# 物理学报 Acta Physica Sinica



电子-声子相互作用对平行双量子点体系热电效应的影响

吴海娜 孙雪 公卫江 易光宇

Influences of electron-phonon interaction on the thermoelectric effect in a parallel double quantum dot system

Wu Hai-Na Sun Xue Gong Wei-Jiang Yi Guang-Yu

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 64, 077301 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.077301 在线阅读 View online: http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.077301 当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I7

您可能感兴趣的其他文章 Articles you may be interested in

耦合锗量子点中空穴态对称特性研究

Asymmetry of hole states in vertically coupled Ge double quantum dot 物理学报.2014, 63(22): 227301 http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.227301

混合量子点器件电致发光的能量转移研究

Electroluminescent energy transfer of hybrid quantum dotsdevice 物理学报.2014, 63(17): 177301 http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.177301

界面电子转移对量子点荧光闪烁行为的影响

Influence of interfacial electron transfer on fluorescence blinking of quantum dots 物理学报.2014, 63(16): 167302 http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.167302

红光量子点掺杂 PVK 体系的发光特性研究

Luminescence characteristics of PVK doped with red-emitting quantum dots 物理学报.2014, 63(9): 097302 http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.097302

单电子晶体管电流解析模型及数值分析

Analytical I-V model and numerical analysis of single electron transistor 物理学报.2013, 62(7): 077301 http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.077301

# 电子-声子相互作用对平行双量子点体系热电 效应的影响\*

吴海娜 孙雪 公卫江 易光宇

(东北大学,理学院物理系,沈阳 110819)

(2014年9月18日收到; 2014年10月29日收到修改稿)

量子点体系是一种典型的低维体系,该体系的独特物理特性有利于提高热电转换效率.本文采用非平衡 态格林函数方法,选择平行双量子点结构,详细讨论了电子-声子相互作用对该体系的电导、热电功率、热电优 值以及热导等热电效应相关参数的影响,全面描述了电子-声子相互作用对该结构中热电效应的影响.理论计 算结果表明,在低温情况下,该体系中的法诺干涉能够有效增强热电效应,而电子-声子相互作用通过破坏法 诺干涉而在一定程度上抑制电导以及热导过程.然而,电子-声子相互作用不会显著地影响热电功率的幅值, 并且热电优值的极值几乎不会改变,因此在低温条件下电子-声子相互作用并不是破坏量子点体系热电效应 的必要条件.本文的结果将有利于澄清电子-声子相互作用对量子点体系热电效应的影响.

关键词:量子点,电子-声子相互作用,法诺效应,热电效应 PACS: 73.21.La, 72.20.Pa, 73.23.-b

#### **DOI:** 10.7498/aps.64.077301

### 1引言

随着微加工技术的飞速发展,电子器件达到了 纳米尺度并进入了介观物理的研究范围<sup>[1]</sup>.随着半 导体电子器件尺寸的进一步变小,量子现象和新的 技术问题随之出现,其中阻碍器件继续小型化的一 个关键技术问题就是装置的热耗散问题<sup>[2]</sup>.当电流 流过电子装置时,不可避免地要产生热量,利用热 电效应是合理回收利用这部分热量最有效的办法 之一.由于在纳米结构的材料中存在显著的量子输 运现象,致使其热电参数不再严格遵循传统的魏德 曼-弗兰兹定律和莫特关系<sup>[3,4]</sup>,因此在纳米材料中 热电转换效率可以得到明显提高.此外,纳米结构 中的热电特性也可以通过改变门电压等系统参数 来调制.这样,纳米技术的发展为寻求高效的热电 材料开辟了新的道路.

量子点体系是典型的低维体系,其独特的结构 和具有电子能级分立的物理特性,使得人们期盼在 这样的体系上获得更大的热电效率,开始对量子点 系统热电输运特性进行了探索性研究<sup>[5-11]</sup>.研究 发现,影响量子点结构热电性能的因素很多,其中 电子电荷能和量子局限效应能够强烈地影响量子 点系统的热电系数,从而导致栅压热电功率和热 导的振荡[12,13]: 量子点体系的库仑相互作用也对 热电效应有很大的影响[14,15]. 然而在量子系统中 电子-声子相互作用的影响也是不可忽略的重要因 素<sup>[16-18]</sup>, 大量的理论和实验<sup>[19-22]</sup>研究单个或两 个电子与声子相互作用的情况,指出电子-声子相 互作用在系统输运过程起着很强的作用,但它对系 统热电效应的具体影响,目前国际上还少有研究, 在本文中,我们研究双量子点与两电极耦合的体 系,考虑在不同参数下电子-声子相互作用对体系 中电导、热电功率、热电优值和热导等热电效应参 数的影响. 通过研究揭示电子-声子相互作用对系 统热电效应的影响机理,给出提高热电效应的理论 预见,并为具有广阔应用前景的热电材料和器件的

