

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Wydział Fizyki
Zakład Fizyki Mezoskopowej



Spinowe efekty w transporcie termoelektrycznym przez układy kropek kwantowych

Łukasz Karwacki

Rozprawa doktorska

Promotor: prof. dr hab. Józef Barnaś

Promotor pomocniczy: dr Piotr Trocha

Poznań 2017

Streszczenie

Spinowe efekty termoelektryczne, a spinowy efekt Seebecka w szczególności, są obecnie uważane za jeden z najbardziej efektywnych sposobów uzyskiwania prądu spinowego. W niskowymiarowych strukturach zjawiska występujące naturalnie w tej skali umożliwiają znaczną kontrolę nad transportem ładunku i spinu. Jedną z takich struktur jest kropka kwantowa. W niniejszej rozprawie rozważany jest wpływ zjawisk występujących w układach kropek kwantowych takich jak blokada kulombowska oraz zjawiska interferencji kwantowej na zjawiska termoelektryczne zarówno ładunkowe jak i spinowe.

Rozprawa została podzielona na trzy części, w których rozważane są różne tzw. reżimy transportowe w układach kropek kwantowych: kulombowski, Kondo oraz słaby. W reżimie kulombowskim rozważono układ pojedynczej oraz dwóch kropek kwantowych połączonych z elektrodami magnetycznymi. Ponadto uwzględniono sprzężenie spinowo-orbitalne typu Rashby jako jeden z efektów spinowych stosowanych do manipulacji przepływem prądu spinowego w nanostrukturach.

W drugiej części opisano powyższe układy w reżimie silnych korelacji pomiędzy kropką lub układem dwóch kropek a elektrodami, czyli tzw. reżimem Kondo. Pokazano możliwość uzyskania większej efektywności termoelektrycznej w wyniku zajścia elektronowego analogu optycznego zjawiska Dicke.

W ostatniej części rozważono kropkę kwantową połączoną z elektrodami metalicznymi oraz wykonanymi z izolatora magnetycznego. W układzie tym pokazano możliwość konwersji wywołanego różnicą temperatur prądu spinowego przenoszonego przez elektrony na prąd spinowy przenoszony przez kwanty fal spinowych, czyli magnony. Pokazano również możliwość uzyskania termicznej diody spinowej.

Podziękowania

Dziękuję mojemu promotorowi, prof. dr. hab. Józefowi Barnasiowi, za cierpliwość, opiekę naukową i umożliwienie dalszego rozwoju w dziedzinie elektroniki spinowej.

Dziękuję również dr. Piotrowi Trocha za cenne rady i pomocne dyskusje.

Podziękowania składam także Koleżankom i Kolegom z Zakładu Fizyki Mezoskopowej za miłą atmosferę.

Dziękuję Rodzicom za wsparcie.

Wsparcie finansowe:

Niniejsza rozprawa została sfinansowana ze środków projektu Narodowego Centrum Nauki:

Spinowe efekty termoelektryczne w transporcie przez układy nanoskopowe,

DEC-2012/04/A/ST3/00372.



NARODOWE CENTRUM NAUKI

Spis treści

1	Wprowadzenie	1
1.1	Kropki kwantowe	3
1.1.1	Zjawisko Kondo	6
1.2	Zjawiska termoelektryczne	9
1.2.1	Efekty ładunkowe	14
1.2.2	Efekty spinowe	16
1.3	Oddziaływanie spinowo-orbitalne typu Rashby	18
1.4	Zjawiska interferencji kwantowej	20
1.5	Układ rozprawy	22
I	Układy słabo skorelowanych kropek kwantowych	25
2	Wpływ oddziaływania spinowo-orbitalnego Rashby na transport termoelektryczny przez kropkę kwantową	27
2.1	Opis teoretyczny	27
2.1.1	Model układu	27
2.1.2	Prąd elektryczny i prąd spinowy	28
2.1.3	Funkcje Greena i współczynnik transmisji	32
2.2	Wyniki numeryczne	34
2.2.1	Transport w liniowej odpowiedzi	35
2.2.2	Transport nierównowagowy: silnik cieplny	42
2.3	Podsumowanie	43
3	Spinowo-zależny transport termoelektryczny przez układ dwóch kropek kwantowych z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym Rashby	45
3.1	Opis teoretyczny	45
3.1.1	Model układu	45
3.1.2	Funkcje Greena i współczynnik transmisji	47
3.2	Wyniki numeryczne	49
3.2.1	Wpływ korelacji kulombowskich na efekty termoelektryczne	50
3.2.2	Modulacja efektów termoelektrycznych fazą Rashby	53
3.3	Podsumowanie	54

