом. Збудження зумовлені коливанням центру мас молекули. Наводиться пояснення виникнення гармонічного потенціалу, в якому коливається молекула, яке отримало розвиток в теоретичних роботах, зокрема, [42]. Потенціал виникає внаслідок Ван дер Ваальсової взаємодії молекули з електродами. За оцінками, для параметрів пристрою, що розглядався, частота таких коливань становить порядку  $10^{12}$  Гц. При тунелюванні електрону на молекулу на неї діє електрична сила, зумовлена зарядом-зображенням або локальними електричними полями, що приводить до зміщення молекули. Молекула коливається, що впливає на енергію системи з причини зміщення заряду в електричному полі, і в свою чергу на тунельні властивості та вольт-амперні характеристики пристрою.

Теоретичні обґрунтування отриманих вольт-амперних характеристик робилися, зокрема, з урахуванням наявності непружних тунельних процесів в

системі [42], або виникнення механічної нестійкості та човникового транспорту заряду за допомогою гранули, що коливається [57].

Тунелювання електронів в молекулярних транзисторах – перспективний напрямок експериментальної діяльності при розробці мікроелектроніки та в спектроскопії молекул. За останні часи виконано ще низку експериментів в цій галузі [58, 59, 48].

За допомогою експерименту [48] вдалося підтвердити теоретичне передбачення, що вплив сильної електрон-вібронної взаємодії на транспорт електронів проявляється також в особливостях кривих залежностей кондуктансу від температури. В [49] було теоретично передбачено, що для послідовного тунелювання електронів залежність лінійного кондуктансу від температури аномально немонотонна. При цьому при низьких температурах кондуктанс пригнічується порівняно з кондуктансом одноелектронного транзистора з нерухомою квантовою точкою через поляронне звуження ширини електронного рівня на квантовій точці.

Транспорт неполяризованих за спіном електронів в одномолекулярних транзисторах добре теоретично вивчене явище. Цікаво звернутись до розгляду вібронних ефектів при транспортуванні спін-поляризованих електронів. Можна керувати транспортом спін-поляризованих електронів за допомогою зовнішнього магнітного поля, тож пристрій може бути використаний у спінтроніці.

Вібронні ефекти у зовнішньому магнітному полі вивчають, зокрема, розглядаючи з'єднання віброуючої нанотрубки з електродами. Роботи [45, 60] вивчають вплив зовнішнього магнітного поля на транспортні властивості підвішаної нанотрубки в режимі кулонівської блокади за наявності магнетопружного зв'язку, тобто враховуючи зміну фази амплітуди тунелювання у зовнішньому магнітному полі. При цьому спін електрону виключається з розгляду через припущення сильного зееманівського розщеплення, що створює ефективно однорівневу систему. Також з застосуванням цього підходу розглянуто модель в роботі [50].

Особливу властивість має система у випадку повної спінової поляризації електродів у протилежних напрямках. Зазначимо, що такі електроди можуть бути сконструйовані з напівметалу – матеріалу, що був теоретично передбачений в [61] та нещодавно отриманий в експерименті [62]. Для нульового зовнішнього магнітного поля струм через систему блокується – «спінова блокада» [63]. Тоді зовнішнє магнітне поле, перпендикулярне до площини векторів намагніченості електродів, слугуватиме для отримання ненульового струму повністю спіново поляризованих електронів. Зовнішнє магнітне поле завдяки прецесії індукує перевертання спіну електрону на квантовій точці, роблячи можливим тунелювання з електроду-витоку до електроду-стоку і таким чином знімаючи «спінову блокаду». При цьому через розщеплення Зеемана усувається виродження рівня за спіном.

Магнітні ефекти при неповній поляризації електродів розглянуто, наприклад, в [51, 53, 64] у зв'язку з охолодженням (зниженням енергії) механічної моди за наявності спінової та кулонівської взаємодії. Показано, що для підвішаної віброуючої нанотрубки, яка характеризується сильною спіно-орбітальною взаємодією (або за наявності градієнту зовнішнього магнітного поля, що прикладено вздовж вісі нанотрубки), процеси перебросу спіну супроводжуються випускненням або поглинанням вібронів, що призводить до механічного пригнічення коливальної моди.

За рахунок впливу через кулонівську блокаду двократного заповнення рівня на квантовій точці, електрон-електронні кореляції відіграють важливу роль в електронному транспорті в одномолекулярних транзисторах. Енергетичні масштаби кулонівських кореляцій та зумовлених вібраціями поляронних ефектів можуть бути однаковими, і ці енергії, як правило, набагато більші, ніж зееманівське розщеплення рівня. У цьому випадку кулонівська блокада та блокада Франка-Кондона все ще присутні, коли «спінову блокаду» знято. Система, що характеризується параметрами в цьому діапазоні значень, вивчається в дисертаційній роботі.



#### 1.4. Тунелювання електронів в наноелектромеханічних системах.

Наноелектромеханічна система особлива тим, що, завдяки слабкій дисипації, в ній можливі коливальні процеси з великою амплітудою (порівняно з амплітудою нульових коливань квантової точки), які сприяють переносу електронів – електронний шатл, тобто човниковий транспорт заряду та спіну. Одноелектронний (за аналогією з одноелектронним транзистором) шатл є нелінійним, неравновісним та нелокальним за часом наноелектромеханічним явищем. Він вперше передбачений в [43], теорію доповнено в роботі [57]. В мезоскопічному режимі замість звичайних класичних осциляцій зарядженої частинки між пластинами конденсатора під напругою (електричний маятник) отримується низка нових особливостей та нові фізичні ефекти. Взаємодія між електричним тунелюванням, кулонівською блокадою та ефектами запізнення механічних осциляцій рухомої квантової точки, що розташована між електродами мезоскопічного транзистора під напругою, приводить до механічної нестійкості та початку осциляцій квантової точки. В результаті електричний струм через пристрій сильно (експоненціально) зростає, що може додати функціональності сучасним молекулярним транзисторам [57].

Як зазначалося, гармонічний потенціал, в якому рухається квантова точка, формується, наприклад, за рахунок Ван дер Ваальсової взаємодії точки та електродів [42, 54]. Інший спосіб формування такого потенціалу наведено в [43] – квантова точки вважається з'єднаною пружними ланцюжками, сформованими з органічних молекул. В експерименті [65] відтворюється шатлоподібний електронний режим при такому з'єднанні. Між електродами поміщено квантову точку, представлену золотою сферичною гранулою діаметром 20 нм. Електроди з'єднуються з квантовою точкою шаром органічних молекул, які мають пружні властивості. Молекула пінінгована на підкладці, але при зростанні зовнішньої напруги та кількості електронів на точці потенціал пінінгу переборюється. Спостерігаються коливання гранули та подальший вихід амплітуди коливань на оптимальне значення. Отримано властиві для шатлівського транспорту вольт-амперні характеристики. Значення порогової напруги виявилось не

співпадаючим за порядком з передбаченим для цієї моделі в [43], що пояснюється технічними особливостями формування з'єднуючих ланцюжків.

В експерименті [66] також спостерігалось самозбудження гранули під дією постійної напруги.

При електричному шатлі електричне поле електродів, створене прикладеною напругою, діючи на квантову точку, що заряджена від електроду-витоку, притягує точку до електроду-стоку, тим самим забезпечуючи виконання тих умов, що приводять до шатлювання електронів. Якщо квантова точка не закріплена жорстко, а дисипація в механічній системі слабка, електронне шатлювання завжди має місце, коли тягнуча напруга перевищує порогове значення  $V > V_{th} = (2/e)(\Delta_\varepsilon + \hbar\omega)$  [57], де  $\Delta_\varepsilon = \varepsilon_0 - \varepsilon_F$  – це енергія електронного рівня на квантовій точці, що рахується від енергії Фермі електронів в електродах,  $\varepsilon_F$ ,  $\omega$  – це кутова частота осциляцій квантової точки,  $e$  – елементарний заряд. В шатлівському режимі електронного транспорту амплітуда коливань квантової точки зростає до певного значення  $A_m \gtrsim l_t$  (де  $l_t$  тунельна довжина,  $\approx 1 \text{ \AA}$ ), на якому виходить на граничний цикл. Це можливо через нелокальну у часі динаміку механічної підсистеми. Вихід на граничний цикл (насичення) пояснюється тим, що позитивна (при виникненні шатлу) робота електричного поля на замкненій траєкторії квантової точки перестає зростати. Властивість шатлівського режиму це сильне пригнічення низькочастотного шуму порівняно з дробовим шумом, вимірним для стандартного одноелектронного транзистора [67].

В одноелектронному транзисторі з магнітними електродами контроль над електронним шатлюванням спін-поляризованих електронів може здійснюватися за допомогою зовнішнього магнітного поля, що робить такий транзистор новим спінтронним пристроєм [68].

Теорію електронного шатлу для спін-поляризованих електронів в зовнішньому магнітному полі під дією тягнучої напруги побудовано в [69] для випадку часткової спінової поляризації електродів.

Для спін-поляризованих електронів також можливий свій особливий механізм шатлювання. Обмінні (магнітні) сили, що виникають при взаємодії магнітного моменту, пов'язаного зі спіном на квантовій точці, з намагніченістю електродів, можуть виявитися більшими ніж електричні сили в транзисторі і бути основою для виникнення електронного шатлу [70]. Таке припущення підтверджується експериментом [71], де досліджувався транзистор на основі молекули фулерену з нікелевими електродами. Обмінні сили, зумовлені електронним спіном на квантовій точці, становили (в енергетичних одиницях) порядку 10 меВ. Накоплення спіну на квантовій точці при нульовій температурі відбувається завдяки тунелюванню спін-поляризованих електронів з електроду-витоку. Обмінна взаємодія між магнітним моментом, пов'язаним з цим спіном, та магнетизацією електродів приводить до появи обмінної сили, яка притягує квантову точку до електроду-витоку та відштовхує її від електроду-стоку, але на цьому процес припиняється. Таким чином, обмінна взаємодія сама по собі не приводить до появи режиму шатлювання та протікання струму, посиленого цим явищем. Шатлювання матиме місце, якщо відбувається переворот спіну на квантовій точці. Нехай, для визначеності, електрони в електроді-витоку повністю поляризовані і мають спін «вгору», електроді-стоку – спін «вниз». Електрон зі спіном «вгору» тунелює на квантову точку. Зовнішнє магнітне поле перпендикулярне до площини векторів магнетизації електродів індукує перевороти спіну на квантовій точці. Квантова точка, що зайнята електроном зі спіном вниз, притягуватиметься вже до електроду-стоку, і магнітний шатл стає можливим. Існування магнітного шатлу теоретично доведено в [70] для випадку кулонівської блокади, коли тунелювання другого електрону на квантову точку, вже зайняту електроном, неможливо через кулонівське відштовхування. Для частково поляризованих електродів магнітний шатл в режимі кулонівської блокади досліджено в [72], отримано значення «нижнього» та «верхнього» критичних магнітних полів, що відокремлюють область шатлювання від області коливань, що загасають, та їх залежність від тунельної ширини рівня та ступеня поляризації.

Якщо при кулонівській блокаді спін квантової точки завжди визначається одним електроном, то при знятті кулонівської блокади сумарний спін квантової точки дорівнюватиме нулю, тож вона не притягуватиметься до електродів. Іншими словами, кулонівська взаємодія сприяє електронному шатлюванню в магнітних нанопристроях, що показано в [73] для шатлювання під дією тягнучої напруги.

Викликає інтерес дослідження термоіндукованого магнітного шатлу. Термоіндукований шатл має в якості енергетичного джерела різницю температур в електродах, при цьому хімічні потенціали електродів тримаються однаковими. В роботі [74] розглянуто можливість виникнення шатлівської нестійкості та шатлу в такій системі в режимі кулонівської блокади. Показано, що, незважаючи на дисипацію, викликану ненульовою температурою, шатлювання матиме місце при великій різниці температур в електродах в певному діапазоні зовнішніх магнітних полів. Наявність верхнього критичного магнітного поля пояснюється тим, що при швидкій прецесії в магнітному полі (порівняно з часом одного акту тунелювання та періодом коливань) середній спіл на квантовій точці дорівнює нулю, і процес шатлювання зупиняється. Нижнє критичне магнітне поле становить величину, при якій інкремент експоненціального зростання амплітуди коливань перевищує певну характеристику системи, названу внутрішнім тертям. Внутрішнє тертя, теорію якого розвинуто в [74], пов'язане з роботою, що виконують обмінні сили.

Виникає питання існування термоіндукованого магнітного шатлу при невеликих (порівняно з іншими енергетичними параметрами системи) значеннях енергії кулонівської взаємодії. В цій дисертаційній роботі в розділі 5 буде приділено увагу процесам переходу від режиму, при якому коливання загасають, до режиму шатлювання для пристрою, що має градієнт температур, та областям параметрів, що відповідають шатлівському режиму.

## РОЗДІЛ 2

# НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНІ АНОМАЛІЇ ПРИ ТУНЕЛЮВАННІ ЕЛЕКТРОНІВ КРІЗЬ СИЛЬНО АСИМЕТРИЧНИЙ МАЙОРАНІВСЬКИЙ НАНОДРІТ

В розділі вивчається система контактів «метал–майоранівський нанодріт–метал», з приділенням уваги ефектам, спричиненим асиметрією системи за тунельними зв'язками з металевими електродами. Досліджуються особливості вольт-амперних характеристик та залежностей кондуктансу від температури, що властиві пристрою саме за наявності майоранівських станів. Результати, які викладено в цьому розділі, опубліковано в роботі [1].

### 2.1. Рівняння руху та парціальні струми.

Майоранівський нанодріт – це топологічний надпровідник, сформований на основі квантового дроту, що розташований на поверхні надпровідника. На кінцях нанодроту формується пара майоранівських зв'язаних станів, МЗС (рис. 2.1).

Масивні електроди приводяться в тунельний контакт з нанодротом, причому, завдяки наявності рухомого електроду (наприклад, щупу скануючого тунельного мікроскопу), можна керувати щільністю тунельного зв'язку, тобто збільшувати або зменшувати тунельну ширину рівня,  $\Gamma_R$ . На рисунку  $\mu_{L,R}$  – хімічні потенціали в електродах, визначаються зовнішньою напругою. Хімічний потенціал надпровідника співпадає з рівнем Фермі електродів. Розглянуто два включення, які відрізняються тим, чи є надпровідник заземленим (рис. 2.1.), чи, навпаки, струм проходить тільки через систему «метал–незаземлений майоранівський нанодріт–метал» (рис. 2.1. без позначення заземлення надпровідника та з відповідним відносним розташуванням хімічних потенціалів).

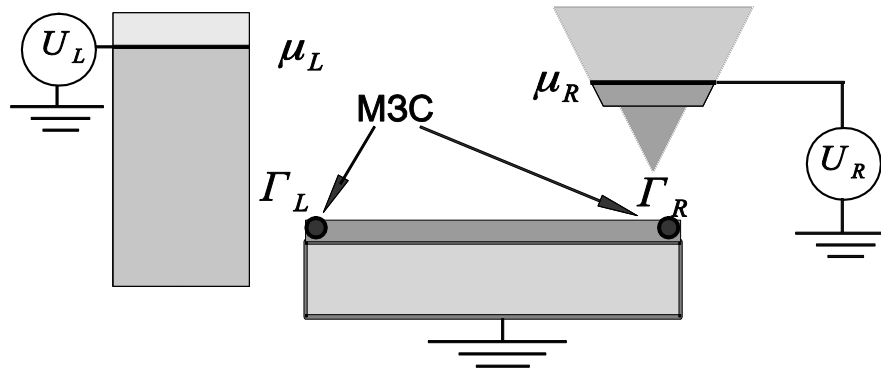


Рис. 2.1. Система контактів з майоранівським квантовим нанодротом. Майоранівські зв'язані стани (МЗС) формуються на кінцях квантового дроту розташованого на поверхні надпровідника. Майоранівський нанодріт поміщено між масивними електродами, щільністю контакту з якими можна керувати – щуп скануючого тунельного мікроскопу з правого боку нанодроту дозволяє змінювати тунельну ширину  $\Gamma_R$ . Хімічні потенціали електродів  $\mu_{L,R}$  визначаються зовнішньою напругою.

Повний гамільтоніан складається з трьох доданків

$$\hat{H} = \hat{H}_l + \hat{H}_M + \hat{H}_t, \quad (2.1)$$

де

$$\hat{H}_l = \sum_{k,\alpha} \varepsilon_{k,\alpha} c_{k,\alpha}^+ c_{k,\alpha}, \quad (2.2)$$

– це гамільтоніан електронів в електродах, де  $c_{k,\alpha}^+$  ( $c_{k,\alpha}$ ) – оператор народження (знищення) електрону з імпульсом  $k$  та енергією  $\varepsilon_{k,\alpha}$  в електроді  $\alpha = L, R$ . МЗС  $\gamma_1$  та  $\gamma_2$  описуються ефективним гамільтоніаном

$$\hat{H}_M = \frac{i}{2} \varepsilon_M \gamma_1 \gamma_2, \quad (2.3)$$

який виводиться з гамільтоніану моделі Китаєва [15].  $\varepsilon_M$  – енергія, на яку розщеплені два майоранівських стани.

Тунельний гамільтоніан  $\hat{H}_t$ , що описує зв'язок між електродом  $\alpha = L, R$  та топологічним надпровідником, запишеться наступним чином

$$\hat{H}_t = \sum_{k,\alpha} \mathcal{V}_{k,\alpha} c_{k,\alpha}^+ \gamma_\alpha + \text{H.c.}, \quad (2.4)$$

де  $\gamma_{L(R)} = \gamma_{1(2)}$ , а  $\mathcal{V}_{k,\alpha}$  – це ефективні тунельні амплітуди, що з'являються через проектування польових операторів надпровідника на різноманіття майоранівських станів [17, 23].

Середній струм отримано методом рівнянь руху (equations of motion method, EOM). Оператор електричного струму для електроду  $\alpha = L, R$  має вигляд

$$\hat{I}_\alpha = -e \frac{d\hat{N}_\alpha}{dt}, \quad (2.5)$$

де  $e = |e|$  – елементарний заряд,  $N_\alpha$  – оператор числа частинок, що дорівнює

$$\hat{N}_\alpha = \sum_k c_{k,\alpha}^+ c_{k,\alpha}. \quad (2.6)$$

За допомогою рівняння Гейзенберга для оператора числа частинок оператор струму запишеться як

$$\hat{I}_\alpha(t) = -\frac{ie}{\hbar} [\hat{H}, \hat{N}_\alpha(t)]. \quad (2.7)$$

Задля отримання середнього струму в сталому режимі обчислено квантовомеханічне середнє для оператора струму. Отримуємо

$$I_\alpha = \langle \hat{I}_\alpha \rangle, \quad (2.8)$$

$$I_\alpha(t) = -\frac{2e}{\hbar} \left\langle \sum_k \text{Im}(\mathcal{V}_{k,\alpha} c_{k,\alpha}^+ \gamma_\alpha) \right\rangle, \quad (2.9)$$

де квантовомеханічне середнє  $\langle \dots \rangle$  обчислюється з незбуреним гамільтоніаном невзаємодіючих електронів в електродах.

Розв'язуючи рівняння Гейзенберга для операторів в електродах

$$\frac{dc_{k,\alpha}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, c_{k,\alpha}], \quad (2.10)$$

отримаємо

$$c_{k,\alpha}(t) = c_{k,\alpha} e^{-i\varepsilon_{k,\alpha}t/\hbar} - i\mathcal{V}_{k,\alpha} \int_{-\infty}^t e^{-i\varepsilon_{k,\alpha}(t-t')/\hbar} \gamma_\alpha(t') dt'. \quad (2.11)$$

Гейзенбергівське рівняння руху для операторів майоранівських ферміонів має вигляд

$$\frac{d\gamma_\alpha}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \gamma_\alpha], \quad (2.12)$$

тож матимемо (тут  $\hbar = 1$ )

$$\begin{cases} \gamma_L(t) = \varepsilon_M \gamma_R(t) - 4 \sum_k \text{Im} \mathcal{V}_{k,L} c_{k,L}^+, \\ \gamma_R(t) = -\varepsilon_M \gamma_L(t) - 4 \sum_k \text{Im} \mathcal{V}_{k,R} c_{k,R}^+. \end{cases} \quad (2.13)$$

Підставляючи вираз (2.11), отримуємо систему зв'язаних рівнянь, яка може бути представлена у матричній формі наступним чином

$$\begin{pmatrix} \dot{\gamma}_L(t) \\ \dot{\gamma}_R(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2\Gamma_L & \varepsilon_M \\ -\varepsilon_M & -2\Gamma_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_L(t) \\ \gamma_R(t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \xi_L(t) \\ \xi_R(t) \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

де

$$\xi_\alpha(t) = 2i \sum_k \mathcal{V}_{k,\alpha} c_{k,\alpha}^+ e^{i\varepsilon_{k,\alpha} t} + \text{H.c.}, \quad (2.15)$$

а  $\Gamma_\alpha$  – ширина рівня енергії стану на нанодроті при тунелюванні з відповідного електроду

$$\Gamma_\alpha = \sum_k 2\pi \delta(\varepsilon - \varepsilon_{k,\alpha}) |\mathcal{V}_{k,\alpha}|^2, \quad (2.16)$$

що характеризує тунельні зв'язки у пристрої. Розв'язок системи (2.14) має вигляд

$$\gamma_L(t) = \sum_k \mathcal{V}_{k,L}^* c_{k,L} e^{-i\varepsilon_{k,L} t} \frac{\varepsilon_{k,L} + 2i\Gamma_R}{\Delta_L} + i \sum_k \mathcal{V}_{k,R}^* c_{k,R} e^{-i\varepsilon_{k,R} t} \frac{\varepsilon_M}{\Delta_R} + \text{H.c.}, \quad (2.17)$$

$$\gamma_R(t) = \sum_k \mathcal{V}_{k,R}^* c_{k,R} e^{-i\varepsilon_{k,R} t} \frac{\varepsilon_{k,R} + 2i\Gamma_L}{\Delta_R} + i \sum_k \mathcal{V}_{k,L}^* c_{k,L} e^{-i\varepsilon_{k,L} t} \frac{\varepsilon_M}{\Delta_L} + \text{H.c.}, \quad (2.18)$$

де  $2\Delta_\alpha = [\varepsilon_{k,\alpha} + i(\Gamma_L + \Gamma_R)]^2 + (\Gamma_L - \Gamma_R)^2 - \varepsilon_M^2$ .

При обчисленні середнього з незбуреним гамільтоніаном електродів, отримаємо множник

$$\langle c_{k,\alpha}^+ c_{k',\alpha'} \rangle = f_\alpha(\varepsilon_{k,\alpha}) \delta_{k,k'} \delta_{\alpha,\alpha'}, \quad (2.19)$$

де  $f_\alpha(\varepsilon) = (\exp[(\varepsilon - \mu_\alpha) / T] + 1)^{-1}$  – це функція розподілу Фермі-Дірака,  $T$  – це



температура електродів ( $k_B = 1$ ),  $\varepsilon$  – енергія та  $\mu_\alpha = eV_\alpha$  – хімічний потенціал, що рахуються від енергії Фермі електродів,  $V_\alpha$  – напруга в електроді  $\alpha$ . Середній струм (2.9) матиме вигляд (повертаючись до  $\hbar$ )

$$I_\alpha = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon T_\alpha(\varepsilon) \tanh\left(\frac{\mu_\alpha - \varepsilon}{2T}\right), \quad (2.20)$$

де коефіцієнт проходження  $T_\alpha(\varepsilon)$  становить

$$T_\alpha(\varepsilon) = \frac{4(4\Gamma_L^2\Gamma_R^2 + \Gamma_\alpha^2\varepsilon^2 + \Gamma_L\Gamma_R\varepsilon_M^2)}{\varepsilon^4 + 4\varepsilon^2(\Gamma_L^2 + \Gamma_R^2) + (4\Gamma_L\Gamma_R)^2 + \varepsilon_M^2(\varepsilon_M^2 - 2\{\varepsilon^2 - 4\Gamma_L\Gamma_R\})}. \quad (2.21)$$

## 2.2. Диференціальний кондуктанс. Пік в кондуктансі при нульовій напрузі.

Диференціальний кондуктанс при тунелюванні з відповідного електроду  $G_\alpha(V) = dI_\alpha / dV$  за низьких температур становить

$$G_\alpha(V) = 2G_0 T_\alpha(\varepsilon)|_{\varepsilon=eV}, \quad (2.22)$$

де  $G_0 = e^2 / (2\pi\hbar)$ . Отримуємо, що при  $V = 0$ ,  $\varepsilon_M = 0$  він дорівнює  $2G_0$ , що підтверджує наявність в нашій моделі піку (максимуму) в кондуктансі при нульовій напрузі за відсутності розщеплення станів. Звернемо увагу на появу для безспінових електронів множника 2 в рівнянні (2.22) та гіперболічного тангенсу в залежності (2.20) струму від температури та хімічного потенціалу, замість різниці фермієвських функцій розподілу електродів в звичайному випадку (формула Ландауера-Бютікера). Обидві ці властивості пов'язані з присутністю надпровідника-підкладки при транспорті електронів через майоранівський нанодріт. Множник 2 з'являється через наявність додаткового каналу (андріївське тунелювання) при транспорті електронів через майоранівські зв'язані стани. Характерна температурна залежність та залежність від хімічного потенціалу у рівнянні (2.20) є звичайною для контактів «метал–надпровідник». Бачимо, що  $I(T, \mu_\alpha = 0) \equiv 0$  для заданих  $\Gamma_L$  та  $\Gamma_R$ , як це й повинно бути, коли до електродів не прикладено ніякої напруги відносно заземленого надпровідника.

Для контакту «метал–заземлений майоранівський нанодріт» ( $\varepsilon_M = 0$  та, для визначеності,  $\Gamma_R = 0$  (наприклад, щуп тунельного мікроскопу відведено на нескінченність)), яка є модифікацією моделі, що розглядається, формула (2.22) спрощується до виразу, який співпадає з виразом для струму в такому випадку, тобто (1.1), яку отримано у [23]. В системі контактів «метал–заземлений майоранівський нанодріт–метал» у загальному випадку  $\Gamma_L \neq \Gamma_R$  струми в лівому та правому електроді не рівні,  $I_L \neq I_R$ , що характерно для систем з майоранівськими станами [26]. Доречно розглянути випадок, коли сумарний струм до «землі» (ground) дорівнює нулю,  $I_G = I_L + I_R = 0$ , тобто можна говорити про струм з електроду-витоку ( $L$ ) до електроду-стоку ( $R$ ), зумовлений напругою  $eV$ . За допомогою отриманих формул (2.20)-(2.21) ми відтворюємо вираз (1.2) для струму через майоранівський нанодріт при рівних тунельних зв'язках, отриманий для контакту з симетричним поданням напруги у [24] та [25]. Для системи, несиметричної за тунельними зв'язками та/або несиметричного подання напруги струм у «землю» ненульовий. В цьому підрозділі досліджено систему при включенні, коли  $I_R = 0, I_G = I_L = I(V)$  (як, наприклад, в [26]). При цьому включенні розглянуто залежність диференціального кондуктансу від напруги через  $\mu_L = eV$ , коли  $\mu_R = 0$ . З виразів (2.20)-(2.21) знайдемо залежність кондуктансу від напруги за низьких температур. Матимемо  $G(V) = 2G_0 T_L(\varepsilon = eV)$ , а в безрозмірних змінних  $\tilde{V} = V / (2\sqrt{\Gamma_L \Gamma_R})$  та  $\tilde{\varepsilon}_M = \varepsilon_M / (2\sqrt{\Gamma_L \Gamma_R})$  диференціальний кондуктанс має вигляд

$$\frac{G(V)}{2G_0} = \frac{1 + \tilde{\varepsilon}_M^2 + (\Gamma_L / \Gamma_R) e^{2\tilde{V}^2}}{(1 + \tilde{\varepsilon}_M^2)^2 + e^{2\tilde{V}^2} [(\Gamma_L^2 + \Gamma_R^2) / \Gamma_L \Gamma_R - \tilde{\varepsilon}_M^2]}. \quad (2.23)$$

Зокрема, в лінійному відгуку,  $V \rightarrow 0$ , рівняння (2.23) спрощується до вигляду

$$\frac{G}{2G_0} = \frac{4\Gamma_L \Gamma_R}{4\Gamma_L \Gamma_R + \varepsilon_M^2}. \quad (2.24)$$

З цього виразу видно, що при великих значеннях тунельної ширини другого

контакту  $\Gamma_R \gg \Gamma_L$ , таких, що  $\varepsilon_M \ll \sqrt{\Gamma_L \Gamma_R}$ , диференціальний кондуктанс досягає максимуму при нульовій напрузі за наявності розщеплення пари майоранівських станів. Максимальне значення дорівнює двом квантам кондуктансу,  $G(0) \rightarrow 2G_0$ . Зауважимо, що при  $\Gamma_R = 0$  у випадку ненульової енергії розщеплення станів, матимемо лише (з (2.22)):  $G(0) = 0$ .

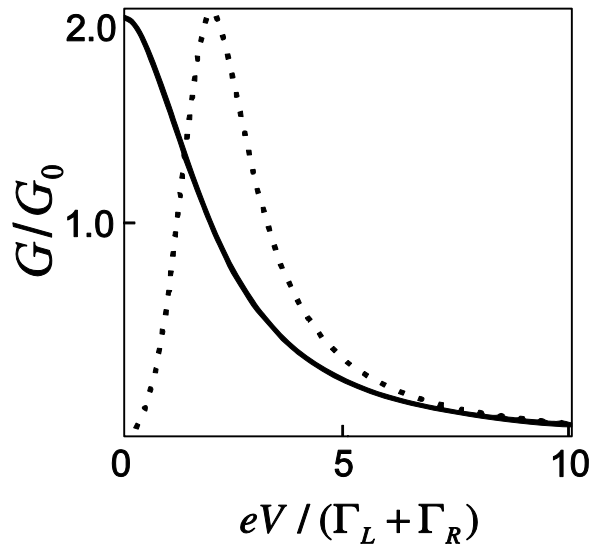


Рис. 2.2. Залежність диференціального кондуктансу системи контактів «метал–заземлений майоранівський нанодріт–метал» від напруги,  $G(V)/G_0$ ,  $G_0 = e^2 / (2\pi\hbar)$ . Суцільна крива демонструє пік в кондуктансі при нульовій напрузі (ZBP), якщо  $\Gamma_R = 0$ ,  $\varepsilon_M = 0$ . Короткопунктирна крива відповідає випадку ненульового розщеплення,  $\varepsilon_M = 2\Gamma_L$ , коли ознака майоранівських станів зникає, тобто пік кондуктансу зміщується до більших напруг. Крива для третього випадку співпадає з суцільною кривою. У цьому випадку за рахунок другого електроду створено контакт з великою тунельною шириною,  $\Gamma_R \gg \Gamma_L$ ,  $\varepsilon_M = 2\Gamma_L$ . В нашій системі кондуктанс досягає максимуму при нульовій напрузі за наявності розщеплення. Напругу нормовано на сумарну тунельну ширину рівня  $\Gamma_L + \Gamma_R$ .

Ми отримали, що в системі, асиметричній за тунельними зв'язками, ознака наявності майоранівських ферміонів, якою є пік в кондуктансі при нульовій

напрузі (zero bias peak, ZBP), може бути відтворена навіть при ненульовому розщепленні майоранівських станів за енергією,  $\varepsilon_M \gg \Gamma_L$ , при тому що у симетричних системах та в системах «метал–заземлений майоранівський нанодріт» за наявності розщеплення цей пік зміщується в область вищих напруг.

На рис. 2.2 показано, що пік в кондуктансі при нульовій напрузі відновлюється у сильно асиметричній ( $\Gamma_R \gg \Gamma_L$ ) системі при  $\varepsilon_M \ll \sqrt{\Gamma_L \Gamma_R}$  (суцільна крива), коли сумарна ширина майоранівських рівнів перевищує розщеплення. При тій самій енергії розщеплення для системи «метал–майоранівський нанодріт» аномалія зміщується до вищих напруг (краткопунктирна крива). Підсумовуючи, зазначимо, що присутність другого контакту, навіть без подання на нього напруги, збільшує струм за низьких енергій (низька напруга, низька температура).

