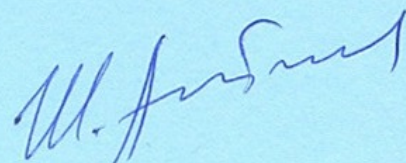


НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР
імені Б.І. Веркіна

ШКОП Анастасія Дмитрівна,



УДК 538.93

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

01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Харків – 2020

Дисертацією є рукопис.

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

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

Офіційні опоненти: член-кореспондент НАН України,
доктор фізико-математичних наук, професор
Ямпольський Валерій Олександрович,
Інститут радіофізики та електроніки
імені О. Я. Усикова НАН України,
головний науковий співробітник
відділу теоретичної фізики;

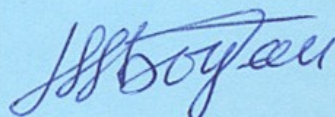
кандидат фізико-математичних наук, доцент
Рашба Георгій Ілліч,
Харківський національний університет
імені В.Н. Каразіна МОН України,
виконуючий обов'язки завідувача кафедри
теоретичної фізики імені академіка І.М. Ліфшиця.

Захист відбудеться «07» серпня 2020 року о 15⁰⁰ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 64.175.02 при Фізико-технічному інституті низьких температур імені Б.І. Веркіна НАН України за адресою: 61103, м. Харків, проспект Науки, 47.

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

Автореферат розісланий «04» червня 2020 року.

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

 Богдан М.М.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

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 нанодруту 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-віброна взаємодія. В спітронному 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 спітронному молекулярному транзисторі можливе термоіндуковане магнітнокерване 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 магнітокерованого 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 магнітокерованого 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 магнітокерованого 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] та в 8 тезах доповідей конференцій [6 – 13].

Структура дисертації. Дисертація складається з анотацій, вступу, оглядового розділу, чотирьох оригінальних розділів, висновків і списку використаних джерел і додатків. Загальний обсяг дисертації становить 135 сторінок, містить 25 рисунків і список використаних джерел з 83 найменувань на 9 сторінках.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ ДИСЕРТАЦІЇ

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

У **вступі** наведено обґрунтування актуальності проблеми, сформульовані мета і завдання досліджень, наведені основні отримані автором наукові

результати, визначена їх новизна і практичне значення, наведені дані щодо апробації та публікації результатів досліджень.

У **першому розділі** «Транспорт взаємодіючих електронів у наноструктурах (огляд)» наданий огляд наукової літератури з тематики дисертації. Введено поняття майоранівських зв'язаних станів. Описано характеристики тунельного транспорту через майоранівські зв'язані стани для систем, симетричних за зв'язками з електродами. Обговорено транспортні характеристики електронів у металевих одношарових вуглецевих нанотрубках при представленні системи електронів як латтінжеровської рідини, наведено приклад використання методу ренормгрупи для пошуку коефіцієнту проходження бар'єру. Введено поняття одноелектронного молекулярного транзистору та надано визначення вібронного режиму та режиму шатлювання. Описано властивості системи з сильним електрон-вібронним зв'язком, зокрема, поляронний зсув, непружні канали тунелювання, сходинки струму, блокаду Франка-Кондона. Обговорено найбільш значні експерименти в цій галузі. Обґрунтована необхідність дослідження молекулярного транзистору зі спінополяризованими електронами в зовнішньому магнітному полі як ще маловивченої моделі. Обговорено механізм магнітного шатлу.

Обґрунтовано інтерес до задач, вирішених у даній дисертаційній роботі: дослідження особливостей транспортних характеристик нанотрубок та молекулярних транзисторів за наявності електрон-електронної та електрон-вібронної взаємодії.

У **другому розділі** «Низькоенергетичні аномалії при тунелюванні електронів крізь сильно асиметричний майоранівський нанодріт» вивчається система контактів «метал–майоранівський нанодріт–метал» (рис. 1). Майоранівський нанодріт – це топологічний надпровідник, сформований на основі квантового дроту, що розташований на поверхні надпровідника. На кінцях нанодроту утворюється пара майоранівських зв'язаних станів (МЗС) – квазічастинкових станів з енергією нижче надпровідникової щілини.

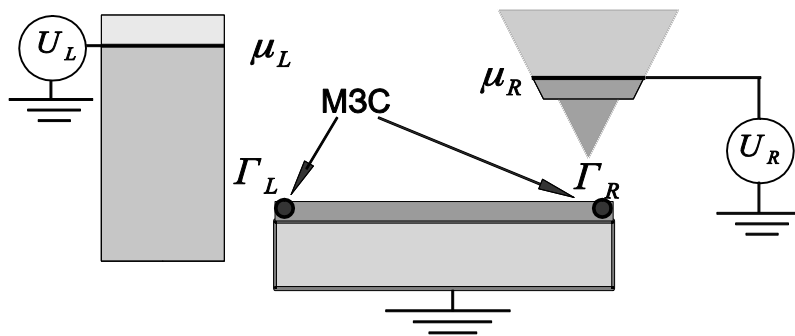


Рис. 1. Система контактів з майоранівським нанодротом.

