

T 型耦合双量子点系统的非对等 Kondo 共振分裂传输 *

谌雄文^{1) 2)} 施振刚^{1) 2)} 谌宝菊¹⁾ 宋克慧^{1) 2)}

1) 怀化学院物理与电子信息科学系, 怀化 418008)

2) 怀化学院信息科学研究所, 怀化 418008)

(2007 年 7 月 3 日收到, 2007 年 9 月 4 日收到修改稿)

利用赝玻色子平均场近似理论,并借助于单杂质的 Anderson 模型的哈密顿量,研究了 T 型耦合双量子点嵌入正常电极的基态输运性质.结果表明:在体系处于平衡状态时,随着双量子点的耦合强度增加,体系的 Kondo 效应被削弱.当耦合强度足够强时,Kondo 量子点态密度的 Kondo 共振单峰分裂成两个不对等的 Kondo 共振双峰.在体系处于非平衡状态时,增加两电极的偏压,态密度的 Kondo 分裂的非对等性明显加强.

关键词:Kondo 效应,态密度,格林函数法,耦合双量子点

PACC:7215Q,7150,7115P,7335C

1. 引言

在强关联电子系统中,Kondo 效应^[1]的研究是一个热点课题.特别是纳米技术的进展大大激发了人们对 Kondo 效应的理论和实验研究,其中不同环境下的单量子点系统的 Kondo 效应就引起了人们浓厚的兴趣^[2-5].最近,人们对耦合双量子点系统的研究投入了更大的热情,这主要是由于双量子点系统比单量子点系统的物理特性更为丰富^[6-11].但这些研究多集中在两个量子点地位等同的串联双量子点系统和并联双量子点系统上,而关于 T 型耦合双量子点(T-DQD)系统研究的报道较少.由于 T-DQD 系统的两个量子点地位具有非对等性,因此,它们有许多新奇的物理性质.例如,Comaglia 等^[12]用重正化群理论研究了两个 Kondo 量子点组成的 T-DQD 嵌入电极系统,得到系统的电导与温度和外加磁场的非单调变化关系;Wu 等^[13]利用平均场理论研究了 T-DQD 中 Kondo 量子点嵌入电极的非平衡态的传输性质,得到了这个系统中 Kondo 效应和 Fano 效应共存且相互竞争.随着双量子点之间的耦合加强,Fano 效应将会压制 Kondo 效应.Güclü 等^[14]在 2003 年利用平均场近似理论研究了 T-DQD 系统中 Kondo 量

子点旁于多传输通道量子点嵌入电极系统的 Kondo 效应.他们得到了一些重要的性质:在保持双量子点之间的耦合强度大于非 Kondo 量子点与电极之间的耦合矩阵元的情况下,当体系只存在一个传输通道时,双量子点之间的 Kondo 散射可以完全压制体系的电子传输;当体系存在多个传输通道时,体系的电子传输又能够部分地恢复.文献[14]的模型是一个很有意思的模型.Silva 等^[15]在 2006 年利用重正化群方法研究了双量子点之间的耦合强度小于非 Kondo 量子点与电极之间的耦合矩阵元且 Kondo 量子点中存在大库仑排斥作用情况下的 Kondo 效应,得到了随着双量子点之间的耦合强度的增加,Kondo 量子点的态密度(DOS)的 Kondo 单峰分裂成两个间距明显等值的 Kondo 双峰.由此可见,这个模型在不同的环境中有许多新奇的性质.在本文中,我们利用平均场近似理论研究了在这个模型在 Kondo 量子点中的库仑排斥作用为无穷大且非 Kondo 量子点与电极之间存在较强耦合情况下的基态传输性质.我们也发现了一些新的性质:在体系处于平衡状态时,随着双量子点的耦合强度增加,体系的 Kondo 效应被削弱.当耦合强度足够强时,Kondo 量子点的 DOS 的 Kondo 共振单峰分裂成两个不对等的 Kondo 共振双峰,且随着双量子点的耦合强度增加,Kondo 共振双

* 湖南省自然科学基金(批准号 06JJ50014)湖南省教育厅科研基金重点项目(批准号 06A055)和怀化学院科学研究基金资助的课题.

† E-mail: hnsxw617@yahoo.com.cn

峰继续被压制,双峰距离明显变宽.在满足一定的条件下,减小 Kondo 量子点的能级, Kondo 分裂的非对称性被削弱.在体系处于非平衡状态情况下,增加电极的偏压, Kondo 分裂的非对称性被加强.