\* 中央高校基本科研业务费专项资金(批准号: N130505001)和辽宁省教育厅科学研究一般项目(批准号: L2014099)资助的课题.

© 2015 中国物理学会 Chinese Physical Society

<sup>†</sup>通信作者. E-mail: gwjneu@163.com

研制提供理论参考.

#### 2 理论模型

考虑双量子点与两个金属电极耦合的模型, 两个量子点分别与左右两个电极相连接,结构如 图1所示.



图1 耦合双量子点结构示意图

描述整个体系的哈密顿量表示如下:

$$H = H_{\rm C} + H_{\rm D} + H_{\rm T},\tag{1}$$

其中第一项 H<sub>C</sub> 为左右两个电极中电子的哈密顿量

$$H_{\rm C} = \sum_{\alpha k} \varepsilon_{\alpha k} c^{\dagger}_{\alpha k} c_{\alpha k}, \qquad (2)$$

 $c_{\alpha k}^{\dagger}(c_{\alpha k})$ 表示在 $\alpha(\alpha = L, R)$ 电极上能量为 $\varepsilon_{\alpha k}$ 的 电子的产生(湮没)算符.第二项 $H_D$ 描述量子点的 哈密顿量.在计入电子-声子相互作用的情况下,其 表达式可写为

$$H_{\rm D} = \sum_{i} [\varepsilon_i d_i^{\dagger} d_i + \lambda (a^{\dagger} + a) d_i^{\dagger} d_i] + \omega_0 a^{\dagger} a, \quad (3)$$

其中 $d_i^{\dagger}(d_i)$ 是第i个量子点中电子的产生(湮没)算符, $a^{\dagger}(a)$ 是声子的产生(湮没)算符. $\varepsilon_i$ 表示量子点 i的能级.对于电子-声子相互作用,我们考虑电子 与长光学支声子的相互作用.在长波极限,声子频 率可以做爱因斯坦近似<sup>[23-24]</sup>.相应地,声子能量 可以取为常数 $\omega_0$ .与此同时,电子-声子相互作用 也可以简化.在此,我们用 $\lambda$ 表示电子-声子相互作用 也可以简化.在此,我们用 $\lambda$ 表示电子-声子耦合强 度,并且认为两个量子点中的声子模式以及电子-声子相互作用相同<sup>[25-27]</sup>.该近似在量子点的构造 材料及尺寸一致的情况下是可行的<sup>[28-30]</sup>.为了得 到清晰的热电效应图像,我们忽略电子间的相互作 用.此外,值得注意的是,由于所有耦合双量子点 结构都可通过表象变换而转换为这一结构,因此对 该结构性质的讨论具有普适性.

哈密顿量(1)式的最后一项 H<sub>T</sub>表示量子点与 电极之间的耦合

$$H_{\rm T} = \sum_{\alpha ki} V_{\alpha ki} c^{\dagger}_{\alpha k} d_i + \text{H.C.}, \qquad (4)$$

其中V<sub>αki</sub>为量子点与电极的耦合系数.

对这一双量子点体系,运用格林函数方法可以 得到电流和热流的表达式.以左电极为例,电流 J<sup>L</sup><sub>e</sub> 和热流 J<sup>L</sup><sub>O</sub>分别写为<sup>[6]</sup>

$$J_{\rm e}^{\rm L} = \frac{e}{h} \sum \int d\omega \tau(\omega) [f_{\rm L}(\omega) - f_{\rm R}(\omega)], \qquad (5)$$
$$J_{\rm Q}^{\rm L} = \frac{1}{h} \sum \int d\omega (\omega - \mu_{\rm L}) \tau(\omega) \times [f_{\rm L}(\omega) - f_{\rm R}(\omega)]. \qquad (6)$$