Повний гамільтоніан складається з трьох доданків $\hat{H} = \hat{H}_l + \hat{H}_M + \hat{H}_t$, де

$$\hat{H}_l = \sum_{k,\alpha} \varepsilon_{k,\alpha} c_{k,\alpha}^+ c_{k,\alpha} \quad (1)$$

– гамільтоніан електронів в електродах, $c_{k,\alpha}^+$ – оператор народження електрону з

імпульсом k та енергією $\varepsilon_{k,\alpha}$ в електроді $\alpha = (L, R)$. Майоранівські зв'язані стани γ_1 та γ_2 описуються ефективним гамільтоніаном

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

де ε_M – енергія, на яку розщеплені два майоранівських стани. Тунельний гамільтоніан має вигляд

$$\hat{H}_t = \sum_{k,\alpha} \mathcal{V}_{k,\alpha} c_{k,\alpha}^+ \gamma_\alpha + \text{H.c.}, \quad (3)$$

де $\mathcal{V}_{L(R)} = \mathcal{V}_{1(2)}$. $\mathcal{V}_{k,\alpha}$ – ефективні тунельні амплітуди, таким чином тунельний зв'язок з електродом α характеризується тунельною шириною рівня $\Gamma_\alpha = \sum 2\pi \delta(\varepsilon - \varepsilon_{k,\alpha}) |\mathcal{V}_{k,\alpha}|^2$. Методом рівнянь руху отримано вираз для середнього струму у вигляді

$$I_\alpha = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \mathcal{T}_\alpha(\varepsilon) \tanh\left(\frac{\mu_\alpha - \varepsilon}{2T}\right), \quad (4)$$

де e – елементарний заряд, T – температура електродів ($k_B = 1$), ε – енергія та $\mu_\alpha = eV_\alpha$ – хімпотенціал, що рахуються від рівня енергії Фермі електродів, V_α – напруга в електроді α . Коефіцієнт проходження $\mathcal{T}_\alpha(\varepsilon)$ має вигляд

$$\mathcal{T}_\alpha(\varepsilon) = \frac{4(4\Gamma_L^2\Gamma_R^2 + \Gamma_\alpha^2\varepsilon^2 + \Gamma_L\Gamma_R\varepsilon_M^2)}{\varepsilon^4 + 4\varepsilon^2(\Gamma_L^2 + \Gamma_R^2) + (4\Gamma_L\Gamma_R)^2 + \varepsilon_M^2(\varepsilon_M^2 - 2\{\varepsilon^2 - 4\Gamma_L\Gamma_R\})}. \quad (5)$$

Обчислено, по-перше, електричний струм та кондуктанс системи «метал–заземлений майоранівський нанодріт–метал», асиметричної за тунельними зв'язками, $\Gamma_L \neq \Gamma_R$. Систему розглянуто під дією тягнучої напруги V , коли струм з правого електроду дорівнює нулю, $I_R = 0$, а струм з лівого електроду дорівнює струму «в землю», $I_L = I_G = I(V)$.

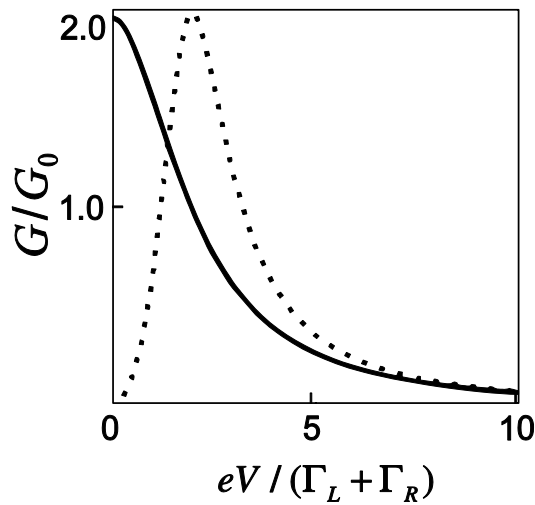


Рис. 2. Залежність диференціального кондуктансу системи «метал–заземлений майоранівський нанодріт–метал» від напруги при різних значеннях розщеплення ε_M .

Показано, що за наявності розщеплення пари майоранівських станів, $\varepsilon_M \neq 0$, в сильно асиметричній системі диференціальний кондуктанс досягає максимуму при нульовій напрузі. Максимум становить два кванти кондуктансу, $G(0) \rightarrow 2G_0$, де $G_0 = e^2 / (2\pi\hbar)$ (рис. 2). Ефект має місце при великих значеннях тунельної ширини другого контакту $\Gamma_R \gg \Gamma_L$, такому, що $\varepsilon_M \ll \sqrt{\Gamma_L \Gamma_R}$. Максимум кондуктансу (пік в кондуктансі) при нульовій напрузі використовується експериментаторами для виявлення майоранівських ферміонів, але відомо, що за наявності розщеплення він зміщується в область більших напруг в симетричній системі та в системі «метал–заземлений майоранівський нанодріт».

Розглянуто також іншу модель експериментального пристрою – систему «метал–незаземлений майоранівський нанодріт–метал», і знайдено струм, що протікає під дією тягнучої напруги V , такої, що $\mu_L - \mu_R = eV$. У випадку сильної асиметрії (для визначеності, $\Gamma_L \gg \Gamma_R$) за низьких температур, при $\varepsilon_M = 0$ аналітично знайдено струм через систему у вигляді

$$I(V) = \frac{2}{\pi} \frac{e\Gamma_R}{\hbar} \arctan\left(\frac{eV}{2\Gamma_R}\right). \quad (6)$$

Криві, отримані за загальною формулою для струму (4), в тому числі для ненульових значень ε_M , представлені на рис. 3.

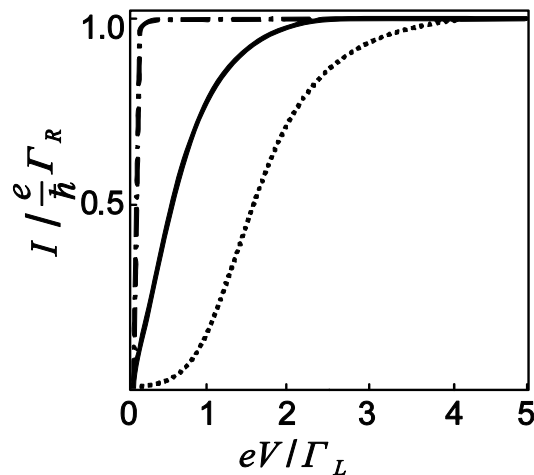


Рис. 3. Вольт-амперні характеристики системи «метал–незаземлений майоранівський нанодріт–метал» при різних значеннях розщеплення ε_M .