II	Układy silnie skorelowanych kropek kwantowych	55
4	Efekty termoelektryczne w układzie silnie skorelowanej kropki kwantowej z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym Rashby	57
4.1	Opis teoretyczny	57
4.1.1	Metoda bozonów pomocniczych	57
4.1.2	Funkcje Greena i współczynnik transmisji	60
4.2	Wyniki numeryczne	61
4.2.1	Temperatura Kondo i pole wymiany	61
4.2.2	Funkcja spektralna i współczynnik transmisji	62
4.2.3	Efekty termoelektryczne: przypadek braku akumulacji spinowej	65
4.2.4	Efekty termoelektryczne: przypadek skończonej akumulacji spinowej	70
4.3	Podsumowanie	70
5	Wpływ zjawisk interferencyjnych na transport termoelektryczny przez dwie silnie skorelowane kropki kwantowe	73
5.1	Opis teoretyczny	73
5.1.1	Model układu	73
5.1.2	Funkcje Greena i współczynnik transmisji	76
5.2	Wyniki numeryczne	77
5.2.1	Efekty interferencyjne	78
5.2.2	Elektrody niemagnetyczne	80
5.2.3	Elektrody magnetyczne: brak akumulacji spinowej	84
5.2.4	Elektrody magnetyczne: akumulacja spinowa	86
5.3	Podsumowanie	91
6	Wpływ oddziaływania spinowo-orbitalnego Rashby na transport termoelektryczny przez dwie silnie skorelowane kropki kwantowe	93
6.1	Opis teoretyczny	93
6.2	Wyniki numeryczne	94
6.2.1	Rozszczepienie poziomów kropek	94
6.2.2	Efekty termoelektryczne	95
6.3	Podsumowanie	98
III	Układ hybrydowy słabo sprzężonej kropki kwantowej	99
7	Transport fal spinowych przez kropkę kwantową	101
7.1	Opis teoretyczny	101
7.1.1	Model	101
7.1.2	Metoda obliczeniowa	103
7.1.3	Prądy płynące przez kropkę	104
7.2	Rezultaty i dyskusja	106

7.2.1	Przypadek szczególny 1: kropka połączona z dwiema elektrodami dielektrycznymi (I - QD - I).	107
7.2.2	Przypadek szczególny 2: kropka połączona z elektrodą metaliczną i dielektryczną (M - QD - I).	109
7.2.3	Przypadek ogólny: kropka połączona z czterema elektrodami	111
7.2.4	Przypadek skończonej wartości U	115
7.2.5	Silnik cieplny	118
7.3	Podsumowanie	120
8	Podsumowanie	121
	Dodatek	127
A	Podstawowe transformacje	127
	Bibliografia	133
	Lista publikacji	143
	Abstract	145

Rozdział 1

Wprowadzenie

Zgodnie z empiryczną obserwacją znaną powszechnie jako prawo Moore’a liczba tranzystorów w układach scalonych, a co za tym idzie również ich wydajność, podwaja się w przybliżeniu co dwa lata. Tempo miniaturyzacji półprzewodnikowych układów elektronicznych jest jednak ograniczone [1–3]. Bramki w obecnie stosowanych tranzystorach, wchodzących w skład układów scalonych, są oparte na krzemie i mają rozmiary rzędu 14 nm. Prawo Moore’a traci powoli swoją wartość prognostyczną, a całkowite załamanie się tej obserwacji jest przewidywane w najbliższych dwóch dekadach, gdy bramki tranzystorów produkowanych w oparciu o dotychczasową technologię półprzewodnikową osiągną rozmiary poniżej 10 nm, co spowoduje znaczny wzrost prawdopodobieństwa tunelowania elektronów przez bramkę i pojawienie się prądów upływu [1–3].