这里  $f_{\alpha}(\omega) = \{\exp[(\omega - \mu_{\alpha})/k_{\rm B}T_{\alpha}] + 1\}^{-1}$  是两电 极处在温度为  $T_{\alpha}$  的热平衡时  $\alpha$  极的费米分布函数,  $\mu_{\alpha} = eV_{\alpha}$  是由源电极和漏电极间电压得到的化学 势表达式. 隧穿函数  $\tau(\omega)$  的表达式为

$$\tau(\omega) = \operatorname{Tr}[\Gamma^{\mathrm{L}}G^{\mathrm{r}}(\omega)\Gamma^{\mathrm{R}}G^{\mathrm{a}}(\omega)], \qquad (7)$$

其中,  $G^{r}(\omega)$  和 $G^{a}(\omega)$  分别表示体系的延迟和超前 格林函数.  $\Gamma^{L(R)}(\varepsilon) = 2\pi\rho_{L(R)}(\varepsilon)|V_{L(R)}(\varepsilon)|^{2}$ , 表示 电极与量子点的耦合强度, 其中 $\rho_{L(R)}(\varepsilon)$ 表示左右 电极的能态密度.

在线性输运区内, 温度差  $\delta T = T_{\rm L} - T_{\rm R} \rightarrow 0$ , 热电电势差  $\delta V = V_{\rm L} - V_{\rm R} \rightarrow 0$ , 此时, 可以对电流 和热流的表达式做级数展开并近似到线性项. 相应 地, 电流和热流的表达式分别写成

$$\begin{pmatrix} J_{e}^{L} \\ J_{Q}^{L} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} \ L_{12} \\ L_{21} \ L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{L} - V_{R} \\ T_{L} - T_{R} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

输运积分可以表达为

$$K_{n} = \frac{1}{h} \int \mathrm{d}\omega \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega}\right) \omega^{n} \tau\left(\omega\right),$$

相比较可得 $L_{11} = e^2 K_0$ ,  $L_{21} = L_{12}T = -eK_1$ 和 $L_{22} = K_2/T$ . 线性电导公式为

$$G = \lim_{V \to 0} \frac{\mathrm{d}J_{\mathrm{e}}}{\mathrm{d}V} = L_{11},$$

综上可得 $G = e^2 K_0$ . 量子点系统的热电功率可以 表达为 $S = -\frac{1}{eT} \frac{K_1}{K_0}$ , 电子贡献的热导根据定义  $\kappa_e = \frac{\Delta J_Q}{\Delta T}$ 可以写为 $\kappa_e = K_1 eS + \frac{K_2}{T}$ . 根据这几 个物理量, 我可以计算该体系的热电优值, 其定义 为ZT =  $GS^2 T / \kappa_e$ .

由于该体系中考虑电子-声子相互作用,对体 系中热电性质的讨论,我们主要依赖于对格林函数 的求解,首先对哈密顿量(1)式进行正则变换.引 入正则变换

$$\bar{H} = e^s H e^{-s},\tag{9}$$

其中 $S = \sum_{i} \frac{\lambda}{\omega_0} (a^{\dagger} - a) n_i$ . 经过变换之后的哈密 顿量为

$$\bar{H} = H_{\rm el} + H_{\rm ph},\tag{10}$$

其中

$$H_{\rm el} = \sum_{\alpha k} \varepsilon_{\alpha k} c^{\dagger}_{\alpha k} c_{\alpha k} + \sum_{i} \tilde{\varepsilon}_{i} d^{\dagger}_{i} d_{i} + \sum_{\alpha k i} V_{\alpha k i} X c^{\dagger}_{\alpha k} d_{i} + \text{H.C.}, \quad (11)$$

$$H_{\rm ph} = \omega_0 a^{\dagger} a. \tag{12}$$

可以看出,经过正则变换之后的哈密顿量中声子 部分保持不变, 电子-声子相互作用的耦合项消失.  $\tilde{\varepsilon}_i = \varepsilon_i - \lambda^2 / \omega_0$ 表示第*i*个量子点中考虑电子-声 子相互作用后能级的变动.  $X = e^{-\frac{\lambda}{\omega_0}(a^{\dagger}-a)}$ 为新 的描述声子算符. 由于量子点与电极之间的耦合作 用小于电子-声子相互作用的强度, 即 $V_{\alpha ki} \ll \lambda$ , 可 以用 X 的平均值代替 X, 即

$$X = \langle X \rangle = e^{-g(2N_{\rm ph}+1)}, \qquad (13)$$

这里 $g = (\lambda/\omega_0)^2$ 以及 $N_{\rm ph} = [\exp(\omega_0/k_{\rm B}T - 1)]^{-1}$ . 相应地,"大于"和"小于"格林函数可以分别