Струм насичується до свого максимального значення при напругах порядку меншої ширини рівня, $eV_s \approx \Gamma_R$, що набагато менше, ніж напруга насичення при резонансному електронному тунелюванні в асиметричній системі без майоранівських станів. Знайдені ефекти дозволяють виявляти майоранівські стани в тунельних експериментах.

У **третьому розділі** «Індукована взаємодією щілина в спектрі електронів та хіральні ефекти в металевих вуглецевих нанотрубках» вивчається вплив електрон-фононої та електрон-електронної взаємодії на спектр та транспортні

характеристики електронів у металевих одношарових вуглецевих нанотрубках. Кут хіральності θ характеризує спосіб згортання графена. Покладено, що куту $\theta=0$ відповідає нанотрубка типу «крісло», а $\theta=\pi/6$ – нанотрубка типу «зигзаг». В межах однієї енергетичної долини електрони описуються гамільтоніаном

$$\hat{H}^{(+)} = \hbar v_F \hat{\sigma}_1 \hat{k}_x, \quad (7)$$

якщо залежність від кута хіральності унітарним перетворенням перенесена до гамільтоніану електрон-фононої взаємодії. Тут і далі через $\hat{\sigma}_j, j=1,2$ позначено матриці Паулі, $\hat{k}_x = -i\partial/\partial x$, вісь x направлена вздовж вісі нанотрубки, v_F – швидкість Фермі. Гамільтоніан електрон-фононої взаємодії (у відповідній долині) для вуглецевих нанотрбок має матричний вигляд

$$\hat{H}_{e-ph} = \begin{pmatrix} V_1 & V_2 \\ V_2^* & V_1 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

де недиагональні матричні елементи потенціалу залежать, зокрема, від кута хіральності θ , а саме: $V_2 \sim e^{i\theta}$.

Отримано, що в спектрі електронів утворюється щілина пайєрлсівської природи, яка формується в стаціонарному полі зміщень за рахунок електрон-фононої взаємодії. Мінімізуючи повну енергію системи, отримуємо вираз для енергетичної щілини. Вона експоненціально залежить від енергії електрон-фононої взаємодії та не залежить від кута хіральності.

Показано, що електрон-електронна взаємодія, індукована в такій системі в другому порядку теорії збурень за константою зв'язку, теж має матричний вигляд та приводить до появи щілини в спектрі діраківських електронів. Потенціал електрон-електронної взаємодії залежатиме від параметрів нанотрубки, зокрема, від модулів пружності, ефективного хірального кута $\xi \sim \theta$ та квадрату амплітуди нульових коливань. Для згинальних коливань підвішеної нанотрубки ця величина пропорційна довжині трубки та може досягати значних величин для віброуючих нанотрбок, що реалізовані в експериментах.

Щілину в спектрі, зумовлену електрон-електронними кореляціями, знайдено з використанням рівняння Хартрі-Фока виду

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(+)} |\Psi(x)\rangle + \int dx' \hat{W}(x-x') |\Psi(x)\rangle \sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(x') | \Psi_{\kappa}(x') \rangle - \\ - \int dx' \hat{W}(x-x') |\Psi(x')\rangle \sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(x') | \Psi_{\kappa}(x) \rangle = \hat{E} |\Psi(x)\rangle, \end{aligned} \quad (9)$$

з гамільтоніаном $\hat{H}^{(+)}$, що відповідає (7). Хвильові функції $|\Psi_{\kappa}(x)\rangle$ – розв'язки вільного гамільтоніану, вони мають індекс стану $\kappa = (k, s)$, з $s=1,2$, та де k – хвильовий вектор. Позначено $|\Psi(x)\rangle = \sum_s |\Psi_{\kappa}(x)\rangle$. В (9) $\hat{W}(x-x')$ – потенціал парної електрон-електронної взаємодії, що залежить від відстані між частинками. Він має, зокрема, доданки виду $W_2(x-x') \hat{\sigma}_2$ – недиагональні компоненти, що визначаються знайденою величиною потенціалу електрон-електронної взаємодії.

Нанотрубка вважається допованою до енергії $E_0 = \hbar v_F K$, де K – відповідний хвильовий вектор. Отримано вираз для щілини, який має вигляд

$$\Delta(k) = \int d\tilde{x} [F(0) - F(\tilde{x}) \cos k\tilde{x}] W_2(\tilde{x}), \quad (10)$$

де

$$\sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(x') | \Psi_{\kappa}(x) \rangle \approx \frac{2 \sin(K[x - x'])}{x - x'} \equiv F(x - x'). \quad (11)$$

Як відомо, поява щілини в спектрі носіїв заряду порушує умови для парадоксу Клейна (проходження електростатичних потенціалів без розсіювання назад). Розглянуто тунелювання через локальний електростатичний бар'єр в нанотрубці. З рівняння Хартрі-Фока з розсіювачем при подальшому застосуванні методу ренормгрупи отримано вираз для коефіцієнту проходження, перенормованого електрон-електронними кореляціями, у вигляді

$$\mathcal{T} = \frac{\mathcal{T}_0 (\Delta_0 / D_0)^{2\alpha(K)}}{1 - \mathcal{T}_0 + \mathcal{T}_0 (\Delta_0 / D_0)^{2\alpha(K)}}, \quad (12)$$