Drugim z powodów, dla których dotychczasowe architektury elektroniczne zawiodą jest wzrastająca z malejącym rozmiarem układu gęstość ciepła wydzielanego przez układ, objawiającego się szumem termicznym (szumem Johnsona-Nyquista) [1]. Jak wiadomo prąd elektryczny płynący przez przewodnik powoduje jego podgrzanie, zgodnie z prawem Joule’a-Lenza, i dodatkowy wzrost oporu hamującego przepływ prądu, a w rezultacie również degradującego urządzenie. Jest to związane ze sprzężeniem układu elektronów przewodnictwa i otaczających je rdzeni atomowych, których kwanty drgań zwane fononami są głównym czynnikiem powodującym rozpraszanie elektronów. Obecnie w celu pozbycia się tego nadmiarowego ciepła stosuje się różne pasywne i aktywne elementy odprowadzające ciepło do otoczenia. Zmniejszanie skali elementów elektronicznych znacznie utrudni odprowadzenie tego ciepła — same aktywne elementy chłodzące musiałyby pobierać dużą moc. Jednak zamiast odprowadzać to ciepło do otoczenia można przetworzyć je w użyteczne źródło energii, obniżając tym samym pobór zewnętrznej mocy.

Rozwiązania powyższych problemów wymagają zastosowania materiałów innych niż krzem oraz odmiennego zaprojektowania nowych elementów elektronicznych. Kierunkami, z których należy oczekiwać odpowiedzi na powyżej postawione problemy, są stosunkowo młode interdyscyplinarne poddziedziny nauki: fizyka mezoskopowa [4] oraz spintronika (elektronika spinowa) [5–8]. Pierwsza z dziedzin jest związana z transportem w układach niskowymiarowych, w których podstawową rolę odgrywają zjawiska kwantyzacji ładunku oraz zjawiska interferencji kwantowej.

Od czasu doświadczalnego potwierdzenia dualizmu korpuskularno-falowego materii dla elektronów w eksperymencie Davissona i Germera (1927) [9] pokazano, że zjawisko interferencji kwantowej zachodzi również w przypadku większych obiektów takich jak np. fuleren, czyli alotropowa odmiana węgla, C_{60} [10]. Dalsze zmniejszanie rozmiarów układów elektronicznych będzie niechybnie prowadziło do silnego uwidocznienia się efektów interferencyjnych, które w aktualnie stosowanych architekturach układów scalonych są niepożądane. Jednakże w urządzeniach mezoskopowych kwantowe efekty interferencyjne stanowią jeden z atutów, gdyż pozwalają one na kontrolowanie transportu.

Jak wspomniano, druga z dziedzin, która może dostarczyć rozwiązania problemów wynikających z miniaturyzacji urządzeń elektronicznych jest spintronika. Jej głównym punktem zainteresowania jest spin jako nośnik informacji.

Spin, podobnie jak ładunek i masa, należy do podstawowych własności elektronu. Własność ta nie jest możliwa do adekwatnego wyjaśnienia w obrębie fizyki klasycznej, a nawet w obrębie kwantowego równania Schrödingera. Spin jest własnością, której wyjaśnienie jest możliwe wyłącznie poprzez połączenie teorii kwantowej oraz szczególnej teorii względności. Połączenie to, którego wyrazem jest relatywistyczne równanie Diraca, pozwoliło na wyjaśnienie wielu zjawisk i otwarcie nowych możliwości w rozwoju urządzeń przetwarzających informacje. Istnienie spinu ma istotne konsekwencje — oddziaływania elektrostatyczne pomiędzy, obdarzonymi spinem, elektronami odpowiadają, m. in., za istnienie porządku magnetycznego. Ponadto orbitalny i spinowy stopień swobody elektronów mogą być ze sobą silnie powiązane, np. w metalach z rodziny ziem rzadkich lub metalach ciężkich takich jak platyna. To oddziaływanie spinowo-orbitalne cieszy się w ostatnich latach dużym zainteresowaniem, ze względu na możliwość stosowania prądu elektrycznego do kontrolowania przepływu spinu. Rozwój spintroniki był możliwy dzięki postępom w technologii litograficznej i, w rezultacie, pojawienia się możliwości tworzenia cienkich warstw różnych materiałów, rzędu rozmiarów atomów. W szczególności pierwsze komercyjne sukcesy spintroniki pokazały konieczność dalszego rozwoju tej dziedziny. Powstanie elementów stosowanych w głowicach dysków twardych i magnetycznych pamięciach opartych na zjawiskach gigantycznego magnetooporu (GMR, ang. *giant magnetoresistance*) [11–14] oraz tunelowego magnetooporu (TMR, ang. *tunnel magnetoresistance*) [15, 16] przyczyniło się między innymi do wzrostu gęstości zapisu danych i możliwości dalszego rozwoju pojemnych nośników danych.