写为电子和声子两部分乘积的形式,即

$$G_{ij}^{>}(t) = -i \left\langle d_i(t) d_j^{\dagger}(0) \right\rangle = \tilde{G}_{ij}^{>}(t) e^{-\varPhi(t)}, \quad (14)$$

$$G_{ij}^{<}(t) = i \left\langle d_{j}^{\dagger}(0) d_{i}(t) \right\rangle = \tilde{G}_{ij}^{<}(t) e^{-\Phi(-t)}, \quad (15)$$

其中i(j) = 1, 2.  $\tilde{G}_{ij}^{>(<)}$ 是基于 $H_{\rm el}$ 定义的大于 和小于格林函数. 而  $e^{-\Phi(\mp t)}$ 是 $\langle X^{\dagger}(0) X(t) \rangle_{\rm ph}$ 和  $\langle X(t) X^{\dagger}(0) \rangle_{\rm ph}$ 的迹, 其中

$$e^{-\Phi(t)} = g \Big[ N_{\rm ph} \left( 1 - e^{i\omega_0 t} \right) + (N_{\rm ph} + 1) \\ \times \left( 1 - e^{-i\omega_0 t} \right) \Big].$$
(16)

根据恒等式  $e^{-\Phi(t)} = \sum_{n} L_n e^{-in\omega_0 t}, G^{<(>)}(\omega)$ 可写为

 $G^{>}(\omega) = \sum L_n \tilde{G}^{>}(\omega - n\omega_0),$ 

$$G^{>}(\omega) = \sum_{n} L_{n} \tilde{G}^{>}(\omega - n\omega_{0}), \qquad (17)$$
$$G^{<}(\omega) = \sum_{n} L_{n} \tilde{G}^{<}(\omega + n\omega_{0}), \qquad (18)$$

$$G^{\sim}(\omega) = \sum_{n} L_{n} G^{\sim}(\omega + n\omega_{0}), \qquad (18)$$

其中L<sub>n</sub>为温度、电子-声子相互作用强度以及声子 数的函数,即

$$L_n = \frac{\mathrm{e}^{-g} g^n}{n!}, \quad n \ge 0, \quad T = 0, \tag{19}$$

$$L_n = e^{-g(2N_{\rm ph}+1)} e^{\frac{-g}{2}} I_n$$
$$\times \left( 2g\sqrt{N_{\rm ph} (N_{\rm ph}+1)} \right), \quad T \neq 0, \quad (20)$$

上式中 $I_n$ 是n阶Bessel函数.  $\tilde{G}^{<}(\omega)$ 可以通过 Keldysh 和 Langreth 进一步得出

$$\tilde{G}^{<}\left(\omega\right)=\tilde{G}^{\mathrm{r}}\left(\omega\right)\tilde{\varSigma}^{<}\left(\omega\right)\tilde{G}^{\mathrm{a}}\left(\omega\right),$$

其中

$$\tilde{\Sigma}^{<}(\omega) = i \left[ \tilde{\Gamma}_{\rm L} f_{\rm L}(\omega) + \tilde{\Gamma}_{\rm R} f_{\rm R}(\omega) \right],$$
$$\tilde{\Gamma}_{\alpha} = \Gamma_{\alpha} \langle X \rangle^{2}.$$

通过运动方程得到格林函数矩阵

$$\tilde{G}^{\mathrm{r}}(\omega) = \begin{bmatrix} \omega - \tilde{\varepsilon}_{1} + \mathrm{i}\tilde{\Gamma}_{11} & \mathrm{i}\tilde{\Gamma}_{12} \\ \mathrm{i}\tilde{\Gamma}_{21} & \omega - \tilde{\varepsilon}_{2} + \mathrm{i}\tilde{\Gamma}_{22} \end{bmatrix}^{-1}.$$
 (21)

此时,我们可以根据下面的表达式求出 $G^{r}(\omega)$ , 刡 [<mark>31</mark>]

$$G^{\mathrm{r}}(\omega) = \sum_{n} L_{n} [\tilde{G}^{\mathrm{r}}(\omega - n\omega_{0}) - \frac{1}{2} \tilde{G}^{<}(\omega + n\omega_{0}) + \frac{1}{2} \tilde{G}^{<}(\omega - n\omega_{0})], \qquad (22)$$

而超前格林函数可由 $G^{a}(\omega) = [G^{r}(\omega)]^{\dagger}$ 给出.