де \mathcal{T}_0 – затравочний коефіцієнт проходження потенціального бар'єру для електронів зі щілиною в спектрі. В (12) $\alpha(K)$ – ефективна константа електрон-електронної взаємодії, така що

$$\alpha(K) = \frac{\Delta_0 K}{E_0^2} [\Phi(0) - \Phi(2K)], \quad (13)$$

а функція $\Phi(k)$ – це Фур'є-образ потенціалу взаємодії,

$$\Phi(k) = \frac{\Delta_0}{E_0} \int d\tilde{x} e^{ik\tilde{x}} W_0(\tilde{x}) + \int d\tilde{x} e^{ik\tilde{x}} W_2(\tilde{x}), \quad (14)$$

Позначено $\Delta_0 = \Delta(K)$, $D_0 = \hbar v_F / 2d$ – характерний енергетичний масштаб потенціалу розсіяння, d – просторовий розмір потенціалу розсіювання, $W_0(\tilde{x})$ – діагональні матричні елементи потенціалу $\hat{W}(\tilde{x})$. Коефіцієнт проходження залежить від хірального кута завдяки залежності $W_2(\tilde{x}) \sim \sin \xi$, що зумовлює явище хірального тунелювання. Зокрема, при $\xi = 0$ величина щілини дорівнює нулю, $\Delta_0 = 0$, тоді $\alpha(K) = 0$, і отримуємо, що $\mathcal{T} \rightarrow \mathcal{T}_0$, який за цих умов прямує до 1. Таким чином, при певній хіральності перенормування відсутнє і в системі має місце парадокс Клейна.

У **четвертому розділі** «Ефекти електрон-вібронаї та кулонівської взаємодії при тунелюванні спін-поляризованих електронів в молекулярному транзисторі» розглянуто транспорт заряду та спіну в спінтронному молекулярному транзисторі. Молекула, що представлена як вібруюча квантова точка, розташована між двома магнітними електродами, що повністю поляризовані за спіном в протилежних напрямках (рис. 4). На рисунку границі затемнених областей в електродах визначають хімпотенціали, V – тягнуча напруга, ε_F – рівень Фермі електродів. Перпендикулярно площині векторів намагніченості електродів прикладене зовнішнє магнітне поле \vec{H} , яке викликає

перевороту спіну на квантовій точці. В системі має місце «спінова блокада» струму за відсутності зовнішнього магнітного поля.

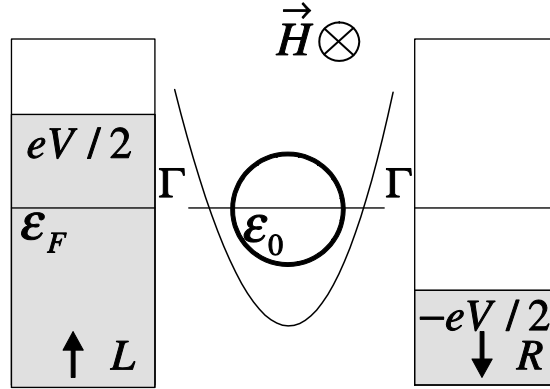


Рис. 4. Ескіз моделі молекулярного транзистора зі спин-поляризованими електродами.

Гамільтоніан системи після двох унітарних перетворень, що дозволяють виключити гамільтоніан електрон-вібронаї взаємодії та гамільтоніан електронів в магнітному полі, набуває вигляду: $\hat{H} = \hat{H}_l + \hat{H}_d + \hat{H}_v + \hat{H}_t$. Тут \hat{H}_l – гамільтоніан електронів в електродах, що збігається з тим, що зустрічався в другому розділі, при цьому індекс електроду при повній спіновій поляризації відповідає спіновому індексу. Гамільтоніан квантової точки \hat{H}_d має вигляд

$$\hat{H}_d = \sum_{s=1,2} \varepsilon_s a_s^+ a_s + (U - 2\lambda^2 \hbar \omega) a_1^+ a_1 a_2^+ a_2, \quad (15)$$

де $a_1 = (1/\sqrt{2})(d_\uparrow + d_\downarrow)$, $a_2 = (1/\sqrt{2})(d_\uparrow - d_\downarrow)$ – це комбінації початкових операторів d_σ знищення електронного стану з енергією ε_0 та проекцією спіну $\sigma = \uparrow, \downarrow$ на квантовій точці. Рівень на квантовій точці розщеплюється на два, $\varepsilon_s = \varepsilon_d + j_s \hbar / 2$, $j_s = \pm 1$, $s = 1, 2$, де введено позначення для магнітного поля в енергетичних одиницях $\hbar = g \mu_B H$, g – гіромагнітне відношення, μ_B – магнетон Бора. ε_d – це енергія електрона на квантовій точці, перенормована електрон-вібронаю взаємодією, $\varepsilon_d = \varepsilon_0 - \lambda^2 \hbar \omega$. Тут $\lambda = \varepsilon_{int} / \hbar \omega$ – константа електрон-вібронаї взаємодії, характерна енергія якої ε_{int} , а ω – частота коливань точки. U – енергія кулонівської взаємодії. Після унітарних перетворень кулонівська енергія також перенормовується. Зауважимо, що далі використовується те саме позначення для перенормованої величини, тобто $U - 2\lambda^2 \hbar \omega$ замінюється на U (невід’ємне).

Гамільтоніан \hat{H}_v , що описує віброну підсистему на квантовій точці, відповідає гамільтоніану гармонічного осцилятора

$$\hat{H}_v = \hbar \omega b^+ b, \quad (16)$$

де b^+ – оператор народження бозонного стану на точці.