Uproszczony opis powyższych zjawisk możliwy jest w oparciu o dwukanałowy model Motta, w którym zakłada się niezależność dwóch kanałów transportowych dla nośników o spinie równoległym do kierunku namagnesowania ferromagnetycznej warstwy (spin skierowany „w górę”, $\uparrow$) oraz nośników o spinie przeciwnym do wyróżnionej osi namagnesowania (spin skierowany „w dół”, $\downarrow$). Model ten jest słuszny dla układów, w których grubość warstw jest mniejsza niż droga dyfuzji spinu, która jest średnią drogą po której elektron propaguje się bez zmiany spinu. Wpływ rozpraszania elektronów o różnych spinach w układzie wielowarstwowym można rozpatrywać w przybliżeniu jako układ oporników połączonych w szereg dla jednego kierunku spinu, przy czym w zależności od badanego materiału ferromagnetycznego, oporniki reprezentujące poszczególne kanały spinowe charakteryzują się inną wartością oporu — większą dla nośników mniejszościowych, mniejszą dla nośników większościowych, a identyczną wartością w przypadku warstwy niemagnetycznej. Gdy namagnesowanie warstw ferromagnetycznych jest

kolinearne i jednakowo skierowane — równoległe (P, ang. *parallel*) — układ charakteryzuje się niskim oporem. W przypadku, gdy namagnesowanie jednej z warstw jest zorientowane przeciwnie — antyrównoległe (AP, ang. *antiparallel*) — układ charakteryzuje się wysokim oporem. Jest to związane z faktem, że w pierwszym przypadku elektrony o spinie $\uparrow$ mogą swobodnie przejść do adekwatnych stanów w warstwie ferromagnetycznej, podczas gdy w drugim przypadku elektrony o danym spinie są silnie rozpraszane w jednej z warstw ferromagnetycznych, co prowadzi do redukcji prądu.

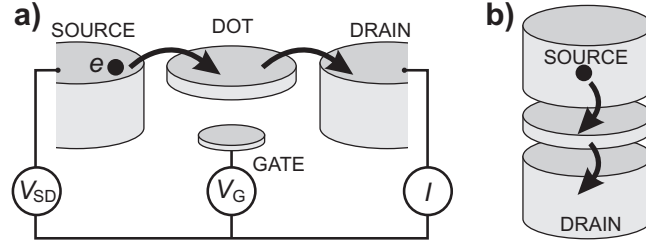
Przepływ spinu można jednocześnie powiązać z prądem spinowym, który w przypadku metali magnetycznych jest zdefiniowany jako różnica prądów nośników większościowych i mniejszościowych. Największą przewagą wykorzystania w elektronice prądu spinowego nad prądem ładunkowym jest możliwość jego przepływu nawet w izolatorach. W tym przypadku prąd przenoszony jest przez fale spinowe, co całkowicie eliminuje problem generacji ciepła Joule’a-Lenza. Dotychczas akumulacja spinowa, która indukuje prąd spinowy, generowana była przeważnie poprzez przyłożenie napięcia, czyli przepływ prądu ładunkowego. Nawet w przypadku układów bazujących na izolatorach, prąd spinowy generowany był przez prąd ładunkowy przepływający w przyległej warstwie metalicznej. Poprzez przyłożenie gradientu temperatury pomiędzy końcami układu można uzyskać prąd spinowy bez towarzyszącego mu prądu ładunkowego.

Powyższe zjawiska wykazują szczególnie interesujące właściwości w obrębie układów niskowymiarowych takich jak kropki kwantowe. Z tego względu głównym celem przyświecającym niniejszej rozprawie jest opis teoretyczny zjawisk termoelektrycznych i spinowych zjawisk termoelektrycznych w układach kropek kwantowych.