2. 系统的模型

系统的模型如图 1 所示,在我们的 T-DQD 系统中,量子点 QD1 没有直接和电极耦合,而它的能级 $\epsilon_1, \epsilon_1 + U_1$ (U_1 是量子点中的库仑排斥作用势)满足 $-\epsilon_1, \epsilon_1 + U_1 \gg 0$, 故 QD1 处于 Kondo 区,称为 Kondo 量子点. 量子点 QD2 是一个无相互作用的单能级量子点(量子点中的 $U_2 = 0$),其能级为 ϵ_2 ,它嵌入正常源电极和漏电极之间且保持较强的耦合隧穿. 这样处理可以使 QD1 通过与 QD2 的耦合间接与双电极形成 Kondo 关联,而产生 Kondo 效应^[15]. 取 $U_1 \rightarrow \infty$,系统的 Anderson 哈密顿量为^[13-15]

$$\begin{aligned} H = & \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k,\sigma} c_{k,\sigma}^+ c_{k,\sigma} \\ & + \sum_{\sigma} \epsilon_1 f_{\sigma}^+ f_{\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_2 d_{\sigma}^+ d_{\sigma} \\ & + \sum_{k,\sigma} (V_{\alpha} c_{k,\sigma}^+ d_{\sigma} + \text{H.C.}) \\ & + \frac{t_c}{\sqrt{N_{\sigma}}} \sum_{\sigma} (d_{\sigma}^+ b^+ f_{\sigma} + \text{H.C.}) \\ & + \lambda (b^+ b + \sum_{\sigma} f_{\sigma}^+ f_{\sigma} - 1), \end{aligned} \quad (1)$$

式中 $c_{k,\sigma}^+ (c_{k,\sigma})$ 是源电极 ($\alpha = \text{L}$) 和漏电极 ($\alpha = \text{R}$) 中量子数为 k 、自旋为 σ 的电子的产生(湮没)算符, $\epsilon_{k,\sigma}$ 是这些电子的能级, $d_{\sigma}^+ (d_{\sigma})$ 是 QD2 中自旋为 σ 的电子的产生(湮没)算符, V_{α} 是 QD2 和电极的隧穿耦合矩阵元, t_c 是双量子点之间的杂化耦合强度, λ 是拉格朗日乘子. 在平均场近似理论中, QD1 中的 $N_{\sigma} = 2$ 重自旋简并态电子的产生(湮没)算符表示为 $f_{\sigma}^+ b (b^+ f_{\sigma})$, 准费米算子 $f_{\sigma}^+ (f_{\sigma})$ 表示在 QD1 中产生(湮没)一个单占据量子态, 玻色子算子 $b^+ (b)$ 表示在 QD1 中产生(湮没)一个空占据量子态. 由于 QD1 只能处于空占据量子态或单占据量子态, 因此必须满足约束条件

$$b^+ b + \sum_{\sigma} f_{\sigma}^+ f_{\sigma} = 1.$$

在平均场近似理论中, b 由一个常数取代,

$$\tilde{b} = b(t) / \sqrt{N_{\sigma}},$$

这种近似仅适合于描述处于 Kondo 区的量子点(即

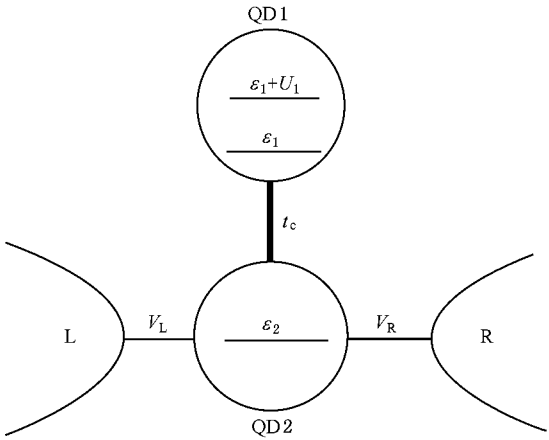


图 1 T 型耦合量子点结构模型

量子点中只有自旋涨落,而没有电荷涨落). 通过定义重正化参数

$$\begin{aligned} \tilde{t}_c &= t_c \tilde{b}, \\ \tilde{\epsilon}_1 &= \epsilon_1 + \lambda, \end{aligned}$$