### 2.3. Незаземлений майоранівський нанодріт.

В цьому підрозділі розглянемо систему «метал–незаземлений майоранівський нанодріт–метал», в якій надпровідник-підкладка електрично ізолюваний і струм крізь майоранівський нанодріт протікає під дією тягнучої напруги  $V$ , такої що  $\mu_L - \mu_R = eV$ . Для симетричної системи ( $\Gamma_L = \Gamma_R = \Gamma$ ) задачу було розглянуто в [24] та [25]. При цьому, як показано вище, для симетричної заземленої системи і при симетрично прикладеній напрузі,  $\mu_L = -\mu_R = eV / 2$  (тільки такий випадок розглядався в [25]), сумарний струм в «землю» дорівнює нулю,  $I_G = I_L + I_R = 0$ , тож струми крізь лівий та правий контакти є рівними,  $|I_L| = |I_R|$ . Тоді немає різниці, чи надпровідник заземлений чи ні.

Такий підхід може бути застосовано і для системи, асиметричної за тунельними зв'язками.

Тепер рівняння, що описують умову нульового струму в «землю» при зазначеній геометрії системи, а саме

$$\begin{cases} \sum_{\alpha=L,R} I_{\alpha}(\mu_{\alpha}) = 0, \\ \mu_L - \mu_R = eV, \end{cases} \quad (2.25)$$

визначають хімічні потенціали електродів як функцію тягнучої напруги. Очевидно, що при невеликій асиметрії  $|\Gamma_L - \Gamma_R| \ll \Gamma_L + \Gamma_R$  й асиметрія в хімічних потенціалах  $\delta V = V_L + V_R$  буде мала і слабо впливатиме на струм. В протилежному випадку сильної асиметрії системи (для визначеності вважатимемо  $\Gamma_L \gg \Gamma_R$ ) хімічні потенціали сильно відрізнятимуться,  $|V_L| \ll |V_R|$  при всіх значеннях тягнучої напруги  $V$ . Тож струм через незаземлений майоранівський нанодріт буде не таким, як звичайний струм крізь резонансний (Брейт-Вігнерівський) рівень.

Систему розглянуто за низьких температур,  $T \rightarrow 0$ . Для достатньо довгого нанодроту, такого, що розщепленням станів можна знехтувати ( $\varepsilon_M = 0$ ), аналітично отримано вираз для струму. При  $\varepsilon_M = 0$  коефіцієнт проходження  $\mathcal{T}_{\alpha}$  залежить, як це й повинно бути, тільки від «своєї» ширини рівня  $\Gamma_{\alpha}$

$$\mathcal{T}_{\alpha}(\varepsilon) = \frac{4\Gamma_{\alpha}^2}{\varepsilon^2 + 4\Gamma_{\alpha}^2}, \quad (2.26)$$

а відповідні струми мають вигляд

$$I_{\alpha}(\mu_{\alpha}) = \frac{2}{\pi} \frac{e\Gamma_{\alpha}}{\hbar} \arctan\left(\frac{\mu_{\alpha}}{2\Gamma_{\alpha}}\right). \quad (2.27)$$

При сильній асиметрії  $\Gamma_L \gg \Gamma_R$  розв'язок системи рівнянь (2.25) відносно хімічних потенціалів при підстановці (2.27) запишеться як

$$\begin{cases} \mu_L \simeq 2\Gamma_R \arctan\left(\frac{eV}{2\Gamma_R}\right), \\ \mu_R = \mu_L - eV. \end{cases} \quad (2.28)$$

При цьому  $\mu_L \ll \Gamma_L$ , а  $|\mu_R| \simeq eV$ , тож струм крізь незаземлений майоранівський нанодріт визначається відповідним струмом крізь найбільш слабкий контакт. За допомогою (2.27) отримуємо

$$I(V) = \frac{2}{\pi} \frac{e\Gamma_R}{\hbar} \arctan\left(\frac{eV}{2\Gamma_R}\right). \quad (2.29)$$

Струм насичується до значення  $I_m = e\Gamma_R/\hbar$ , що співпадає з відповідним максимальним струмом крізь Брейт-Вігнерівський резонансний рівень при  $\Gamma_L \gg \Gamma_R$ . Однак, на відміну від звичайного транспорту, де насичення настає при  $eV_s \simeq \Gamma_{tot} = \Gamma_L + \Gamma_R \simeq \Gamma_L$  (для сильно асиметричної системи), у випадку тунелювання крізь майоранівські стани струм насичується до свого максимального значення при набагато менших енергіях  $eV_s \simeq \Gamma_R$ .

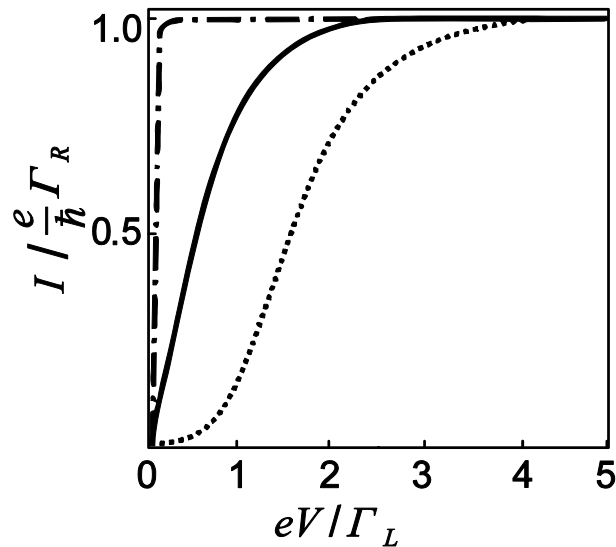


Рис. 2.3. Вольт-амперні характеристики  $I(V)/I_m$  системи контактів «метал–незаземлений майоранівський нанодріт–метал» при різних значеннях розщеплення  $\varepsilon_M$ . Асиметрія системи сильна,  $\Gamma_R/\Gamma_L = 0.001$ . Параметри кривих:  $\varepsilon_M = 0$  (штрих-пунктирна крива),  $\varepsilon_M = \Gamma_L$  (суцільна крива),  $\varepsilon_M = 2\Gamma_L$  (короткопунктирна крива). В сильно асиметричній системі за відсутності майоранівського розщеплення ( $\varepsilon_M = 0$ ) струм насичується при напругах порядку найменшої ширини рівня  $\Gamma_R$  (штрих-пунктирна крива), на відміну від резонансного електронного тунелювання в системі без майоранівських станів.

Це продемонстровано на рис. 2.3, де представлено чисельні розрахунки за загальною формулою (2.20), при  $\varepsilon_M = 0$  (штрих-пунктирна крива) і для ненульових  $\varepsilon_M$  (суцільна та короткопунктирна криві).

В сильно асиметричній системі ( $\Gamma_L \gg \Gamma_R$ ) за відсутності майоранівського розщеплення струм насичується при напругах порядку найменшої ширини рівня  $\Gamma_R$ , на відміну від резонансного електронного тунелювання в системі без майоранівських станів.

Розглянемо вплив скінченного розщеплення  $\varepsilon_M \neq 0$  на вольт-амперні характеристики для системи «метал–незаземлений нанодріт–метал». Чисельні розрахунки (рис. 2.3) показують, що за невеликих значень енергії розщеплення  $\varepsilon_M \ll \Gamma_L$  вольт-амперні характеристики слабо відрізняються від залежностей, отриманих при  $\varepsilon_M = 0$ . Коли  $\varepsilon_M$  за порядком дорівнює  $\Gamma_L$ , насичення струму має місце при  $eV_s \simeq \varepsilon_M$  і ці вольт-амперні характеристики повторюють добре відому залежність  $I(V)$  при електронному тунелюванні крізь асиметричну систему контактів з однорівневою квантовою точкою. Специфічне для майоранівської системи насичення за низьких напруг зникає.

Можна виділити особливості, властиві майоранівській системі, аналізуючи температурну залежність кондуктансу  $G(V=0, T)$ . На рис. 2.4 наведені чисельні розрахунки температурної залежності диференціального кондуктансу, отриманого за допомогою виразу (2.20).

Відомо [75], що кондуктанс при резонансному тунелюванні при високих температурах спадає як  $G \sim \Gamma_0 / T$ , де  $\Gamma_0 = \Gamma_L \Gamma_R / (\Gamma_L + \Gamma_R)$ , і температура переходу з незалежної від температури поведінки до поведінки як  $1/T$  визначається сумарною шириною рівня  $\Gamma_{tot} = \Gamma_L + \Gamma_R$ . Наші розрахунки показують, що для сильно асиметричної системи «метал–незаземлений майоранівський нанодріт–метал» температура такого переходу визначається найменшою шириною рівня і кондуктанс сильно пригнічується з ростом температури вже за низьких температур (суцільна крива), на відміну від кондуктансу симетричної системи (пунктирна крива).

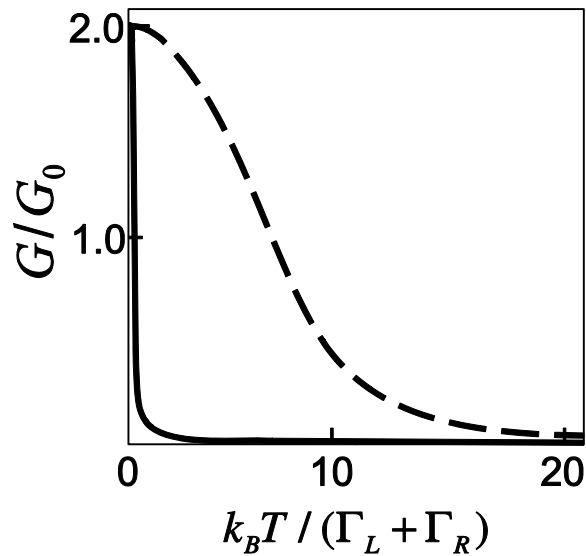


Рис. 2.4. Температурна залежність диференціального кондуктансу у лінійному відгуку для системи контактів «метал–незаземлений майоранівський нанодріт–метал»  $G(T)/G_0$ ,  $G_0 = e^2 / (2\pi\hbar)$ . Параметри кривих:  $\varepsilon_M = 0$ , асиметрія системи:  $\Gamma_R / \Gamma_L = 0.001$  (суцільна крива),  $\Gamma_L / \Gamma_R = 1$  (пунктирна крива). При сильній асиметрії кондуктанс сильно пригнічується вже за низьких температур.

### Висновки

В розділі показано, що квазістани, що нетривіальною інтерпретуються як половина ферміона, якими є майоранівські стани, проявляються через особливості вольт-амперних характеристик тунельних систем. Основні результати розділу:

1. Знайдено струм крізь систему «метал–майоранівський нанодріт–метал».
2. Показано, що в системі «метал–заземлений майоранівський нанодріт–метал», сильно асиметричній за тунельними зв'язками, при розщепленні майоранівських станів кондуктанс досягає максимуму при нульовій напрузі. На відміну від систем з іншою геометрією, де при наявності розщеплення цей



максимум, що важливий для виявлення майоранівських станів, зміщується в область більш високих напруг.

3. Отримано, що струм крізь майоранівський нанодріт в при сильній асиметрії системи за тунельними зв'язками швидко насичується, а залежність кондуктансу від температури швидко спадає. Таким чином, можна відрізнити ці вольт-амперні характеристики від характеристик при резонансному тунелюванні в системі без майоранівських станів.

## РОЗДІЛ 3

### ІНДУКОВАНА ВЗАЄМОДІЄЮ ЩІЛИНА В СПЕКТРІ ЕЛЕКТРОНІВ ТА ХІРАЛЬНІ ЕФЕКТИ В МЕТАЛЕВИХ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБКАХ

В цьому розділі вивчається вплив електрон-фононої та електрон-електронної взаємодії на спектр та транспортні характеристики діраківських електронів в металевих одношарових вуглецевих нанотрубках (SWNT). Показано, що недіагональні компоненти потенціалу електрон-електронної взаємодії приводять до появи щілини в спектрі електронів. Розраховано коефіцієнт проходження електронів через локальний скалярний (електростатичний) потенціал з урахуванням енергетичної щілини в спектрі та електрон-електронної взаємодії. Викладені результати опубліковано в статті [2].

#### 3.1. Розсіяння електронів на акустичних фононах в межах однієї долини. Пайєрлсівська щілина.

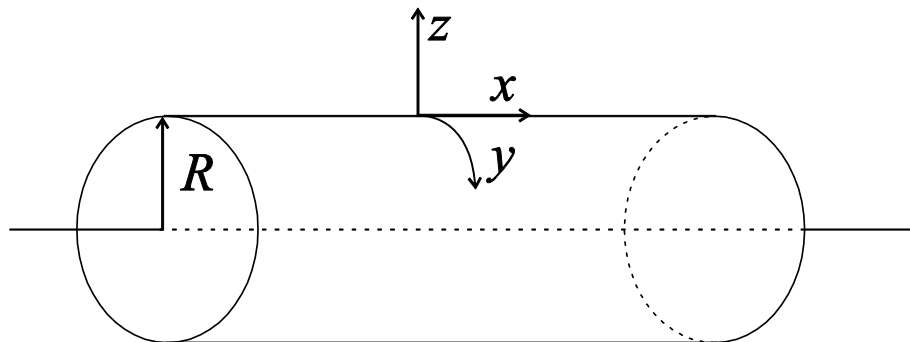
В одношаровій вуглецевій нанотрубці динаміка електронів ефективно є одновимірною. Гамільтоніан електронів в нанотрубці має вигляд [76]

$$\hat{H}^{(\pm)} = \pm \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & e^{\pm i\theta} \hat{k}_x \\ e^{\mp i\theta} \hat{k}_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

в якій знак  $\pm$  визначає тип долини ( $k_F$  та  $-k_F$  відповідно, де  $k_F = \varepsilon_F / \hbar v_F$ ),  $v_F$  – фермієвська швидкість. Кут хіральності  $\theta$  характеризує спосіб згортання графена ( $0 < \theta < \pi / 6$ ). Вважаємо, що  $\theta = 0$  відповідає SWNT типу «крісло» (“armchair”),  $\theta = \pi / 6$  – SWNT типу «зигзаг» (“zigzag”),  $\hat{k}_x = -i\partial / \partial x$  – це квазіімпульс, вісь  $x$  спрямовано вздовж вісі нанотрубки (рис. 3.1) Процеси, розглянуті в роботі, не призводять до електронних переходів між енергетичними долинами, тому долини будемо розглядати незалежно.

Спочатку розглянемо можливість появи щілини в спектрі діраківських електронів в металевій одношаровій вуглецевій нанотрубці за рахунок пайєрлсівського фазового переходу. Нагадаємо, що в стандартній теорії

пайєрлєсївського фазового переходу щїлина в спектрі 1D електронів провідності виникає за рахунок електрон-фононної взаємодїї, що розглядається в наближенні середнього поля [77]. Поява щїлини на рївнї Фермі зобов'язана фононам з їмпульсами  $q = 2k_F$ , якї розсіюють електрони назад, так, що стани «до» і «пїсля» розсіяння відповідають схемї  $k_F \rightarrow -k_F$  зї змїною значення їмпульсу  $\delta k \approx 2k_F$ . Такї фонони мають високї (оптичнї) частоти і у вуглецевих нанотрубках вони призводять до мїждолинного розсіяння електронів. Теорїю пайєрлєсївського фазового переходу з урахуванням електрон-електронних кореляцїй (в латїнжерївській рїдинї) докладно розглянуто в роботї [78]. Для вуглецевих нанотрубок звичайна пайєрлєсївська щїлина виключно мала [79] і нею можна знехтувати при дослїдженнї транспортних властивостей нанотрубок за ненульових температур.



*Рис. 3.1. Схематичне зображення одношарової вуглецевої нанотрубки радіусу  $R$ . Показано систему координат, що використовується при розглядї, і в якїй, зокрема, визначено тензор деформацїї  $u_{ij}$ .*

Нас буде цікавити розсіяння електронів в межах однієї долини ( $\delta k \approx 0$ , малї змїни енергїї), зумовлене взаємодїєю з низькоенергетичними – акустичними – фононами, якї розглядаються як стацїонарне поле змїщень. Відомо, що для носїїв з квадратичним спектром, тобто без урахування дїраківської (спїнорної) структури хвильових функцїй електронів, ця взаємодїя не приводить до утворення щїлини в спектрі, і для вільних електронів внесок акустичних фононїв

зводиться до незначного, порядку  $(v/v_F)^2 \ll 1$  ( $v$  – швидкість звуку), перенормування фермієвської швидкості [80].

Для вуглецевих нанотрбок електрон-фононна взаємодія має матричний вигляд [35]

$$\hat{H}_{e-ph} = \begin{pmatrix} V_1 & V_2 \\ V_2^* & V_1 \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Вираз приведено для однієї енергетичної долини, при цьому для іншої – знаки недіагональних компонент змінюються на протилежні. Залежність від кута хіральності в гамільтоніані (3.1) зручно перенести в недіагональні елементи матриці електрон-фононної взаємодії (3.2) за допомогою унітарного перетворення з оператором

$$\hat{P} = \hat{P}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & e^{\pm i\theta/2} \\ e^{\mp i\theta/2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Після перетворення отримаємо

$$\hat{H}^{(+)\prime} = \hbar v_F \hat{\sigma}_1 \hat{k}_x \quad (3.4)$$

та

$$\hat{H}'_{e-ph} = \begin{pmatrix} V_1 & V_2' \\ V_2'^* & V_1 \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

де  $V_2' = V_2 \exp(i\theta)$ . В (3.4) і далі через  $\hat{\sigma}_j$  з  $j=1,2$  позначено матриці Паулі. Приходимо до залежності матричних елементів недіагонального потенціалу від кута хіральності  $\theta$ . Надалі опустимо штрих і вважатимемо, що  $V_2$  вже залежить від кута хіральності.

Діагональний потенціал  $V_1$  у виразі (3.2) – це деформаційний потенціал

$$V_1 = g_1 (u_{xx} + u_{yy}), \quad (3.6)$$

де  $g_1 \approx \varepsilon_F$ . Тут і далі  $u_{ij}$  – компоненти тензору деформації,  $u_{xx} = \partial u_x / \partial x$ ,  $u_{yy} = \partial u_y / \partial y$ ,  $2u_{xy} = \partial u_x / \partial y + \partial u_y / \partial x$  (див. рис. 3.1), де зміщення  $u_x$  та  $u_y$  відповідають пружним деформаціям розтягування та скручування нанотрубки відповідно.

Недіагональний комплексний потенціал  $V_2$ , як було вже зазначено, специфічний для вуглецевих нанотрубок (див. [35], з урахуванням перепозначення координат та додаткової залежності від кута хіральності)

$$V_2 = g_2 e^{-i\xi} (u_{yy} - u_{xx} + 2iu_{xy}), \quad (3.7)$$

( $\xi = 2\theta$  – ефективний хіральний кут). Константа  $g_2$  пропорційна інтегралу перекриття між атомами вуглецю в двопідгратковій моделі гексагональної решітки і значно менша за константу деформаційного потенціалу,  $g_2 \ll g_1$  ( $g_2 \approx 1.5 \text{ eV}$ , відповідно до оцінок роботи [35]).

Легко бачити, що для постійних значень потенціалу (3.2) в спектрі електронів з'являється щілина (цей вираз, з якого ми стратуємо, має вигляд, формально аналогічний результату [37]), тобто спектр запишеться наступним чином ( $\hbar = 1, v_F = 1$ )

$$\varepsilon(k) = V_1 \pm \sqrt{(k + V_{pm}^{(\pm)})^2 + \Delta^2}, \quad (3.8)$$

де псевдомагнітний потенціал становить

$$V_{pm}^{(\pm)} = \pm \text{Re} V_2 = \pm g_2 [(u_{yy} - u_{xx}) \cos \xi - 2u_{xy} \sin \xi], \quad (3.9)$$

$k$  – квазіімпульс, який тут (і далі) відраховується від  $k_F$ , а щілина визначається виразом

$$\Delta = \text{Im} V_2 = g_2 [(u_{yy} - u_{xx}) \sin \xi + 2u_{xy} \cos \xi]. \quad (3.10)$$

Для знаходження значення рівноважної самоузгодженої пайєрлсівської щілини  $\Delta_p$  за нульової температури необхідно мінімізувати повну енергію системи, що складається з енергій заповнених «фермі-підвалів» двох долин електронного спектру (спектр представлений на рис. 3.2, але в поданих формулах  $k$  відраховується від  $k_F$ ) і пружної енергії нанотрубки.

Для постійних значень компонент тензору деформацій щільність пружної енергії нанотрубки радіусу  $R$  має вигляд (див., наприклад, [35])

$$U_e = 2\pi R \left\{ \frac{B}{2} (u_{xx} + u_{yy})^2 + \frac{S}{2} \left[ (u_{xx} - u_{yy})^2 + 4u_{xy}^2 \right] \right\}, \quad (3.11)$$

де константи  $B$  та  $S$  визначають модуль всебічного стиску і модуль зсуву площини графіту.

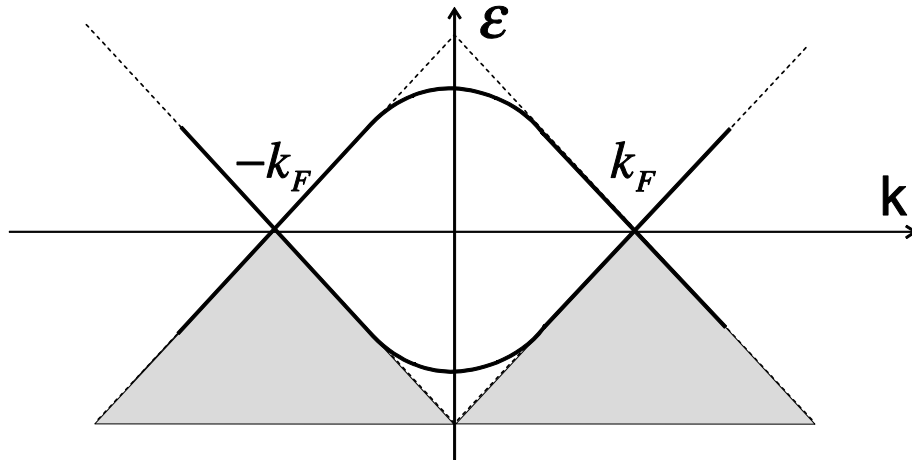


Рис. 3.2. Дві долини ( $\pm k_F$ ) безщільового спектру діраківських електронів. Заштриховано «фермі-підвали» заповнених електронних станів.

Опускаючи несуттєву для нас постійну зсуву енергій,  $V_1$ , в (3.8) та підсумовуючи за імпульсами до максимальних значень  $k = k_F$  (вважаємо, що спектр лінійний до енергій порядку  $\varepsilon_F$ ), для повної щільності енергії нанотрубки будемо мати

$$\varepsilon_t = \sum_{\eta=\pm} \varepsilon^{(\eta)} + U_e, \quad (3.12)$$

де

$$\varepsilon^{(\pm)} = -2 \int_{-k_F}^{+k_F} \frac{dk}{2\pi} \sqrt{(k + V_{pm}^{(\pm)})^2 + \Delta^2} \quad (3.13)$$

(статистичний множник «2» враховує спін електрона).

Для слабких констант електрон-фононої взаємодії псевдомагнітний потенціал  $V_{pm}$  та пайерлсівська щілина  $\Delta$  значно менші за фермієвську енергію  $\varepsilon_F$ ,  $V_{pm} \ll \varepsilon_F$ ,  $\Delta \ll \varepsilon_F$ . За цієї умови система рівнянь  $\partial \varepsilon_t / \partial u_{ij} = 0$  матиме простий вигляд:

$$\begin{cases} \frac{g_2 \sin \xi}{\pi^2 R} F_u(u_{ll'}) = B(u_{xx} + u_{yy}) + S(u_{xx} - u_{yy}), a \\ -\frac{g_2 \sin \xi}{\pi^2 R} F_u(u_{ll'}) = B(u_{xx} + u_{yy}) - S(u_{xx} - u_{yy}), \\ \frac{g_2 \cos \xi}{2\pi^2 R} F_u(u_{ll'}) = Su_{xy}, \end{cases} \quad (3.14)$$

де

$$F_u(u_{ll'}) = \Delta \ln \frac{4\varepsilon_F}{|V_{pm}| + \sqrt{V_{pm}^2 + \Delta^2}}. \quad (3.15)$$

З системи (3.14) випливає, що

$$u_{xx} + u_{yy} = 0, \quad u_{xy} = \operatorname{ctg} \xi u_{xx}, \quad (3.16)$$

і тоді деформаційний (3.6) та псевдомагнітний (3.9) потенціали дорівнюють нулю,  $V_1 = V_{pm}^{(\pm)} = 0$ . Внаслідок (3.16) вираз для пружної енергії (3.11) має стандартний вигляд для пайерлсівського діелектрика [81, 82]

$$U_e = \frac{\Delta^2}{2g_{eff}^2}, \quad (3.17)$$

де

$$g_{eff}^2 \equiv \frac{g_2^2}{\pi RS}. \quad (3.18)$$

Крім того, система (3.14) дозволяє визначити рівноважний вираз для щілини в (3.17). В результаті формула для пайерлсівської щілини передбачає звичайну для теорії слабого зв'язку експоненціальну залежність від константи електрон-фононної взаємодії

$$\Delta_p \approx \pm 4\varepsilon_F \exp\left(-\pi^2 \hbar \nu_F \frac{RS}{g_2^2}\right). \quad (3.19)$$

Модуль зсуву легко виражається через швидкість поперечних фононів в нанотрубці,  $\nu_l = \sqrt{S/M}$ , яку можна виміряти експериментально (тут  $M$  – щільність маси атомів вуглецю в графені). Пайерлсівська щілина (3.19) при  $R \rightarrow \infty$  зникає (як і повинно бути для графену). Експоненціальна залежність розміру щілини від слабкої для вуглецевих нанотрубок константи призводить до

аномально малої чисельної величини, якою можна знехтувати в реальних експериментах з вуглецевими нанотрубками. Проте, принципова можливість появи щілини в спектрі за рахунок розсіяння діраківських електронів на акустичних фонах, на наш погляд, становить інтерес.

Зауважимо, що кут хіральності  $\xi$  не входить до виразу для рівноважної щілини  $\Delta_p$ , попре те, що від нього залежали початкові потенціали моделі. Тому теорія пайєрлсівського переходу, індукованого електрон-фононим розсіянням електронів в межах однієї долини ( $\delta k \approx 0$ ), повністю еквівалентна теорії 1D пайєрлсівського діелектрика [81, 82]. Зокрема, теорія передбачає існування топологічних солітонів (антісолітонов) з параметром порядку  $\Delta(x) = \pm \Delta_p \text{th} \left[ \Delta_p (x - x_0) / [\sqrt{2} \hbar v_F] \right]$  з локалізованим на солітоні дворазово виродженим за спіном електронним рівнем з  $\omega_f = 0$ . Енергія такого солітону  $E_s = 2\Delta_p / \pi < \Delta_p$  і тому при допіруванні електрони утворюють солітон-антісолітонний вігнерівський кристал (періодично розташовані солітони і антісолітони з локалізованими на них електронними станами). Фізично очевидно, що при температурах  $T \geq \Delta_p$  пайєрлсівська щілина в спектрі зникає, і в нашому випадку (SWNT) описана вище картина «солітонного транспорту» зарядів в пайєрлсівському діелектрику відноситься до області наднизьких температур. Більш реалістичним є сценарій, теорію якого розвинуто в наступному підрозділі, коли щілина в спектрі електронів виникає за рахунок електрон-електронних кореляцій (викликаних віртуальним обміном акустичними фонами) при допіруванні металевої SWNT.

### **3.2. Індукована електрон-електронними кореляціями хіральна щілина.**

Для діраківських електронів в одношарових вуглецевих нанотрубках фононна взаємодія має матричну структуру (див. формули (3.5)-(3.7)). Ми показуємо, що, як наслідок, індукована в другому порядку теорії збурень за константою зв'язку електрон-електронна взаємодія також має матричний вигляд.



Діаграма, використана для розрахунку, приведена на рис. 3.3. Для наших цілей інтерес становить та частина цієї взаємодії, яка пропорційна  $\hat{\sigma}_2$ , тобто індукує щілину в спектрі діраківських електронів, гамільтоніан яких тепер можна записати у вигляді

$$\hat{H}_D = \hbar v_F \hat{\sigma}_1 \hat{k} + \hat{\sigma}_2 \Delta_{eff}. \quad (3.20)$$

Структура електрон-фононного потенціалу (3.5) показує, що електрон-електронна взаємодія пропорційна добутку констант деформаційного та недіагонального потенціалів (3.6), (3.7), тобто  $W_2 \sim g_1 g_2$ . Використовуючи діаграму, рис. 3.3, знайдемо квадрат матричного елемента потенціалу взаємодії і оцінімо залежність кореляційного потенціалу від імпульсу і хірального кута.

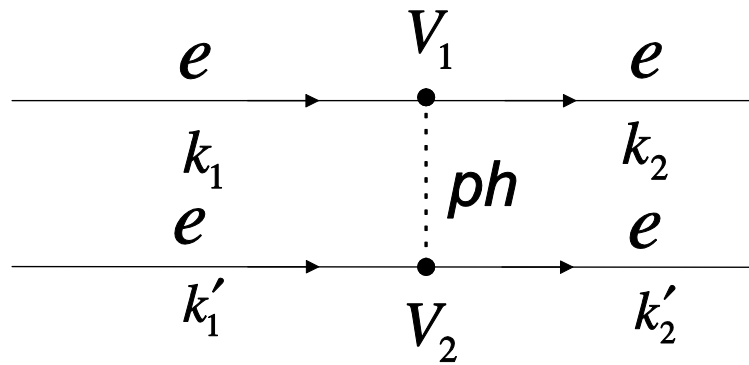


Рис. 3.3. Діаграма електрон-електронного розсіяння вперед,  $|k_2 - k_1| = |k_2' - k_1'| \equiv \delta k \sim 0$ , що породжує статичний потенціал електрон-електронної взаємодії, котрий в свою чергу індукує кореляційну щілину в спектрі електронів.  $V_1, V_2$  – амплітуди потенціалів взаємодії.

Для статичного випадку (нехтуючи ефектами запізнювання) отримуємо

$$W_2 \sim -g_1 g_2 \frac{\langle \hat{u}_x^2 \rangle}{\hbar^2 v_t^2} \sin \xi \left( \frac{S}{B+S} \right)^2. \quad (3.21)$$

Тут  $B, S$  – модулі пружності, введені в попередньому підрозділі,  $\langle \hat{u}_x^2 \rangle$  – квадрат амплітуди нульових коливань нанотрубки. Зазначимо, що для згинальних коливань підвішеної нанотрубки ця величина пропорційна довжині трубки та

може досягати значних величин для вібруючих нанотрубок реалізованих в експерименті, описаному в [29] ( $L \approx 10^3$  нм). Відзначимо також, що за температур, набагато більших характерних енергій згинальних коливань, термічно активовані коливання приводять до лінійної залежності кореляційного потенціалу від температури.

Згідно (3.21),  $W_2$  не залежить від імпульсу, що призводить до локального  $\delta$ -функціонального потенціалу електрон-електронних кореляцій,  $W_2(x-x') \sim \hbar v_F \delta(x-x')$ , де  $x, x'$  – координати вздовж вісі  $x$ . Нижче буде показано, що в наближенні Хартрі-Фока кореляційна щільність дорівнює нулю для цього виду потенціалу. Тому в подальшому потенціал електрон-електронних кореляцій змодельовано у вигляді «розмазаної» на довжині  $l_p$  (де  $l_p$  – характерна довжина релаксації в фононній підсистемі)  $\delta$ -функції Дірака, тож матимемо

$$W_2(x-x') \sim \hbar v_F \frac{l_p}{l_p^2 + (x-x')^2} W_2. \quad (3.22)$$

Знайдемо ефективну щільність в спектрі електронів, використовуючи метод Хартрі-Фока. У цьому наближенні рівняння, що враховує електрон-електронну взаємодію, має вигляд

$$\begin{aligned} -i\hat{\sigma}_1 \frac{\partial |\Psi(x)\rangle}{\partial x} + \int dx' \hat{W}(x-x') |\Psi(x)\rangle \sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(x') | \Psi_{\kappa}(x') \rangle - \\ - \int dx' \hat{W}(x-x') |\Psi(x')\rangle \sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(x') | \Psi_{\kappa}(x) \rangle = \hat{E} |\Psi(x)\rangle, \end{aligned} \quad (3.23)$$

з незбуреним гамільтоніаном, що відповідає (3.4), та з  $\hat{E} = E\hat{I}$ , де  $\hat{I}$  – одинична матриця. Хвильові функції мають індекс стану  $\kappa = (k, s)$ , з  $s=1,2$ , та де  $k$  – хвильовий вектор,  $|\Psi(x)\rangle = \sum |\Psi_s(x)\rangle$ . В (3.23)  $\hat{W}(x-x')$  – це потенціал парної електрон-електронної взаємодії, який можна представити у вигляді

$$\hat{W}(x-x') = \hat{W}(|x-x'|) = W_0(x-x')\hat{I} + W_1(x-x')\hat{\sigma}_1 + W_2(x-x')\hat{\sigma}_2. \quad (3.24)$$

Перший доданок в (3.23) відповідає хартрівському, а другий – фоківському (обмінному) типу взаємодії.