## 3 结果和计论

根据以上得到的公式,我们进行数值计算来研 究双量子点体系的热电性质. 方便起见, 我们定义 费米能级  $\varepsilon_{\rm F}$  为能量零点,量子点2与电极之间的耦 合强度 $\Gamma_{22}$ 作为能量单位,即 $\Gamma_{22} = 1.0.$ 此外,为 实现该结构中的法诺干涉,我们令 $\Gamma_{22} = 10\Gamma_{11}$ ,以 及 $\varepsilon_1 = \varepsilon_0 - 0.5$ 和 $\varepsilon_2 = \varepsilon_0 + 0.5$ ,其中 $\varepsilon_0$ 可以通过 栅电压的调节来获得.如图2(a)所示我们可以观 察到在低温  $(k_{\rm B}T \leq 0.02)$  时, 电导谱线呈现出法诺 线型. 随着温度的增加, 电导谱线中的法诺线型开 始变得不明显,这是因为温度的增加允许能量在  $\varepsilon_{\rm F} - k_{\rm B}T < \omega < \varepsilon_{\rm F} + k_{\rm B}T$ 的电子通过该结构,从 而在不同能量电子波之间的干涉导致了法诺效应 的破坏. 图2(b)研究了热电功率,可以看出非零点 热电功率仅出现在法诺干涉出现的能量区域里. 由 此得出结论: 在该体系中热电功率依赖于法诺干 涉. 在低温时, 当法诺干涉很强烈时, 热电功率的 值较大,而温度的增加减弱了法诺干涉,因此热电 功率的幅值变得较小. 另外, 从图2(c)中可以看出 在低温时,热导与电导谱线的线型类似,和电导相 比, 热导更加依赖于温度的变化, 且随温度的升高, 热导谱线的法诺线型趋于模糊. 图2(d)展现热电 优值ZT随量子点能级的变化情况.随着能级的增 加, ZT 增加得较小, 当温度升高时, ZT 却减小得很 快. 在 $k_{\rm B}T = 0.1$ 时, ZT的值几乎接近于零.



图 2 (网刊彩色) 无电子 -声子相互作用时, 温度为  $k_{\rm B}T = 0.05 \, \pi \, k_{\rm B}T = 0.1$  时电导、热导、热电功率和热电优值 随量子点能级变化的曲线



图3 (网刊彩色)不同电子-声子相互作用下,温度为kBT=0.05和kBT=0.1时电导G随量子点能级变化的曲线

下面我们分析电子-声子相互作用对该体系 中的热电效应的影响.对于声子的能量,我们令  $\omega_0 = 1.0.$ 由相关文献可知,尺寸在几十纳米左右、 由III-V族化合物(如,GaAs/GaAlAs等)形成的量 子点,其声子能量数量级为meV:10 meV<sup>[28-30,32]</sup>. 而量子点结构中相关参数的量级也能调至这个范 围内<sup>[33-35]</sup>.因此,这样的参数设置是合理的.

图 3 是温度分别为 $k_{\rm B}T = 0.05 \, \pi k_{\rm B}T = 0.1$ 时电导G随着电子-声子相互作用的增强而变化的曲线. 从图 3 (a)可以清楚地看到, 当 $\lambda = 0.1$ 时, 此