体系的哈密顿量(1)式退化为如下自由电子模型:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k,\sigma} c_{k,\sigma}^+ c_{k,\sigma} + \sum_{\sigma} \tilde{\epsilon}_1 f_{\sigma}^+ f_{\sigma} \\ & + \sum_{\sigma} \epsilon_2 d_{\sigma}^+ d_{\sigma} \\ & + \sum_{k,\sigma} (V_{\alpha} c_{k,\sigma}^+ d_{\sigma} + \text{H.C.}) \\ & + \tilde{t}_c \sum_{\sigma} (d_{\sigma}^+ f_{\sigma} + \text{H.C.}) \\ & + \lambda (2\tilde{b}^2 - 1). \end{aligned} \quad (2)$$

我们利用体系的自由能最低原理和非平衡格林函数的谱定理以及傅里叶变换,得到了体系的两个变量 \tilde{b} 和 $\tilde{\epsilon}_1$ 的参数方程

$$2\tilde{b}^2 - i \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G_{ff\sigma}^<(\omega) - 1 = 0, \quad (3)$$

$$\lambda (\tilde{\epsilon}_1 - \epsilon_1) \tilde{b}^2 - i \tilde{t}_c \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G_{fd\sigma}^<(\omega) = 0, \quad (4)$$

式中 $G_{ff\sigma}^<(\omega), G_{fd\sigma}^<(\omega)$ 分别是 QD1 的 Lesser 格林函数以及 QD1 与 QD2 的关联 Lesser 格林函数.

$$G_{ff\sigma}^<(\omega) = \frac{2[\Gamma_L f_L(\omega) + \Gamma_R f_R(\omega)] \tilde{t}_c^2}{|(\omega - \tilde{\epsilon}_1) \chi(\omega - \epsilon_2 + i\tau) - \tilde{t}_c^2|^2}, \quad (5)$$

$$G_{fd\sigma}^<(\omega) = \frac{2[\Gamma_L f_L(\omega) + \Gamma_R f_R(\omega)] \chi(\omega - \tilde{\epsilon}_1) \tilde{t}_c}{|(\omega - \tilde{\epsilon}_1) \chi(\omega - \epsilon_2 + i\tau) - \tilde{t}_c^2|^2}, \quad (6)$$

式中 $f_{\alpha}(\omega)$ 是 α 电极的费米配分函数, Γ_{α} 和 τ 是

QD2 和电极之间的耦合关联函数 ,

$$\Gamma_a = \pi \sum_{k_a \sigma} V_a^2 \delta(\omega - \epsilon_{k_a \sigma}),$$
$$\tau = \Gamma_L + \Gamma_R.$$

在宽能带 ($\omega < D$, D 是能带宽度) 限制下, τ 可以退化为一个与能量无关的常数. 从(5)式中我们可以得到 QD1 通过 QD2 与电极有效杂化耦合关联参数 $\Delta_{fa} = \Gamma_a \tilde{t}_c^2$, 这是一个很重要的物理参数. 通过 Δ_{fa} , 电极中的传导电子包围了双量子点, 使得局域在 QD1 里的电子自旋被电极的传导电子屏蔽从而在 QD1 与电极之间产生 Kondo 效应.

3. 数值计算结果及讨论

为了更清楚地说明体系的基态性质, 我们采用数值计算和控制参量的方法, 模拟了体系在零温情况下的 Kondo 量子点 QD1 的 DOS, 从而研究了体系的 Kondo 效应,

$$\rho(\omega) = -\frac{\tilde{b}^2}{\pi} \sum_{\sigma} \text{Im} G_{ff\sigma}(\omega),$$

其中 $G_{ff\sigma}(\omega)$ 是 QD1 的推迟格林函数.