Незбурене рівняння (3.23) (рівняння з  $\hat{W}(x-x')=0$ ) становить вільне безмасове одновимірне рівняння Дірака ( $\hbar=1$ ,  $v_F=1$ )

$$-i\hat{\sigma}_1 \frac{\partial |\Psi(x)\rangle}{\partial x} = \hat{E} |\Psi(x)\rangle, \quad (3.25)$$

з базисними розв'язками виду

$$|\Psi_1(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ikx}, \quad |\Psi_2(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-ikx}. \quad (3.26)$$

Закон дисперсії для цього рівняння  $E = k$  (зручно вибрати класифікацію станів, в якій одному хвильовому числу відповідає одна енергія  $E$ ).

Припущено, що нанотрубка допована до енергії  $E_0 = \hbar v_F K$ , де  $K$  – відповідний хвильовий вектор. Тоді базисні розв'язки (3.26) породжують в інтегральному рівнянні (3.23) ядро виду

$$\sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(x') | \Psi_{\kappa}(x) \rangle \approx \frac{2 \sin[K(x-x')]}{x-x'} \equiv F(x-x'). \quad (3.27)$$

Оскільки ядро (3.27) залежить від різниці координат, інтегральне рівняння (3.23) має точний розв'язок. В результаті, якщо розв'язок представити у вигляді  $|\Psi(x)\rangle = |c_{1,2}\rangle e^{\pm ikx}$ , отримаємо

$$\pm k \hat{\sigma}_1 |c_{1,2}\rangle + \hat{A}(k) |c_{1,2}\rangle = \hat{E} |c_{1,2}\rangle, \quad (3.28)$$

де

$$\hat{A}(k) = \int d\tilde{x} \hat{W}(\tilde{x}) [F(0) - F(\tilde{x}) \cos k\tilde{x}] \quad (3.29)$$

(використано парність функцій  $F(\tilde{x})$  та  $W_2(\tilde{x})$ ).

З рівнянь (3.28)-(3.29) випливає, що при  $\hat{A}(k) \sim \hat{I}$  можна повернутися до «вільного» рівняння, тільки енергія електронів буде перенормованою; якщо  $\hat{A}(k) \sim \hat{\sigma}_1$  – перенормується хвильове число. Але такими перенормуваннями ми не будемо цікавитись і знехтуємо ними. Найцікавіший випадок, як вже зазначалося, відповідає  $\hat{A}(k) \sim \hat{\sigma}_2$ .

Тоді в спектрі збуджень з'являється щілина, тобто енергія має вигляд

$$E = \sqrt{k^2 + \Delta^2(k)}, \quad (3.30)$$

де

$$\Delta(k) = \int d\tilde{x} [F(0) - F(\tilde{x}) \cos k\tilde{x}] W_2(\tilde{x}), \quad (3.31)$$

і  $W_2(\tilde{x})$  визначається рівнянням (3.22) з урахуванням (3.21). Зауважимо, що у разі  $\delta$ -функціонального потенціалу взаємодії,  $W_2(\tilde{x}) \sim \hbar v_F \delta(\tilde{x})$ , щілина в спектрі збуджень дорівнює нулю. Крім того, величина щілини залежить від енергії допірування, і за відсутності допірування значення щілини також дорівнює нулю. З урахуванням (3.30) в випадку, що розглядається, рівняння (3.28) має розв'язки виду

$$|\psi_1(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{k - i\Delta}{E} \\ 1 \end{pmatrix} e^{ikx}, \quad |\psi_2(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{k + i\Delta}{E} \\ -1 \end{pmatrix} e^{-ikx}. \quad (3.32)$$

Перший вираз описує хвилю, що поширюється у позитивному напрямку вісі  $x$ . Відповідно, другий – у негативному.

Відзначимо, що для безщільових електронів базисні розв'язки (3.26) завдяки спінорній структурі є ортогональними одне одному. Для розв'язків (3.32) справедливо, що добуток  $\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \neq 0$ . Ця властивість приводить до радикальних змін при розгляді впливу електрон-електронних кореляцій на матричний елемент розсіяння електронів на електростатичному зовнішньому потенціалі. До цього питання перейдемо в наступному підрозділі.

### 3.3. Коефіцієнт проходження $\delta$ -функціонального бар'єру.

Як вже зазначалося, наявність енергетичної щілини  $\Delta$  в спектрі порушує умови для парадоксу Клейна при енергіях  $E \leq \Delta$ , тож при проходженні електронами скалярних (електростатичних) потенціальних бар'єрів в нанотрубці з'являється ненульове відбиття назад. В якості ілюстрації розраховано коефіцієнт проходження електрона при розсіянні на прямокутному потенціальному бар'єрі виду  $\hat{V}_0(x) = V_0(x)\hat{I}$ ,  $V_0(x) = V_0 = \text{const}$ ,  $0 < x < a$ . При

розрахунку припущено, що величина щілини не залежить від хвильового числа  $k$ , тож  $\Delta = \text{const}$ .

Стандартна процедура розрахунку за допомогою зшивання хвильових функцій приводить до наступного виразу для амплітуди відбиття бар'єру ( $\hbar = 1$ ,  $v_F = 1$ )

$$r_g = \frac{A_1 \sin ap_1}{2p_1 p_2 E(E - V_0) \sin ap_1 - iA_2 \cos ap_1}, \quad (3.33)$$

де  $p_1 = \sqrt{(E - V_0)^2 - \Delta^2}$ ,  $p_2 = \sqrt{E^2 - \Delta^2}$  та

$$A_1(E) = (p_1^2 - p_2^2)E^2 - (p_2^2 - \Delta^2)V_0^2 + 2p_2^2 EV_0 - 2ip_2 \Delta V_0(E - V_0), \quad (3.34)$$

$$A_2(E) = (p_1^2 + p_2^2)E^2 + (p_2^2 + \Delta^2)V_0^2 - 2p_2^2 EV_0. \quad (3.35)$$

Амплітуду відбиття  $\delta$ -функціонального бар'єру,  $r_0$ , матимемо, обчисливши значення виразу (3.33) при  $V_0 \rightarrow \infty$ ,  $a \rightarrow 0$ ,  $aV_0 \rightarrow \mathcal{V}$ . Тоді коефіцієнти відбиття і проходження мають вигляд, відповідно,

$$|r_0|^2 = \frac{\Delta^2 \sin^2 \mathcal{V}}{E^2 - \Delta^2 \sin^2 \mathcal{V}}, \quad (3.36)$$

$$|\tau_0|^2 = \frac{E^2 - 2\Delta^2 \sin^2 \mathcal{V}}{E^2 - \Delta^2 \sin^2 \mathcal{V}}. \quad (3.37)$$

Як легко перевірити, коефіцієнти відбиття, як той, що походить з (3.33), так і (3.36), дорівнюють нулю при  $\Delta = 0$ , що є проявом парадоксу Клейна для ультрарелятивістських ферміонів. Відзначимо, що особливою рисою хірального тунелювання (в порівнянні з тунелюванням нерелятивістських електронів) є осцилююча залежність коефіцієнта відбиття від ефективної величини бар'єру  $\mathcal{V}$ . Зокрема, для  $\delta$ -функціонального бар'єру при  $\mathcal{V} = \pi n$  ( $n = 0, 1, \dots$ ) коефіцієнт проходження  $|\tau_0|^2 = 1$ , і, відповідно,  $|r_0|^2 = 0$  (резонансне проходження). При  $\mathcal{V} = \pi(n + 1/2)$  коефіцієнт відбиття досягає максимальної величини,  $r_{0 \max} = \Delta / p_2$ .

У наступному підрозділі розглянемо вплив електрон-електронних кореляцій на затравочний коефіцієнт проходження, зокрема, виду (3.37).

### 3.4. Перенормування коефіцієнта проходження локального електростатичного потенціалу.

Розглянемо розсіяння взаємодіючих електронів на плавному потенціалі  $\hat{V}_0(x)$ . Плавним потенціалом вважатимемо такий, що змінюється на характерній довжині набагато меншій ніж фермієвська довжина хвилі квазічастинок, але набагато більшій за постійну ґратки. Потенціал заданий на обмеженому інтервалі  $\hat{V}_0(x) = V_0(x)\hat{I}$ , де  $V_0(x) = V_0 = \text{const}$  при  $|x| < d$  (потенціал  $\hat{V}_0(x)$  має тільки діагональні компоненти і є інваріантним щодо унітарного перетворення (3.3)). При розв'язку задачі до рівняння (3.23) додається розсіювач, тож отримуємо

$$-i\hat{\sigma}_1 \frac{\partial |\Psi(x)\rangle}{\partial x} + \hat{V}_0(x)|\Psi(x)\rangle + \int dx' \hat{W}(x-x')|\Psi(x)\rangle \sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(x') | \Psi_{\kappa}(x') \rangle - \int dx' \hat{W}(x-x')|\Psi(x')\rangle \sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(x') | \Psi_{\kappa}(x) \rangle = \hat{E}|\Psi(x)\rangle. \quad (3.38)$$

Розв'язки для рівняння (3.38) можна представити асимптотиками при  $x \rightarrow \pm\infty$ , які позначимо через  $|G_{1,2}^{(0)}\rangle$ , такі що

$$|G_1^{(0)}(x)\rangle = \begin{cases} |\psi_1(x)\rangle + r_l^{(0)}|\psi_2(x)\rangle, & x \rightarrow -\infty; \\ \tau_l^{(0)}|\psi_1(x)\rangle, & x \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (3.39)$$

$$|G_2^{(0)}(x)\rangle = \begin{cases} |\psi_2(x)\rangle + r_r^{(0)}|\psi_1(x)\rangle, & x \rightarrow +\infty; \\ \tau_r^{(0)}|\psi_2(x)\rangle, & x \rightarrow -\infty, \end{cases} \quad (3.40)$$

де  $r_{l,r}^{(0)}, \tau_{l,r}^{(0)}$  – це амплітуди відбиття та проходження відповідно, які є елементами унітарної  $\hat{S}$ -матриці розсіяння

$$\hat{S}_0 = \begin{pmatrix} r_l^{(0)} & \tau_r^{(0)} \\ \tau_l^{(0)} & r_r^{(0)} \end{pmatrix} = e^{i\varphi_1^{(0)}} \begin{pmatrix} \sqrt{1-\tau_0^2} e^{i\varphi_2^{(0)}} & i\tau_0 e^{i\varphi_3^{(0)}} \\ i\tau_0 e^{-i\varphi_3^{(0)}} & \sqrt{1-\tau_0^2} e^{-i\varphi_2^{(0)}} \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

параметризованої стандартним чином за допомогою затравочного коефіцієнту проходження  $\tau_0$  та фази  $\varphi_j$ ,  $j=1,2,3$ . Накладено умову унітарності,  $\hat{S}_0 \hat{S}_0^+ = 1$ .

Розв'язки (3.39), (3.40) породжують, окрім ядра  $F(x-x')$ , ядро  $Q(x,x')$ , тож матимемо вираз, який описує осциляції Фріделя [39] в новій системі,

$$\sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(x') | \Psi_{\kappa}(x) \rangle \approx F(x-x') + Q(x,x'), \quad (3.42)$$

де

$$Q(x,x') = \begin{cases} -r_r^{(0)} \frac{\Delta_0}{K+i\Delta_0} \frac{e^{iK(x+x')}}{x+x'} + \text{Н.с.} & x, x' > 0; \\ -r_l^{(0)} \frac{\Delta_0}{K-i\Delta_0} \frac{e^{-iK(x+x')}}{x+x'} + \text{Н.с.} & x, x' < 0, \end{cases} \quad (3.43)$$

та  $\Delta_0 = \Delta(K)$  (див. (3.31)). Це ядро перенормує затравочні елементи  $\hat{S}$ -матриці розсіяння. Зауважимо, що ядро  $Q(x,x')$  не нуль при ненульовому значенні параметра  $\Delta_0$ , ефективної щілини в спектрі електронних збуджень.

Для знаходження перенормувань елементів  $\hat{S}$ -матриці зручно вчинити наступним чином. Нехай  $|G_{1,2}(x)\rangle$  – розв'язки рівняння (3.38) з ядром (3.42), тобто розв'язки, що мають ті ж асимптотики (3.39), (3.40), але з перенормованими елементами  $\hat{S}$ -матриці (які ми не будемо позначати індексом «0»). Тоді неважко переконатися в справедливості тотожності

$$\begin{aligned} \langle G_j^{(0)}(\infty) \hat{\sigma}_1 G_{j'}(\infty) \rangle - \langle G_j^{(0)}(-\infty) \hat{\sigma}_1 G_{j'}(-\infty) \rangle = \\ = -i \int dx \langle G_j^{(0)}(x) \hat{L} \{ G_{j'}^{(0)}(x) \} \rangle, \end{aligned} \quad (3.44)$$

де

$$\begin{aligned} \hat{L} \{ G_{j'}^{(0)}(x) \} = \int dx' Q(x',x') \hat{W}(x-x') | G_{j'}^{(0)}(x) \rangle - \\ - \int dx' Q(x,x') \hat{W}(x-x') | G_{j'}^{(0)}(x') \rangle. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Поклавши в рівнянні (3.44)  $j, j' = 1, 2$ , отримуємо систему чотирьох лінійних рівнянь для елементів  $\hat{S}$ -матриці розсіяння. Розв'язуючи цю систему для поправки першого порядку (за константою взаємодії) до коефіцієнтів  $r_{l,r}^{(0)}, t_{l,r}^{(0)}$ , отримуємо наступні рівняння

$$\left[ \begin{array}{l} \tau_l - \tau_l^{(0)} = -r_r^{(0)} \left( \bar{r}_r^{(0)} \tau_l^{(0)} - r_l^{(0)} \bar{\tau}_r^{(0)} \right) \frac{\alpha(K)}{2} \ln \frac{1}{|2d(k-K)|}, \\ r_l - r_l^{(0)} = -\tau_r^{(0)} \left( \bar{r}_r^{(0)} \tau_l^{(0)} - r_l^{(0)} \bar{\tau}_r^{(0)} \right) \frac{\alpha(K)}{2} \ln \frac{1}{|2d(k-K)|}, \\ \tau_r - \tau_r^{(0)} = r_l^{(0)} \left( r_r^{(0)} \bar{\tau}_l^{(0)} - \bar{r}_l^{(0)} \tau_r^{(0)} \right) \frac{\alpha(K)}{2} \ln \frac{1}{|2d(k-K)|}, \\ r_r - r_r^{(0)} = \tau_l^{(0)} \left( r_r^{(0)} \bar{\tau}_l^{(0)} - \bar{r}_l^{(0)} \tau_r^{(0)} \right) \frac{\alpha(K)}{2} \ln \frac{1}{|2d(k-K)|}, \end{array} \right. \quad (3.46)$$

де амплітуда з ризикою позначає комплексно спряжену величину,  $d$  – просторовий розмір потенціалу розсіяння, а  $\alpha(K)$  визначається виразом

$$\alpha(K) = \frac{\Delta_0 K}{E_0^2} [\Phi(0) - \Phi(2K)], \quad (3.47)$$

де через  $\Phi(k)$  позначено Фур'є-образ потенціалу взаємодії

$$\Phi(k) = \frac{\Delta_0}{E_0} \int d\tilde{x} e^{ik\tilde{x}} W_0(\tilde{x}) + \int d\tilde{x} e^{ik\tilde{x}} W_2(\tilde{x}). \quad (3.48)$$

Зауважимо, що безрозмірний параметр  $\alpha(K)$  має фізичний зміст ефективної константи електрон-електронної взаємодії. Він дорівнює нулю при  $\Delta_0 = 0$ . Також, для  $\delta$ -функціонального потенціалу взаємодії справедливий вираз  $\Phi(0) = \Phi(2K)$ , тож матимемо в такому випадку:  $\alpha(K) = 0$ . Тому тільки для нелокального потенціалу електрон-електронних кореляцій з'являються як щілина в спектрі електронів, так і перенормування коефіцієнтів відбиття та проходження. Потенціал  $\Phi(K)$  визначається сумою вкладів діагонального потенціалу  $W_0$  електрон-електронної взаємодії та недіагонального потенціалу  $W_2$ . Справедлива умова  $W_0 \gg W_2$ , але наявність малого фактору  $\Delta_0 / \hbar v_F K \ll 1$ , з яким  $W_0$  входить у (3.48), дозволяє залишити в (3.48) обидва доданки.

Рівняння системи (3.46) вірні при виконанні умови  $\alpha(K) \ln \left[ 1 / |2d(k-K)| \right] \ll 1$ . При  $k \rightarrow K$  теорія збурень не справедлива і необхідно виконувати підсумовування усіх сингулярних доданків типу



$\{\alpha(K) \ln[1/|2d(k-K)|]\}^n$  в кожному « $n$ »-му порядку теорії збурень. Це дозволяє зробити метод ренормгрупи.

Скористаємось методом ренормгрупи [39] для знаходження перенормованих елементів матриці розсіяння  $\hat{S}$  (що параметризується за допомогою  $\tau$  та  $\varphi_j$  аналогічно (3.41)), при довільній енергії електронів, що налітають на бар'єр. Рівняння (3.46) породжують такі ренормгрупові співвідношення

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tau_l}{\partial z} &= -\frac{\alpha(K)r_r}{2}(\bar{r}_r\tau_l - r_l\bar{\tau}_r), & \frac{\partial r_l}{\partial z} &= -\frac{\alpha(K)\tau_r}{2}(\bar{r}_r\tau_l - r_l\bar{\tau}_r), \\ \frac{\partial \tau_r}{\partial z} &= \frac{\alpha(K)r_l}{2}(r_r\bar{\tau}_l - \bar{r}_l\tau_r), & \frac{\partial r_r}{\partial z} &= \frac{\alpha(K)\tau_l}{2}(r_r\bar{\tau}_l - \bar{r}_l\tau_r), \end{aligned} \quad (3.49)$$

де  $z = \ln[D_0 / D(E)]$ ,  $D_0 = \hbar v_F / 2d$  – характерний енергетичний масштаб потенціалу розсіяння ( $\Delta_0 \ll D_0 \ll \varepsilon_F$  для плавних потенціалів, що не призводять до міждолинних електронних переходів) та  $D(E)$  – енергія електрону, відрахована від енергії допірування. Перенормовані елементи  $\hat{S}$ -матриці розсіяння відповідають розв'язкам системи (3.49) при  $D(E) \approx \Delta_0$ , з урахуванням початкових значень:  $\hat{S} = \hat{S}_0$  при  $D = D_0$ . Зауважимо, що умова унітарності  $\hat{S}$ -матриці – інваріант системи (3.49).

З рівнянь ренормгрупи (3.49), використовуючи параметризацію (3.41), отримаємо систему рівнянь для  $\tau$  та  $\varphi_j$ . З них випливає, що фази  $\varphi_j$  не перенормовуються, тобто  $\varphi_j = \varphi_j^{(0)}$ . Тоді будемо мати вираз для перенормованої амплітуди проходження  $\tau$ , з якого за стандартною формулою  $\mathcal{T} = |\tau|^2$  знаходимо коефіцієнт проходження бар'єру у вигляді

$$\mathcal{T} = \frac{\mathcal{T}_0(\Delta_0 / D_0)^{2\alpha(K)}}{1 - \mathcal{T}_0 + \mathcal{T}_0(\Delta_0 / D_0)^{2\alpha(K)}}. \quad (3.50)$$

Даний вираз за структурою співпадає з (1.4), знайденим в роботі [39]. Проте, фізичний зміст і походження показника ступеня  $\alpha(K)$  в (3.50) (формула (3.47)) суттєво відрізняється від [39].

Зазначимо, що, завдяки залежностям  $\Delta_0 \sim \sin \xi$  та  $W_2(\tilde{x}) \sim \sin \xi$ , ефективна константа електрон-електронної взаємодії  $\alpha(K)$  залежить від хірального кута нанотрубки, що призводить до хірального тунелювання в системі. Зокрема, при  $\xi = 0$  величина щілини дорівнює нулю,  $\Delta_0 = 0$ , тоді  $\alpha(K) = 0$ , і отримуємо, що  $\mathcal{T} \rightarrow \mathcal{T}_0$ , тобто перенормування коефіцієнта проходження не відбувається. При цьому затравочний коефіцієнт проходження прямує до одиниці. Тоді маємо  $\mathcal{T}(\Delta_0 \rightarrow 0) \rightarrow 1$ , і в системі знову має місце парадокс Клейна.

### **Висновки**

В цьому розділі досліджено вплив електрон-фононої та електрон-електронної взаємодії на спектр діраківських електронів та особливості електронного розсіяння на електростатичних потенціалах в нанотрубках. Основні результати розділу:

1. Показано, що за рахунок недіагональних компонентів матриці електрон-фононої взаємодії індукується енергетична щілина за допомогою двох запропонованих механізмів: (i) пайерлсівський перехід (ii) кореляційний механізм.
2. Показано, що пайерлсівська щілина не залежить від кута хіральності нанотрубки та експоненційно залежить від параметрів потенціалу взаємодії.
3. Величина кореляційної щілини залежить від кута хіральності і пропорційна великій константі деформаційного потенціалу, яка для вільно підвішених (вібруючих) нанотрубок прямо пропорційна довжині нанотрубки.
4. Електрон-електронні кореляції приводять до порушення умов для парадоксу Клейна і до перенормування коефіцієнту проходження електростатичного потенціального бар'єру в нанотрубці. Коефіцієнт проходження залежить від хірального кута нанотрубки, зумовлюючи хіральне тунелювання в системі.

## РОЗДІЛ 4

# ЕФЕКТИ ЕЛЕКТРОН-ВІБРОННОЇ ТА КУЛОНІВСЬКОЇ ВЗАЄМОДІЇ ПРИ ТУНЕЛЮВАННІ СПІН-ПОЛЯРИЗОВАНИХ ЕЛЕКТРОНІВ В МОЛЕКУЛЯРНОМУ ТРАНЗИСТОРІ

У даному розділі проводиться аналіз транспорту заряду та спіну в спітронному молекулярному транзисторі – молекулярному транзисторі з електродами, що поляризовані за спіном у протилежних напрямках, який знаходиться у зовнішньому магнітному полі. Вивчається вплив кулонівської взаємодії електронів на вольт-амперні характеристики у вібронному режимі. На відміну від пристроїв, розглянутих в розділі 2, в даній системі враховано коливання поміщеної між електродами квантової точки, що зумовлює появу суттєвої електрон-вібронної взаємодії. Також зауважимо, що розглянутий транзистор має електрод затвору, тому можливе керування величиною енергії електронного рівня на квантовій точці.

### **4.1. Ефекти блокади Франка-Кондона при тунелюванні спін-поляризованих електронів в молекулярному транзисторі.**

У даному підрозділі вивчається спітронний молекулярний транзистор в вібронному режимі вразі нехтування електрон-електронною взаємодією. Отримано вольт-амперні характеристики та залежність кондуктансу від температури, виявлено аномально немонотонний характер температурної залежності кондуктансу та проаналізовано її особливості. Результати, що ввійшли до підрозділу, відображено в роботі [3].

#### **4.1.1. Модель, гамільтоніан та рівняння руху.**

Розглянуто модель молекулярного транзистору, що може застосовуватись у спітроніці – вібруюча квантова точка, з одним електронним енергетичним рівнем, розташована між двома електродами, повністю поляризованими за спіном в протилежних напрямках (рис. 4.1).

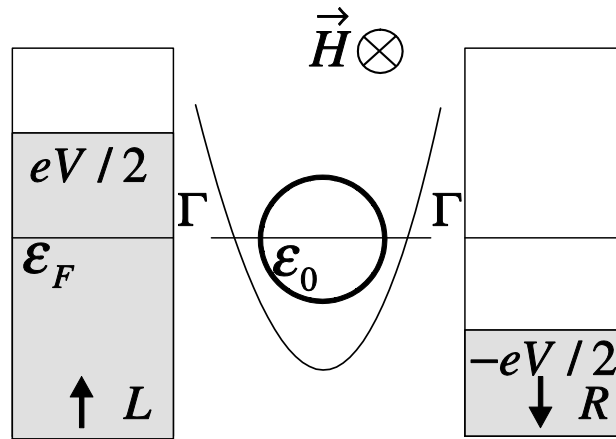


Рис. 4.1. Ескіз моделі молекулярного транзистора зі спін-поляризованими електродами. Електрони в електроді-витоку мають спін  $\uparrow$ , а в електроді-стоку – спін  $\downarrow$  (стрілки). Схематично зображено молекулу з електронним рівнем  $\varepsilon_0$  в гармонічному потенціалі. Тунельний зв'язок між електродами та молекулою характеризується шириною рівня  $\Gamma$ . Зовнішнє магнітне поле  $\vec{H}$  спрямовано перпендикулярно площині векторів намагніченості. Прикладено тягнучу напругу, хімічні потенціали електродів становлять  $\mu_{L,R} = \pm eV/2$ , рахуючи від рівня Фермі електродів,  $\varepsilon_F$ .

Для визначеності, електрони в електроді-витоку мають спін «вгору»,  $\uparrow$ , а в електроді-стоку – спін «вниз»,  $\downarrow$ , що позначено стрілками на рисунку. Перпендикулярно площині векторів намагніченості прикладено зовнішнє магнітне поле  $\vec{H}$ . Така система має властивість «спінової блокади» струму – за нульової величини зовнішнього магнітного поля електричний струм заблоковано. Зовнішнє магнітне поле індукує перевороти спіну на квантовій точці і робить можливим процес тунелювання з поляризованого електроду-витоку до протилежно поляризованого електроду стоку.

Прикладено тягнучу напругу, так, що різниця хімічних потенціалів електродів становить  $\mu_L - \mu_R = eV$ . На рисунку границі затемнених областей в електродах визначають хімічні потенціали,  $\varepsilon_0$  – рівень енергії на квантовій

точці,  $\Gamma$  – ширина рівня, що характеризує тунельний зв'язок між електродами та молекулою.

Гамільтоніан системи складається з чотирьох частин

$$\hat{H} = \hat{H}_l + \hat{H}_d + \hat{H}_{v-d} + \hat{H}_t, \quad (4.1)$$

де  $\hat{H}_l$  гамільтоніан електронів в електродах, який зустрічався в попередніх розділах,

$$\hat{H}_l = \sum_{k,\alpha} \varepsilon_{k,\alpha} c_{k,\alpha}^+ c_{k,\alpha}, \quad (4.2)$$

$c_{k,\alpha}^+$  ( $c_{k,\alpha}$ ) оператор народження (знищення) електрону в електроді  $\alpha = L, R$  з імпульсом  $k$  та енергією  $\varepsilon_{k,\alpha}$  (комутаційні співвідношення стандартні). При цьому індекс електроду при повній спіновій поляризації відповідає спіновому індексу. Гамільтоніан квантової точки  $\hat{H}_d$

$$\hat{H}_d = \sum_{\sigma} \varepsilon_0 d_{\sigma}^+ d_{\sigma} - \frac{g\mu_B H}{2} (d_{\uparrow}^+ d_{\downarrow} + d_{\downarrow}^+ d_{\uparrow}) + U d_{\uparrow}^+ d_{\uparrow} d_{\downarrow}^+ d_{\downarrow}, \quad (4.3)$$

де  $d_{\sigma}^+$  ( $d_{\sigma}$ ) – оператор народження (знищення) електронного стану з енергією  $\varepsilon_0$  та проекцією спіну  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ .  $H$  – зовнішнє магнітне поле,  $g$  – гіромагнітне відношення,  $\mu_B$  – магнетон Бора. Зазначимо, що через наявність у пристрої електроду затвору для керування різницею енергій між рівнем енергії на квантовій точці  $\varepsilon_0$  та рівнем Фермі  $\varepsilon_F$ , вважатимемо, що залежність енергії електронів на квантовій точці від напруги затвору  $V_g$  вже включено у  $\varepsilon_0$ .

В (4.3) в доданку, що характеризує кулонівську взаємодію частинок на квантовій точці,  $U$  – це енергія електрон-електронної взаємодії.

Вібронну підсистему змодельовано гармонічним осцилятором. Гамільтоніан  $\hat{H}_{v-d}$ , що описує вібронну підсистему на квантовій точці та взаємодію між електронною та вібронною підсистемами, має вигляд

$$\hat{H}_{v-d} = \hbar\omega b^+ b + \varepsilon_{int} (b^+ + b)(d_{\uparrow}^+ d_{\uparrow} + d_{\downarrow}^+ d_{\downarrow}), \quad (4.4)$$

де  $\omega$  – частота коливань квантової точки,  $\varepsilon_{int}$  – характерна енергія взаємодії,

оператор  $b^+$  ( $b$ ) народжує (знищує) бозонний стан на квантовій точці. Взаємодія обчислюється через енергію при зміщенні заряду, накопиченого на квантовій точці, в електричному полі електродів під напругою. Оператор зміщення квантової точки (безрозмірний),  $\hat{x} = b^+ + b$ , дорівнює  $\hat{x} = \sqrt{2}\hat{X}/x_0$ , де  $\hat{X}$  – це оператор зміщення квантової точки, а  $x_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$  – амплітуда нульових коливань,  $m$  – маса квантової точки.

Тунельний гамільтоніан  $\hat{H}_t$ , що описує тунелювання електронів між електродами та точкою, при повній поляризації електродів за спіном, має вигляд

$$\hat{H}_t = t_L \sum_k c_{k,L}^+ d_{\uparrow} + t_R \sum_k c_{k,R}^+ d_{\downarrow} + \text{H.c.}, \quad (4.5)$$

де  $t_{\alpha}$  – це тунельна амплітуда. Покладемо  $t_L = t_R = t_0$  та надалі обмежемося розглядом системи, симетричної за тунельними зв'язками.

Щоб виключити гамільтоніан електрон-вібронної взаємодії та гамільтоніан електронів в магнітному полі і привести повний гамільтоніан  $\hat{H}$  до діагональної форми, проведено два перетворення: канонічне перетворення операторів квантової точки  $d_{\sigma}$ , таке, що

$$d_{\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 + a_2), \quad d_{\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-a_1 + a_2), \quad (4.6)$$

та унітарне перетворення  $\hat{\Lambda}\hat{H}\hat{\Lambda}^+$  з  $\hat{\Lambda} = \exp[-i\lambda\hat{p}(n_1 + n_2)]$ , де позначено  $n_s = a_s^+ a_s$ ,  $s = 1, 2$  та введено безрозмірний оператор імпульсу  $\hat{p} = 2\hat{P}/p_0 = i(b^+ - b)$ , де  $p_0 = \sqrt{2m\omega\hbar}$ , а  $\hat{P}$  – це оператор імпульсу, що канонічно спряжений з оператором зміщення квантової точки  $\hat{X}$ . Параметр  $\lambda$  грає роль безрозмірної константи електрон-вібронної взаємодії. Матимемо, що  $\lambda = \varepsilon_{int}/\hbar\omega$ , і зазначене перетворення призведе до отримання  $\hat{H}_{v-d}$  та  $\hat{H}_d$  в діагональній формі

$$\hat{H}_{v-d} \rightarrow \hat{H}_v = \hbar\omega b^+ b, \quad (4.7)$$

$$\hat{H}_d \rightarrow \hat{H}_d = \sum_{s=1,2} \varepsilon_s a_s^+ a_s + (U - 2\lambda^2 \hbar\omega) n_1 n_2, \quad (4.8)$$

де введено

$$\varepsilon_s = \varepsilon_d + j_s \hbar / 2, \quad j_s = \pm 1 \quad (4.9)$$

з позначенням для зовнішнього магнітного поля в енергетичних одиницях  $\hbar = g \mu_B H$ , та з

$$\varepsilon_d = \varepsilon_0 - \lambda^2 \hbar \omega. \quad (4.10)$$

Вираз (4.10) показує, що енергія на квантовій точці перенормується,  $\varepsilon_d$  – новий рівень енергії після поляронного зсуву. В магнітному полі рівень  $\varepsilon_d$  розщеплюється на  $\varepsilon_1$  та  $\varepsilon_2$  (зеєманівське розщеплення, див. (4.9)). Ці рівні відповідають енергіям пружних каналів тунелювання в нашій системі. Енергія кулонівської взаємодії також перенормується електрон-вібронною взаємодією (див. (4.8)). Випадок, коли перенормована величина негативна, потребує особливого розгляду. В рамках нашого підходу ми розглядатимемо тільки позитивні її значення та нуль і, зважаючи на ці зауваження, надалі будемо використовувати позначення  $U$  для перенормованої величини, тож  $U - 2\lambda^2 \hbar \omega$  замінюється на  $U$ .