时呈现出的电导线型与图 2 (a) 中无电子- 声子相 互作用的情况基本相同. 随着电子-声子相互作用 的增强, 电导 *G* 的幅值受到明显的抑制. 当 $\lambda = 0.7$ 时, 电导 *G* 的值明显减小, 即由 $\lambda = 0.1$ 时的 0.95 左右减小到 0.55 左右. 同时, 电导 *G* 的线型完全 受到破坏, 原有的共振态和非共振态不再能够区 分, 电导谱展现出明显的振荡, 并逐渐向高能方向 移动. 由此我们能够推知, 该体系中的电子-声子 相互作用破坏了体系中的电子输运. 图 3 (b) 中是  $k_{\rm B}T = 0.1$ 时的结果, 由于此时  $k_{\rm B}T = 0.1$ , 温度的 升高不免会破坏量子输运,相应地,法诺线型也有 所减弱.如果引入电子-声子相互作用,并不断加强 其强度,我们可以看到电导幅值受到抑制的情况与 图 3(a) 类似.值得注意的是,在 $\varepsilon_0 = 0.5$  处的法诺 峰下降明显,同时电导谷的抬升也相对显著.

由于热电功率完全依赖于电子的输运性质,接 下来我们讨论电子-声子相互作用对体系热电功率 的影响.如图4 所示,热电功率的变化与图3中展 示的电导变化情况相反,随着电子-声子相互作用 λ的增强,热电功率极值的大小并没有太大的变化, 此时电子-声子相互作用对热电功率的明显效果在 于:热电功率极值所对应的ε0位置向高能区移动, 且热电功率的振荡随电子-声子相互作用的增大而 明显增强.另一方面从图4(b)中我们发现,在高温 情况下,热电功率呈现的谱图与图4(a)的结果有 很大的不同,热电功率的谱图出现更加明显的振 荡,且随着电子-声子相互作用的增强,热电功率极 值减小的趋势变得更为明显,峰谷之间的距离相比 图 4 (a) 的情况变大.随着电子-声子相互作用的增强,热电功率的极值变大,由 $\lambda = 0.1$ 时的0.38 左右 变为 $\lambda = 0.7$ 时的0.52 左右.通过分析图 4 中热电 功率受电子-声子相互作用影响的结果,我们得出 一个重要结论,电子-声子相互作用未必导致热电 功率 *S* 的极值减小,即它不是抑制热电功率的必要 条件.

反映热电性质的另一个重要的物理量是热电 优值. 下面我们讨论电子-声子相互作用对热电 优值的影响. 图5分别给出温度为 $k_{\rm B}T = 0.05$ 和  $k_{\rm B}T = 0.1$ 时随着电子-声子相互作用的增强, 热电 优值 ZT 随能级 $\varepsilon_0$ 变化的曲线. 从图5(a)中可以看 到,随着电子-声子相互作用的增强, ZT 的主峰右 移,且振荡变得更加明显. 值得注意的是, 弱电子 -声子相互作用的情况下, ZT 的幅值几乎不出现改



图 4 (网刊彩色) 不同电子 - 声子相互作用下, 温度为  $k_{\rm B}T = 0.05 \ \pi k_{\rm B}T = 0.1$  时热电功率 S 随量子点能级变化的曲线



图 5 (网刊彩色) 不同电子 - 声子相互作用下, 温度为  $k_{\rm B}T = 0.05 \, \pi k_{\rm B}T = 0.1$  时热电优值 ZT 随量子点能级变化的曲线

077301-5

变,只有在 $\lambda = 0.7$ 时,幅值有所抑制. 在 $\lambda = 0.7$ 时,一1  $\leq \varepsilon_0 \leq 0$ 区间内,出现明显的伴峰. 高温时,如图5(b)所示,随着 $\lambda$ 的增强,ZT的极值大幅减小,振荡更加明显,尤其是在 $\varepsilon_0 \leq 0$ 的区域内,可以看到出现了更加明显的伴峰,其幅值为0.08 左右. 伴峰出现的原因主要是电子-声子相互作用为各种能量的电子均提供了输运的机会. 我们知道,当不考虑电子-声子相互作用时,只有费米面附近的电子能够进行输运,而考虑了电子-声子相互作用后,电子通过吸收或放出声子,各种能量的电子都能够进行输运,所以产生了很多峰值. 恰恰也正是这样一个机理,导致图 $3 + \varepsilon_0 = -0.5$ 时新的电导峰出现. 该电导峰表示, $\varepsilon_0 = -0.5$ 时,共振通道中的电子能够吸收一个声子而参与共振隧穿,从而表现出电导峰.