图 2 示出了在双量子点之间的耦合较弱、体系处于平衡状态情况下, Kondo 量子点 QD1 的 DOS 随耦合强度 t_c 的变化关系. 当 t_c 较小(如 $t_c = 0.4\tau$) 时, 双量子点通过类似于离子键的形式结合成一个人造分子, 此时两个量子点都保持它们的能级和电荷的量子化. 因此, 当电极的一个传导电子隧穿进入 QD2 而后通过量子隧穿进入 QD1, 它就被局域在 QD1 中, 形成一个显著的自旋杂质单态, 电极中处于费米能级的传导电子通过 Δ_{ff} 包围了 QD1 和 QD2 形成的人造分子, 于是 QD1 的自旋杂质单态和包围人造分子的传导电子形成了 Kondo 自旋单态, 导致 Kondo 效应的产生. 因此, 图 2(a) 中显示当 t_c 较小(如 $t_c = 0.4\tau$) 时, DOS 在体系能级 ϵ 到达费米能级 ϵ_F ($\epsilon_F = 0.0$) 处出现一个尖锐的 Kondo 单峰是可以理解的. 由于双量子点之间的耦合较弱, 它们的能级和电荷保持量子化, 故形成 Kondo 单态后 QD1 中的电子要脱离 QD1 的局域隧穿到 QD2 就很困难. 但是, 当增强 t_c 后电子在两个量子点之间的隧穿能力将增强, 这将削弱 Kondo 量子点 QD1 对局域在其中的电子的局域性, 导致它与电极的传导电子形成的 Kondo 自旋单态减弱. 因此, 我们可以从图 2(a) 中看到, 当 t_c 增强时, 尖锐的 Kondo 峰受到压制, Kondo

效应减弱. 此外, 我们还可以看到, 当 t_c 增强时, 体系的 Kondo 温度 T_K 也从零温升高(如图 2(b) 所示), 这不利于在零温情况下 Kondo 共振的产生, 因此 Kondo 效应的压制是很自然的物理性质.

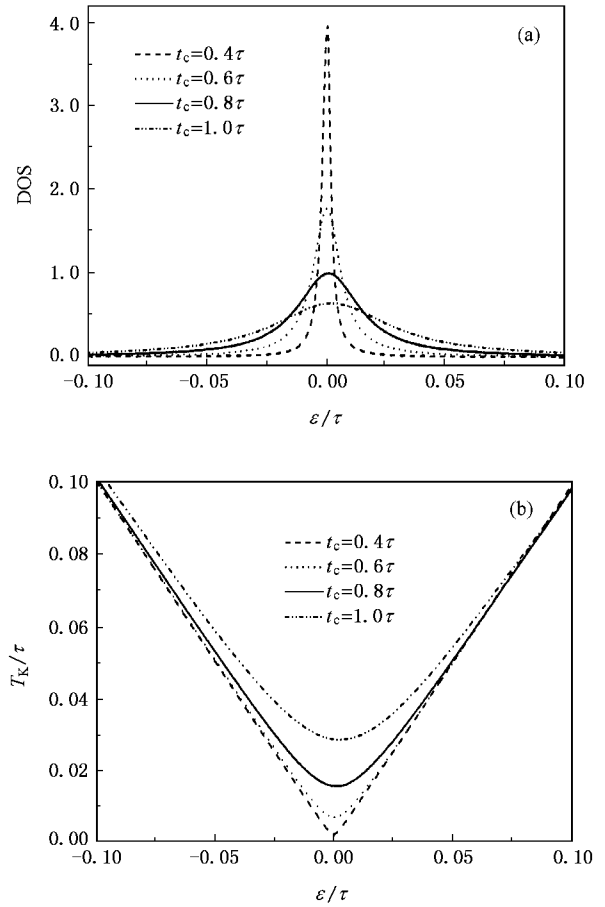


图 2 当 $\epsilon_1 = -3.5\tau$, $\epsilon_2 = -1.0e - 3\tau$ 时, 弱耦合情况下 Kondo 量子点的 DOS 和 Kondo 温度与耦合强度的关系 (a) DOS 与耦合强度的关系 (b) Kondo 温度与耦合强度的关系

当 t_c 调节到强耦合情况时, 体系的基态性质与弱耦合情况有所不同, 图 3 反映了体系进入强耦合且处于平衡状态时的情况. 从图 3(a) 可以看到: 当 t_c 从 1.0τ 增加并趋近于 3.0τ 时, DOS 的 Kondo 共振峰保持单峰特点, 但单峰的位置偏离 ϵ_F . 如图 3(b) 所示, 当 $t_c > 4.0\tau$ 时, T_K 产生了非对等的 W 型分裂, 在 $\epsilon \rightarrow \epsilon_F$ 时, T_K 远离零温, 故导致 DOS 的 Kondo 共振峰明显分裂成两个不对等的 Kondo 共振峰, 且随 t_c 的加强, 峰距扩大、峰值降低, 在 ϵ_F 位置 Kondo 共振被压制而形成马鞍底. 产生这种现象的主要原因是当两个量子点之间的耦合很强时, 两个量子点通过类似于共价键的形式结合成一个人造分