Тунельний гамільтоніан при повній поляризації електродів після перетворення набуває вигляду

$$\hat{H}_t = \frac{t_0}{\sqrt{2}} \sum_{k,\alpha} \exp\{-\lambda(b^+ - b)\} c_{k,\alpha}^+ (j_\alpha a_1 + a_2) + \text{H.c.}, \quad (17)$$

де t_0 – тунельна амплітуда (однакова для обох контактів у симетричній системі), $j_\alpha = \pm 1$. Для довільних значень U методом матриці густини в теорії збурень за $\Gamma \ll \max\{T, eV\}$ ($\Gamma = 2\pi v_F |t_0|^2$ – ширина рівня енергії на точці, v_F – густина станів на рівні Фермі, T – температура системи), знайдено струм у спінтронному молекулярному транзисторі. Матриця густини системи факторизується на матрицю густини електронів в електродах, електронів на квантовій точці та матрицю густини вібронної підсистеми. Матриця густини вібронної підсистеми вважається рівноважною, оскільки розглядається випадок, коли час релаксації вібронної підсистеми набагато менший за час одного акту тунелювання. Вираз для середнього струму має вигляд ($\hbar = 1$)

$$\frac{I}{I_0} = \frac{h^2}{h^2 + \Gamma^2 F^2} L, \quad (18)$$

де $I_0 = e\Gamma / 2$, а також позначено

$$\begin{aligned} L &= \rho_0[D_-(\varepsilon_1) + D_-(\varepsilon_2)] + \rho_1[C_-(\varepsilon_1) + D_-(\varepsilon_2 + U)] \\ &+ \rho_2[C_-(\varepsilon_2) + D_-(\varepsilon_1 + U)] + \rho_D[C_-(\varepsilon_1 + U) + C_-(\varepsilon_2 + U)], \\ F &= (F_1 + F_2) / 2, \\ F_{1,2} &= 1 - C_+(\varepsilon_{1,2}) + D_+(\varepsilon_{2,1} + U), \end{aligned} \quad (19)$$

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

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

Тут $\rho_{0,1,2,D}$ – матричні елементи матриці густини електронної підсистеми на квантовій точці, для яких з рівняння Ліувілля - фон Неймана знайдена система рівнянь. $f_{L,R}$ – функції розподілу Фермі-Дірака, функції A_n мають вигляд

$$A_n = \exp\{-\lambda^2(1 + 2n_B)\} I_n(z) \exp\{n\omega / 2T\}. \quad (20)$$

Тут $I_n(z)$ – модифіковані функції Бесселя першого роду, $z = 2\lambda^2 \sqrt{n_B(1 + n_B)}$, n_B – функція розподілу Бозе-Ейнштейна.

Аналітичні та чисельні розрахунки проведено для випадку, коли значення перенормованого рівня енергії на квантовій точці збігається з енергією Фермі в електродах, $\varepsilon_d - \varepsilon_F = 0$. Зокрема, в границі $U \rightarrow 0$, $T \rightarrow 0$ отримано вираз для струму при $eV \geq h$ у вигляді

$$\frac{I}{I_0} \simeq \frac{2K_+K_-}{K_+ + K_-} \left(\frac{h^2}{h^2 + \Gamma^2 K_+K_-} \right), \quad (21)$$

де

$$K_{\pm} = K(N_{\pm}) = \exp\{-\lambda^2\} \sum_{n=0}^{N_{\pm}} \frac{\lambda^{2n}}{n!}. \quad (22)$$

Тут $N_{\pm} = [(eV \pm h) / 2\omega]$, де символом [...] позначено цілу частину виразу. Поряд із можливістю пружного тунелювання, електрони можуть тунелювати непружно, випускаючи або поглинаючи віброни. Відповідно до відомих результатів, при низьких температурах при $\lambda \neq 0$ вольт-амперні характеристики мають вигляд ступінчастих функцій. Пригнічення струму в молекулярних транзисторах при низьких температурах отримало назву блокади Франка-Кондона.

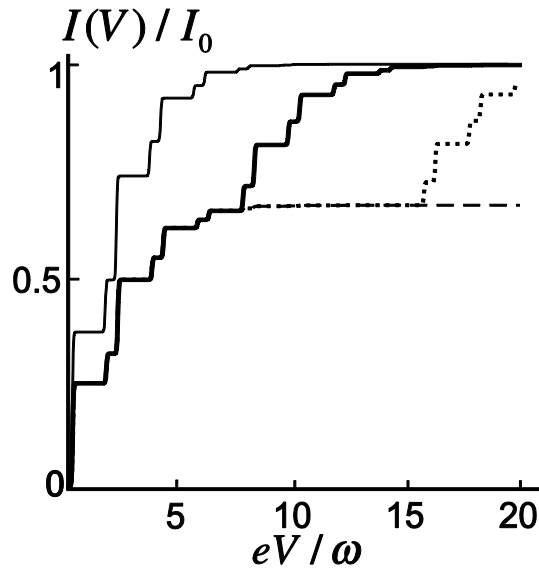


Рис. 5. Залежність струму від напруги для спітронного молекулярного транзистора при низьких температурах для різних значень енергії кулонівської взаємодії.

Чисельні розрахунки ілюструють знайдені ефекти. Передбачено подвоєння кількості сходинок струму – сходинок Франка-Кондона (рис. 5), порівняно зі звичайним молекулярним транзистором, через наявність в системі із зеєманівським розщепленням другого пружного каналу тунелювання. При сильній кулонівській взаємодії висота сходинок струму пригнічена (суцільна товста, короткопунктирна та пунктирна криві порівняно з суцільною тонкою кривою на рис. 5), а також на вольт-амперних характеристиках з'являються області без сходинок (короткопунктирна та пунктирна криві на рис. 5). Такі області мають місце і для системи в сильному зовнішньому магнітному полі. Ефекти зумовлені взаємодією процесів зняття блокади Франка-Кондона та кулонівської блокади тягнутою напругою. Виявлено, що зняття кулонівської блокади відбувається поетапно, так як наявні два пружні канали тунелювання другого електрону на квантову точку, і один з цих каналів відкривається раніше іншого за енергією.

Показано, що температурна залежність кондуктансу спітронного молекулярного транзистора при сильній електрон-вібронній взаємодії є

аномально немонотонною при середніх температурах в широкому діапазоні значень зовнішнього магнітного поля і для довільної кулонівської енергії (рис. 6, 7).