图 6 (网刊彩色) 不同电子 -声子相互作用下,温度为  $k_{\rm B}T = 0.05 \, \pi \, k_{\rm B}T = 0.1$ 时热导率  $\kappa$  随量子点能级变化 的曲线

热电优值的性质比热电功率复杂,上一结果的 澄清还需要进一步研究热导的情况.图 6 给出温度 为 $k_{\rm B}T = 0.05 \, \pi k_{\rm B}T = 0.1$ 时热导率 $\kappa$ 随电子-声 子相互作用的变化的曲线. 弱电子-声子相互作用 下, 热导受到的抑制及其线型的变化与图4中的电 导谱图变化类似. 正是由于这一原因, 热电优值与 热电功率 S呈现出的效果相类似. 随着电子-声子 相互作用增强, 如 $k_{\rm B}T = 0.05$ ,  $\lambda = 0.7$ 时, 热导的 线型被严重破坏, 此时在图6中已经看不到线型中 的谷, 这也就导致热电优值 ZT 的下降. 由此我们 可以判断, 电子-声子相互作用分裂了共振通道, 从 而导致多个电导峰的出现, 使得热电效应更加丰 富, 相应地,  $\varepsilon_0 = -0.5$ 处的电导峰导致了热电功率 的振荡以及热电优值出现新的峰值.

通过以上各热电效应相关参数的变化,我们能 够看出在耦合双量子点体系中,电子-声子相互作 用对体系热电性质产生的各种影响.我们发现,体 系中热电性质的主要物理量,电导、热电功率、热电 优值及热导,并不单独依赖于电子的隧穿性质,电 子-声子相互作用在某种程度上对体系的热电性质 有所抑制,然而电子-声子相互作用不会影响热电 功率,且热电优值基本不随电子-声子相互作用增 强而减小.电子-声子相互作用与热电效应并不是 简单的线性破坏关系.

## 4 结 论

我们分析了低温下,电子-声子相互作用对耦 合双量子点体系热电效应的影响.利用非平衡格林 函数方法得到系统的电导、热电功率、热电优值和 热导随电子-声子相互作用变化的解析表达式.通 过数值计算发现,电导和热导的峰值随着电子-声 子相互作用的增大而减小.然而,电子-声子相互作 用不会显著降低热电功率,并且热电优值也相对坚 实.相信该工作对澄清电子-声子相互作用对量子 点体系热电效应的影响有所帮助.

#### 参考文献

- [1] Dubi Y, Ventra M D 2011 Rev. Mod. Phys. 83 131
- [2] Agrait N, Untiedt C, Bollinger G R, Vieira S 2002 Phys. Rev. Lett. 88 216803
- [3] Appleyard N, Nicholls J T, Pepper M, Tribe W R, Simmons M Y, Ritchie D A 2000 Phys. Rev. B 62 16275
- [4] Kubala B, König J, Pekola J 2008 Phys. Rev. Lett. 100 066801
- [5] Harman T C, Taylor P J, Walsh M P, LaForge B E 2002 Science 297 2229
- [6] Kim T S, Hershfield S 2002 Phys. Rev. Lett. 88 136601

- [7] Reddy P, Jang S Y, Segalman R A, Majumdar A 2007 Science 315 1568
- [8] Kuo D M T, Chang Y C 2010 Phys. Rev. B 81 205321
- [9] Chen X S, Buhmaim H, Molenkamp L W 2000 Phys. Rev. B 61 16801
- [10] Chi F, Zheng J, Lu X D, Zhang K C 2011 Phys. Lett. A 375 1352
- [11] Wu L J, Han Y, Gong W J, Tan T Y 2011 Acta Phys.
  Sin. 60 107303 (in Chinese) [吴丽君, 韩宇, 公卫江, 谭天 亚 2011 物理学报 60 107303]
- [12] Zianni X 2007 Phy. Rev. B 75 045344
- [13] Wang R Q, Sheng L, Shen R, Wang B, Xing D Y 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 057202
- [14] Uchida K, Takahashi S, Harii K, Ieda J, Koshibae W, Ando K, Maekawa S, Saitoh E 2008 Nature 455 778
- [15] Hatami M, Bauer G E W, Zhang Q, Kelly P J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 066603
- [16] Chen C Y, Lin D L, Jin P W, Zhang S Q 1994 Phys. Rev. B 49 13680
- [17] Luo K, Wang F Q, Liang R S, Ren Z Z 2014 Chin. Phys. B 23 107103
- [18] Zhang A M, Zhang Q M 2013 Chin. Phys. B 22 087103
- [19] Dmitriy V, Melnikov, Beall Fowler W 2001 *Phy. Rev. B* 63 165302
- [20] Weig E M, Blick R H, Brandes T, Kirschbaum J, Wegscheider W, Bichler M, Kotthaus J P 2004 Phy. Rev. Lett. 92 46804