1.1 Kropki kwantowe

Kropki kwantowe są strukturami tzw. zero-wymiarowymi, co oznacza, że elektrony są w nich silnie zlokalizowane w trzech kierunkach przestrzennych. Ograniczenie stopni swobody powoduje skwantowanie energii elektronów, które przypomina spektrum energii w atomach, skąd wynika inna nazwa kropek kwantowych - „sztuczne atomy” lub „sztuczne molekuly” w przypadku układów większej liczby kropek kwantowych. Jedną z różnic pomiędzy atomami a kropkami kwantowymi jest możliwość dołączenia kropki kwantowej do obwodu elektrycznego złożonego z elektrody źródłowej, drenu i bramkującej, co pozwala na przepływ prądu elektrycznego przez układ oraz ścisłą kontrolę nad nim, otwierając drogę do stworzenia niskowymiarowych odpowiedników układów elektronicznych takich jak diody czy tranzystory. Obecnie prowadzone są badania nad stosowaniem układów — matryc kropek kwantowych, na kształt sztucznego ciała stałego [17, 18]. Uzasadnionym zatem wydaje się rozpatrywanie własności części składowych takich matryc, czyli pojedynczych i podwójnych kropek kwantowych, które są przedmiotem zainteresowania niniejszej rozprawy.

W ogólności nazwa „kropka kwantowa” stała się w przeciągu ostatnich lat bardzo pojemnym terminem określającym układy, w których może przebywać skończona, niewielka liczba elektronów. Realizacją kropki kwantowej może być m. in. molekula magnetyczna [19], metaliczna granulka [20] lub odpowiednio spreparowane nanorurki węglowe [21, 22] i grafen [23]. W dalszej części rozprawy rozpatrywane będą prawie wyłącznie kropki kwantowe stworzone w

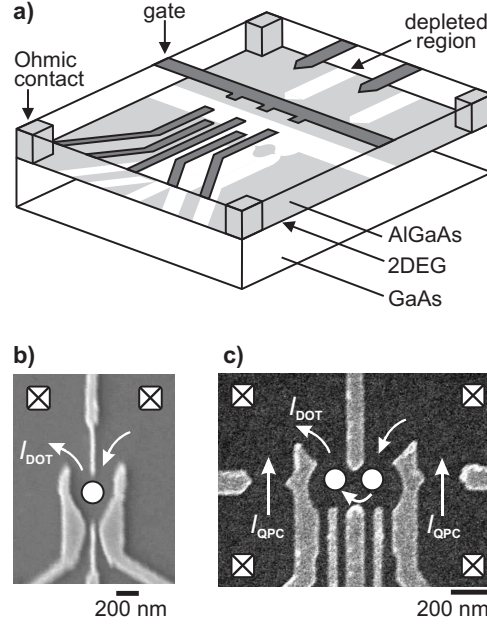


Rysunek 1.1: Schematyczne przedstawienie dwóch podstawowych rodzajów kropek kwantowych. (a) Kropka kwantowa lateralna. (b) Kropka kwantowa wertykalna. Rysunek pochodzi z pracy [25].

oparciu o heterostruktury półprzewodnikowe, ze względu na ich dobrze poznane właściwości transportowe [24–28].

W niskowymiarowych układach półprzewodnikowych znajduje się nawet do 10^6 atomów, a co za tym idzie również elektronów, które są w większości silnie związane z jądrami, pozostawiając niewielką liczbę elektronów swobodnych. Na rys. 1.1 pokazano schematycznie możliwe realizacje kropek kwantowych. Rysunek 1.1(a) pokazuje tzw. kropkę kwantową bramkowaną lub lateralną, podczas gdy rys. 1.1(b) pokazuje kropkę kwantową pionową. Dalsze rozważania zostaną ograniczone do kropki kwantowej typu bramkowanego przedstawionego na rys. 1.1(a) oraz na rys. 1.2. W celu uzyskania takiego układu wytwarzana jest wielowarstwowa półprzewodnikowa GaAs i AlGaAs. Następnie warstwa AlGaAs jest domieszkowana w celu uzyskania nadmiaru elektronów. Na granicy warstw (ok. 100 nm poniżej powierzchni) wytwarza się dwuwymiarowy gaz elektronowy (2DEG, ang. *two-dimensional electron gas*), czyli gaz elektronów, których swobodny ruch jest możliwy jedynie w obrębie płaszczyzny międzywarstwowej. Gaz ten charakteryzuje się wysoką ruchliwością nośników, dzięki czemu średnia droga swobodna w takiej strukturze jest większa od samej struktury, co prowadzi do balistycznego transportu przez nią. Następnie przy pomocy metod litograficznych na górną warstwę nakładane są metaliczne elektrody. Przyłożenie ujemnie spolaryzowanego napięcia do tych elektrod definiuje bariery tunelowe i obszar kropki kwantowej w gazie elektronowym. Wytworzone w ten sposób bariery wysokiego potencjału oddzielają wyodrębniony obszar kropki kwantowej od elektrod źródła i drenu, dzięki czemu możliwe jest uzyskanie określonej liczby elektronów na kropce.