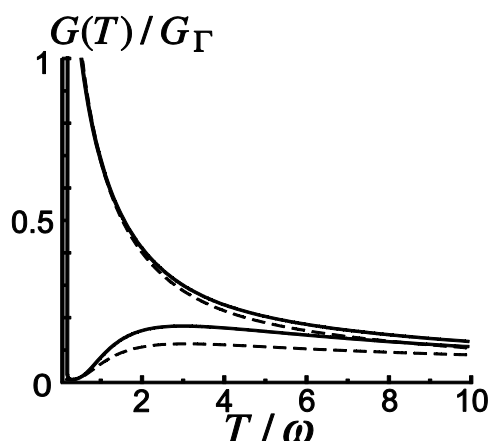


Рис. 6. Залежність кондуктансу спітронного молекулярного транзистора від температури при сильній (нижні криві) та слабкій (верхні криві) електрон-вібронній взаємодії при різних значеннях кулонівської енергії.

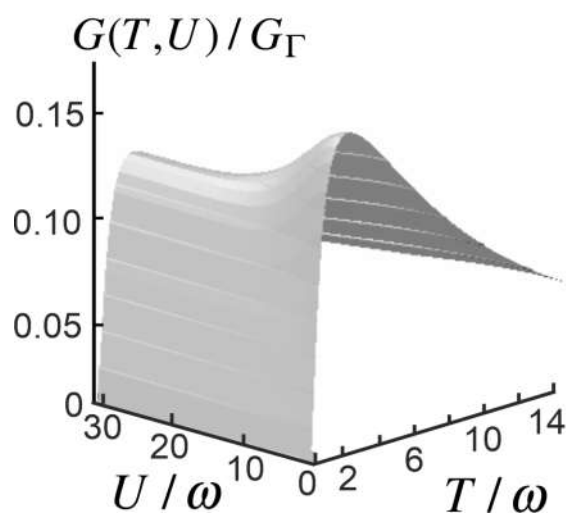


Рис. 7. Немонотонна поведінка температурної залежності кондуктансу в широкому діапазоні значень кулонівської енергії U .

При цьому величина аномального збільшення залежить від значення енергії кулонівської взаємодії (рис. 7), а також від величини зовнішнього магнітного поля.

У п'ятому розділі «Вплив електрон-електронної взаємодії на термоіндуковане шатлювання поляризованих за спіном електронів» досліджується виникнення термоіндукованого магнітокерованого човникового транспорту в спітронному молекулярному транзисторі. При термоіндукованому шатлюванні джерелом енергії служить не зовнішня напруга, а різниця температур електродів. Магнітний шатл зумовлений обмінною взаємодією між спіном електрону на квантовій точці та намагніченостями електродів. Модель пристрою за довільних температур електродів $T_L > T_R$ зображено на рис. 8, хімічні потенціали тримаються

однаковими і співпадають з ε_F , аналогічно до рис. 4 позначено напрямки поляризації електродів.

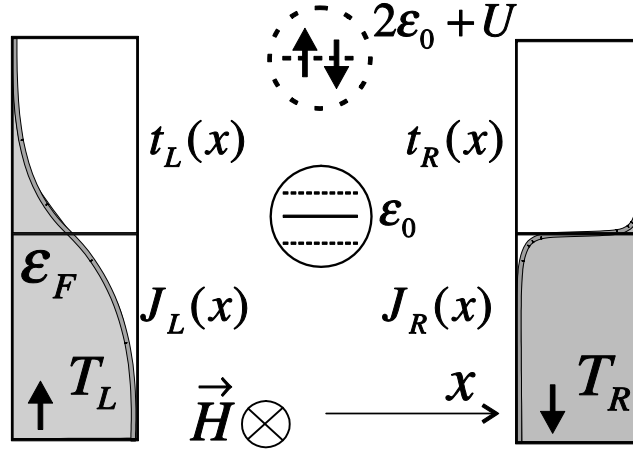


Рис. 8. Модель пристрою, де можливе термоіндуковане магнітне шатлювання.

Повний гамільтоніан системи складається з чотирьох доданків $\hat{H} = \hat{H}_l + \hat{H}_d + \hat{H}_v + \hat{H}_t$. Гамільтоніан електронів в електродах \hat{H}_l співпадає з введеним у четвертому розділі. Гамільтоніан квантової точки враховує вплив обмінних сил і має вигляд

$$\hat{H}_d = \left(\varepsilon_0 - \frac{J(\hat{X})}{2} \right) d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + \left(\varepsilon_0 + \frac{J(\hat{X})}{2} \right) d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - \frac{\hbar}{2} (d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow}) + U d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}, \quad (23)$$

де використано позначення, що застосовувались у формулі (15). Тут $J(\hat{X}) = J_L(\hat{X}) - J_R(\hat{X})$ – це залежна від зміщення квантової точки \hat{X} енергія обмінної взаємодії, що є різницею енергій взаємодії між спіном електрона на точці та намагніченістю L, R -електроду. Вібронний гамільтоніан в термінах операторів зміщення \hat{X} та імпульсу \hat{P} квантової точки матиме вигляд

$$\hat{H}_v = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \hat{X}^2, \quad (24)$$

де m – маса, а ω – частота коливань точки. Тунельний гамільтоніан має вигляд

$$\hat{H}_t = t_L(\hat{X}) \sum_k c_{k,L}^{\dagger} d_{\uparrow} + t_R(\hat{X}) \sum_k c_{k,R}^{\dagger} d_{\downarrow} + \text{H.c.}, \quad (25)$$

де залежність тунельної амплітуди від зміщення квантової точки моделюється експоненціальною функцією, $t_{L/R}(\hat{X}) = t_{L/R} \exp(\mp \hat{X} / 2l_t)$, де l_t – тунельна довжина. Зважаючи, що зміщення набагато перевищує амплітуду нульових коливань, \hat{X} та \hat{P} розглянуто як класичні змінні x та p , а положення ізольованої квантової точки вважається положенням рівноваги $x = 0$.