子,此时电子在两个量子点之间来回多次隧穿而保持相位的相干性,因而两个量子点中的电子态被相干地耦合在一起,形成两个分子轨道.轨道能级对应成、反键能级

$$\epsilon_{\mp} = \frac{\epsilon_2 + \tilde{\epsilon}_1 \mp \sqrt{(\epsilon_2 + \tilde{\epsilon}_1)^2 \mp 4\tilde{t}_c^2}}{2},$$

导致 DOS 的 Kondo 单峰分裂成不对等的 Kondo 双峰. 由于此时每个量子点将不再保持各自能级和电荷的量子化,电子不能被视为粒子而位于一个特定的量子点中,它应被视为是一个分布在两个量子点上的相干波. 于是 QD1 对电子的局域能力强烈削弱,导致 QD1 与电极之间的 Kondo 效应减弱,因此就产生了图 3(a)所示的随 t_c 增强不对等的 Kondo 双峰被压制的现象.

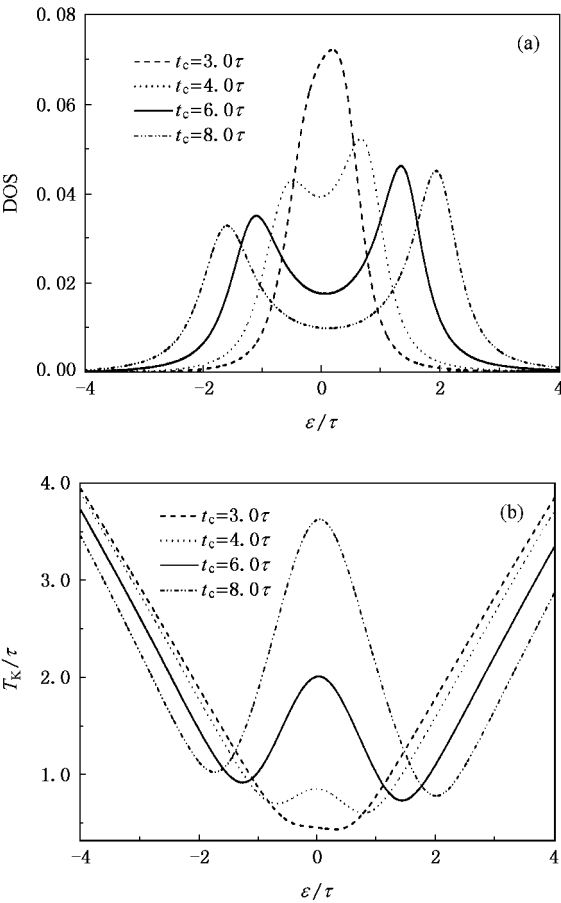


图 3 当 $\epsilon_1 = -3.5\tau$, $\epsilon_2 = -1.0e - 3\tau$ 时,强耦合情况下 Kondo 量子点的 DOS 和 Kondo 温度与耦合强度的关系 (a) DOS 与耦合强度的关系 (b) Kondo 温度与耦合强度的关系

图 4 反映了系统处于 Kondo 区的平衡状态情况下, Kondo 量子点 QD1 的 DOS 随 ϵ_1 的变化关系.当双量子点之间的耦合较弱(如图 4(a)所示)时,由于

与图 3(a)相同的物理本质,使 DOS 的 Kondo 共振峰保持单峰特点. 当 QD1 的能级小于 QD2 的能级,处于 QD2 的电子态可看成是激发态,而处于 QD1 的电子态则类似于基态,这有利于电子从 QD2 隧穿至 QD1,但不利于电子从 QD1 反隧穿至 QD2. 因此 QD1 对电子有较强的局域性,使得 QD1 的自旋杂质单态和包围人造分子并处于费米能级的传导电子形成了尖锐的 Kondo 自旋单态. 最终 QD1 的 DOS 在 $\epsilon = \epsilon_F$ 处形成尖锐的共振单峰,而其他位置共振却被强烈压制(如 $\epsilon_1 = -3.5\tau$). 当双量子点之间的耦合较强(如图 4(b)所示)时, DOS 的 Kondo 共振峰保持非对等双峰特点. 随着 ϵ_1 从 0.0τ 开始降低,双 Kondo 共振峰被强烈压制,双峰距离变窄,且峰值间隔变小,非对等 Kondo 双峰最终退化为对等 Kondo 双峰.