В цьому підрозділі покладено, що кулонівська енергія в системі така, що  $U = 0$ , тобто електрон-електронна взаємодія нехтовно мала.

Після перетворень тунельний гамільтоніан  $\hat{H}_t$  має вигляд

$$\hat{H}_t = \frac{t_0}{\sqrt{2}} \sum_{k,\alpha} e^{i\lambda \hat{p}} c_{k,\alpha}^+ (j_\alpha a_1 + a_2) + \text{H.c.}, \quad (4.11)$$

де  $j_\alpha = \pm 1$ . Тунельна амплітуда теж стає перенормованою, набуваючи експоненціальний множник, який залежить від константи електрон-вібронної взаємодії. Внаслідок цього, як буде показано далі, в системах з ненульовою електрон-вібронною взаємодією тунельний зв'язок сильно пригнічується.

За припущення, що  $U = 0$ , проблема пошуку струму через систему розв'язується аналітично методом рівнянь руху. В представленні Гайзенберга залежність операторів від часу описується рівняннями

$$\frac{dc_{k,\alpha}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, c_{k,\alpha}], \quad \frac{da_s}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, a_s], \quad \frac{db}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, b]. \quad (4.12)$$

Розв'язуючи диференціальні рівняння отримуємо для ферміонних операторів

$$c_{k,\alpha}(t) = c_{k,\alpha}(0)e^{-i\varepsilon_{k,\alpha}t/\hbar} - \frac{i}{\hbar} \frac{t_0}{\sqrt{2}} \int_0^t dt' (j_\alpha a_1(t') + a_2(t')) e^{-i\varepsilon_{k,\alpha}(t-t')/\hbar} e^{i\lambda\hat{p}(t')}, \quad (4.13)$$

$$a_1(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_{k\alpha} \frac{t_0}{\sqrt{2}} j_\alpha c_{k\alpha}(0) \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\varepsilon_{k\alpha}t'/\hbar} e^{-i(\varepsilon_1 - i\Gamma/2)(t-t')/\hbar} e^{-i\lambda\hat{p}(t')}, \quad (4.14)$$

$$a_2(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_{k\alpha} \frac{t_0}{\sqrt{2}} c_{k\alpha}(0) \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\varepsilon_{k\alpha}t'/\hbar} e^{-i(\varepsilon_2 - i\Gamma/2)(t-t')/\hbar} e^{-i\lambda\hat{p}(t')},$$

де

$$\Gamma = \Gamma_{L,R} = 2\pi\nu_F |t_{L,R}|^2 = 2\pi\nu_F |t_0|^2, \quad (4.15)$$

– це ширина рівня енергії на квантовій точці при тунелюванні з відповідного електроду, однакова у випадку симетричної системі контактів (далі називатимемо цю ситуацію – симетричний контакт). Тут  $\nu_F$  – густина станів на рівні Фермі електродів. Використовуємо значення  $\nu_F$ , нехтуючи слабкою залежністю густини станів від енергії в наближенні широких зон (wide band approximation).

Розв'язок задачі проводиться для випадку слабого тунельного зв'язку в теорії збурень за параметром відношення ширини рівня до температури системи  $T$  або тягнучої напруги при  $\Gamma \ll \max\{T, eV\}$ .

Знехтуємо малими доданками в рівнянні руху для операторів квантової точки  $b^+(b)$ , тож їх залежність від часу матиме вигляд

$$b(t) = b(0)e^{-i\omega t} \quad (4.16)$$

Зауважимо, що не можна знехтувати  $\Gamma$  у рівняннях руху ферміонних операторів, так як це призведе до розбіжностей.

#### 4.1.2. Струм та кондуктанс в спітронному молекулярному транзисторі.

Середній струм, знайдений за стандартними формулами (2.5)-(2.8), буде мати вигляд



$$I_\alpha = -\frac{2e}{\hbar} \frac{t_0}{\sqrt{2}} \left\langle \sum_k \text{Im} e^{i\lambda \hat{p}(t)} c_{k,\alpha}^+ (j_\alpha a_1 + a_2) \right\rangle. \quad (4.17)$$

В теорії збурень квантовомеханічне усереднення з повним гамільтоніаном проведено з урахуванням факторизації формули (4.17). Після такої факторизації вона дорівнюватиме добутку двох середніх, кожне з яких буде обчислюватися з незбуреним гамільтоніаном підсистем, що входять до складу системи (ферміонна, бозонна). Обчислюючи середні припускаємо, що матриця густини вібронної підсистеми рівноважна, оскільки вважатимемо, що час релаксації вібронів набагато менший за час одного акту тунелювання. Матриця густини електронів в масивних електродах припускається також рівноважною. Так добуток ферміонних операторів в електродах при обчисленні середнього дає

$$\langle c_{k,\alpha}^+ c_{k',\alpha'} \rangle = f_\alpha(\varepsilon_{k,\alpha}) \delta_{k,k'} \delta_{\alpha,\alpha'}. \quad (4.18)$$

де  $f_\alpha(\varepsilon)$  – функція розподілу Фермі-Дірака з  $\mu_\alpha = j_\alpha(eV/2)$ , що рахується від  $\varepsilon_F$ . А добуток експонент, що залежать від бозонних операторів, після обчислення середнього з гамільтоніаном (4.7) дає множник

$$\langle e^{\pm i\lambda \hat{p}(t)} e^{\mp i\lambda \hat{p}(t')} \rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n e^{-i\omega n(t-t')}, \quad (4.19)$$

при розрахуванні якого ми спираємось на [83] та [42]. Позначено

$$A_n = e^{-\lambda^2(1+2n_B)} I_n(z) e^{n\omega/2T} \quad (4.20)$$

(в (4.20) і далі  $\hbar=1$ ), де  $I_n(z)$  – модифіковані функції Бесселя першого роду,  $z = 2\lambda^2 \sqrt{n_B(1+n_B)}$ ,  $\omega$  – квант осциляцій,  $n_B$  – функція розподілу Бозе-Ейнштейна,  $n_B = (\exp(\omega/T) - 1)^{-1}$  (вважаємо, що температура електронної підсистеми в електродах та вібронної підсистеми на квантовій точці однакова,  $T$ ). Числа  $n$  є квантовими числами, що позначають рівні енергії на квантовій точці та відіграють роль номерів вібронних каналів, які є непружними тунельними каналами в цій системі.

Після підстановки рівнянь для операторів  $c_{k,\alpha}$  та  $a_s$  вираз для симетризованого струму  $I = (I_L + I_R)/2$  матиме вигляд

$$I = 2\pi e \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n(\omega) \int_0^{\infty} d\varepsilon \{f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)\} \zeta(\varepsilon), \quad (4.21)$$

$$\zeta(\varepsilon) = \sum_{s=1,2} \frac{\Gamma^2 / 4}{(\varepsilon - \varepsilon_s - n\omega)^2 + \Gamma^2 / 4} - \sum_{m=1,2} \Theta_m(\varepsilon), \quad (4.22)$$

$$\Theta_m(\varepsilon) = \text{Re} \left( \frac{\Gamma^2 / 4}{(\varepsilon - \varepsilon_1 - n\omega - j_m i\Gamma / 2)(\varepsilon - \varepsilon_2 - n\omega + j_m i\Gamma / 2)} \right), \quad (4.23)$$

де  $j_m = \pm 1$ . Для спрощення результату обчислимо асимптотику (4.23) при  $\Gamma \rightarrow 0$ , що узгоджується з нашим припущенням слабого тунельного зв'язку. Тоді будемо мати

$$I = I_0 \chi(h) \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n(\omega) \frac{1}{2} \sum_{s=1,2} \{f_L(\varepsilon_s + n\omega) - f_R(\varepsilon_s + n\omega)\}, \quad (4.24)$$

де  $I_0 = e\Gamma / 2$ ,  $\chi(h) = h^2 / (h^2 + \Gamma^2)$  (і тепер в «нових»  $\varepsilon_s$  замість  $\varepsilon_0$  враховується лише відхилення  $\delta\varepsilon \equiv \varepsilon_0 - \varepsilon_F$ ). Струм має вигляд суми  $n$  парціальних струмів, що відповідають двом пружним каналам (при  $n = 0$ ) і кожному з непружних каналів. Поряд із можливістю пружного тунелювання, електрони можуть тунелювати непружно, випускаючи або поглинаючи віброни. Тобто можливе тунелювання через стан, наприклад,  $\varepsilon_1$ , також тунелювання через стан  $\varepsilon_1$  з випускненням одного віброну, також тунелювання через стан  $\varepsilon_1$  з випускненням двох вібронів і т.д. Кожен з пружних каналів, що пов'язані з тунелюванням через енергетичні рівні  $\varepsilon_{1,2}$ , має низку вібронних (непружних) каналів, «побудованих» на них. Кількість вібронів залежить від енергії електронів, тобто від тягнучої напруги та температури. Зауважимо, що максимальний струм насичення при великих напругах (за умови достатньо великих значень зовнішнього магнітного поля,  $h \gg \Gamma$ ) становить стандартну для квантової точки величину.

Отримані вольт-амперні характеристики для молекулярного транзистора зі спін-поляризованими електродами зображено на рис. 4.2. (на них відхилення рівня  $\varepsilon_0$  від  $\varepsilon_F$  зафіксовано на  $\delta\varepsilon = \lambda^2\omega + h/2$  за рахунок напруги електроду затвору, нижчий розщеплений рівень співпадає з рівнем Фермі електродів).

Як і повинно бути, при низьких температурах при  $\lambda \neq 0$  вольт-амперні характеристики мають вигляд ступінчастих функцій, в системі має місце блокада Франка-Кондона. Суцільна крива ( $\lambda = 3$ ) відповідає вольт-амперній характеристиці у режимі, коли через блокаду Франка-Кондона при сильній електрон-вібронній взаємодії ( $\lambda \gtrsim 3$ ) струм сильно пригнічується при низьких напругах та низьких температурах. Таке пригнічення не має місця при меншій константі електрон-вібронної взаємодії ( $\lambda = 1$ , короткопунктирна крива).

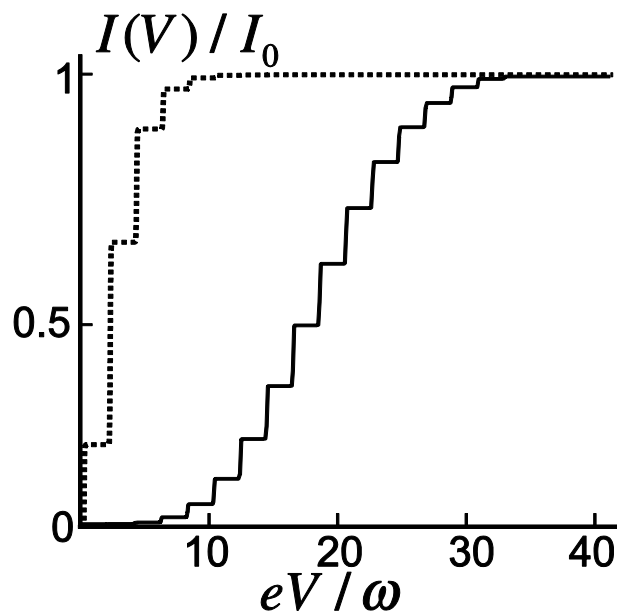


Рис. 4.2. Вольт-амперні характеристики молекулярного транзистора зі спінополяризованими електродами  $I(V)/I_0$ ,  $I_0 = e\Gamma/2$ ,  $\hbar = 1$ . Криві розраховано при фіксованому значенні зовнішнього магнітного поля  $h = \omega$  (де  $h = g\mu_B H$ , а  $\omega$  – квант осциляцій) при різних значеннях константи електрон-вібронної взаємодії:  $\lambda = 1$  (короткопунктирна крива), та  $\lambda = 3$  (суцільна крива). При сильній електрон-вібронній взаємодії  $\lambda \gtrsim 3$  блокада Франка-Кондона приводить до сильного пригнічення струму. Для кривих  $\delta\varepsilon = \lambda^2\omega + h/2$ .

Проаналізуємо залежність максимального кондуктансу від температури. Кондуктанс молекулярного транзистора в лінійному відгуку знайдено за стандартною формулою  $G = \left. \frac{dI}{dV} \right|_{V \rightarrow 0}$ .

Отримано

$$G = G_{\lambda=0}(T) \chi(h) \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n(\omega) \frac{1}{2} \sum_{s=1,2} \cosh^{-2} \left( \frac{\delta\varepsilon + j_s h / 2 - \lambda^2 \omega + n\omega}{2T} \right), \quad (4.25)$$

де  $G_{\lambda=0}(T) = \frac{e^2 \Gamma}{8 T}$ . Зауважимо, що і струм, і кондуктанс при нехтовно малому зовнішньому магнітному полі,  $h \rightarrow 0$ , прямують до нуля, що є проявом властивості «спінової блокади» в нашій системі.

Асимптотичні вирази для кондуктансу при низьких та високих температурах наступні. При  $T \rightarrow 0$  всі парціальні внески від'ємних  $n$ ,  $n < 0$ , малі за рахунок  $e^{n\omega/2T}$ . При цьому внески від додатних  $n$ ,  $n > 0$ , також малі через малість функції Бесселя, яка для малого аргументу становитиме  $I_n(z)|_{z \rightarrow 0} \approx (z/2)^n / n!$ . Внесок з  $n=0$  для кожного пружного каналу стає основним, тож кондуктанс дорівнюватиме

$$G(T) \approx e^{-\lambda^2} G_{\lambda=0}(T) \chi(h) \frac{1}{2} \left\{ 1 + \cosh^{-2} \left( \frac{h}{2T} \right) \right\}, \quad (4.26)$$

де покладено  $\delta\varepsilon = \lambda^2 \omega + h/2$ . Даний вираз показує, що кондуктанс стає експоненціально пригніченим ( $\sim e^{-\lambda^2}$ ) за наявності електрон-вібронної взаємодії вже при малих температурах, на відміну від кондуктансу нерухомої квантової точки. Відомо, що це справедливо і для молекулярних транзисторів з одним пружним каналом. Тож отримано поляронне звуження тунельної ширини рівня (1.5) в нашій моделі.

Випадок  $T \gg \lambda^2 \omega$  потребує більш кропіткого розгляду. Використаємо умову нормування ймовірнісної ваги  $A_n(\omega)$ , що повинна виконуватись для будь-якої системи

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n(\omega) = 1. \quad (4.27)$$

При  $T \rightarrow \infty$  матимемо для  $A_n$  (див. (4.20))

$$2n_B + 1 \approx \operatorname{cth} y, \quad \sqrt{n_B(n_B + 1)} \approx (2\operatorname{sh} y)^{-1}, \quad (4.28)$$

де позначено  $y = \omega / 2T$ . Тоді (4.27) запишеться як

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ny} I_n \left( \frac{\lambda^2}{\text{sh } y} \right) = e^{\lambda^2 \text{cth } y}. \quad (4.29)$$

Можна показати, що диференціювання за  $y$  дає

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} n e^{ny} I_n \left( \frac{\lambda^2}{\text{sh } y} \right) = \lambda^2 e^{\lambda^2 \text{cth } y}, \quad (4.30)$$

а друге диференціювання дозволяє отримати співвідношення

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} n^2 e^{ny} I_n \left( \frac{\lambda^2}{\text{sh } y} \right) = \lambda^2 e^{\lambda^2 \text{cth } y} (\lambda^2 \text{cth } y + \lambda^4). \quad (4.31)$$

Тоді асимптотичний вираз для (4.25) при високих температурах  $T \gg \lambda^2 \omega$ ,  $T \gg h$  матиме вигляд

$$G(T) \approx G_{\lambda=0}(T) \chi(h) \left( 1 - \frac{\lambda^2 \omega}{2T} - \frac{\lambda^2 h \omega}{8T^2} - \frac{1}{2} \left( \frac{h}{2T} \right)^2 \right), \quad (4.32)$$

де покладено  $\delta\varepsilon = \lambda^2 \omega + h/2$ . Отримано, що кондуктанс молекулярного транзистора у зовнішньому магнітному полі при високих температурах має малі поправки, що залежать від константи електрон-вібронної взаємодії та величини зовнішнього магнітного поля, а в нульовому наближенні підкорюється відомому виразу для кондуктансу квантової точки при великих значеннях  $T$  (якщо коефіцієнт  $\chi(h)$  близький до 1, що виконується за умови  $h \gg \Gamma$ ).

Аналіз поведінки залежності кондуктансу від температури при довільних температурах та для довільних значень зовнішнього магнітного поля проведено за допомогою чисельних розрахунків. Вони підтверджують, що поведінка кривих кондуктансу сильно залежить від значення константи електрон-вібронної взаємодії та зовнішнього магнітного поля, як витікає з (4.25), (4.26) та (4.32).

На рис. 4.3 зображено залежності кондуктансу від температури у лінійному відгуку при різних значеннях константи електрон-вібронної взаємодії та зовнішнього магнітного поля. При сильній електрон-вібронній взаємодії має місце аномально немонотонна поведінка кондуктансу при середніх температурах  $T \simeq \omega$ . При цьому аномальне збільшення кондуктансу більш виражене, якщо

зовнішнє магнітне поле слабке,  $\hbar \approx \omega$ . Суцільні криві (рис. 4.3) відповідають температурним залежностям кондуктансу при слабкій ( $\lambda = 1$ , вища крива) та сильній ( $\lambda = 3$ , нижча крива) електрон-вібронній взаємодії при значенні зовнішнього магнітного поля  $\hbar = \omega$ . Пунктирними кривими зображено залежності для тих самих  $\lambda$  при  $\hbar = 5\omega$ .

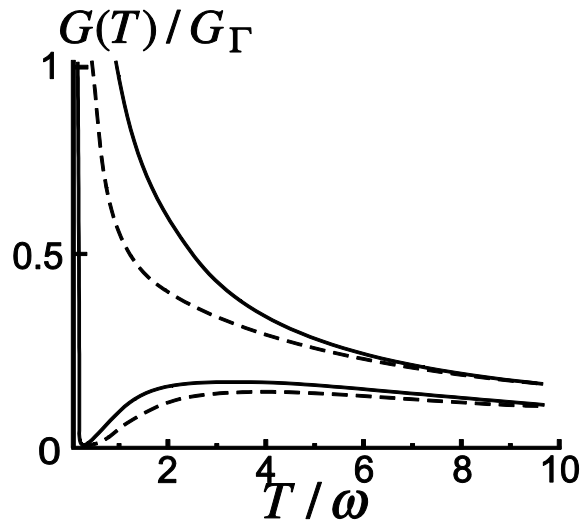


Рис. 4.3. Залежність кондуктансу в лінійному відгуку від температури  $G(T) / G_{\Gamma}$  для молекулярного транзистора зі спін-поляризованими електродами при різних значеннях константи електрон-вібронної взаємодії та зовнішнього магнітного поля. Суцільні криві відповідають температурним залежностям кондуктансу при значенні зовнішнього магнітного поля  $\hbar = \omega$  при слабкій ( $\lambda = 1$ , вища суцільна крива) та сильній ( $\lambda = 3$ , нижча суцільна крива) електрон-вібронній взаємодії. Пунктирними кривими зображено залежності для тих же значень  $\lambda$  при  $\hbar = 5\omega$ . При сильній електрон-вібронній взаємодії поведінка кондуктансу аномально немонотонна при середніх температурах,  $T \approx \omega$ . Параметри кривих:  $\Gamma = 0.0075\omega$ ,  $G_{\Gamma} = G_0\Gamma / 2\omega$ ,  $G_0 = e^2 / 2\pi$ ,  $\delta\varepsilon = \lambda^2\omega + \hbar / 2$ ,  $\hbar = 1$ .

При сильній електрон-вібронній взаємодії,  $\lambda = 3$ , при низьких температурах кондуктанс сильно пригнічений (через блокаду Франка-Кондона),

порівняно з кривими при  $\lambda = 1$ . При  $\lambda = 3$  з ростом температури ( $\omega \lesssim T \lesssim \lambda^2 \omega$ ) кондуктанс зростає. Аналогічно до залежності для звичайного молекулярного транзистора, температурна залежність кондуктансу якого розглянуто в [49], аномалія з'являється завдяки вкладом термічно індукованих вібронних мод на квантовій точці при  $T \gtrsim \omega$ . При сильній електрон-вібронній взаємодії,  $\lambda \gtrsim 3$ , сильно виражене поляронне пригнічення конкурує з посиленням, зумовленим термічно індукованими вібронами. Подальше збільшення температури робить відкритими усі непружні канали, тоді кондуктанс відповідатиме асимптотичній залежності для нерухомої квантової точки і монотонно спадатиме.

Система, що розглядається, на відміну від звичайного молекулярного транзистора, має особливість, що аномальне зростання кондуктансу чутливе до зовнішнього магнітного поля. Магнітні поля  $h \gg \omega$  деструктивно впливають на аномальне зростання кондуктансу. Отримано висновок, що збільшення аномального кондуктансу при середніх температурах відбувається при  $h \approx \omega$  через наявність двох пружних каналів в нашій системі. Детальне дослідження цього питання зроблено в наступному підрозділі.

#### **4.2. Вплив кулонівської взаємодії на транспортні характеристики молекулярного транзистора зі спін-поляризованими електродами.**

Цей підрозділ присвячений аналізу транспортних характеристик вищерозглянутої моделі при урахуванні кулонівської взаємодії. Методом матриці густини отримується вираз для середнього струму. Він досліджується аналітичними та чисельними методами при різних значеннях параметрів моделі. Розглядається зняття кулонівської блокади в системі з зеєманівським розщепленням. Наведено аналіз аномалії кондуктансу при ненульовій кулонівській взаємодії та, зокрема, в широкій області зовнішніх магнітних полів. Отримані результати опубліковано в роботі [5].

### 4.2.1. Рівняння для елементів матриці густини.

Розглянемо молекулярний транзистор зі спин-поляризованими електродами у зовнішньому магнітному полі (рис. 4.1). Гамільтоніан системи та подальші унітарні перетворення співпадають з (4.1)-(4.11). Нас цікавитиме вираз для гамільтоніана системи після унітарного перетворення, коли до повного гамільтоніану входить гамільтоніан електронів в електродах (4.2), електронів на квантовій точці виду (4.8), гамільтоніан вібронної підсистеми (4.7), та тунельний гамільтоніан (4.11). Нагадаємо, що випадок, коли перенормована  $U$  негативна, потребує особливого підходу і нами наразі не розглядається. Для довільних позитивних значень  $U$  проблему пошуку струму та кондуктансу розв'язано методом матриці густини в теорії збурень за параметром  $\Gamma \ll \max\{T, eV\}$  ( $\Gamma$  – ширина рівня енергії на квантовій точці в симетричному контакті, див. (4.15),  $T$  – температура системи,  $V$  – тягнуча напруга).

Рівняння Ліувілля-фон Неймана для матриці густини (тут і нижче  $\hbar = 1$ )

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + i[\hat{H}_0 + \hat{H}_t, \hat{\rho}] = 0 \quad (4.33)$$

з незбуреним гамільтоніаном  $\hat{H}_0 = \hat{H}_l + \hat{H}_v + \hat{H}_d$ , має формальний розв'язок

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_{-\infty} - i \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\hat{H}_0(t-t')} [\hat{H}_t, \hat{\rho}(t')] e^{i\hat{H}_0(t-t')}, \quad (4.34)$$

де  $\hat{\rho}_{-\infty} = \hat{\rho}(t \rightarrow -\infty)$ . Квантовий розгляд електронної підсистеми в нашій моделі базується на припущенні, що матриця густини системи факторизується на матрицю густини електронів в електродах, електронів на квантовій точці і матрицю густини вібронної підсистеми

$$\hat{\rho} \approx \hat{\rho}_l \otimes \hat{\rho}_v \otimes \hat{\rho}_d. \quad (4.35)$$

Матриця густини електронів в масивних електродах покладається рівноважною. Вважаємо матрицю густини вібронної підсистеми також рівноважною, оскільки розглядається випадок, коли час релаксації вібронної підсистеми набагато менший за час одного акту тунелювання. Це наближення відповідає режиму послідовного електронного тунелювання і сильному зв'язку квантової точки з



тепловим оточенням. Такий підхід справедливий при малих  $\Gamma$ . Зауважимо, що спрощення (4.35) не дозволяє розглядати резонансні явища (наприклад, ефект Кондо, когерентне тунелювання тощо), але це адекватний метод розгляду стохастичного електронного тунелювання та когерентної спінової динаміки (осциляції спіну в зовнішньому магнітному полі приведуть до появи ненульових недиагональних елементів матриці густини електронів на квантовій точці).

Підставляючи (4.34), (4.35) до (4.33) та використовуючи символ « $\Gamma$ » для позначення сліду за електронними ступенями свободи в електродах та вібронами ступенями свободи на квантовій точці, отримуємо

$$\frac{\partial \hat{\rho}_d}{\partial t} + i[\hat{H}_d, \hat{\rho}_d] = -\text{Tr} \int_{-\infty}^t dt' [\hat{H}_t, e^{-i\hat{H}_0(t-t')} [\hat{H}_t, \hat{\rho}(t')] e^{i\hat{H}_0(t-t')}]. \quad (4.36)$$

Відповідно до нашого припущення (4.35), середнє з незбуреним гамільтоніаном електродів матиме вигляд (4.18). Середнє значення добутку експоненціальних функцій  $\exp\{\pm i\lambda \hat{p}\}$  при різних значеннях часової змінної  $t, t'$  з незбуреним гамільтоніаном віброна підсистеми в припущенні, що віброни перебувають у рівновазі з тепловим середовищем за температури  $T$ , приймає форму (4.19).

За допомогою (4.18) та (4.19) вираз (4.36) трансформується до виду

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}_d}{\partial t} + i[\hat{H}_d, \hat{\rho}_d] = & \frac{\Gamma}{4} \sum_{n,\alpha} A_n \int d\varepsilon \frac{1}{2\pi} \int d\tau \left\{ e^{i\varepsilon_n^+ \tau} [1 - f_\alpha(\varepsilon)] a_\alpha e^{-i\hat{H}_d \tau} \hat{\rho}_d(t - \tau) a_\alpha^+ e^{i\hat{H}_d \tau} + \right. \\ & + e^{-i\varepsilon_n^- \tau} f_\alpha(\varepsilon) a_\alpha^+ e^{-i\hat{H}_d \tau} \hat{\rho}_d(t - \tau) a_\alpha e^{i\hat{H}_d \tau} - e^{i\varepsilon_n^- \tau} f_\alpha(\varepsilon) a_\alpha e^{-i\hat{H}_d \tau} a_\alpha^+ \hat{\rho}_d(t - \tau) e^{i\hat{H}_d \tau} - \\ & \left. - e^{-i\varepsilon_n^+ \tau} [1 - f_\alpha(\varepsilon)] a_\alpha^+ e^{-i\hat{H}_d \tau} a_\alpha \rho_d(t - \tau) e^{i\hat{H}_d \tau} \right\} + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (4.37)$$

де позначено  $\varepsilon_n^\pm = \varepsilon \pm n\omega$ ,  $\omega$  – квант коливань і  $a_\alpha = j_\alpha a_1 + a_2$ .

Оператор густини  $\hat{\rho}_d$  діє у просторі Фока станів на квантовій точці. Матричними елементами зведеної матриці густини (матриці густини електронів на квантовій точці) є

$$\begin{aligned} \rho_0 &= \langle 0 | \hat{\rho}_d | 0 \rangle; & \rho_s &= \langle s | \hat{\rho}_d | s \rangle; \\ \rho_D &= \langle D | \hat{\rho}_d | D \rangle; & \rho_{ss'} &= \langle s | \hat{\rho}_d | s' \rangle, s \neq s' = 1, 2; \end{aligned} \quad (4.38)$$

де  $|0\rangle$  – це вакуумний стан. Тоді  $|s\rangle = a_s^+ |0\rangle$ , а стан  $|D\rangle = a_1^+ a_2^+ |0\rangle$  відповідає подвійно заповненій квантовій точці.

У стаціонарному режимі оператор густини  $\hat{\rho}_d$  незалежний від часу. В цьому випадку з рівнянь (4.37), (4.38) отримуємо наступну систему рівнянь для матричних елементів

$$-\rho_0 [D_+(\varepsilon_1) + D_+(\varepsilon_2)] + \rho_1 [1 - C_+(\varepsilon_1)] + \rho_2 [1 - C_+(\varepsilon_2)] - \rho_+ [C_-(\varepsilon_1) + C_-(\varepsilon_2)] = 0, \quad (4.39)$$

$$\rho_0 D_+(\varepsilon_1) - \rho_1 F_1 + \rho_D [1 - C_+(\varepsilon_2 + U)] + \rho_+ [C_-(\varepsilon_1) + D_-(\varepsilon_2 + U)] = 0, \quad (4.40)$$

$$\rho_0 D_+(\varepsilon_2) - \rho_2 F_2 + \rho_D [1 - C_+(\varepsilon_1 + U)] + \rho_+ [C_-(\varepsilon_2) + D_-(\varepsilon_1 + U)] = 0, \quad (4.41)$$

$$\rho_1 D_+(\varepsilon_2 + U) + \rho_2 D_+(\varepsilon_1 + U) - \rho_D [1 - C_+(\varepsilon_1 + U)] - \rho_D [1 - C_+(\varepsilon_2 + U)] - \rho_+ [D_-(\varepsilon_1 + U) + D_-(\varepsilon_2 + U)] = 0, \quad (4.42)$$

$$h\rho_+ = \Gamma\rho_- F, \quad (4.43)$$

$$h\rho_- = -\Gamma(\rho_+ F - L/2). \quad (4.44)$$

У рівняннях (4.44) використано наступні позначення

$$\rho_+ = (\rho_{12} + \rho_{21}) / 2, \quad (4.45)$$

$$\rho_- = i(\rho_{12} - \rho_{21}) / 2,$$

$$C_{\pm}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \sum_n A_n [f_L(\varepsilon - n\omega) \pm f_R(\varepsilon - n\omega)], \quad (4.46)$$

$$D_{\pm}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \sum_n A_n [f_L(\varepsilon + n\omega) \pm f_R(\varepsilon + n\omega)], \quad (4.47)$$

$$L = \rho_0 [D_-(\varepsilon_1) + D_-(\varepsilon_2)] + \rho_1 [C_-(\varepsilon_1) + D_-(\varepsilon_2 + U)] + \rho_2 [C_-(\varepsilon_2) + D_-(\varepsilon_1 + U)] + \rho_D [C_-(\varepsilon_1 + U) + C_-(\varepsilon_2 + U)], \quad (4.48)$$

$$F = (F_1 + F_2) / 2, \quad (4.49)$$

$$F_{1,2} = 1 - C_+(\varepsilon_{1,2}) + D_+(\varepsilon_{2,1} + U). \quad (4.50)$$

Зауважимо, що система рівнянь (4.44) задовольняє (як і належить) умові нормування,  $\rho_0 + \rho_1 + \rho_2 + \rho_D = 1$ .