З використанням методу матриці густини в теорії збурень за параметром $\Gamma_{\alpha} / T_{\alpha} \ll 1$, де Γ_{α} – ширина рівня енергії на квантовій точці при тунелюванні з електроду $\alpha = (L, R)$, знайдено систему рівнянь для матричних елементів

матриці густини, що дозволяє обчислити рівняння руху для координати центру мас квантової точки

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = -\frac{1}{2m} \frac{\partial J(x)}{\partial x} (\rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}), \quad (26)$$

де матричні елементи ρ_{\uparrow} та ρ_{\downarrow} , що відповідають заповненню квантової точки електроном зі спіном \uparrow та \downarrow відповідно, є функціоналами координати.

Показано, що кулонівська взаємодія сприяє термоіндукованому магнітнокерованому шатлюванню. Чисельно знайдене критичне (порогове) значення енергії кулонівської взаємодії $U = U_c$, при якому відбувається перехід до режиму шатлювання, тобто коли замість коливань, що загасають, в системі мають місце коливання з великою амплітудою. Встановлено величини нижнього та верхнього критичних магнітних полів, h_{c1} та h_{c2} , які розділяють область коливань, що загасають, та шатлівську область, при різних значеннях кулонівської енергії.

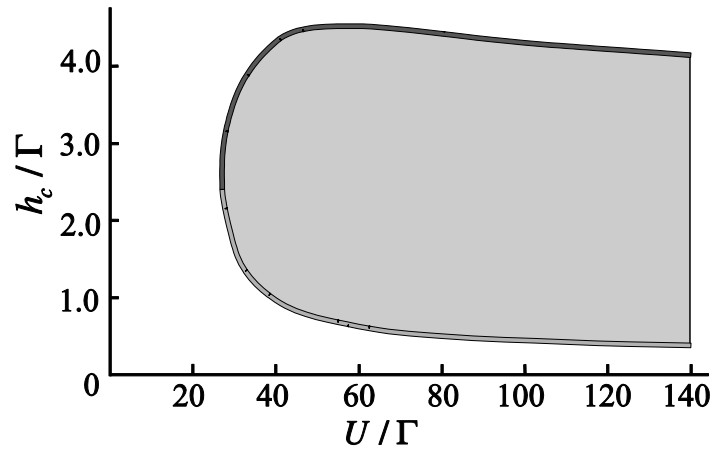


Рис. 9. Залежність критичних магнітних полів від кулонівської енергії.

На рис. 9 зображена чисельно знайдена залежність h_{c1} та h_{c2} від величини кулонівської взаємодії при фіксованій різниці температур $\delta T = T_L - T_R$ та середній температурі $T = (T_L + T_R) / 2$ у вигляді діаграми в осях h_c та U (режим шатлювання відповідає затемненій області). «Вікно» $\delta h_c = h_{c2} - h_{c1}$ слабо залежить від U аж до $U \approx T_L$, коли знімається кулонівська блокада та δh_c звужується до нуля. 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.

На рис. 10 представлені залежності значень верхнього та нижнього критичних магнітних полів від різниці температур δT (області, що відповідають шатлюванню – всередині кривих). Рисунок демонструє, що термоіндукований магнітний шатл – порогове явище за різницею температур електродів. Порогове

значення δT_{th} сильно залежить від значення механічної частоти коливань ω та середньої температури T .

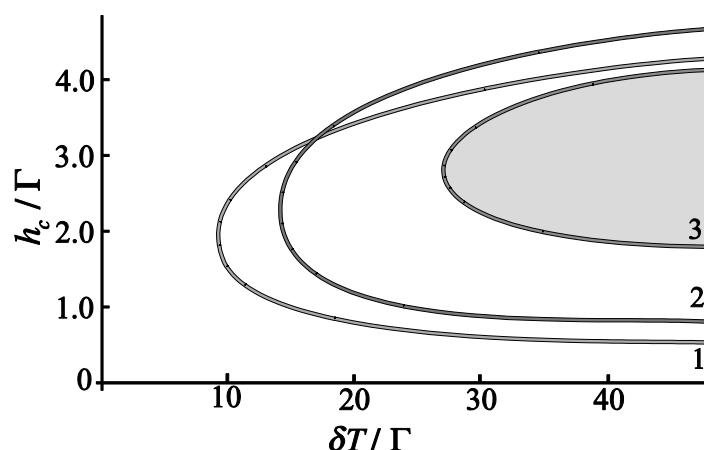


Рис. 10. Залежність критичних магнітних полів від різниці температур в електродах при різних значеннях частоти коливань квантової точки. Відповідно до номерів кривих, $\omega_1 < \omega_2 < \omega_3$.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішено важливу задачу в області теоретичної фізики, а саме: теоретично описано вплив електрон-електронної та електрон-вібрональної 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 тягнучою напругою.
5. Показано, що кондуктанс спітронного молекулярного транзистора при сильній електрон-вібрональній 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 спітронному молекулярному транзисторі та виявлено пороговий характер цього явища за параметрами величини кулонівської взаємодії, зовнішнього магнітного поля та різниці температур електродів.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ АВТОРОМ ПРАЦЬ 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. Pinskaya O.A. Coulomb effects in a thermally driven magnetic shuttle / O.A. Pinskaya, **A.D. Shkop**, I.V. Krive // VII International Conference “Nanotechnology and Nanomaterials”, August 27 – 30, 2019: book of abstr. – Ukraine, Lviv, 2019. – P. 562.