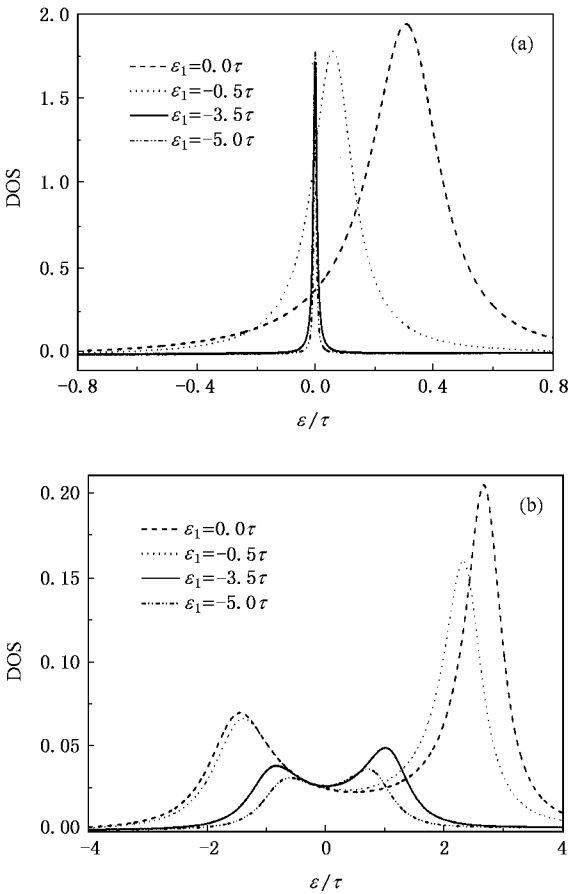


图 4 当 $\epsilon_2 = -1.0e - 3\tau$ 时, Kondo 量子点的 DOS 与其能级的关系 (a) $t_c = 0.6\tau$ (b) $t_c = 5.0\tau$

图 5 给出了系统处于 Kondo 区的非平衡状态情况下, Kondo 量子点 QD1 的 DOS 随着双电极偏压 ev 的变化关系.当双量子点处于弱耦合(如图 5(a)所示)时,源电极、漏电极的偏压并不能改变双量子点

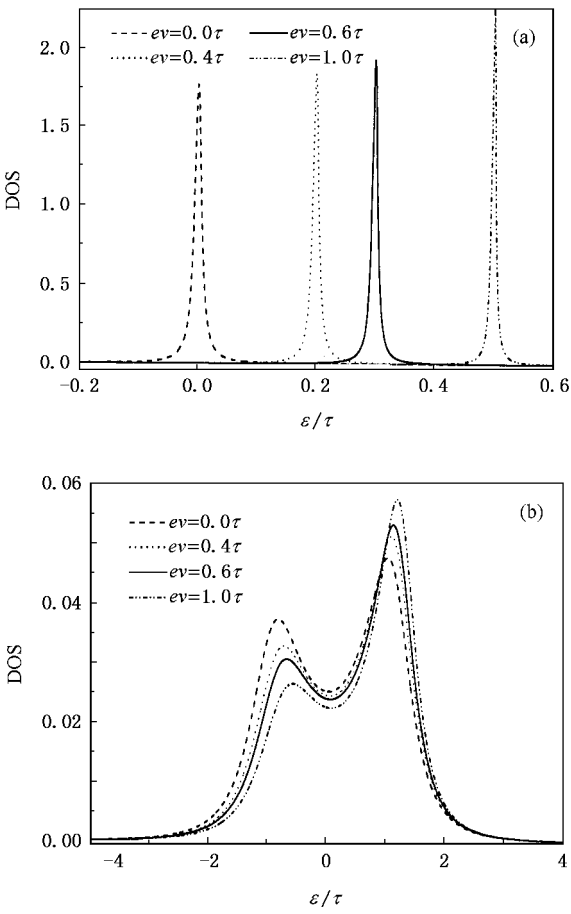


图 5 当 $\epsilon_1 = -3.5\tau$, $\epsilon_2 = -1.0e - 3\tau$ 时, Kondo 量子点的 DOS 与电极偏压的关系 (a) $t_c = 0.6\tau$ (b) $t_c = 5.0\tau$