- [21] Park H, Park J, Lim A K L, Anderson E H, Alivisatos A P, McEuen P L 2000 Nature 40 757
- [22] Li J J, Zhu K D 2009 Appl. Phys. Lett. 94 063116
- [23] Akiko U, Mikio E 2006 Phys. Rev. B 73 235353
- [24] Kuo D M T, Chang Y C 2002 Phys. Rev. B 66 085311
- [25] Zhu J X, Balatsky A V 2003 Phys. Rev. B 67 165326
- [26] Liu Y S, Chen H, Fan X H, Yang X F 2006 Phys. Rev. B 73 115310
- [27] Song J T, Sun Q F, Jiang H, Xie X C 2008 Phys. Rev. B 77 035309
- [28] Marcos H Degani, Gil A Farias 1990 Phys. Rev. B 42 11950
- [29] Roca E, Trallero-Giner C, Gardona M 1994 Phys. Rev. B 49 13704
- [30] Kazunori O, Koji A, Mistsuru M 1999 Phys. Rev. B 59 110850
- [31] Chen Z Z, Lü R, Zhu B F 2005 Phy. Rev. B 71 165324
- [32] Stephanie M R, Matti M 2002 Rev. Mod. Phys. 74 1283
- [33] Van der Wiel W G, De Franceschi S, Elzerman J M, Fujisawa T, Tarucha S, Kouwenhoven L P 2003 Rev. Mod. Phys. 75 1
- [34] Hanson R, Kouwenhoven L P, Petta J R, Tarucha S, Vandersypen L M K 2007 Rev. Mod. Phys. 79 1217
- [35] Melniko D V, Beall F W 2001 Phys. Rev. B 64 245320

## Influences of electron-phonon interaction on the thermoelectric effect in a parallel double quantum dot system<sup>\*</sup>

Wu Hai-Na Sun Xue Gong Wei-Jiang<sup>†</sup> Yi Guang-Yu

(College of Science, Northeastern University, Shenyang 110819, China)(Received 18 September 2014; revised manuscript received 29 October 2014 )

#### Abstract

A quantum-dot system is a typical low-dimensional system, and previous researches showed that its thermoelectric conversion efficiency can be markedy improved due to its unique physical properties. In this poper, we choose the parallel double-quantum-dot structure and discuss the influence of the electron-phonon interaction on the thermoelectric-related parameters, i.e., the electric conductance, thermopower, the figure of merit, and thermal conductance, by using the nonequilibrium Green's function method. Our theoretical calculation results show that under the condition of low temperature, the occurrence of the Fano interference can assist to enhance the thermoelectric effect. When the electronphonon interaction is taken into account, it can suppress the electric and thermal conductances to a certain extent because of its negative effect on the Fano interterence. However, we readily find that apparently the strengthening of the electron-phonon interaction cannot suppress the maximum of the thermopower. Instead, in some regions, the thermopower has an opportunity to enhance due to the appearance of a new channel caused by the electron-phonon interaction. Meanwhile, the figure of merit is found to cause similar effects to the thermopower. Therefore, in the case of low temperature, the electron-phonon interaction contributes little to the destruction of the thermoelectric effect, namely, it is not the necessary condition for the suppression of the thermoelectric effect. With the increase of temperature, the negative effect of the electron-phonon interaction on the Fano interference becomes relatively distinct, which inevitably weakens the thermoelectric effect. Results of this paper will help to clarify the influence of electron-phonon interaction on the thermoelectric effect.

Keywords: quantum dot, electron-phonon interaction, fano effect, thermoelectric effect PACS: 73.21.La, 72.20.Pa, 73.23.-b DOI: 10.7498/aps.64.077301

<sup>\*</sup> Project supported by the Fundamental Research Funds for the Central Universities of Ministry Education of China (Grant No. N130505001), and the Science Research Foundation of Education Bureau of Liaoning Province, China (Grant No. L2014099).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: gwjneu@163.com