#### 4.2.2. Струм спіно-поляризованих електронів в молекулярному транзисторі.

«Лівий\правий» струм в системі визначається стандартним чином за формулою

$$I_{\alpha} = -e \text{Tr} \left( \hat{\rho} \frac{\partial \hat{N}_{\alpha}}{\partial t} \right), \quad (4.51)$$

де  $\hat{N}_{\alpha} = \sum_k c_{k,\alpha}^+ c_{k,\alpha}$ . Слід береться за всіма ступіннями свободи системи. За допомогою (4.11), (4.34) струм запишеться у наступній формі

$$I_{\alpha} = \text{Tr} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\hat{H}_0(t-t')} \hat{J}_{\alpha} e^{-i\hat{H}_0(t-t')} [\hat{H}_t, \hat{\rho}] + \text{c.c.}, \quad (4.52)$$

де позначено

$$\hat{J}_{\alpha} = \frac{et_0}{\sqrt{2}} e^{-\lambda(b^+ - b)} (j_{\alpha} a_1 + a_2) \sum_k c_{k,\alpha}^+. \quad (4.53)$$

Загальний струм, визначений як напівсума лівого та правого струмів,  $I = (I_L + I_R) / 2$ , дорівнюватиме

$$I = e\Gamma(\rho_+ F - L / 2) = -eh\rho_-. \quad (4.54)$$

В результаті вираз для струму має вигляд

$$\frac{I}{I_0} = \frac{h^2}{h^2 + \Gamma^2 F^2} L, \quad (4.55)$$

де  $I_0 = e\Gamma / 2$ . Зауважимо, що з рівнянь (4.44), (4.50), та рівняння (4.55) видно, що  $I(V=0) = 0$  і  $I(h \rightarrow 0) \rightarrow 0$ , як і належить. Максимальний струм при  $V \rightarrow \infty$  за скінченних  $U$  дорівнює  $I_m = I_0 h^2 / (h^2 + \Gamma^2)$  і прямує до  $I_0$  лише тоді, коли  $h \gg \Gamma$ .

Рівняння (4.39)-(4.44) утворюють повний набір для обчислення струму за формулою (4.55). Ці рівняння можна спростити в певних границях. В чисельному та аналітичному аналізах ми обмежимося випадком, коли значення відхилення  $\delta\varepsilon$  таке, що  $\varepsilon_d$ , відраховане від рівня Фермі електродів, дорівнює

нулю,  $\varepsilon_d = 0$ . Зазначене відносне положення рівнів накладає певну симетрію на коефіцієнти  $C_{\pm}(\varepsilon_s)$ ,  $D_{\pm}(\varepsilon_s)$ , а саме

$$\begin{aligned} C_-(\varepsilon_{1,2}) &= D_-(\varepsilon_{2,1}), \\ C_+(\varepsilon_{1,2}) + D_+(\varepsilon_{2,1}) &= 1. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Ці властивості дозволяють отримати прості вирази для струму в граничних випадках нехтовно малих,  $U \rightarrow 0$ , і великих,  $U \rightarrow \infty$ , значень електрон-електронної взаємодії.

Якщо знехтувати кулонівською взаємодією електронів на квантовій точці,  $U \rightarrow 0$ , вираз для струму набуває вигляду

$$\frac{I}{I_0} = \frac{h^2 \Omega_1}{h^2 + \Gamma^2 \Omega_2 \Omega_3}, \quad (4.57)$$

де

$$\Omega_1 = \frac{2[D_+(\varepsilon_1)D_-(\varepsilon_2) + D_+(\varepsilon_2)D_-(\varepsilon_1)]}{D_+(\varepsilon_1) + D_+(\varepsilon_2)}, \quad (4.58)$$

$$\Omega_{2,3} = D_+(\varepsilon_1) \pm D_-(\varepsilon_1) + D_+(\varepsilon_2) \mp D_-(\varepsilon_2). \quad (4.59)$$

Розглянемо в цій границі випадок низьких температур,  $T \rightarrow 0$ . Віброни збудження пригнічені,  $n_B \rightarrow 0$ . При нульовій температурі при  $eV < h$  загальний струм дорівнює нулю. Тільки коли тягнуча напруга достатньо велика, електрон може протунелювати через молекулу, або протунелювати через молекулу з випускненням вібронів. В границі  $T \rightarrow 0$  рівняння (4.57) при  $eV \geq h$  трансформується до виду

$$\frac{I}{I_0} \simeq \frac{2K_+K_-}{K_+ + K_-} \left( \frac{h^2}{h^2 + \Gamma^2 K_+K_-} \right), \quad (4.60)$$

де

$$K_{\pm} = K(N_{\pm}) = e^{-\lambda^2} \sum_{n=0}^{N_{\pm}} \frac{\lambda^{2n}}{n!} \quad (4.61)$$

з

$$N_{\pm} = \left[ \frac{eV \pm h}{2\omega} \right]. \quad (4.62)$$

Символом [...] позначено цілу частину виразу. Неаналітична залежність функцій  $K_{\pm}$  від тягнучої напруги демонструє наявність сходинок струму (сходинок Франка-Кондона). Мають місце два набори сходинок, пов'язаних з відкриттям непружних каналів, що базуються на пружних каналах, утворених двома рівнями енергії, які виникли після зеєманівського розщеплення електронного рівня на квантовій точці. З рівнянь (4.60)-(4.62) видно, що в залежності струму від напруги кількість сходинок Франка-Кондона в інтервалі  $2\omega$  (система розглядається при симметрично прикладеній напрузі) подвоюється. Подвоєння сходинок та аналіз умов цього ефекту, який буде зроблено в наступному підрозділі, є важливим результатом даної роботи. Подвоєння кількості сходинок Франка-Кондона як при  $U=0$ , так і при ненульовій  $U$  підтверджується чисельними моделюваннями (див. наступний підрозділ). Можна показати, що подвоєння не має місця у випадку сильних зовнішніх магнітних полів  $h \gg \omega$ . Для  $h \gg \omega$  отримаємо, що  $K_+ \gg K_-$ ,  $K_+ \rightarrow 1$ , та

$$\frac{I}{I_0} \simeq 2K_- \left( \frac{h^2}{h^2 + \Gamma^2 K_-} \right). \quad (4.63)$$

У цьому випадку поява сходинок регулюється лише стрибками функції  $K_-$  і подвоєння сходинок не відбувається. Однак, сходинок мають подвоєну висоту.

Перейдемо до ще однієї границі – режиму кулонівської блокади. Коли  $U \rightarrow \infty$ , подвійне заповнення рівня на квантовій точці заборонено, що виражається умовою  $\rho_D = 0$ . У цьому випадку вираз для струму приймає форму

$$\frac{I}{I_0} = \frac{h^2 \Omega_4}{h^2 \Omega_5 + (\Gamma/2)^2 \Omega_6}, \quad (4.64)$$

де

$$\Omega_4 = D_+(\varepsilon_1)D_-(\varepsilon_2) + D_+(\varepsilon_2)D_-(\varepsilon_1), \quad (4.65)$$

$$\Omega_5 = \frac{[D_+(\varepsilon_1) + D_+(\varepsilon_2)]^2 - D_+(\varepsilon_1)D_+(\varepsilon_2)}{D_+(\varepsilon_1) + D_+(\varepsilon_2)}, \quad (4.66)$$

$$\Omega_6 = [D_+(\varepsilon_1) + D_+(\varepsilon_2)]\Omega_2\Omega_3 - D_+(\varepsilon_1)[D_+(\varepsilon_2) - D_-(\varepsilon_2)] - D_+(\varepsilon_2)[D_+(\varepsilon_1) - D_-(\varepsilon_1)]. \quad (4.67)$$

За  $eV \gg \hbar$  поведінка струму при низьких температурах  $T \rightarrow 0$  визначається виразом

$$\frac{I}{I_0} \simeq \frac{K_+K_-(K_+ + K_-)}{(K_+ + K_-)^2 - K_+K_-} \left[ \frac{\hbar^2}{\hbar^2 + (\Gamma/2)^2 K} \right], \quad (4.68)$$

де

$$K = \frac{K_+K_-(K_+ + K_-)^2}{(K_+ + K_-)^2 - K_+K_-}. \quad (4.69)$$

Подвоєння сходинок Франка-Кондона також присутнє в цій границі,  $U \rightarrow \infty$ . При цьому, для  $\hbar \gg \omega$  отримуємо (порівняти з рівнянням (4.63))

$$\frac{I}{I_0} \simeq K_- \left[ \frac{\hbar^2}{\hbar^2 + (\Gamma/2)^2 K_-} \right], \quad (4.70)$$

і подвоєння кількості сходинок не відбувається в цій границі.

Зауважимо, що ненульова температура призводить до появи струму при  $eV < \hbar$  внаслідок непружних процесів поглинання вібронів.

### 4.2.3. Результати чисельних розрахунків струму і кондуктансу та дискусія.

На рис. 4.4-4.8 зображено вольт-амперні характеристики спітронного молекулярного транзистора. Спочатку звернемо увагу на транспортні властивості спітронного пристрою, коли електрон-вібронна взаємодія відсутня ( $\lambda = 0$ ). Залежності струму від напруги  $I(V)$  для різних значень енергії кулонівської взаємодії (для  $U = 0$  і для двох ненульових значень енергії взаємодії) приведені на рис. 4.4.

Зеєманівське розщеплення рівня енергії у зовнішньому магнітному полі впроваджує два канали для тунелювання електронів – тунелювання через стан з верхньою,  $\varepsilon_1$ , та з нижньою,  $\varepsilon_2$ , енергією. Для ненульової кулонівської взаємодії електронні кореляції пригнічують ймовірність пружних процесів тунелювання через ці канали. Ймовірність тунелювання зростає, коли кулонівська блокада для

тунелювання електронів знімається. Коли стає можливим подвійне заповнення енергетичного рівня, з'являються два додаткові канали для тунелювання електронів.

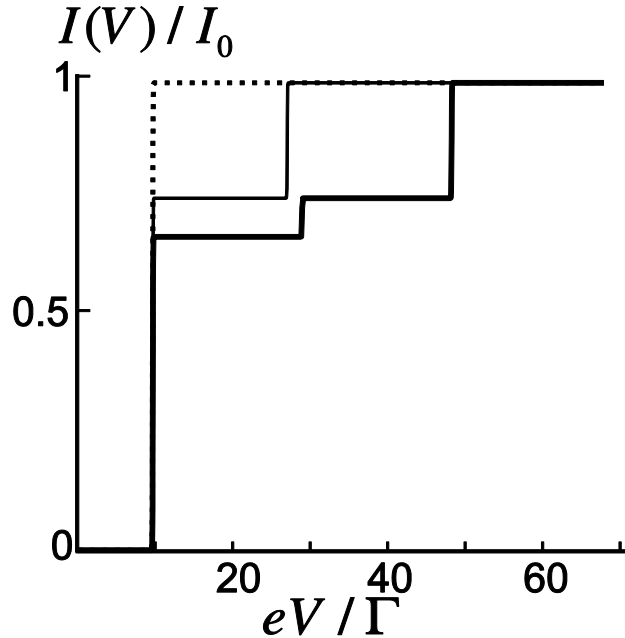


Рис. 4.4. Вольт-амперні характеристики спітронного молекулярного транзистора за відсутності електрон-вібронаї взаємодії,  $\lambda = 0$ , для різних значень енергії кулонівської взаємодії:  $U = 0$  (короткопунктирна),  $U = 9\Gamma$  (суцільна тонка),  $U = 20\Gamma$  (суцільна товста). Криві показують, що зняття кулонівської блокади тягнутою напругою відбувається поетапно, тобто наявні два пружні канали тунелювання другого електрону на квантову точку, і один з цих каналів відкривається раніше іншого за енергією. На суцільній товстій кривій ( $U = 20\Gamma$ ) видно всі стрибки струму, які пов'язані з відкриттям нових пружних каналів. На суцільній тонкій кривій ( $U = 9\Gamma$ ) кількість стрибків струму менша завдяки співвідношенню параметрів виду  $U \leq h$ . Параметри: зовнішнє магнітне поле в енергетичних одиницях  $h = 10\Gamma$ ,  $T = 0.01\Gamma$ , струм наведено в одиницях  $I_0 = e\Gamma / 2$ .

Ці канали відповідають електронному тунелюванню через подвійно заповнений стан з енергією збудження  $\varepsilon_{2,1} + U$ , коли рівні  $\varepsilon_{2,1}$  зайняті. Енергія

подвійно заповненого рівня електрона становить  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + U = 2\varepsilon_d + U = U$ , і не залежить від зовнішнього магнітного поля (як це і має бути). Відкриття каналів для тунелювання електронів за відповідних порогових тягнучих напруг при низьких температурах призводить до стрибків струму, які добре видно на графіках  $I(V)$  (рис. 4.4).

Хоча кулонівська блокада може бути знята за рахунок збільшення тягнучої напруги, цей процес відбувається поетапно, демонструючи особливість нашої системи. Такий спосіб зняття кулонівської блокади показаний на залежності струму від напруги для  $U > h$  (суцільна товста крива на рис. 4.4). У нашій симетричній геометрії розщеплених рівнів,  $\varepsilon_d = 0$ , перший етап закінчується на пороговій напрузі  $eV = 2(U - h/2)$ , а другий – на  $eV = 2(U + h/2)$ . Для випадку  $U \leq h$  кількість сходинок струму зменшується (суцільна тонка крива на рис. 4.4). Дійсно, тепер подвійне заповнення точки, коли нижній рівень енергії ( $\varepsilon_2$ ) зайнятий вже можливо при пороговій напрузі для початку струму, і зняття кулонівської блокади відбувається в один етап. При  $U = 0$  (короткопунктирна крива) кулонівська блокада відсутня і струм одразу насичується до максимального значення.

Коли враховується електрон-віброна взаємодія (див. рис. 4.5), ефект поетапного зняття кулонівської блокади також присутній, але тепер кулонівська енергія перенормована електрон-вібронною взаємодією. Крім того, вольт-амперні характеристики демонструють сходинок Франка-Кондона (вони мають місце кожний певний інтервал напруг, тож принципово відрізняються від вищерозглянутих).

У нашій моделі, коли розщеплення рівнів становить  $h \approx \omega$ , кількість сходинок Франка-Кондона на інтервалі  $2\omega$  подвоюється порівняно з кількістю сходинок в моделі з безспіновими електронами (для порівняння див. напр. [44, 49]).



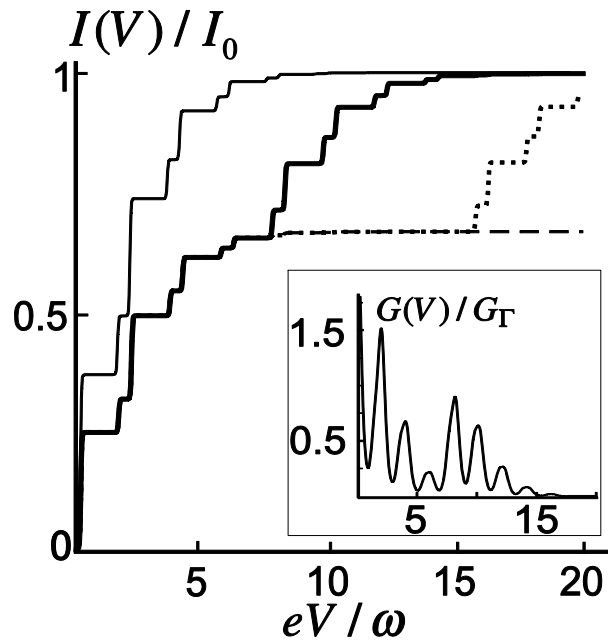


Рис. 4.5. Залежність струму від напруги в спітронному молекулярному транзисторі при врахуванні електрон-вібронної взаємодії,  $\lambda = 1$ . Криві обчислені для різних значень енергії кулонівської взаємодії:  $U = 0$  (суцільна тонка),  $U = 4\omega$  (суцільна товста),  $U = 8\omega$  (короткопунктирна),  $U \rightarrow \infty$  (пунктирна). Графіки демонструють, що кількість сходинок Франка-Кондона в інтервалі  $2\omega$  подвоюється. Крім того, коли  $U \neq 0$ , вплив кулонівської взаємодії приводить до пригнічення висоти сходинок Франка-Кондона та появи областей без сходинок. Для середньої кулонівської взаємодії,  $U \approx N_m \omega$  (див. рівняння (4.71) у тексті), сходинок сильно пригнічені за висотою (суцільна товста крива), а для сильної кулонівської взаємодії,  $U \gg N_m \omega$  (короткопунктирна та пунктирна криві) сходинок Франка-Кондона при великих напругах зникають (сходинок стають нехтовно малі за висотою, порівняно з першою сходиною) Параметри:  $\hbar = 0.25\omega$ ,  $T = 0.01\omega \gg \Gamma = 0.0075\omega$ . Вставка: залежність диференціального кондуктансу від напруги  $G(V)/G_T$ . Графік демонструє, що немонотонна залежність висоти піків від напруги може слугувати проявом взаємодії вібронних та кулонівських ефектів в системі. Параметри:  $U = 4\omega$ ,  $T = 0.1\omega$ ,  $G_T = G_0 \Gamma / (2\omega)$ ,  $G_0 = e^2 / 2\pi$ .

Пояснення ефекту – в зміщенні серій сходинок відносно одна одної. Серії стрибків струму, викликаних відкриттям непружних каналів, «побудованих» на двох пружних каналах ( $\varepsilon_{1,2}$ ), зміщуються відносно одна одної на  $h$ , що приводить до подвоєння кількості сходинок, у загальному випадку, коли  $h$  не є кратним  $\omega$ . Дійсно, для  $U = 0$  з рівнянь (4.60)-(4.62) виходить, що при пороговій напрузі  $eV = h$ , коли пружні канали відкриті, маємо:  $N_- = 0$ ,  $N_+ = [h / \omega]$ , де [...] позначає цілу частину. Якщо  $h$  не є цілим числом в одиницях  $\omega$ , функції  $K_-$  та  $K_+$  мають незалежні стрибки з зростанням  $eV$ . Подвоєння підтверджується чисельними розрахунками (рис. 4.5), які показують, що, аналогічно до випадку  $U = 0$  (суцільна тонка крива), подвоєння кількості сходинок має місце для  $U \neq 0$  (суцільна товста крива та короткопунктирна крива) і навіть коли  $U \rightarrow \infty$  (пунктирна крива, яка практично співпадає з короткопунктирною кривою при напругах  $eV \lesssim 2U \approx 16\omega$ ). На рисунку також зазначено ефект пригнічення та зникнення сходинок струму, який буде проаналізовано нижче в цьому підрозділі.

Вставка на рис. 4.5 показує залежність диференціального кондуктансу від тягнучої напруги  $G(V) / G_T$ . Графік демонструє, що залежність висот піків диференціального кондуктансу від тягнучої напруги немонотонна у випадку сильної кулонівської взаємодії (прояв взаємодії процесів зняття блокади Франка-Кондона та зняття кулонівської блокади).

Нова серія сходинок з'являється також тоді, коли знімається кулонівська блокада. Тому подвоєння сходинок Франка-Кондона також відбувається після першого етапу зняття кулонівської блокади (рис. 4.6) в загальному випадку, коли  $U / \omega$  не ціле (і навіть якщо  $h$  є кратним  $\omega$ ).

При пороговій напрузі  $eV / 2 = \varepsilon_{\uparrow\downarrow} - \varepsilon_1 = U - h / 2$  подвійне заповнення квантової точки стає дозволеним. Однак, при цій напрузі заповнення рівня  $\varepsilon_2$ , якщо рівень  $\varepsilon_1$  зайнятий, поки що неможливо, і внесок  $\varepsilon_1$  відповідає значенню  $K_-$  з  $N_- = [(U - h) / \omega]$  (розглядається випадок  $U > h$  для визначеності). Припустимо, що  $h$  кратне  $\omega$ . Тоді, якщо  $U$  не кратне  $\omega$ , стрибок струму після першого етапу зняття кулонівської блокади не співпадає зі стрибком функції  $K_-$ ,

таким чином, кількість сходинок подвоюється. Неважко показати, що кількість сходинок подвоюється для не цілого  $U / \omega$  так само у випадку  $U < h$ .

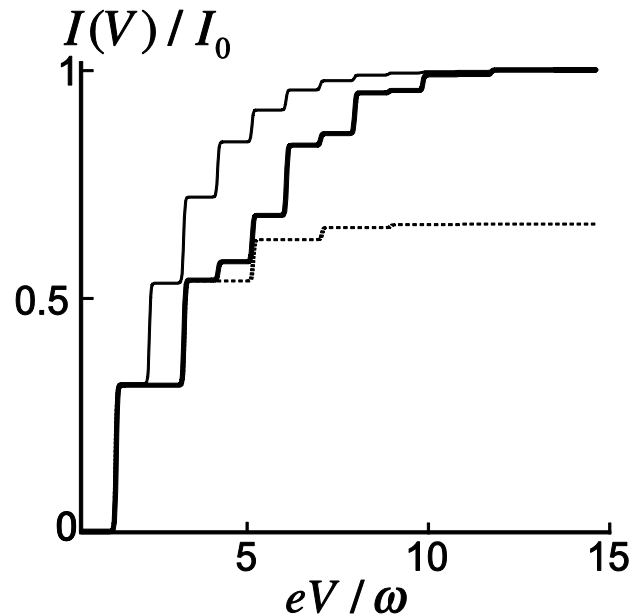


Рис. 4.6. Залежність струму від напруги, коли енергія кулонівської взаємодії не кратна  $\omega$ :  $U = 0.5\omega$  (суцільна тонка),  $U = 2.5\omega$  (суцільна товста),  $U \rightarrow \infty$  (короткопунктирна). Тут  $h = \omega$ , а інші параметри такі ж, як на рис. 4.5. Криві показують, що подвоєння кількості сходинок відбувається після першого етапу зняття кулонівської блокади. У режимі кулонівської блокади ( $U \rightarrow \infty$ ) подвоєння не відбувається.

Подвоєння кількості сходинок добре видно на рис. 4.6 для  $U < h$  (суцільна тонка крива). Коли  $U > h$  кількість сходинок подвоюється після першого етапу зняття кулонівської блокади (суцільна товста крива). У режимі кулонівської блокади подвоєння завдяки  $U$  не відбувається ( $U \rightarrow \infty$ , короткопунктирна крива). Зауважимо, що в симуляціях, приведених на рис. 4.6,  $h$  є кратним  $\omega$ . У загальному випадку, подвоєння кількості сходинок Франка-Кондона – особливість нашої моделі.

В границі сильних зовнішніх магнітних полів  $h \gg \omega$  подвоєння кількості сходинок не відбувається (рис. 4.7), навіть якщо  $h$  не є кратним  $\omega$  (див. формулу (4.63), яка справедлива для невзаємодіючих електронів). Ще одна

специфічна особливість залежності струму від напруги в сильних магнітних полях і  $U = 0$  – це подвоєння висоти сходинок (рис. 4.7, суцільна тонка крива). До того ж, при  $h \gg \omega$  кулонівські кореляції все ще впливають на появу сходинок Франка-Кондона. Кількість сходинок не подвоюється, коли значення  $U / \omega$  є цілим числом (суцільна товста крива на рис. 4.7).

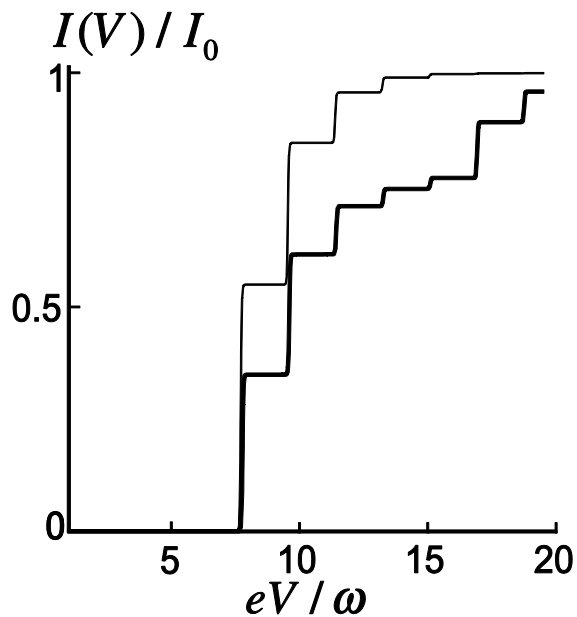


Рис. 4.7. Залежності струму від напруги для спітронного молекулярного транзистора у сильному зовнішньому магнітному полі,  $h = 7.25\omega$ . Представлені випадки: без взаємодії,  $U = 0$  (суцільна тонка), і коли кулонівська енергія ненульова, причому  $U$  кратне  $\omega$ ,  $U = 5\omega$  (суцільна товста крива). У сильних зовнішніх магнітних полях  $h \gg \omega$  подвоєння кількості сходинок Франка-Кондона не відбувається. При цьому у випадку  $U = 0$  сходинок мають подвоєння висоти.

Подвоєння кількості сходинок в границі  $h \gg \omega$  відбувається, коли  $U / \omega$  не ціле. На рис. 4.8. вольт-амперні характеристики демонструють подвоєння числа сходинок Франка-Кондона після першого етапу зняття кулонівської блокади у цьому випадку (суцільна тонка та суцільна товста криві). Графіки також демонструють пригнічення висоти сходинок та появу областей без сходинок при  $h \gg \omega$  при великих значеннях  $U$ .

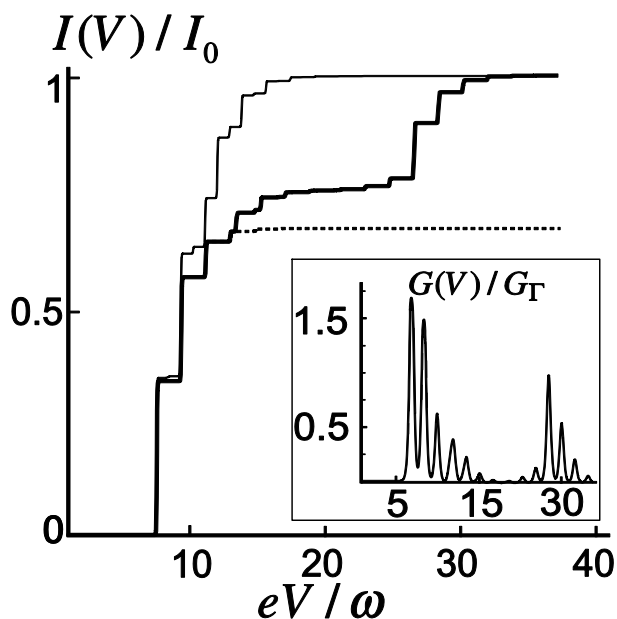


Рис. 4.8. Залежність струму від напруги в сильному зовнішньому магнітному полі,  $h = 7.25\omega$ , для різних значень енергії кулонівської взаємодії: коли  $U/\omega$  не ціле ( $U = 2.5\omega$  (суцільна тонка),  $U = 10.5\omega$  (суцільна товста)) і  $U \rightarrow \infty$  (короткопунктирна). Вольт-амперні характеристики демонструють подвоєння числа сходинок Франка-Кондона після першого етапу зняття кулонівської блокади у випадку, коли  $U/\omega$  не ціле. Показано пригнічення висоти сходинок та появу областей без сходинок при  $h \gg \omega$  при великих значеннях  $U$ . Параметри кривих, незазначені вище, такі ж, як на рис. 4.5. Вставка: залежність диференціального кондуктансу від напруги  $G(V)/G_T$ . Поява двох добре відокремлених піків кондуктансу є ще одним проявом поетапного зняття кулонівської блокади. Параметри:  $U = 10.5\omega$ ,  $h = 7.25\omega$ , усі інші параметри такі ж, як на вставці на рис. 4.5.

Отримано також, що для сильної кулонівської взаємодії залежність струму від напруги має області, що характеризуються пригніченням висоти сходинок Франка-Кондона. Мають місце також області без сходинок (мається на увазі, що наявні в цих областях сходинок нехтовно малі за висотою, порівняно з першою сходиною). Крива для  $U = 0$  (суцільна тонка крива на рис. 4.5) має вигляд послідовності подвоєних сходинок Франка-Кондона з висотами, що монотонно зменшуються. При кулонівській взаємодії  $U \gtrsim \omega$  крива  $I(V)$  демонструє дві

серії подвоєних сходинок з висотами, що зменшуються (рис. 4.5, суцільна товста крива). У випадку сильної кулонівської взаємодії,  $U \gg \omega$ , з'являється область без сходинок (рис. 4.5, короткопунктирна крива). Пригнічення вібронних сходинок зумовлено взаємовпливом процесів зняття блокади Франка-Кондона та кулонівської блокади. Для опису ефекту корисно ввести число  $N_m$  непружних каналів (пов'язаних з одним пружним каналом), які дають основний внесок у струм. За допомогою (4.61) і формули Стірлінга отримуємо наступний вираз (коли  $\lambda = 1$ )

$$N_m \approx [e\lambda^2] \quad (4.71)$$

(тут  $e$  – це основа натурального логарифму, символ [...] позначає цілу частину виразу).

Зняття блокади Франка-Кондона для певного пружного каналу означає, що до відкриття нових пружних каналів струм майже не збільшується, порівняно з тим, що вже є, а суттєві сходинок відсутні. Для зняття блокади Франка-Кондона з каналів, що відповідають однократно заповненій квантовій точці, тягнуча напруга повинна перевищувати значення  $eV \approx N_m \omega$  (для визначеності розглянемо невеликі зовнішні магнітні поля,  $h \ll \omega$ ). Коли кулонівська взаємодія досить сильна,  $U \gg N_m \omega$ , кулонівська блокада при цих напругах не знімається, тому сходинок в області  $eV \in (0, N_m \omega)$  мають пригнічену висоту у порівнянні з сходинок на кривій  $I(V)$  при  $U = 0$ . Поки нові канали недоступні, нові сходинок відсутні (короткопунктирна крива на рис. 4.5), так само як у випадку  $U \rightarrow \infty$ , для всіх високих напруг (пунктирна крива на рис. 4.5). Зняття кулонівської блокади завдяки збільшенню напруги породжує нові серії сходинок Франка-Кондона, що відповідають каналам тунелювання, коли квантова точка подвійно заповнюється (короткопунктирна крива на рис. 4.5). Для середньої кулонівської взаємодії,  $U \approx N_m \omega$ , нові серії сходинок з'являються, коли блокаду Франка-Кондона не повністю знято, тоді криві представляють собою дві серії сходинок з висотами, що монотонно зменшуються (суцільна товста крива на рис. 4.5). На вставці показано залежність диференціального кондуктансу від

напруги, вона ілюструє пригнічення висоти сходинок Франка-Кондона через пригнічення піків кондуктансу. Зауважимо, що визначення «сильний» та «середній» є умовними і вони залежать від значення  $\lambda$  для кожної системи.

Струм в області без сходинок дорівнює струму насичення у режимі кулонівської блокади,  $U \rightarrow \infty$ , (тобто границя  $V \rightarrow \infty$  рівняння (4.68)). Він становить  $I_U = 2I_0 h^2 / [3(h^2 + \Gamma^2 / 3)]$  і це значення менше, ніж максимальний струм для невзаємодіючих електронів.

В сильних магнітних полях  $h \gg \omega$  також відбувається пригнічення висоти сходинок Франка-Кондона (див. рис. 4.8, суцільна товста крива). Зняття кулонівської блокади відбувається в два етапи, і при сильній взаємодії  $U \gg \omega$  вони розділені енергетичним інтервалом  $e\delta V \simeq h \gg \omega$ . Тоді крива  $I(V)$  має дві області зі сходинок Франка-Кондона, розділених великим інтервалом без суттєвих сходинок. Максимальний струм в цьому випадку більший, ніж у випадку  $U \rightarrow \infty$ , оскільки система вже перебуває на другому етапі зняття кулонівської блокади (можна порівняти суцільну товсту та короткопунктирну криву на рис. 4.8).

Вставка на рис. 4.8 показує залежність диференціального кондуктансу від тягнучої напруги. Поява двох добре відокремлених піків кондуктансу (енергетичний інтервал  $e\delta V \simeq h$ ), що супроводжуються сходинок Франка-Кондона – це ще один прояв поетапного зняття кулонівської блокади.