АНОТАЦІЯ

Шкоп А.Д. Ефекти електрон-електронної та електрон-вібронаї взаємодії в транспорті заряду та спіну в тунельних наноструктурах. – Рукопис.

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 транспорту електронів у вуглецевих нанотрубках та молекулярних транзисторах за наявності електрон-електронної та електрон-вібронаї взаємодії. Показано, що в системі контактів з майоранівським нанодротом, сильно асиметричній за тунельними зв'язками, кондуктанс досягає максимуму при нульовій напрузі. Знайдено, що в металевій одношаровій вуглецевій нанотрубці електрон-електронна взаємодія індукує щілину в спектрі носіїв заряду та зумовлює хіральне тунелювання. Визначено, що на вольт-амперних характеристиках спітронного молекулярного транзистора подвоюється кількість сходинок струму, а при сильній кулонівській взаємодії з'являються області без сходинок. Виявлено пороговий характер явища термоіндукованого магнітокерованого човникового транспорту у спітронному молекулярному транзисторі.

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

АННОТАЦИЯ

Шкоп А.Д. Эффекты электрон-электронного и электрон-вибронного взаимодействия в транспорте заряда и спина в туннельных наноструктурах. Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. – Физико-технический институт низких температур имени Б. И. Веркина НАН Украины, Харьков, 2020.

Диссертация посвящена теоретическому исследованию транспорта электронов в углеродных нанотрубках и молекулярных транзисторах при учете электрон-электронного и электрон-вибронного взаимодействия.

Найдены особенности тока и кондактанса, обусловленные сильной асимметрией по туннельным связям, для системы контактов с майорановским нанопроводом – топологическим сверхпроводником, в котором имеются внутрищелевые квазичастичные (майорановские) состояния. Показано, что для системы «металл–заземленный майорановский нанопровод–металл», сильно асимметричной по туннельным связям с электродами, при расщеплении пары майорановских состояний по энергии кондактанс достигает максимума при нулевом напряжении. Известно, что в системах с другой геометрией этот максимум, используемый для обнаружения майорановских состояний в эксперименте, при наличии расщепления смещается в область более высоких напряжений. Установлено, что ток через сильно асимметричную систему «металл–незаземленный майорановский нанопровод–металл» насыщается при более низких напряжениях, чем ток при резонансном электронном туннелировании в системе без майорановских состояний.

Показано, что при упругих деформациях металлической однослойной углеродной нанотрубки может возникать щель в спектре электронов за счет электрон-электронных корреляций, вызванных электрон-фононным взаимодействием. Для локального электростатического барьера в нанотрубке найден коэффициент прохождения, перенормированный электрон-электронными корреляциями. Получено, что коэффициент прохождения зависит от угла киральности нанотрубки, т. е. в системе имеет место киральное туннелирование.

Теоретически рассчитан ток и кондактанс для спинтронного молекулярного транзистора во внешнем магнитном поле, где вибрирующая молекула расположена между электродами, полностью поляризованными по спину в противоположных направлениях. Учтены кулоновские корреляции и электрон-вибронное взаимодействие, приводящее к блокаде Франка-Кондона при низких температурах. Получено, что количество ступенек тока (ступенек Франка-Кондона) на вольт-амперных характеристиках удваивается по сравнению с обычным молекулярным транзистором, что связано с удвоением количества упругих каналов туннелирования в системе с зеемановским расщеплением. Предсказано подавление высоты ступенек Франка-Кондона и

появление областей без ступенек при сильном кулоновском взаимодействии или в сильном внешнем магнитном поле. Эффекты являются следствием взаимовлияния процессов снятия блокады Франка-Кондона и кулоновской блокады тянущим напряжением. Установлено, что кулоновская блокада снимается поэтапно. Показано, что кондактанс спинтронного молекулярного транзистора при сильном электрон-вибронном взаимодействии немонотонно зависит от температуры в широком диапазоне значений внешнего магнитного поля и при произвольной энергии кулоновского взаимодействия.

Рассмотрена система, в которой возможно термоиндуцированное магнитноуправляемое шаттлирование электронов – челночный транспорт в спинтронном молекулярном транзисторе. Источником энергии при термоиндуцированном шаттлировании является не тянущее напряжение, а разность температур электродов. Магнитный шаттл обусловлен обменным взаимодействием между спином электрона на квантовой точке и намагниченностями электродов. Показано, что электрон-электронные корреляции способствуют термоиндуцированному магнитноуправляемому шаттлированию и предсказан пороговый характер этого явления по параметрам разности температур электродов, энергии кулоновского взаимодействия и величине внешнего магнитного поля.

Ключевые слова: кулоновское взаимодействие, электрон-вибронное взаимодействие, майорановские фермионы, киральное туннелирование, парадокс Клейна, молекулярный транзистор, блокада Франка-Кондона, электронный шаттл.

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, the NAS of Ukraine, Kharkiv, 2020.

The thesis is devoted to theoretical study of electron transport in carbon nanotubes and molecular transistors in presence of electron-electron and electron-vibron interaction. It has been shown that for the system of contacts with Majorana nanowire, strongly asymmetric in tunnel couplings, the zero-bias peak of conductance appears. It has been found that in metallic single-wall carbon nanotube the electron-electron interaction induces a gap in charge carriers' spectrum and causes the chiral tunneling. It has been determined that in the current-voltage characteristics of spintronic molecular transistor the number of current steps is doubled and the regions without steps appear for strong Coulomb interaction. It has been revealed that thermo-induced magnetic shuttling in spintronic molecular transistor is a threshold phenomenon.

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

Формат 60x84/16. Ум. друк. арк. 0.9. Тир. 100 прим. Зам. № 135-20.
Підписано до друку 01.06.2020. Папір офсетний.

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

СТИЛЬ ®
ИЗДАТ 
ТИПОГРАФИЯ
www.stil-izdat.com