类似于离子键结合的物理本质,故 DOS 的 Kondo 共振峰保持单峰特点.随着偏压的增加,电极的传导电子通过双量子点的输运速度增加,从而提升了包围双量子点的传导电子的能级,导致 Kondo 共振峰的位置逐渐正向偏离 ϵ_F ,峰值也逐渐增加,且越来越尖锐.当双量子点之间的耦合较强(如图 5(b)所示)时, DOS 的 Kondo 共振峰保持非对等双峰特点.随着偏压的增加,系统的基态性质出现了新的变化:负能级位置的小 Kondo 共振峰被压制,而正能级位置的大 Kondo 共振峰却增强,双峰的不对等特征越来越明显.

4. 结 论

利用格林函数并借助于单杂质的 Anderson 模型的哈密顿量,研究了正常电极嵌入 T-DQD 的基态输运性质.结果表明:在平衡状态下,随着双量子点的耦合强度增加,体系的 Kondo 效应被削弱.当耦合强度足够强时, Kondo 量子点的 DOS 的 Kondo 单峰分裂成两个非对等的 Kondo 双峰,且随着双量子点的耦合强度的增加, Kondo 双峰继续被压制,双峰距离明显变宽.调节 Kondo 量子点的能级也可以连续调节 Kondo 量子点的 Kondo 效应,且强耦合时表现出来的 Kondo 双峰的非对等性随能级降低逐渐削弱.在非平衡状态下,随着偏压增加, Kondo 单峰增强且逐渐偏离费米能级, Kondo 双峰反向变化,非对等性加强.

[1] Hemson A C 1993 *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge : Cambridge University Press)

[2] Ye J F , Ye F , Ding G H 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 468 (in Chinese)[叶剑斐、叶 飞、丁国辉 2003 物理学报 **52** 468]

[3] López R , Sánchez D 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 116602

[4] Govorov A O 2004 *Phys. Rev. B* **70** 035321

[5] Murthy G 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 126803

[6] Chen J C , Chang A M , Melloch M R 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 176801

[7] Oreg Y , Goldhaber-Gordon D 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 136602

[8] Pustilnik M , Borda L , Glazman I I , von Delft J 2004 *Phys. Rev. B* **69** 115316

[9] Chen X W , He D J , Wu S Q , Song K H 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4287 (in Chinese)[谌雄文、贺达江、吴绍全、宋克慧 2006 物理学报 **55** 4287]

[10] Yan C H , Wu S Q , Huang R , Sun W L 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 1888

[11] Tanaka Y , Kawakami N 2007 *Phys. Stat. Sol. C* **4** 641

[12] Cornaglia P S , Grepel D R 2005 *Phys. Rev. B* **71** 075305

[13] Wu B H , Cao J C , Ahn K H 2005 *Phys. Rev. B* **72** 165313

[14] Güclü A D , Sun Q F , Guo H 2003 *Phys. Rev. B* **68** 245323

[15] Silva L D , Sandler N , Ingersent K 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 096603



Asymmetric Kondo resonance splitting transition in T-shaped coupled-quantum-dot devices^{*}

Chen Xiong-Wen^{1,2,†} Shi Zhen-Gang^{1,2} Chen Bao-Ju¹ Song Ke-Hui^{1,2}

¹ *Department of Physics and Electronic Information Science, Huaihua University, Huaihua 418008, China*

² *Institute of Information Science, Huaihua University, Huaihua 418008, China*

(Received 3 July 2007 ; revised manuscript received 4 September 2007)

Abstract

Using the slave-boson mean-field approximation, we theoretically study the transport properties of the ground state of the T-shaped coupled quantum dots with two metallic leads by means of one-impurity Anderson Hamiltonian. It is found that when this system is in the equilibrium state, with the increase of the inter-dot coupling, the Kondo resonance is suppressed, and the single Kondo peak of the density of the Kondo quantum dot is split into two asymmetric Kondo peaks. When it is in the non-equilibrium state, when increasing the bias, this asymmetric Kondo splitting is enhanced.

Keywords : Kondo effect, density of states, Green function, double coupled quantum dots

PACC : 7215Q, 7150, 7115P, 7335C

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 06JJ50014), the Key Program of the Scientific Research Foundation of the Education Bureau of Hunan Province, China (Grant No. 06A055) and the Scientific Research Foundation of Huaihua University, China.

[†] E-mail : hnsxw617@yahoo.com.cn