Далі розглянемо як сильна електрон-віброна взаємодія впливає на температурну залежність максимального кондуктансу. Для більш простої системи (тунелювання неполяризованих за спіном електронів через вібруючу однорівневу квантову точку), коли кулонівську взаємодію не взято до уваги, поляронні ефекти було досліджено в [48, 49]. Немонотонна температурна залежність кондуктансу була передказана [49] та спостережена [48] в транспорті електронів в транзисторі на основі вуглецевого наностручка. В дисертаційній роботі досліджено вплив зовнішнього магнітного поля та кулонівської взаємодії на температурну залежність кондуктансу спітронного молекулярного транзистора.

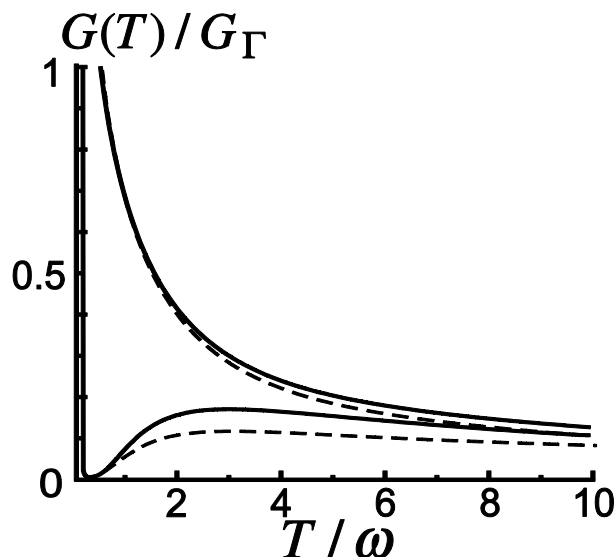


Рис. 4.9. Залежність кондуктансу спітронного молекулярного транзистора від температури  $G(T)$  для різних величин константи електрон-вібронної взаємодії при різних значеннях кулонівської енергії. (i) за відсутності кулонівської взаємодії,  $U = 0$  (суцільні криві) (ii) при  $U = 32\omega$  (пунктирні криві). Пари кривих відповідають двом значенням константи електрон-вібронної взаємодії,  $\lambda = 1$  (верхня крива) і  $\lambda = 3$  (нижня крива). Для сильної електрон-вібронної взаємодії,  $\lambda \gtrsim 1.5$ , температурна залежність кондуктансу немонотонна при середніх температурах (температурах порядку поляронного зсуву  $\omega \lesssim T \lesssim \lambda^2\omega$ ). Аномальна залежність від температури більш виражена при сильному пригніченні кондуктансу при блокаді Франка-Кондона ( $\lambda \gtrsim 3$ ) Параметри:  $h = 0.05\omega$ ,  $\Gamma = 0.0075\omega$ ,  $G_0 = e^2 / 2\pi$ ,  $G_\Gamma = G_0\Gamma / 2\omega$ .

На рис. 4.9 дві суцільні криві ( $\lambda = 1$  – вища та  $\lambda = 3$  – нижча) зображують температурну залежність максимального лінійного кондуктансу за відсутності кулонівських кореляцій ( $U = 0$ ). Дві пунктирні криві ілюструють залежність  $G(T)$  при сильній кулонівській взаємодії  $U = 32\omega$ . Для сильної електрон-вібронної взаємодії  $\lambda \gtrsim 1.5$  залежність  $G(T)$  є немонотонною. Аномальна залежність від температури більш виражена при сильному пригніченні кондуктансу при блокаді Франка-Кондона ( $\lambda \gtrsim 3$ ).



Загальновідомо, що для незваєдуючих електронів максимальний (піковий) кондуктанс у разі послідовного тунелювання електронів через однорівневу квантову точку поводитья як  $1/T$  з ростом температури. Вібронні ефекти, завдяки утворенню поляронного стану електрона на квантовій точці, сильно пригнічують кондуктанс при низьких температурах  $T \ll \omega$  (блокада Франка-Кондона [44]). При високих температурах  $T \gg \lambda^2 \omega$  поляронний стан руйнується і блокада Франка-Кондона знімається. Немонотонна температурна залежність кондуктансу при середніх температурах  $\omega \lesssim T \lesssim \lambda^2 \omega$  зумовлена появою термоіндукованих вібронів на квантовій точці [49]. Для сильної електрон-вібронної взаємодії суттєве пригнічення конкурує з посиленням струму через відкриття нових непружних каналів за рахунок термоіндукованих вібронних мод. За оцінками, характерна температура аномального збільшення кондуктансу  $T \approx \omega$  становить порядку  $T \approx 50$  К для параметрів молекулярного транзистора на основі молекули фулерену  $C_{60}$  з [54].

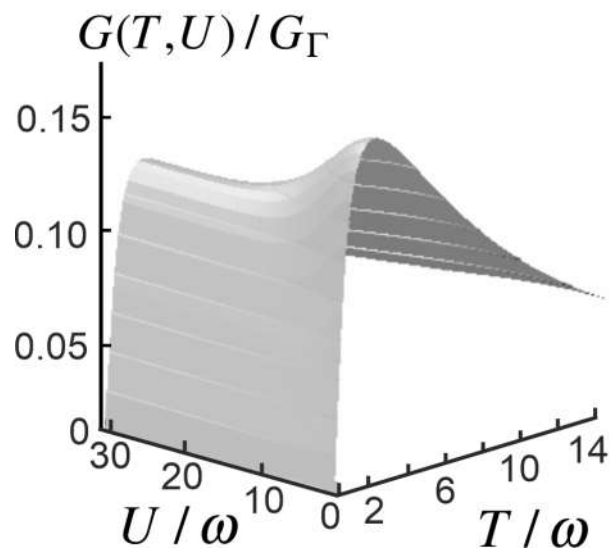


Рис. 4.10. Залежність кондуктансу від температури в широкому діапазоні значень енергії кулонівської взаємодії. Збільшення кулонівської енергії слабо пригнічує максимум кондуктансу. Магнітне поле  $h = 0.05\omega$ , аналогічно до рис. 4.9;  $\lambda = 3$ .

Невеликі зовнішні магнітні поля  $h \ll \Gamma$  сильно пригнічують транспорт електронів в спітронному молекулярному транзисторі через «спінову блокаду». Тому нас цікавлятимуть магнітні поля  $h \gtrsim \Gamma$ , коли «спінову блокаду» знято.

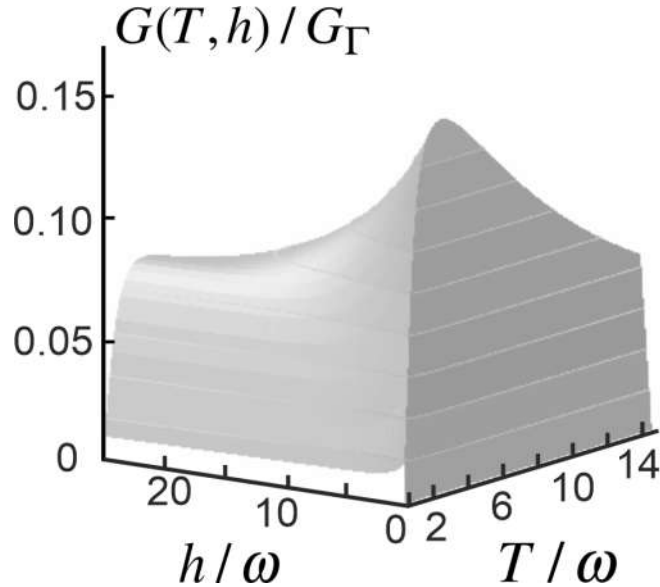


Рис. 4.11. Залежність кондуктансу від температури в широкому діапазоні значень зовнішнього магнітного поля при  $\lambda=3$  за відсутності кулонівської взаємодії ( $U=0$ ). Зі збільшенням  $h$  максимальний кондуктанс пригнічується.

Характерний енергетичний масштаб, коли знято блокаду Франка-Кондона (припускаємо сильну електрон-віброну взаємодію), визначається поляронним зсувом  $\lambda^2\omega$  (точніше цей енергетичний масштаб дорівнює  $N_m\omega$ , див. (4.71)). Коли значення зовнішнього магнітного поля перевищує цей енергетичний масштаб, рівень  $\varepsilon_1$  не сприяє аномальному зростанню кондуктансу. Це означає, що оптимальний діапазон магнітних полів для спостереження немонотонної температурної поведінки становить  $\Gamma \ll h \lesssim N_m\omega$ . У цьому діапазоні магнітних полів аномальна температурна поведінка кондуктансу, передказана для безспінових електронів, слабо змінюється з магнітним полем (піковий кондуктанс незначно зменшується зі збільшенням магнітного поля).

З аналогічних причин кулонівська взаємодія  $U$  повинна бути не надто сильною,  $U \lesssim N_m\omega$ , щоб спостерігати аномалію, коли кулонівську блокаду вже

знято. Наші якісні міркування підтримуються чисельними розрахунками температурної залежності кондуктансу (рис. 4.9-4.12).

На рис. 4.10 показано залежність кондуктансу від температури в широкому діапазоні значень кулонівської взаємодії при  $\lambda = 3$ . Як і очікувалося, для вищезазначених  $U$ , максимальний кондуктанс має слабку залежність від величини кулонівської енергії.

Магнітні поля в діапазоні  $\Gamma \ll h \lesssim N_m \omega$  незначно впливають на максимальний кондуктанс (див. рис. 4.11, 4.12). Зі збільшенням  $h$  максимальний кондуктанс пригнічується. Зауважимо, що при великих температурах, коли електронний поляронний стан на квантовій точці руйнується, як кулонівське, так і магнітне пригнічення малі, і вони не змінюють температурної поведінки кондуктансу.

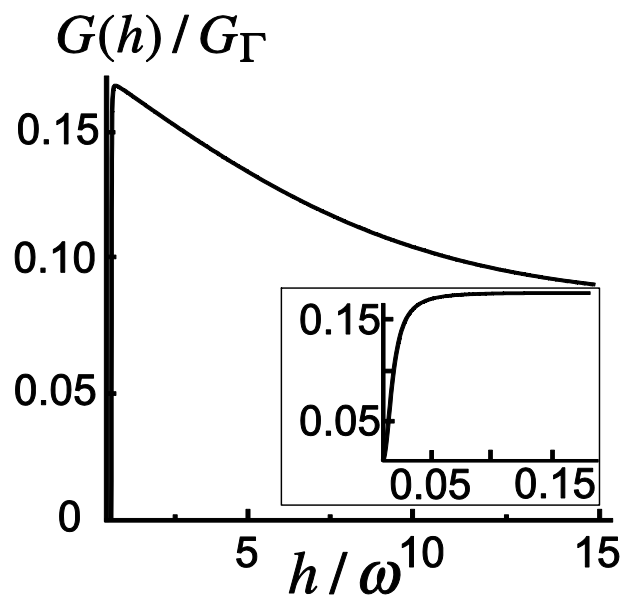


Рис. 4.12 Пригнічення кондуктансу в малих магнітних полях  $h \approx \Gamma$  при  $T = 3\omega$   $\lambda = 3$ . Вставка показує поведінку кривої в діапазоні дуже малих зовнішніх магнітних полів  $h \lesssim \Gamma$ , підтверджуючи прояв «спінової блокади».

Чисельний аналіз показує, що немонотонна температурна залежність кондуктансу, яка є ознакою сильної електрон-вібронної взаємодії в системі, присутня в широкому діапазоні значень зовнішнього магнітного поля та енергії кулонівської взаємодії.

Оцінено значення зовнішнього магнітного поля, що відповідає найбільшому кондуктансу в нашій моделі. Для цього використано параметри транзистора на основі фулерену з експерименту [54]. Для  $\hbar\omega \approx 5$  меВ оптимальне зовнішнє магнітне поле для спостереження температурної аномалії кондуктансу становить порядку  $H \approx 1$  Т.

## Висновки

В цьому розділі досліджено транспортні властивості молекулярного транзистора з магнітними електродами, де струм взаємодіючих спінополяризованих електронів керується зовнішнім магнітним полем. Основні результати розділу:

1. Наявність двох пружних каналів приводить до подвоєння кількості сходинок струму (сходинок Франка-Кондона) на вольт-амперних характеристиках у порівнянні зі звичайним молекулярним транзистором.

2. При сильній кулонівській взаємодії висота сходинок струму пригнічена, а також з'являються області без сходинок (наявні в цих областях сходинок нехтовно малі за висотою, порівняно з першою сходиною). Области без сходинок мають місце і для системи в сильному зовнішньому магнітному полі. Ефекти зумовлені взаємодією процесів зняття блокади Франка-Кондона та кулонівської блокади тягнутою напругою.

3. Отримано, що зняття кулонівської блокади відбувається поетапно, що пов'язано з існуванням двох каналів тунелювання другого електрону на квантову точку.

4. Показано, що ознакою сильної електрон-вібронної взаємодії в системі є аномально немонотонна температурна поведінка кондуктансу в області середніх температур. Ефект має місце в широкій області зовнішніх магнітних полів та для довільної кулонівської взаємодії. Отримано асимптотичні вирази для кондуктансу при низьких та високих температурах з урахуванням поправок, пов'язаних із зовнішнім магнітним полем.

## РОЗДІЛ 5

### ВПЛИВ ЕЛЕКТРОН-ЕЛЕКТРОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ НА ТЕРМОІНДУКОВАНЕ ШАТЛЮВАННЯ ПОЛЯРИЗОВАНИХ ЗА СПІНОМ ЕЛЕКТРОНІВ

У даному розділі досліджується виникнення магнітнокерованого шатлювання – човникового транспорту в спітронному молекулярному транзисторі, при прикладанні електричної напруги або при створенні градієнту температур. Магнітний шатл зумовлений обмінною взаємодією між спіном електрону на квантовій точці та намагніченостями електродів. При термоіндукованому шатлюванні джерелом енергії служить не зовнішня напруга, а різниця температур електродів. Вивчається еволюція системи з часом та досліджуються умови спостереження режиму шатлювання при різних значеннях кулонівської енергії. Результати, викладені в цьому розділі, увійшли до статті [4].

#### **5.1. Модель, гамільтоніан та кінетичні рівняння.**

Розглянемо спітронний молекулярний транзистор. Модель пристрою за відсутності зовнішньої напруги при температурах електродів  $T_L > T_R$  зображено на рис. 5.1.

Аналогічно до моделі з розділу 4 та рис. 4.1, електроди повністю спінополяризовані в протилежних напрямках, магнітне поле перпендикулярне площині магнетизації електродів. Наведено графічну інтерпретацію відносного розташування енергетичних рівнів. Хімічні потенціали тримаються однаковими і співпадають з  $\varepsilon_F$ , енергетичний рівень  $\varepsilon_0$  розщеплений зовнішнім магнітним полем  $H$  та обмінною взаємодією.

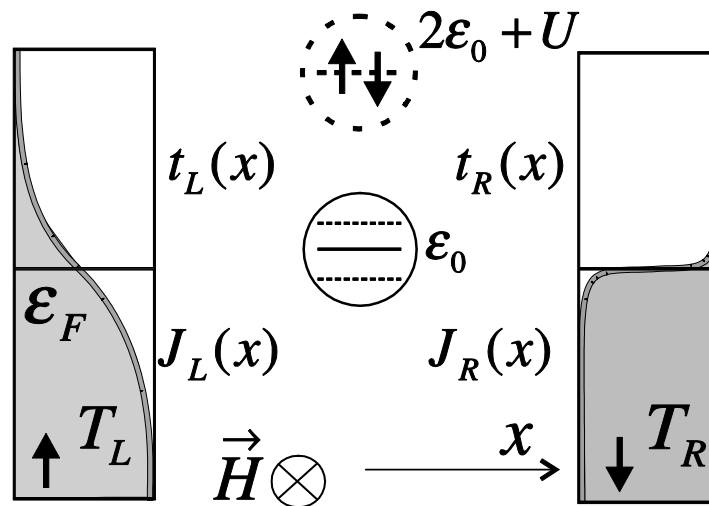


Рис. 5.1. Модель пристрою, де можливе термоіндуковане магнітнокероване шатлювання. Рухома квантова точка (молекула) тунельно зв'язана з електродами, що повністю спін-поляризовані в протилежних напрямках, магнітне поле перпендикулярне площині магнетизації електродів. Тунельні амплітуди  $t_{L/R}(x)$  та обмінні енергії  $J_{L/R}(x)$  залежать від положення квантової точки. Хімічні потенціали електродів однакові,  $\mu = \varepsilon_F$ .

Повний гамільтоніан системи складається з чотирьох доданків

$$\hat{H} = \hat{H}_l + \hat{H}_d + \hat{H}_v + \hat{H}_t \quad (5.1)$$

з позначеннями як в (4.1), з тим самим гамільтоніаном електродів (4.2).

Гамільтоніан квантової точки враховує вплив обмінних сил і має вигляд

$$\begin{aligned} \hat{H}_d = & \left( \varepsilon_0 - \frac{J(\hat{X})}{2} \right) d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + \left( \varepsilon_0 + \frac{J(\hat{X})}{2} \right) d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - \\ & - \frac{\hbar}{2} (d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow}) + U d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}, \end{aligned} \quad (5.2)$$

де використано позначення, що застосовувались у формулі (4.3). Значення енергії рівня, що розщеплений через ефект Зеємана, залежить від зміщення  $\hat{X}$  квантової точки. Енергія обмінної взаємодії становить  $J(\hat{X}) = J_L(\hat{X}) - J_R(\hat{X})$ . Тут  $J_{L/R}(\hat{X}) = J_{L/R} \exp(\mp \hat{X} / l_j)$ , обмінна взаємодія між спіном електрона на квантовій точці та  $L, R$ -електродом,  $l_j$  – це характерна довжина обмінної взаємодії.

Випишуючи гамільтоніан бозонів на квантовій точці, знехтуємо впливом електричним сил, вважаючи, що магнітні моменти в даній задачі мають значно більші константи взаємодії. Тоді енергія  $\varepsilon_0$  та енергія кулонівської взаємодії  $U$  не перенормовуються, а вібронний гамільтоніан одразу запишеться як гамільтоніан гармонічного осцилятора. В цьому розділі зручніше представити його в термінах операторів зміщення та імпульсу квантової точки, тож матимемо

$$\hat{H}_v = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \hat{X}^2 \quad (5.3)$$

з тими ж позначеннями, що приведені в описі для формули (4.4).

Тунельний гамільтоніан має вигляд

$$\hat{H}_t = t_L(\hat{X}) \sum_k c_{k,L}^+ d_{\uparrow} + t_R(\hat{X}) \sum_k c_{k,R}^+ d_{\downarrow} + \text{H.c.}, \quad (5.4)$$

де враховується залежність тунельної амплітуди від зміщення квантової точки. Ця залежність моделюється експоненціальною функцією  $t_{L/R}(\hat{X}) = t_{L/R} \exp(\mp \hat{X} / 2l_t)$ , де  $l_t$  – це характерна довжина тунелювання. Електрон-вібронна взаємодія, таким чином, вводиться через координатну залежність в  $J(\hat{X})$  та  $t_{L/R}(\hat{X})$ .

Вважаючи, що зміщення набагато перевищує амплітуду нульових коливань  $x_0 = \sqrt{\hbar / (m\omega)}$ , надалі розглядатимемо  $\hat{X}$  та  $\hat{P}$  як класичні змінні, які перепозначимо як  $x$  та  $p$ , введемо координатну вісь  $x$  і вважатимемо положення ізольованої квантової точки положенням рівноваги  $x = 0$ .

Знайдемо рівняння руху для координати центру мас  $x$ . Цю нелокальну в часі і нелінійну задачу розв'язуємо в теорії збурень в найнижчому порядку за  $\Gamma_\alpha$ , тобто  $\Gamma_\alpha \ll \max\{T_\alpha, eV\}$ , де  $\Gamma_\alpha$  – ширина рівня енергії на квантовій точці при тунелюванні з електроду  $\alpha = (L, R)$  (див. (4.15)), а  $T_\alpha$  – температура відповідного електроду,  $eV = \mu_L - \mu_R$  різниця хімічних потенціалів електродів. Застосовано метод матриці густини. В наближенні послідовного тунелювання, яке відповідає нашому розгляду, повна матриця густини системи може бути факторизована та представлена як добуток рівноважної матриці густини

електронів в електродах та матриці густини електронів на квантовій точці,

$$\hat{\rho} \approx \hat{\rho}_l \otimes \hat{\rho}_d, \quad (5.5)$$

Процедура пошуку рівняння для матричних елементів матриці густини аналогічна до використаної в попередньому розділі (за винятком того, що в цій задачі не проводиться операція взяття сліду за вібронними ступенями свободи).

В даній задачі простір Фока для електронних станів на квантовій точці складається з векторів:  $|0\rangle$  – порожня квантова точка,  $|\uparrow(\downarrow)\rangle = d_{\uparrow(\downarrow)}^+ |0\rangle$  – квантова точка заповнена електроном зі спіном  $\uparrow(\downarrow)$ ,  $|2\rangle = d_{\uparrow}^+ d_{\downarrow}^+ |0\rangle$  – двократно заповнена квантова точка. Елементи матриці густини  $\hat{\rho}_d$  формують 6-вектор з компонентами

$$\rho_0 = \langle 0 | \hat{\rho}_d | 0 \rangle, \quad \rho_{\uparrow} = \langle \uparrow | \hat{\rho}_d | \uparrow \rangle, \quad (5.6)$$

$$\rho_{\downarrow} = \langle \downarrow | \hat{\rho}_d | \downarrow \rangle, \quad \rho_{\uparrow\downarrow} = \langle \uparrow | \hat{\rho}_d | \downarrow \rangle = \rho_{\downarrow\uparrow}^*, \quad (5.7)$$

$$\rho_2 = \langle 2 | \hat{\rho}_d | 2 \rangle. \quad (5.8)$$

Діагональні матричні елементи задовольняють співвідношенню, що описує умову нормування,  $\rho_0 + \rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow} + \rho_2 = 1$ . В теорії збурень за тунельною шириною матимемо, що рівняння для елементів матриці густини електронів на квантовій точці локальні за часом. Отримана система рівнянь має вигляд

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_0}{\partial t} = & \Gamma_L(x)(1 - f_L^+) \rho_{\uparrow} + \Gamma_R(x)(1 - f_R^+) \rho_{\downarrow} - \Gamma_L(x) f_L^+ \rho_0 - \Gamma_R(x) f_R^+ \rho_0 - \\ & - Y_{1L}(x)(\rho_0 + \rho_{\uparrow}) + Y_{1R}(x)(\rho_0 + \rho_{\downarrow}) - (Y_{2L}(x) + Y_{2R}(x)) \rho_+; \end{aligned} \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{\uparrow}}{\partial t} = & -\Gamma_L(x)(1 - f_L^+) \rho_{\uparrow} + \Gamma_L(x) f_L^+ \rho_0 - \Gamma_R(x) f_R^{U,+} \rho_{\uparrow} + \Gamma_R(x)(1 - f_R^{U,+}) \rho_2 + \\ & + Y_{1L}(x)(\rho_0 + \rho_{\uparrow}) + Y_{1R}^U(x)(\rho_{\uparrow} + \rho_2) + (Y_{2L}(x) + Y_{2R}^U(x)) \rho_+ - i \frac{\hbar}{2} \rho_-; \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{\downarrow}}{\partial t} = & \Gamma_L(x)(1 - f_L^{U,+}) \rho_2 - \Gamma_L(x) f_L^{U,+} \rho_{\downarrow} - \Gamma_R(x)(1 - f_R^+) \rho_{\downarrow} + \Gamma_R(x) f_R^+ \rho_0 - \\ & - Y_{1L}^U(x)(\rho_{\downarrow} + \rho_2) - Y_{1R}(x)(\rho_0 + \rho_{\downarrow}) + (Y_{2L}^U(x) + Y_{2R}(x)) \rho_+ + i \frac{\hbar}{2} \rho_-; \end{aligned} \quad (5.11)$$



$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{\uparrow\downarrow}}{\partial t} = & iJ(x)\rho_{\uparrow\downarrow} - \frac{1}{2}\Gamma_L(x)F_L\rho_{\uparrow\downarrow} - \frac{1}{2}\Gamma_R(x)F_R\rho_{\uparrow\downarrow} - \\ & - \frac{1}{2}(Y_{1L}(x) - Y_{1L}^U(x))\rho_{\uparrow\downarrow} + \frac{1}{2}(Y_{1R}(x) - Y_{1R}^U(x))\rho_{\uparrow\downarrow} + Y_{2L}(x)(\rho_0 + \rho_{\uparrow}) + \\ & + Y_{2L}^U(x)(\rho_{\downarrow} + \rho_2) + Y_{2R}(x)(\rho_0 + \rho_{\downarrow}) + Y_{2R}^U(x)(\rho_{\uparrow} + \rho_2) - i\frac{\hbar}{2}(\rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}); \end{aligned} \quad (5.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_2}{\partial t} = & -\Gamma_L(x)(1 - f_L^{U,+})\rho_2 - \Gamma_R(x)(1 - f_R^{U,+})\rho_2 + \Gamma_L(x)f_L^{U,+}\rho_{\downarrow} + \\ & + \Gamma_R(x)f_R^{U,+}\rho_{\uparrow} + Y_{1L}^U(x)(\rho_{\downarrow+\rho_2}) - Y_{1R}^U(x)(\rho_{\uparrow+\rho_2}) - (Y_{2L}^U(x) + Y_{2R}^U(x))\rho_+; \end{aligned} \quad (5.13)$$

де

$$Y_{1L/R}(x) = f_{L/R}^- \frac{J(x)\Gamma_{L/R}(x)}{\sqrt{J^2(x) + \hbar^2}}, \quad (5.14)$$

$$Y_{1L/R}^U(x) = f_{L/R}^{U,-} \frac{J(x)\Gamma_{L/R}(x)}{\sqrt{J^2(x) + \hbar^2}}, \quad (5.15)$$

$$Y_{2L/R}(x) = f_{L/R}^- \frac{\hbar\Gamma_{L/R}(x)}{2\sqrt{J^2(x) + \hbar^2}}, \quad (5.16)$$

$$Y_{2L/R}^U(x) = f_{L/R}^{U,-} \frac{\hbar\Gamma_{L/R}(x)}{2\sqrt{J^2(x) + \hbar^2}}. \quad (5.17)$$

Тут  $\rho_{\pm} = (\rho_{\uparrow\downarrow} \pm \rho_{\uparrow\downarrow}^*)$ , а також позначено  $2f_{L,R}^{U,\pm} = f_{L,R}(E_- + U) \pm f_{L,R}(E_+ + U)$  та  $f_{L,R}^{\pm} = f_{L,R}^{U,\pm}(U = 0)$ ,  $F_{L,R} = (1 - f_{L,R}^+ + f_{L,R}^{U,+})$ , де  $f_{L,R}$  – функції розподілу Фермі-Дірака. Використано позначення для нових рівнів енергії

$$E_{\pm} = \varepsilon_0 \pm \frac{\sqrt{J^2(x) + \hbar^2}}{2}. \quad (5.18)$$

Залежність координати від часу  $x(t)$  знайдеться з рівняння, що витікає з рівнянь Гамільтона для даної системи. Використовуючи

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_d \frac{\partial(\hat{H}_d + \hat{H}_v)}{\partial x} \right\}, \quad (5.19)$$

матимемо

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2x - \frac{1}{m} \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_d \frac{\partial \hat{H}_d}{\partial x} \right\}, \quad (5.20)$$

тоді

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2x = -\frac{1}{2m} \frac{\partial J(x)}{\partial x} (\rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}). \quad (5.21)$$

Рівняння (5.21) разом з системою рівнянь для матричних елементів матриці густини становлять повну систему та дозволяють обчислити залежність  $x(t)$ , що зроблено чисельними методами. Цю залежність проаналізовано в наступному підрозділі.

Аналітичні розрахунки у свою чергу дозволяють зробити висновок про існування режиму шатлювання в граничних випадках. Варто взяти до уваги, що тільки різниця ймовірностей заселеності станів спінів «вгору» та спінів «вниз» входить до правої частини механічного рівняння руху. Таку комбінацію ймовірностей надалі вважатимемо механічно «активною». Кількість незалежних лінійних рівнянь можна зменшити, якщо перейти від матричних елементів матриці густини до їхніх лінійних комбінацій. Можна показати, що симетричні нейтральні за спіном комбінації відщеплюються від системи рівнянь для чотирьох лінійних комбінацій матричних елементів матриці густини, а саме

$$R_1 = \rho_0 - \rho_2, \quad R_2 = \rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}, \quad R_3 = -i\rho_{-}, \quad R_4 = \rho_{+}. \quad (5.22)$$

Тоді система рівнянь (5.9)-(5.13), записана у векторній формі для елементів  $R_i(t)$ ,  $i = 1 - 4$ , матиме вигляд

$$|\dot{R}(t)\rangle = \hat{A}\{x(t), U\} |R(t)\rangle + |B\{x(t), U\}\rangle, \quad (5.23)$$

де  $\hat{A}\{x(t), U\} = \hat{A}_{\Gamma}\{x(t), U\} + \hat{A}_H\{x(t), U\} + \hat{A}_J\{x(t), U\}$ . Тут введено матриці, що пов'язані з тунелюванням (індекс  $\Gamma$ ), зовнішнім магнітним полем (індекс  $H$ ) та обмінною взаємодією (індекс  $J$ ). Вони мають вигляд

$$\hat{A}_{\Gamma}\{x(t), U\} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} F_{+}^{+,-} & -F_{-}^{-,+} & 0 & 0 \\ -F_{-}^{+,-} & F_{+}^{-,+} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & F_{+}^{-,+} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F_{+}^{-,+} \end{pmatrix}, \quad (5.24)$$

$$\hat{A}_H\{x(t), U\} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -H_+^- \\ 0 & 0 & h & H_-^- \\ 0 & -h & 0 & 0 \\ H_+^- & H_-^- & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.25)$$

$$\hat{A}_J\{x(t), U\} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -J_-^- & -J_+^- & 0 & 0 \\ J_+^- & J_-^- & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J_-^- & J(x) \\ 0 & 0 & -J(x) & J_-^- \end{pmatrix}. \quad (5.26)$$

В цьому матричному рівнянні вектор  $|B\{x(t)\}\rangle$  виникає при використанні умови нормалізації  $\text{Tr}\hat{\rho}_d = 1$ . Він має вигляд

$$|B\{x(t)\}\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} F_+^{-,-} - J_-^+ \\ -F_-^{-,-} + J_+^+ \\ 0 \\ 2H_+^+ \end{pmatrix}. \quad (5.27)$$

Тут величини  $F_{\pm}^{j,j'}$ , де  $(j, j') = (+, -)$ ,  $H_{\pm}^{\eta}$  та  $J_{\pm}^{\eta}$  (з  $\eta = \pm$ ) залежать від тунельної ширини рівня  $\Gamma_{L,R}\{x(t)\}$  та функцій розподілу Фермі-Дірака  $f_{L,R}(\varepsilon)$  та  $f_{L,R}(\varepsilon + U)$ , мають вигляд

$$F_{\pm}^{j,j'} = \Gamma_{\pm}(x) + \left( j \left[ \Gamma_L(x) f_L^{\pm} \pm \Gamma_R(x) f_R^{\pm} \right] + \right. \\ \left. + \left( j' \left[ \Gamma_L(x) f_L^{U,\pm} \pm \Gamma_R(x) f_R^{U,\pm} \right] \right) \right), \quad (5.28)$$

$$H_{\pm}^{\eta} = \left( 2\sqrt{h^2 + J^2(x)} \right)^{-1} h \left\{ \Gamma_L(x) f_L^{\pm} \pm \right. \\ \left. \pm \Gamma_R(x) f_R^{\pm} + \left( \eta \left[ \Gamma_L(x) f_L^{U,\pm} \pm \Gamma_R(x) f_R^{U,\pm} \right] \right) \right\}, \quad (5.29)$$

$$J_{\pm}^{\eta} = 2H_{\pm}^{\eta} J(x) / h. \quad (5.30)$$

Також введено позначення  $\Gamma_{\pm} = \Gamma_L(x) \pm \Gamma_R(x)$ .