Oprócz wyżej wspomnianej własności lokalizacji określonej liczby elektronów na kropce ważnym elementem w transporcie jednoelektronowym jest istnienie zjawiska tzw. blokady kulombowskiej. Odpychanie kulombowskie pomiędzy elektronami, które występuje w tak małej strukturze jaką jest kropka kwantowa prowadzi do tego, że dodanie kolejnego elektronu na kropkę jest związane z dostarczeniem odpowiednio dużej energii, tzw. energii ładowania E_C . W obszarze blokady kulombowskiej liczba N elektronów jest dokładnie określona. Obszar pomiędzy kolejnymi obszarami określonej liczby elektronów (tzn. pomiędzy N a $N \pm 1$ elektronami) jest obszarem fluktuacji ładunku, która umożliwia przepływ prądu przez strukturę.



Rysunek 1.2: (a) Schematyczne przedstawienie eksperymentalnej realizacji układów lateralnych kropek kwantowych. (b) Obraz mikroskopowy przedstawiający realizację układu pojedynczej kropki kwantowej. (c) Obraz mikroskopowy przedstawiający realizację układu dwóch kropek kwantowych. Rysunek pochodzi z pracy [25].

W celu zaobserwowania tych efektów konieczne jest spełnienie dwóch warunków [4, 24]:

$$\frac{e^2}{C} \gg k_B T, \quad (1.1a)$$

$$R_t \gg \frac{h}{e^2}, \quad (1.1b)$$

gdzie C jest pojemnością kropki kwantowej. Warunki te oznaczają, że energia ładowania musi być dużo większa od energii termicznej oraz to, że opór bariery tunelowej, występującej pomiędzy kropką a elektrodami, musi być większy niż kwant oporności $h/e^2 = 25.813 \text{ k}\Omega$. Pierwszy warunek sprawia, że eksperymenty na kropkach kwantowych muszą być prowadzone w stosunkowo niskich temperaturach rzędu 100 mK, a także wymusza niewielkie rozmiary kropek (ok. 100 nm). Drugi warunek zostaje spełniony przez słabe sprzężenie kropki z elektrodami. Słabe sprzężenie oznacza, że elektrony tunelujące poprzez jedno ze złączy ulegają rozproszeniu a następnie relaksacji, przez co pomija się rezonansowe tunelowanie poprzez obydwa złącza jednocześnie.

W celu pokazania podstawowych własności kropki kwantowej można układ z rys. 1.2(a) zastąpić obwodem elektrycznym, w którym bariery tunelowe pomiędzy kropką a elektrodami zostały zastąpione układami oporników i kondensatora (tzw. model stałego oddziaływania).

Liczba wolnych stanów na kropce może zostać wyznaczona jako najmniejsza energia związana z dodaniem elektronu na kropkę, czyli potencjał elektrochemiczny $\mu_{qd} = U(N) - U(N - 1)$, gdzie $U(n)$ jest energią stanu podstawowego n elektronów w zerowej temperaturze. Całkowita pojemność kropki C uwzględnia pojemności pomiędzy kropką a elektrodami bramkującą oraz źródła i drenu, co można zapisać w postaci sumy $C = C_q + C_l + C_r$. Przyjęto również założenie

liniowej odpowiedzi układu, czyli gdy spełnione są warunki $V_{sd} \ll \Delta E/e$ oraz $V_{sd} \ll e/C$, gdzie V_{sd} jest napięciem pomiędzy elektrodami źródła i drenu, a ΔE oznacza różnicę energii poziomów kropki. Potencjał elektrochemiczny kropki z N elektronami może zostać zapisany następująco [24]:

$$\mu_{qd}(N) = E_N + (N - N_0 - \frac{1}{2})\frac{e^2}{C} - e\frac{C_q}{C}V_g, \quad (1.2)$$

gdzie E_N jest energią N -tego elektronu mierzona od minimum pasma przewodnictwa, N_0 jest liczbą elektronów dla zerowego napięcia bramki (ładunek tła), V_g wartością napięcia bramki. Następnie zmiana w potencjale elektrochemicznym kropki związana z przetunelowaniem jednego elektronu wynosi:

$$\mu_{qd}(N+1) - \mu_{qd}(N) = \Delta E + \frac{e^2}{C}. \quad (1.3)$$

Przewodnictwo w takim układzie będzie oscylować pomiędzy wartościami zero i maksymalnej konduktancji z okresem:

$$\Delta V_g = \frac{C}{eC_g} \left(\Delta E + \frac{e^2}{C} \right). \quad (1.4)$$