Для подальшого аналізу розглянемо початок режиму нестійкості, коли зміщення  $x(t)$  мале (але значно більше за амплітуду нульових коливань, що дозволяє класичний опис вібронної підсистеми). Ми розв'язуємо систему рівнянь (5.23) розкладаючи  $R_i(t)$  до доданків, що лінійні за зміщенням  $x(t)$ .

Таким чином  $R_i(t) = R_i^0 + R_i^1(t)$ , де  $R_i^1(t) \propto x(t)$ . Спершу розглянемо невзаємодіючі електрони,  $U = 0$ , та симетричний контакт, тоді  $\Gamma_L(x=0) = \Gamma_R(x=0) = \Gamma$ , а також  $J_L(x=0) = J_R(x=0) = J$ . Рівняння для  $R_1^1$  та  $R_4^1$  відщеплюються від рівнянь для  $R_2^1$  та  $R_3^1$ . Таким чином аналіз механічної нестійкості в цьому окремому випадку зводиться до розв'язку системи двох лінійних рівнянь

$$\begin{pmatrix} \dot{R}_2^1 \\ \dot{R}_3^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Gamma & h \\ -h & -\Gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_2^1 \\ R_3^1 \end{pmatrix} - \alpha_J (f_L^- + f_R^-) \begin{pmatrix} \Gamma / h \\ 1 \end{pmatrix} x(t), \quad (5.31)$$

де  $\alpha_J > 0$  – це обмінна сила, обчислена як похідна зі знаком мінус від обмінної енергії, яка при розкладі до першого порядку за зміщенням становитиме  $J(x) \approx -\alpha_J x$ . Підставимо в (5.21) знайдене з (5.31)  $R_2^1$ , яке дорівнює потрібній комбінації матричних елементів зведеної матриці густини. Для подальшого аналізу  $x(t)$  представимо механічні коливання квантової точки у вигляді  $x(t) \propto \exp(i\Omega t)$  та виділимо у  $\Omega$  реальну та уявну частини. Тоді швидкість змінення амплітуди механічних коливань квантової точки запишеться як  $r = -\text{Im} \Omega$ . При  $U = 0$  отримаємо

$$\begin{aligned} r = & -\frac{\hbar \alpha_J^2}{8m} \frac{\Gamma[\Gamma^2 + (\hbar\omega)^2 + h^2]}{h\{\Gamma^2 - (\hbar\omega)^2 + h^2\}^2 + 4(\hbar\omega)^2 \Gamma^2} \times \\ & \times \sum_{\alpha=L,R} \left\{ f_\alpha \left( \varepsilon_0 - \frac{h}{2} \right) - f_\alpha \left( \varepsilon_0 + \frac{h}{2} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Оскільки функція розподілу Фермі-Дірака  $f_\alpha(\varepsilon)$  це зростаюча функція енергії ( $\varepsilon_0 > 0$ ), а  $h \sim H > 0$  за визначенням, то  $r(h)$  завжди негативна при  $h \neq 0$ . Це означає, що в даному магнітному пристрої для невзаємодіючих електронів ( $U = 0$ ) не виникає механічної нестійкості з подальшим розвитком шатлювання. З іншого боку, в режимі кулонівської блокади ( $U \rightarrow \infty$ ) шатлівський режим має місце у невеликих магнітних полях, таких що  $h < \sqrt{7} \sqrt{\Gamma^2 + (\hbar\omega)^2}$ , як було аналітично доведено в [74] (а також в [70]). Тоді при зменшенні  $U$  повинно існувати критичне значення  $U = U_c$ , при якому трапляється перехід між двома

режимами: режимом, коли в системі мають місце коливання з великою амплітудою та існує шатлювання, і коли механічні коливання загасають. Електрон-електронні кореляції сприяють шатлюванню в магнітних нанопристроях [73], тобто для розвинення шатлівського режиму необхідно, щоб кулонівська взаємодія була більше певного значення, тоді ймовірність дворазового заповнення квантової точки і нульового сумарного спіну буде достатньо малою. Зазначений висновок справедливий для термоіндукованого шатлювання.

Магнітний шатл розвивається в певному діапазоні зовнішніх магнітних полів – від нижнього критичного поля до верхнього критичного поля,  $h_{c1} < h < h_{c2}$ , що властивий для заданого набору параметрів системи. Аналітичні вирази для цих полів в певних наближеннях та окремих границях отримано в [74]. Наявність верхнього критичного поля обґрунтовується тим, що в сильних магнітних полях прецесія магнітного моменту настільки швидка, що в середньому спін на квантовій точці та обмінна сила дорівнюють нулю. Нижнє критичне магнітне поле зумовлене тим, що шатлівська нестійкість виникає, коли швидкість експоненціального зростання амплітуди коливань перевищує внутрішнє тертя. Внутрішнє тертя вперше введено в [74] для магнітного шатлу в режимі кулонівської блокади ( $U \rightarrow \infty$ ). Вираз для коефіцієнту внутрішнього тертя має вигляд

$$r_J(T) \approx -\frac{\hbar \alpha_J^2}{m} \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + (\hbar \omega)^2} \frac{1}{T_L} \cosh^{-2} \left( \frac{\delta \varepsilon}{2T_L} \right), \quad (5.33)$$

Тут  $T_L$  – температура лівого електроду, а температура правого електроду дорівнює нулю. Внутрішнє тертя пояснюється впливом на рух квантової точки роботи обмінних сил.

## **5.2. Вплив електрон-електронної взаємодії на електронне шатлювання в системі, де прикладено зовнішню напругу до електродів.**

В цьому підрозділі розглянуто вплив кулонівських кореляцій на нестійкість механічних коливань та розвинення шатлу для пристрою, в якому

хімічні потенціали відрізняються за рахунок симетрично прикладеної напруги.

В рівняннях (5.3), (5.4) знехтувано електричними силами, що діють на електрони на квантовій точці. В експериментах з молекулярним транзистором на основі молекул фулерену  $C_{60}$  [71] показано, що обмінна взаємодія між спіном електрону на фулерені і магнітними (Ni) електродами є сильною. Електричне поле, що діє на заряджену молекулу, сильно залежить від геометрії пристрою та може бути грубо оцінене як  $E \approx V/d$ , де  $d$  – це відстань між електродами. Досліджуючи вплив електронних кореляцій на магнітний шатл при наявності зовнішньої напруги, припускаємо, що обмінна сила, що за оцінкою дасть  $\approx J/l_J$ , перевищує електричну силу. Оцінено, що максимальне співвідношення електричної сили до обмінної при наших чисельних розрахунках (рис. 5.2), що будуть обговорюватись нижче, становить приблизно 0.3, тож електричною силою можна знехтувати. В такому випадку тягнуча напруга виступає виключно як джерело енергії для повністю магнітного пристрою, що контролюється зовнішнім магнітним полем.

Для аналізу розвинутого режиму шатлювання необхідно розглядати нелінійні та нелокальні спінтромеханічні процеси, що зроблено чисельними методами. На рис. 5.2 представлені результати чисельного моделювання амплітуди коливань квантової точки (молекули), отриманої за допомогою розв'язку системи (5.9)-(5.14) для компонентів матриці густини спільно з рівнянням руху (5.21).

Вісім панелей демонструють розвиток амплітуди  $\mathcal{A}(t)$  механічних осциляцій квантової точки, що стартує з певного початкового положення, з часом, розрахований при різних значеннях тягнучої напруги. Верхня та нижня межа заштрихованих областей відповідає огинаючій осциляцій, чия амплітуда  $\mathcal{A}(t)$  становить половину відстані між цими межами. Еволюцію показано на часовому інтервалі, що на три порядки більший за період осциляцій точки. Механічне зміщення  $x(t)$  нормоване на тунельну довжину  $l_t$ , а час – на характерний час одного акту тунелювання,  $\hbar/\Gamma$ . Розглядається симетричний

контакт,  $\Gamma_L = \Gamma_R = \Gamma$ , а тунельна довжина дорівнює обмінній довжині,  $l_i = l_j$ . Безрозмірний параметр, що входить до правої частини механічного рівняння при записі в безрозмірних одиницях, за оцінками покладено  $\kappa = \hbar^2 J / (ml_i l_j \Gamma^2) = 0.09$ .

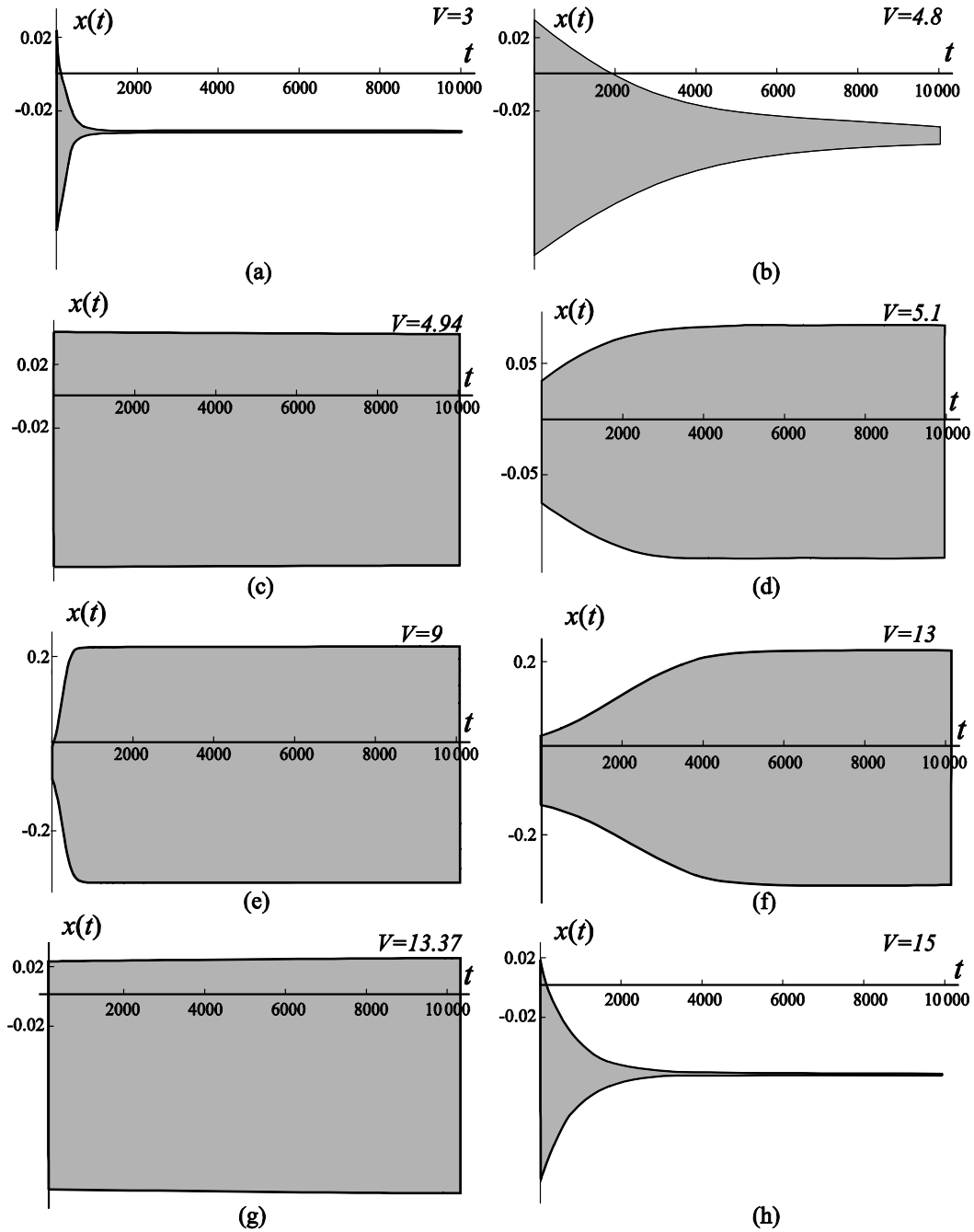


Рис. 5.2. Розвиток амплітуди механічних осциляцій квантової точки, що стартує з початкового положення, з часом при різних значеннях тягнучої напруги, яку вказано на кожній панелі в енергетичних одиницях з нормуванням на  $\Gamma$ . Параметри розрахунків:  $T_L = T_R = \Gamma$ ,  $\hbar\omega = \Gamma$ ,  $h = 1.4\Gamma$ ,  $J = 1.5\Gamma$ ,  $\delta\varepsilon = 2\Gamma$ ,  $U = 10\Gamma$ .

За низьких температур  $T_\alpha \ll \max\{\Gamma, \delta\varepsilon\}$  вплив електронної підсистеми на механічні вібрації має місце, лише якщо енергія електронів, зумовлена тягнутою напругою, перевищує, щонайменше, енергію  $E_-$  електрону зі спіном «вгору» на квантовій точці (формула (5.18)). Як було показано раніше [57], режим шатлювання при  $T_{L,R} = 0$  реалізується коли  $eV > eV_{th} = 2(\delta\varepsilon + \hbar\omega)$ . Звертаючись до чисельних розрахунків, рис. 5.2, отримаємо напругу, при якій для даної системи відбувається перехід від загасання амплітуди (з початково заданого значення) до її збільшення, що допомагає встановити  $V_{th}$ .

Коли коливання молекули виходять на граничний цикл зі значенням амплітуди, що значно перевищує початкове значення, має місце розвинутий режим шатлювання. Можна бачити, що порогова напруга  $V_{th}$  (див. рис. 5.2(c)), що отримана для випадку температури  $T_L = \Gamma$  в електроді-витоку, є близькою до теоретичного значення. Рис. 5.2(c) та рис. 5.2(d) демонструють відповідно початок ( $V = V_{th} = 4.94$ ) та розвиток режиму електронного шатлювання в спітронному пристрої. Режим шатлювання з максимально можливою амплітудою при даних параметрах ілюструє рис. 5.2(e). Завершуючий етап для режиму електронного шатлювання зображено на рис. 5.2 (f). Перехід до загасаючих коливань відбувається при  $V = V_c = 13.37$  (рис. 5.2(g)). Рис. 5.2(a),(b),(h) демонструють загасання амплітуди молекули з часом.

Цікавим з точки зору спітроніки є для нас режим пристрою, коли напруга вище критичної,  $V > V_{th}$ . Тоді за допомогою тунелювання з витоку на квантовій точці заповнюється одноелектронний стан. Двократне заповнення буде можливе, тільки коли енергія електронів з витоку перевищуватиме енергію збудження двократно заповненого електронного стану  $\mu_L > U + \varepsilon_0$  (в цьому виразі знехтовано розщеплення рівня  $\varepsilon_0$  порівняно з  $U$  та  $\mu_L$ ). Зняття кулонівської блокади призводить до того, що сумарний спін електронного стану молекули може дорівнювати нулю, тоді він не взаємодітиме з обмінним полем та не зробить внеску у електронне шатлювання. Можливі три електронних конфігурації на квантовій точці. Розрізнятимемо серед них дві «механічно



пасивні», розуміючи під цим, що сумарна робота обмінних сил за період осциляцій дорівнює нулю: якщо квантова точка зайнята електроном зі спіном «вгору» (тож тунелювання до стоку ще неможливе) та якщо квантова точка двократно заповнена. І одну «механічно активну»: якщо квантова точка зайнята електроном зі спіном «вниз».

Якщо тягнуча напруга  $V > V_{th}$  така, що  $\mu_L$  близький, але все ще менший за енергію збудження двократно заповненого електронного стану, зняття кулонівської блокади відбувається за рахунок температурних флуктуацій, що дозволяє контролювати вплив кулонівських кореляцій за допомогою температури.

Збільшуючи заселення станів з енергіями більше енергії збудження двократно заповненого електронного стану за рахунок збільшення температури, можна отримати перехід від шатлювання до режиму загасаючих коливань при певному критичному значенні співвідношення «механічно пасивних» станів до «механічно активних»,  $n_c = \rho_2 / \rho_\downarrow$ . Можна приблизно оцінити це значення, якщо  $U^* \gg T_L$ , де  $U^* = U + \varepsilon_0 - \mu_L$ . Ми припускаємо, що при певних умовах (див. нижче) тільки величини  $\rho_2$  та  $\rho_\downarrow$  визначають механічну поведінку в критичному регіоні. Два зв'язаних лінійних рівняння для цих ймовірностей виходять з (5.11) та (5.13) при  $\hbar \rightarrow 0$ . В сталому режимі, де  $\dot{\rho}_i = 0$  (тут  $i$  пробігає значення індексів виразів (5.9) -(5.13)) та при  $f_R = 0$  ( $T_R \rightarrow 0$ ),  $f_L(U) \approx \exp(-U^* / T_L) \ll 1$  ці рівняння набувають простої форми

$$[\Gamma_L(a_m) + \Gamma_R(a_m)]\rho_2 = \Gamma_L(a_m)f_L(U)\rho_\downarrow, \quad (5.34)$$

$$\Gamma_L(a_m)\rho_2 = \Gamma_R(a_m)\rho_\downarrow. \quad (5.35)$$

Тут  $a_m$  – це безрозмірна амплітуда (виміряна в одиницях тунельної довжини  $l_t$ ) розвинутих осциляцій шатлу при положенні молекули, яке є найбільш сприятливим для електронного тунелювання з електроду-витоку до стану  $|\downarrow\rangle$ , що відповідає ситуації двократного заповнення квантової точки. Нетривіальний розв'язок цих нових рівнянь існує, коли  $\Gamma_L(a_m) / \Gamma_R(a_m) = \Gamma_L / \Gamma_R \exp(2a_m) \gg 1$ .

Він матиме вигляд  $n_c \simeq f_L(U) \simeq \Gamma_R(a_m) / \Gamma_L(a_m) \ll 1$ . Таким чином, з цих простих міркувань отримуємо, що залежність критичного значення  $U_c^*$  при низьких температурах та в слабких магнітних полях має бути лінійною

$$U_c^* \simeq T_L \left[ \ln \frac{\Gamma_L}{\Gamma_R} + 2a_m \right]. \quad (5.36)$$

Цим пояснюються результати чисельних розрахунків залежності критичної кулонівської енергії від температури, отриманих в [73].

Цікавою особливістю залежностей на рис. 5.2 є те, що при виникненні шатлівської нестійкості амплітуда механічних коливань насичується до певних значень, незважаючи на те, що в рівняння руху (5.21) не було введено феноменологічного тертя. Внутрішнє магнітне тертя (5.33) мале в нашій системі з  $T_{L,R} \ll \delta\varepsilon$ . Це насичення амплітуди коливань є специфічною властивістю нелінійної динаміки магнітного шатлу [70].

### 5.3. Ефекти кулонівської взаємодії при термоіндукованому магнітнокерованому шатлюванні.

Покладемо  $\mu_L = \mu_R = \varepsilon_F$  та розглянемо електронне шатлювання, що індукується різницею температур  $\delta T = T_L - T_R$ . Будемо мати на увазі велику різницю температур  $T_L \gg T_R$  в системі. Це сприятливі умови для шатлювання, бо великі значення  $T_L$  характеризують енергії, що матимуть електрони, при цьому невеликі значення  $T_R$  передбачають слабку термічно індуковану дисипацію в електроді-стоку. Як і раніше,  $T_L \gg \Gamma_L$  та  $T_R \gg \Gamma_R$ . В [74] було показано, що в режимі кулонівської блокади термоіндуковане шатлювання виникає в певному діапазоні зовнішніх магнітних полів  $H_{c1} < H < H_{c2}$ . Відповідне верхнє критичне значення магнітної енергії  $h_{c2}$  при  $\delta T \gg \Gamma$  для симетричного контакту, що вивчався, становить  $h_{c2} = \sqrt{7} \sqrt{\Gamma^2 + (\hbar\omega)^2}$ , а нижнє критичне значення, яке визначається магнітним тертям (5.33), залежить від температури як  $h_{c1} \sim \sqrt{T_L} (\Gamma / T_L)$ . Вікно  $\delta h_c = h_{c2} - h_{c1}$ , де має місце термоіндукований

електронний шатл, по порядку співпадає з  $h_{c2}$  та не набагато більше за  $\Gamma$ . Виникає питання, чи буде спостерігатися термоіндукований магнітний шатл, якщо електрон-електронні кореляції не є суттєвими? Аналітичні розрахунки показують, що для невзаємодіючих електронів ( $U=0$ ) при ненульових температурах шатлювання немає. Таким чином, існує значення  $U=U_c$ , коли починається шатлювання, тобто коливання, що загасають, замінюються коливаннями з відносно великою амплітудою.

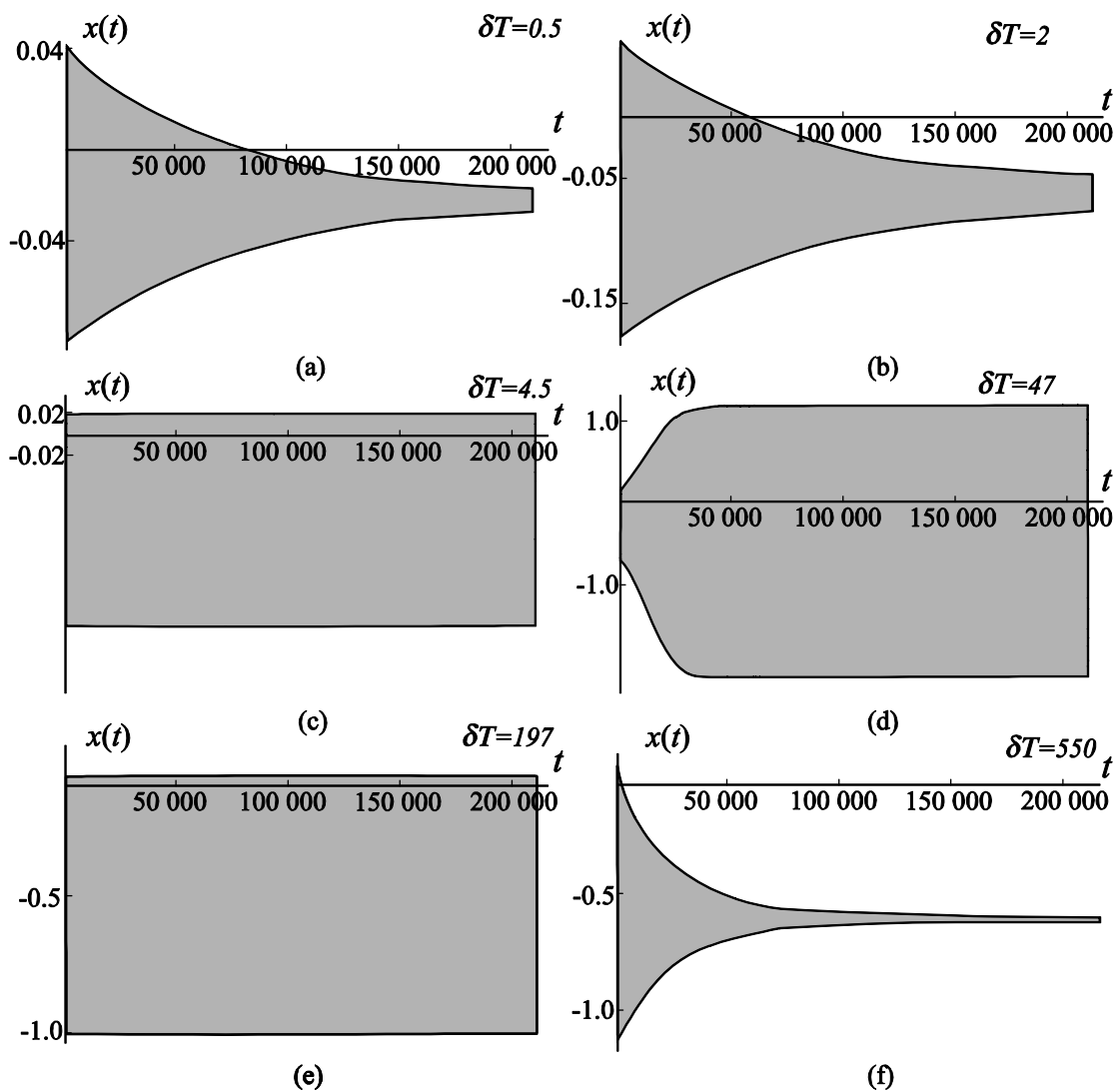


Рис. 5.3. Розвиток амплітуди механічних осциляцій квантової точки, що стартує з початкового положення, за часом за відсутності тягнучої напруги при певних значеннях різниці температур в електродах, які вказано на кожній панелі в енергетичних одиницях з нормуванням на  $\Gamma$ . Параметри:  $T_R = 3\Gamma$ ,  $\hbar\omega = 0.1\Gamma$ ,  $h = \Gamma$ ,  $J = 0.2\Gamma$ ,  $\delta\varepsilon = 10\Gamma$ ,  $U = 150\Gamma$ .

Ми чисельно розв'язуємо рівняння (5.9)-(5.13). Режим шатлювання тепер матиме місце для тих температур, при яких вплив електрон-електронних кореляцій при заданих параметрах ще достатній для розвинення шатлу. Наглядне зображення еволюції амплітуди коливань при різних температурах приведено на рис. 5.3. Визначення амплітуди та умови розрахунків такі ж, як при симуляціях, що зображені на рис. 5.2. Аналогічно до рис. 5.2 проілюстрований початок ( $\delta T = \delta T_{th} = 4.5$ ) режиму електронного шатлювання в спітронному магнітному пристрої (рис. 5.3(c)). Режим шатлювання з максимально можливою амплітудою при даних параметрах ілюструє рис. 5.3(d). Перехід до загасаючих коливань відбувається при  $\delta T = \delta T_c = 197$ , рис. 5.3(e). Панелі рис. 5.3(a),(b),(f) демонструють загасання амплітуди молекули з часом.

Інтервал зовнішніх магнітних полів, при яких має місце шатлювання, зумовлений багатьма параметрами системи. Зручно представити факт виконання вимог наявності в системі критичної величини  $U_c$  та відповідних магнітних полів  $h_{c1} < h < h_{c2}$ , які розділяють область коливань, що загасають, та шатлівську область, на діаграмі в осях  $h_c$  та  $U$ , де режим шатлювання відповідає заштрихованій області (рис. 5.4).

Так можна проаналізувати залежність критичних полів  $h_{c1}$ ,  $h_{c2}$  від величини кулонівської взаємодії в системі при заданому  $\delta T$  та середній температурі  $T = (T_L + T_R) / 2$ . Розглянуто симетричний випадок та взято такі ж умови та параметри, що на рис. 5.3.

Видно, що в режимі кулонівської блокади,  $U \gg T_{L,R}$ , шатлювання при великих  $\delta T$  має місце в певному діапазоні полів  $\delta h_c = h_{c2} - h_{c1}$  (чисельно близькому до аналітичних значень, предказаних для  $U \rightarrow \infty$  в [74]). Це «вікно» для шатлювання слабо залежить від  $U$ , але при  $U \simeq T_L$ , коли знімається кулонівська блокада,  $\delta h_c$  звужується до нуля при певному критичному значенні співвідношення  $\rho_2 / \rho_\downarrow$ . Така поведінка пов'язана з тим, що за появи термоіндукованих станів, коли квантова точка двократно заповнена і має

сумарний спін нуль, суттєво знижується ймовірність магнітнокерованого шатлювання.

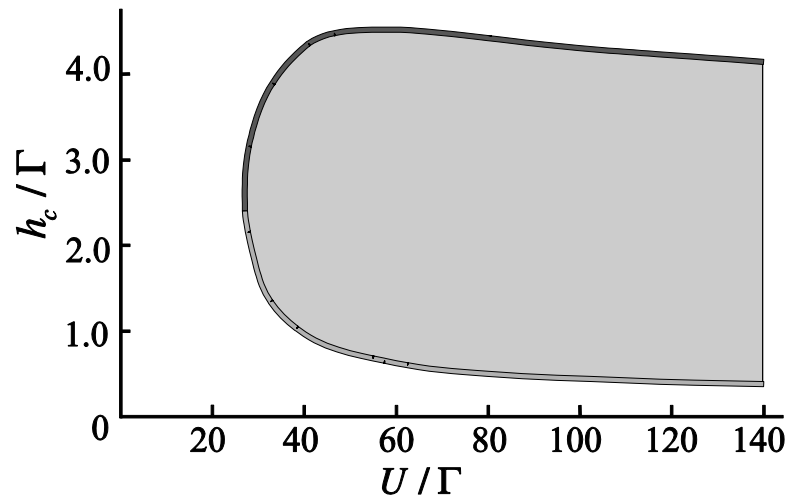


Рис. 5.4. Залежність критичних зовнішніх магнітних полів (представлених в енергетичних одиницях) від кулонівської енергії. Критичне поле розділяє шатлівський режим (заштрихована область) та загасаючі осциляції молекули. Нижнє критичне магнітне поле  $h_{c1}$  зображено світлішою кривою, верхнє критичне магнітне поле  $h_{c2}$  – темнішою. Параметри:  $T_L = 50\Gamma, T_R = 3\Gamma$ . При  $U \approx T_L$  «вікно»  $\delta h_c = h_{c2} - h_{c1}$  звужується до нуля, бо кулонівська блокада знімається і температурно-індукований «механічно пасивний» стан з двократним заповненням точки зупиняє електронне шатлювання.

Розглянемо залежність значень верхнього та нижнього критичних магнітних полів від різниці температур  $\delta T$  при заданих значеннях енергії кулонівської взаємодії. Рис. 5.5 демонструє поведінку критичних магнітних полів як функції  $\delta T$  для різних значень механічної частоти коливань  $\omega$ . У [74], де отриманий аналітичний вираз для верхнього критичного магнітного, розглядався тільки граничний випадок  $T_L \rightarrow \infty$  з  $T_R = 0$ . З рисунку видно, що термоіндукований магнітний шатл – це порогове явище.

Порогове значення  $\delta T_{th}$  сильно залежить від значення енергії відносно рівня Фермі  $\delta \varepsilon$  (як це й повинно бути), механічної частоти коливань та

середньої температури  $T$ . Знову звернемося до факту, що для електричного шатлу (тобто для шатлу, що приводиться до дії за рахунок електричних сил) при  $T = 0$  порогова тягнуча напруга (якщо зовнішня напруга прикладена симетрично) становить  $eV_{th} / 2 = \delta\varepsilon + \hbar\omega$ . Чіткий початок нестійкості при цій напрузі має місце при  $T \gg eV_{th}$ . Скінченні температури розмивають чітку межу у критичному регіоні. Тож не є очевидним з якісного опису шатлівської нестійкості, що  $\delta T_{th}$  для магнітного шатлу визначається сумою енергії  $\delta\varepsilon$  та вібронної енергії  $\hbar\omega$ .

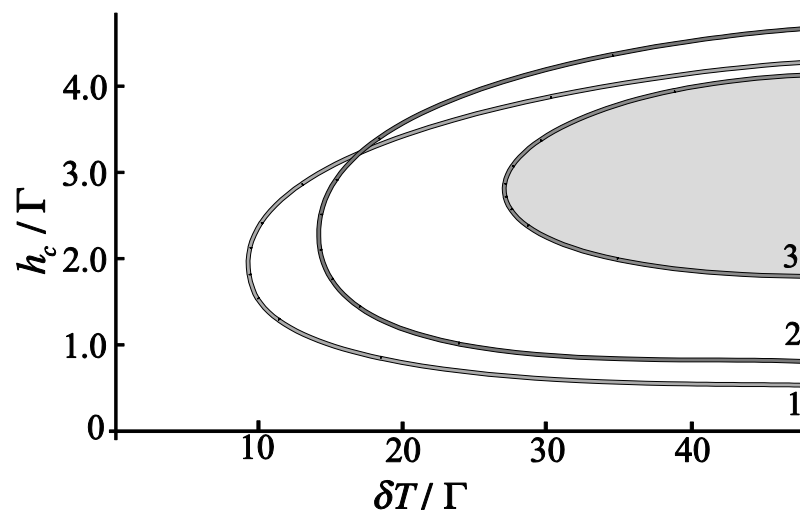


Рис. 5.5. Залежність критичних зовнішніх магнітних полів (представлених в енергетичних одиницях) від різниці температур в електродах  $\delta T = T_L - T_R$ . Наведено криві для:  $\hbar\omega = \Gamma$  (крива 1),  $\hbar\omega = 3\Gamma$  (крива 2),  $\hbar\omega = 5\Gamma$  (крива 3). Режим шатлювання відповідає області, що знаходиться між нижнім та верхнім критичним полем, як це показано для випадку  $\hbar\omega = 5\Gamma$ . Криві демонструють зростання порогового значення  $\delta T_{th}$  з ростом частоти механічних коливань  $\omega$ . Параметри:  $U = 100\Gamma$ ,  $T_R = 3\Gamma$ ,  $J = 1\Gamma$ ,  $\delta\varepsilon = 10\Gamma$ .

Чисельні симуляції, рис. 5.5, показують, що порогове  $\delta T$  задовольняє не простій формулі, що справедлива для порогової тягнучої напруги електричного шатлу, а більш складній залежності (як і очікувалося). Однак, отримана за розрахунками  $\delta T_{th}$  за порядком становить величину, що дорівнює сумі

енергії  $\delta\varepsilon$  та вібронної енергії  $\hbar\omega$ . Наші розрахунки показують, що порогова різниця температур росте з ростом  $\delta\varepsilon$  (як і повинно бути). Більш цікавим є факт, що  $\delta T_{th}$  росте, якщо механічна частота коливань  $\omega$  збільшується (див. рис.5.5).

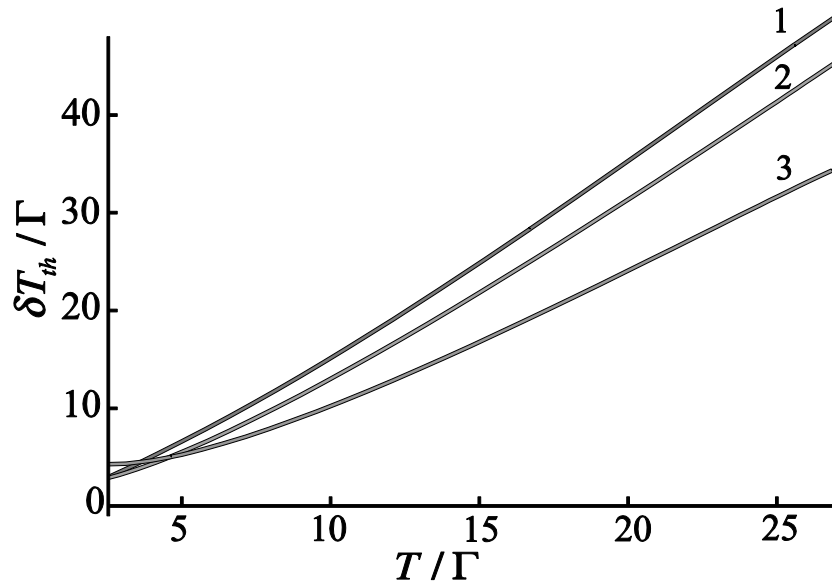


Рис. 5.6. Залежність порогової різниці температур  $\delta T_{th}$  від середньої температури  $T = (T_L + T_R) / 2$  для різних значень  $\delta\varepsilon = \varepsilon_0 - \varepsilon_F$ :  $3\Gamma$  (крива 1),  $5\Gamma$  (крива 2),  $10\Gamma$  (крива 3). Рост  $\delta T_{th}$  з ростом середньої температури системи більш виражений при  $T > \delta\varepsilon$ . Криві демонструють, що поведінку температурної залежності зумовлено нелінійними ефектами, наявними в моделі. Розрахунки зроблено в режимі кулонівської блокади,  $U = 300\Gamma$ , інші параметри такі ж як на рис. 5.3, окрім  $J = 0.3\Gamma$ ,  $\hbar\omega = 0.2\Gamma$ .

Залежність порогової температури, що відповідає початку режиму шатлювання, від середньої температури системи показано на рис. 5.6. З рисунку видно, що порогове значення  $\delta T$  для шатлювання при «високих температурах» ( $T > \delta\varepsilon$ ) залежить від середньої температури. В цьому регіоні, як бачимо з рисунку, виконується співвідношення  $\delta T_{th} \gtrsim T$ . Однак при температурах  $T < \delta\varepsilon$  порогове значення  $\delta T_{th}$  слабо залежить від  $T$ , що видно з поведінки кривих 1 та 2, та, особливо, кривої 3 на рис. 5.6. Можна бачити, що криві залежностей  $\delta T_{th}(T)$  для даного пристрою мають відхилення від лінійної залежності. Це

демонструє нелінійні ефекти в термічному транспорті в одноелектронному транзисторі на основі квантової точки в режимі шатлювання, які зумовлені впливом механічних коливань квантової точки.

Важливо, що режим шатлювання важко доступний, якщо температура в електроді-витоку перевищує  $\delta\varepsilon$ ,  $T_R > \delta\varepsilon$ . В цьому випадку магнітне тертя (див. формулу (5.33)) сильно пригнічує шатлювання, тож механічна нестійкість виникає лише за дуже високої різниці температур  $\delta T$ .

### Висновки

Досліджено коливання квантової точки в спітронному молекулярному транзисторі з електродами, що поляризовані за спіном, який знаходиться в зовнішньому магнітному полі. Основні результати розділу:

1. Отримано рівняння руху для координати центру мас квантової точки (молекули) при прикладанні різниці напруг та в режимі, коли електроди тримаються при різних температурах.

2. За допомогою чисельних розрахунків продемонстровано етапи еволюції системи, в якій можливий електронний шатл, що коливається під дією магнітних сил, для випадку подання напруги та для випадку прикладання градієнту температур.

3. Чисельно отримано значення критичної кулонівської енергії, що розділяє режим загасаючих коливань та шатлівський режим при заданому наборі параметрів. Ці результати свідчать, що термоіндуковане магнітнокероване шатлювання є пороговим явищем за величиною кулонівської взаємодії, тобто електрон-електронні кореляції сприяють термоіндукованому магнітнокерованому шатлюванню.

4. Знайдено область критичних магнітних полів, що зумовлюють режим одноелектронного термоіндукованого магнітнокерованого шатлювання. Отримано залежність критичних магнітних полів від значення енергії кулонівської взаємодії.



5. Показано, що термоіндукований магнітний шатл є пороговим явищем за різницею температур, порогова величина якої залежить, зокрема, від частоти механічних коливань квантової точки. Пороговий характер явища та відхилення від лінійного закону, що має місце в залежностях порогової різниці температур від середньої температури, свідчать про наявність нелінійностей в системі.

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішено важливу задачу в області теоретичної фізики, а саме: теоретично описано вплив електрон-електронної та електрон-вібронної взаємодії на тунельний транспорт заряду та спіну в вуглецевих нанотрубках та молекулярних транзисторах.

Основними результатами дисертаційної роботи є наступні:

1. Показано, що в системі «метал–заземлений майоранівський нанодріт–метал», сильно асиметричній за тунельними зв'язками, за наявності розщеплення пари майоранівських станів кондуктанс досягає максимуму при нульовій напрузі.

2. Виявлено, що в сильно асиметричній системі «метал–незаземлений майоранівський нанодріт–метал» струм насичується при нижчих напругах, ніж при резонансному електронному тунелюванні в системі без майоранівських станів.

3. Знайдено, що в металевій одношаровій вуглецевій нанотрубці електрон-електронна взаємодія приводить до появи енергетичної щілини в спектрі електронів. Для такої системи отримано залежність коефіцієнту проходження електростатичного бар'єру від кута хіральності нанотрубки.

4. Показано, що вольт-амперні характеристики спітронного молекулярного транзистора мають подвоєну кількість сходинок струму у порівнянні зі звичайним молекулярним транзистором. Показано, що при сильній кулонівській взаємодії або в сильному зовнішньому магнітному полі з'являються області без сходинок. Виявлено поетапне зняття кулонівської блокади тягнутою напругою.

5. Показано, що кондуктанс спітронного молекулярного транзистора при сильній електрон-вібронній взаємодії є немонотонною функцією температури в широкому діапазоні значень зовнішнього магнітного поля та при довільній кулонівській енергії.

6. Встановлено області існування термоіндукованого магнітнокерованого човникового транспорту в спінтронному молекулярному транзисторі та виявлено пороговий характер цього явища за параметрами величини кулонівської взаємодії, зовнішнього магнітного поля та різниці температур електродів.

Автор глибоко вдячна науковому керівнику Іллі Валентиновичу Криве за керівництво роботою, неоціненну допомогу та корисні поради. Автор щіро дякує Сергію Івановичу Кулінічу за численні поради, професійну допомогу та плідні дискусії. Дисертантка висловлює подяку А.В. Парафіло, О.О. Ільїнській та О.М. Багровій за плідну співпрацю та всебічну підтримку. Автор вдячна Р.І. Шехтеру, М. Йонсону, Д. Радічу та Х.Ч. Парку за співавторство. Автор висловлює щіру вдячність своїй сім'ї за неоціненну підтримку.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Low-energy anomalies in electron tunneling through strongly asymmetric Majorana nanowire / A.D. Shkop, A.V. Parafilo, I.V. Krive, R.I. Shekhter // *Low Temp. Phys.* – 2016. – V. 42, No. 4. – P. 308–312.
2. Индуцированная взаимодействием щель в спектре электронов и киральные эффекты в металлических углеродных нанотрубках / А.Д. Шкоп, С.И. Кулинич, А.В. Парафило, И.В. Криве // *ФНТ.* – 2017. – Т. 43, № 12. – С. 1745–1753.
3. Shkop A.D. Effects of the Franck-Condon blockade in tunneling of spin-polarized electrons in a molecular transistor / A.D. Shkop, O.M. Bahrova // *Вісник ХНУ, серія «Фізика»* – 2017. – № 27 – С. 53–58.
4. Coulomb effects on thermally induced shuttling of spin-polarized electrons / O.A. Ilinskaya, A.D. Shkop, D. Radic, H.C. Park, I.V. Krive, R.I. Shekhter and M. Jonson // *ФНТ.* – 2019. – Т. 45, № 9. – С. 1208–1216.
5. Interplay of vibration and Coulomb effects in transport of spin-polarized electrons in a single-molecule transistor / A.D. Shkop, O. M. Bahrova, S.I. Kulinich, I.V. Krive // *Superlattices and Microstructures.* – 2020. – V. 137, No. 1. – P. 106356-1–106356-11.
6. Shkop A.D. Manifestation of the Majorana fermions in transport through asymmetric single-charge transistor / A.D. Shkop, A.V. Parafilo // *VI International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 2 – 5, 2015: book of abstr.* – Ukraine, Kharkiv, 2015. – P. 31.
7. Шкоп А.Д. Низкоэнергетическая аномалия в электронном транспорте через квантовый дот с майорановскими фермионами / А.Д Шкоп, А.В. Парафило, И.В. Криве // *XII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах», 1 – 4 грудня, 2015: тези доповідей.* – Україна, Харків, 2015. – С. 50.
8. Shkop A.D. Interaction-induced gap and chiral effects in single-wall carbon nanotube / A.D. Shkop, S.I. Kulinich, I.V. Krive // *VIII International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, May 29 – June 2, 2017: book of abstr.* – Ukraine, Kharkiv, 2017. – P. 57.

9. Shkop A.D. Can acoustic phonons generate energy gap in 1D metallic systems? / A.D. Shkop, S.I. Kulinich, A.V. Parafilo, I.V. Krive // XIII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» присвячена 100-річчю з дня народження академіка І.М. Ліфшиця, 5 – 8 грудня, 2017: тези доповідей. – Україна, Харків, 2017. – С. 108.
10. Bahrova O.M. Effects of Franck-Condon blockade in tunneling of spin-polarized electrons in a molecular transistor / O.M. Bahrova, A.D. Shkop // XIII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» присвячена 100-річчю з дня народження академіка І.М. Ліфшиця, 5 – 8 грудня, 2017: тези доповідей. – Україна, Харків, 2017. – С. 97.
11. Shkop. A.D. Effects of magnetopolaronic blockade in transport of spin-polarized electrons / A.D. Shkop, O.M. Bahrova // IX International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 4 – 8, 2018: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2018. – P. 185.
12. Shkop. A.D. Effects of Coulomb interaction and Franck-Condon blockade in tunneling of spin-polarized electrons in a molecular transistor / A.D. Shkop, O.M. Bahrova, I.V. Krive // X International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 3 – 7, 2019: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2019. – P. 155.
13. Ilinskaya O.A. Coulomb effects in a thermally driven magnetic shuttle / O.A. Ilinskaya, A.D. Shkop, I.V. Krive // VII International Conference “Nanotechnology and Nanomaterials”, August 27 – 30, 2019: book of abstr. – Ukraine, Lviv, 2019. – P. 562.
14. Majorana E. A symmetric theory of electrons and positrons / E. Majorana // Nuovo Cimento. – 1937. – V. 14. – P. 171–184.
15. Kitaev A. Yu. Unpaired Majorana fermions in quantum wires / A. Yu. Kitaev // Physics–Uspekhi. – 2001. – V. 44, No. 10S. – P. 131–136.
16. Fu L. Superconducting proximity effect and Majorana fermions at the surface of a topological insulator / L. Fu and C.L. Kane // Phys. Rev. Lett. – 2008. – V. 100, No. 9. – P. 096407-1–096407-4.

17. Alicea J. New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems / J. Alicea // *Rep. Prog. Phys.* – 2012. – V. 75, No. 7. – P. 076501–076536.
18. Leijnse M. Introduction to topological superconductivity and Majorana fermions / M. Leijnse and K. Flensberg // *Semiconductor Science and Technology.* – 2012. – V. 27, No. 12. – P. 124003–124024.
19. Law K.T. Majorana fermion induced resonant Andreev reflection / K.T. Law, P.A. Lee, T.K. Ng // *Phys. Rev. Lett.* – 2009. – V. 103, No. 23. – P. 237001-1–237001-4.
20. Mourik V. Signatures of Majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices / V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven // *Science.* – 2012. – V. 336, No. 6084. – P. 1003–1007.
21. Zero-bias peaks and splitting in an Al–InAs nanowire topological superconductor as a signature of Majorana fermions / A. Das, Y. Ronen, Y. Most [et al.] // *Nature Phys.* – 2012. – V. 8, No. 12. – P. 887–895.
22. Leijnse M. Scheme to measure Majorana fermion lifetimes using a quantum dot / M. Leijnse, K. Flensberg // *Phys. Rev. B.* – 2011. – V. 84, No. 14. – P. 140501-1–140501-4(R).
23. Flensberg K. Tunneling characteristics of a chain of Majorana bound states / K. Flensberg // *Phys. Rev. B.* – 2010. – V. 82, No. 18. – P. 180516-1–180516-4 (R).
24. Majorana single-charge transistor / R. Hutzen, A. Zazunov, B. Braunecker [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2012. – V. 109, No. 16. – P. 166403-1–166403-4.
25. Thermoelectrical detection of Majorana states / R. Lopez, M. Lee, L. Serra [et al.] // *Phys. Rev. B.* – 2014. – V. 89, No. 20. – P. 205418-1–205418-7.
26. Majorana transport in superconducting nanowire with Rashba and Dresselhaus spin–orbit couplings / Jia-Bin You, Xiao-Qiang Shao, Qing-Jun Tong [et al.] // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2015. – V. 27, No. 22. – P. 225302-1–225302-15.
27. Yao Zh. Electron transport through single-wall carbon nanotubes / Zh. Yao, C. Dekker, Ph. Avouris in *Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties and*

applications, edited by M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and Ph. Avouris // Springer, Berlin – 2001. – 425 p. – P. 147– 171.

28. Disorder, Pseudospins, and Backscattering in Carbon Nanotubes / P.L. McEuen, M. Bockrath, D.H. Cobden [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 1999. – V. 83, No. 24. – P. 5098–5101.

29. Carbon nanotubes: nonlinear high-q resonators with strong coupling to single-electron tunneling, 1-st ed. / H. B. Meerwaldt, G. A. Steele, H. van der Zant in Fluctuating Nonlinear Oscillators, edited by M. Dykman // Oxford University Press, Oxford – 2012. – 1111 p.

30. Kane C.L. Transmission through barriers and resonant tunneling in an interacting one-dimensional electron gas / C.L. Kane and M.P.A. Fisher // Phys. Rev. B. – 1992. – V. 46, No. 23. – P. 15233–15262.

31. Katsnelson M. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene / M. Katsnelson, K. Novoselov, A. Geim // Nature Physics. – 2006. – V. 2, No. 9. – P. 620–625.

32. Katsnelson M. Graphene: new bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics / M. Katsnelson, K. Novoselov // Solid State Comm. – 2007. – V. 143, No. 1-2. – P. 3–13.

33. The electronic properties of graphene / A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres [et al.] // Rev. Mod. Phys. – 2009. – V. 81, No. 1. – P. 109–162.

34. Klein O. Die Reflexion von Elektronen an einem Potentialsprung nach der relativistischen Dynamik von Dirac / O. Klein // Z. Phys. – 1929. – V. 53. – P. 157–165.

35. Ando T. Theory of electronic states and transport in carbon nanotubes / T. Ando // Journ. Phys. Soc. Japan. – 2005. – V. 74, No. 3. – P. 777–817.

36. Chiral tunneling in metallic carbon nanotubes / A.V. Parafilo, I.V. Krive, E.N. Bogachek [et al.] // Phys. Rev. B – 2011. – V. 83, No. 4 – P. 045427-1–045427-5.

37. Chiral effects in normal and superconducting carbon nanotube-based nanostructures / A.V. Parafilo, I.V. Krive, E.N. Bogachek [et al.] // Low Temp. Phys. – 2010. – V. 36, No. 10–11. – P. 959–968.

38. Gogolin A.O. *Bosonization and Strongly Correlated Systems* / A.O. Gogolin, A.A. Nersesyan, A.M. Tsvelik – Cambridge: Cambridge University Press. – 1998. – 17 p.
39. Yue D. Conduction of a weakly interacting one-dimensional electron gas through a single barrier / D. Yue, L. I. Glazman, K. A. Matveev // *Phys. Rev. B.* – 1994. – V. 49, No. 3. – P. 1966–1975.
40. Glazman L. Inelastic resonant tunneling of electrons through a potential barrier / L. Glazman, R. Shekhter // *Sov. Phys. JETP.* – 1988. – V. 67, No. 1. – P. 163–170.
41. Mitra A. Phonon effects in molecular transistors: Quantal and classical treatment / A. Mitra, I. Aleiner, A. Millis // *Phys. Rev. B.* – 2004. – V. 69, No. 24. – P. 245302-1–245302-21.
42. Braig S. Vibrational sidebands and dissipative tunneling in molecular transistors / S. Braig, K. Flensberg // *Phys. Rev. B.* – 2003. – V. 68, No. 20. –P. 205324-1–205324-10.
43. Shuttle mechanism for charge transfer in Coulomb blockade nanostructures / L.Y. Gorelik, A. Isacsson, M.V. Voinova [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 1998. – V. 80, No. 20. – P. 4526–4529.
44. Koch J. Franck–Condon blockade and giant Fano factors in transport through single molecules / J. Koch, F. von Oppen // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – V. 94, No. 20. – P. 206804-1–206804-4.
45. Rastelli G. Resonant magneto-conductance through a vibrating nanotube / G. Rastelli, M. Houzet, F. Pistolesi // *Eur. Phys. Lett.* – 2010. – V. 89, No. 5. – P. 57003–57006.
46. Galperin M. Molecular transport junctions: Vibrational effects / M. Galperin, M. A. Ratner, A. Nitzan // *Journal of Physics: Condensed Matter.* – 2007. –V. 19, No. 10. – P. 103201-1–103201-118.
47. Lundin U. Temperature dependence of polaronic transport through single molecules and quantum dots / U. Lundin and R.H. McKenzie // *Phys. Rev. B.* – 2002. – V. 66, No. 7. – P. 075303–075310.



48. Nanoelectromechanical coupling in fullerene peapods probed by resonant electrical transport experiments / P. Utko, R. Ferone, I. V. Krive [et al.] // *Nature Communications*. – 2010. – V. 1, No. 1. – P. 37-1–37-6.
49. The influence of electro-mechanical effects on resonant electron tunneling through small carbon nano-peapods / I.V. Krive, R. Ferone, R. I. Shekhter [et al.] // *New J. Phys.* – 2008. – V. 10. – P. 043043-1–043043-13.
50. Magnetopolaronic effects in electron transport through a single-level vibrating quantum dot / G.A. Skorobogatko, S.I. Kulinich, I.V. Krive [et al.] // *Low Temp. Phys.* – 2012. – V. 37, No. 12. – P. 1032–1037.
51. Stadler P. Ground-state cooling of a carbon nanomechanical resonator by spin-polarized current / P. Stadler, W. Belzig, G. Rastelli // *Phys. Rev. Lett.* – 2014. – V. 113, No. 4. – P. 047201-1–047201-5.
52. Avriller R. Bistability and displacement fluctuations in a quantum nanomechanical oscillator / R. Avriller, B. Murr, F. Pistolesi // *Phys. Rev. B*. – 2018. – V. 97, No. 15. – P. 155414-1–155414-13.
53. Stadler P. Control of vibrational states by spin-polarized transport in a carbon nanotube resonator / P. Stadler, W. Belzig, G. Rastelli // *Phys. Rev. B*. – 2015.– V. 91, No. 8. – P. 085432-1–085432-14.
54. Nanomechanical oscillations in a single-C<sub>60</sub> transistor / H. Park, J. Park, A. K. L. Lim [et al.] // *Nature*. – 2000. – V. 407, No. 6800. – P. 57–60.
55. Vibration assisted electron tunneling in C<sub>140</sub> transistors / A. Pasupathy, J. Park, C. Chang [et al.] // *Nano Lett.* – 2005. – V. 5, No. 2.– P. 203–207.
56. Single-electron transistor of a single organic molecule with access to several redox states / S. Kubatkin, A. Danilov, M. Hjort // *Nature*. – 2003. – V. 425, No. 6959. – P. 698–701.
57. Vibrational instability due to coherent tunneling of electrons / D. Fedorets, L.Y. Gorelik, R.I. Shekhter [et al.] // *Europhys. Lett.* – 2002. – V. 58, No.1. – P. 99–104.

58. Franck–Condon blockade in a single-molecule transistor / E. Burzuri, Y. Yamamoto, M. Warnock [et al.] // *Nano Letters*. – 2014.– V. 14, No. 6. – P. 3191–3196.
59. Gating a single-molecule transistor with individual atoms / J. Martínez-Blanco, C. Nacci, S. Erwin [et al.] // *Nature Physics*. – 2015. – V. 11, No. 8. – P. 640–644.
60. Interplay of magneto-elastic and polaronic effects in electronic transport through suspended carbon-nanotube quantum dots / G. Rastelli, M. Houzet, L. Glazman [et al.] // *Comptes Rendus Physique*. – 2012. – V. 13, No. 5. – P. 410–425.
61. New class of materials: Half-metallic ferromagnets / R.A. de Groot, F.M. Mueller, P.G. van Engen [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 1983. – V. 50, No. 25. – P. 2024–2027.
62. Efficient spin injection into GaAs quantum well across Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> spin filter / E. Wada, K. Watanabe, Y. Shirahata [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 2010. – V. 96. – P. 102510-1–102510-3.
63. Coulomb promotion of spin-dependent tunneling / L.Y. Gorelik, S.I. Kulinich, R.I. Shekhter [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – V. 95, No. 11. – P. 116806-1–116806-4.
64. Weiss S. Spin-vibronics in interacting nonmagnetic molecular nanojunctions / S. Weiss, J. Brüggemann, M. Thorwart // *Phys. Rev. B*. – 2015. – V. 92, No. 4. – P. 045431-1–045431-9.
65. Nanomechanical electron shuttle consisting of a gold nanoparticle embedded within the gap between two gold electrodes / A.V. Moskalenko, S.N. Gordeev, O.F. Koentjoro [et al.] // *Phys. Rev. B*. – 2009. – V. 79, No. 24. – P. 241403-1–241403 - 4.
66. Nanomechanical resonator shuttling single electrons at radio frequencies / A. Erbe, C. Weiss, W. Zwerger [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – V. 87, No. 9. – P. 096106-1–096106-4.
67. Pistolesi F. Full counting statistics of a charge shuttle / F. Pistolesi // *Phys. Rev. B*. – 2004. – V. 69, No. 24. – P. 245409-1–245409-8.

68. Spin-controlled nanoelectromechanics in magnetic NEM-SET systems / L.Y. Gorelik, D. Fedorets, R.I. Shekhter [et al.] // *New J. Phys.* – 2005. – V. 7. – P. 242-1–242-21.
69. Magnetically controlled single-electron shuttle / O.A. Ilinskaya, S.I. Kulinich, I.V. Krive [et al.] // *Low Temp. Phys.* – 2015. – V. 41, No. 1. – P. 70–75.
70. Single electron shuttle based on electron spin / S.I. Kulinich, L.Y. Gorelik, A.N. Kalinenko [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2014. – V. 112, No. 11. – P. 117206-1–117206-5.
71. The Kondo effect in the presence of ferromagnetism / A. Pasupathy, R. Bialeczak, J. Martinek [et al.] // *Science.* – 2004. – V. 306, No. 5693. – P. 86–89.
72. Shuttling of spin-polarized electrons in molecular transistors / O.A. Ilinskaya, S.I. Kulinich, I.V. Krive [et al.] // *Synthetic Metals.* – 2016. – V. 216. – P. 83–87.
73. Coulomb-promoted spintromechanics in magnetic shuttle devices / O.A. Ilinskaya, D. Radic, H.C. Park [et al.] // *Phys. Rev. B.* – 2019. – V. 100, No. 4. – P. 045408-1–045408-8.
74. Mechanically induced thermal breakdown in magnetic shuttle structures / O.A. Ilinskaya, S.I. Kulinich, I.V. Krive [et al.] // *New J. Phys.* – 2018. – V. 20. – P. 063036-1–063036-11.
75. Resonant tunneling of electrons in quantum wires / I.V. Krive, A. Palevski, R.I. Shekhter [et al.] // *Low Temp. Phys.* – 2010. – V. 36, No. 2. – P. 119–141.
76. Theory of scanning tunneling spectroscopy of fullerene peapods / C. L. Kane, E. J. Mele, A. T. Johnson [et al.] // *Phys. Rev. B.* – 2002. – V. 66, No. 23. – P. 235423-1–235423-15.
77. Peierls R.E. *Quantum theory of solids* / R. E. Peierls – New York: Oxford University Press. – 1995. – 238 p.
78. Voit J. Electron-phonon interaction and phonon dynamics in one-dimensional conductors: Spinless fermions / J. Voit and H. J. Shulz // *Phys. Rev. B.* – 1987. – V. 36, No. 2. – P. 968–979.
79. Saito R. *Physical Properties of Carbon Nanotubes* / R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus // London: Imperial College Press. – 1998. – 272 p.

80. Loss D. Wentzel-Bardeen singularity and phase diagram for interacting electrons coupled to acoustic phonons in one dimension / D. Loss, Th. Martin // *Phys. Rev. B.* – 1994. – V. 50, No. 16. – P. 12160–12163.
81. Krive I.V. The mechanism of nonlinear conductivity and electrodynamics of the quasi-one-dimensional conductors in the Peierls insulator state / I.V. Krive, A.S. Rozhavsky, I.O. Kulik // *Sov. J. Low Temp. Phys.* – 1986. – V. 12, No. 11. – P. 635–677.
82. Krive I.V. Fractional charge in quantum field theory and solid-state physics / I.V. Krive, A.S. Rozhavskii // *Sov. Phys. Usp.* – 1987. – V. 30, No. 5. – P. 370–392.
83. Mahan G.D. *Many-Particle Physics*, 2-nd ed. / G. D. Mahan // New York: Plenum Press. – 1990. – 785 p.

**ДОДАТОК А**  
**СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ**

1. Low-energy anomalies in electron tunneling through strongly asymmetric Majorana nanowire / **A.D. Shkop**, A.V. Parafilo, I.V. Krive, R.I. Shekhter // *Low Temp. Phys.* – 2016. – V. 42, No. 4. – P. 308–312.
2. Индуцированная взаимодействием щель в спектре электронов и киральные эффекты в металлических углеродных нанотрубках / **А.Д. Шкоп**, С.И. Кулинич, А.В. Парафило, И.В. Криве // *ФНТ.* – 2017. – Т. 43, № 12. – С. 1745–1753.
3. **Shkop A.D.** Effects of the Franck-Condon blockade in tunneling of spin-polarized electrons in a molecular transistor / **A.D. Shkop**, O.M. Bahrova // *Вісник ХНУ, серія «Фізика».* – 2017. – № 27. – С. 53–58.
4. Coulomb effects on thermally induced shuttling of spin-polarized electrons / O.A. Ilinskaya, **A.D. Shkop**, D. Radic, H.C. Park, I.V. Krive, R.I. Shekhter, M. Jonson // *ФНТ.* – 2019. – Т. 45, № 9. – С. 1208–1216.
5. Interplay of vibration and Coulomb effects in transport of spin-polarized electrons in a single-molecule transistor / **A.D. Shkop**, O.M. Bahrova, S.I. Kulinich, I.V. Krive // *Superlattices and Microstructures.* – 2020. – V. 137, No. 1. – P. 106356-1–106356-11.
6. **Shkop A.D.** Manifestation of the Majorana fermions in transport through asymmetric single-charge transistor / **A.D. Shkop**, A.V. Parafilo // VI International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 2 – 5, 2015: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2015. – P. 31.
7. **Шкоп А.Д.** Низкоэнергетическая аномалия в электронном транспорте через квантовый дот с майорановскими фермионами / **А.Д. Шкоп**, А.В. Парафило, И.В. Криве // XII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах», 1 – 4 грудня, 2015: тези доповідей. – Україна, Харків, 2015. – С. 50.
8. **Shkop A.D.** Interaction-induced gap and chiral effects in single-wall carbon nanotube / **A.D. Shkop**, S.I. Kulinich, I.V. Krive // VIII International Conference

- for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, May 29 – June 2, 2017: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2017. – P. 57.
9. Can acoustic phonons generate energy gap in 1D metallic systems? / **A.D. Shkop**, S.I. Kulinich, A.V. Parafilo, I.V. Krive // XIII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» присвячена 100-річчю з дня народження академіка І.М. Ліфшиця, 5 – 8 грудня, 2017: тези доповідей. – Україна, Харків, 2017. – С. 108.
  10. Bahrova O.M. Effects of Franck-Condon blockade in tunneling of spin-polarized electrons in a molecular transistor / O.M. Bahrova, **A.D. Shkop** // XIII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» присвячена 100-річчю з дня народження академіка І.М. Ліфшиця, 5 – 8 грудня, 2017: тези доповідей. – Україна, Харків, 2017. – С. 97.
  11. **Shkop A.D.** Effects of magnetopolaronic blockade in transport of spin-polarized electrons / **A.D. Shkop**, O.M. Bahrova // IX International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 4 – 8, 2018: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2018. – P. 185.
  12. **Shkop A.D.** Effects of Coulomb interaction and Franck-Condon blockade in tunneling of spin-polarized electrons in a molecular transistor / **A.D. Shkop**, O.M. Bahrova, I.V. Krive // X International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics”, June 3 – 7, 2019: book of abstr. – Ukraine, Kharkiv, 2019. – P. 155.
  13. Ilinskaya O.A. Coulomb effects in a thermally driven magnetic shuttle / O.A. Ilinskaya, **A.D. Shkop**, I.V. Krive // VII International Conference “Nanotechnology and Nanomaterials”, August 27 – 30, 2019: book of abstr. – Ukraine, Lviv, 2019. – P. 562.

**ДОДАТОК Б****ВІДОМОСТІ ПРО АПРОБАЦІЮ РЕЗУЛЬТАТІВ ДИСЕРТАЦІЇ**

- 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);
- Conference on Interactions and Topology in Dirac Systems (Trieste, Italy, August 3 – 9, 2016)
- VIII International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, May 29 – June 2, 2017);
- XIII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» присвячена 100-річчю з дня народження академіка І.М. Ліфшиця (Харків, Україна, 5 – 8 грудня, 2017);
- IX International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, June 4 – 8, 2018);
- X International Conference for Professionals & Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, June 3 – 7, 2019);
- VII International Conference “Nanotechnology and Nanomaterials” (Lviv, Ukraine, August 27 – 30, 2019).