Powyższe rozważania dotyczyły transportu w tzw. reżimie słabego sprzężenia, tzn. przypadku, gdy spełniony jest warunek $\hbar\Gamma \ll k_B T$, gdzie Γ jest częstością przejść cząstek pomiędzy kropką a elektrodą, która odpowiada za poszerzenie poziomu energetycznego kropki. Spełnienie powyższego warunku pozwala na zastosowanie metod perturbacyjnych ze względu na Γ w celu wyznaczenia parametrów transportowych układu. W przypadku, gdy sprzężenie zaczyna dominować nad energią termiczną pojawiają się procesy wyższego rzędu takie jak współtunelowanie lub efekt Kondo.

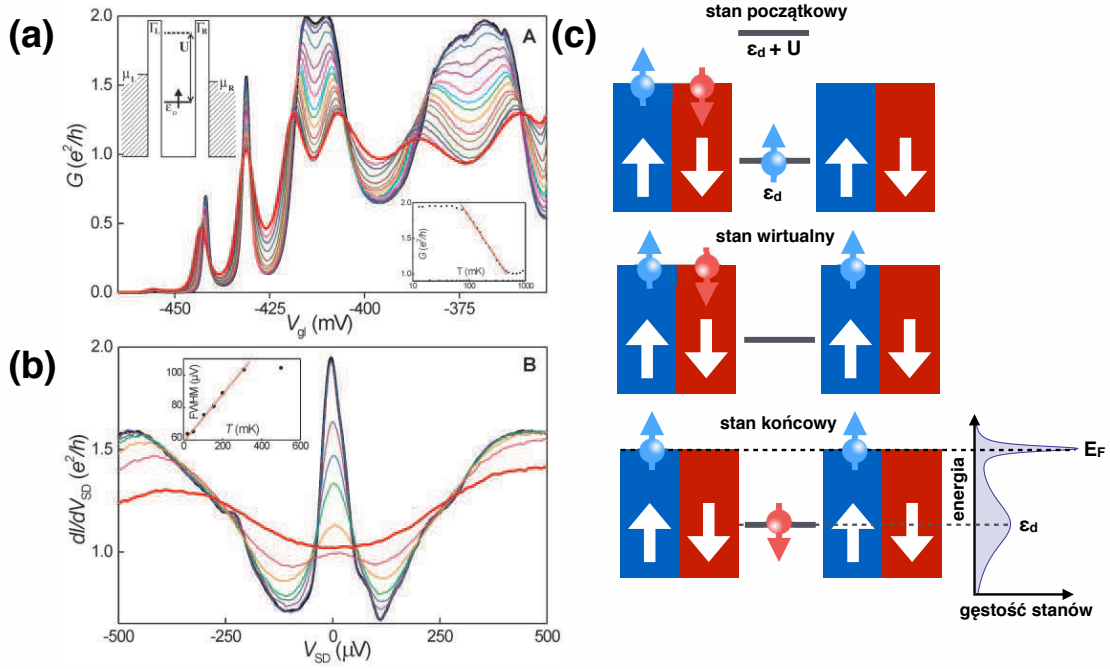
1.1.1 Zjawisko Kondo

Efekt Kondo przyczynił się do znacznego zintensyfikowania badań nad kropkami kwantowymi, gdy pod koniec lat 90-tych ubiegłego wieku pokazano eksperymentalną realizację tego zjawiska w układzie z kropką kwantową [29–32].

Pierwotnie efekt ten został zaobserwowany w warstwie złota, do której dodano magnetyczne domieszki żelaza [34]. Zaobserwowano, że obniżenie temperatury skutkowało znacznym wzrostem oporności takiego układu. Zgodnie z regułą Matthiessena opór właściwy metalu można zapisać jako sumę [35]:

$$\rho = \rho_l(T) + \rho_d, \quad (1.5)$$

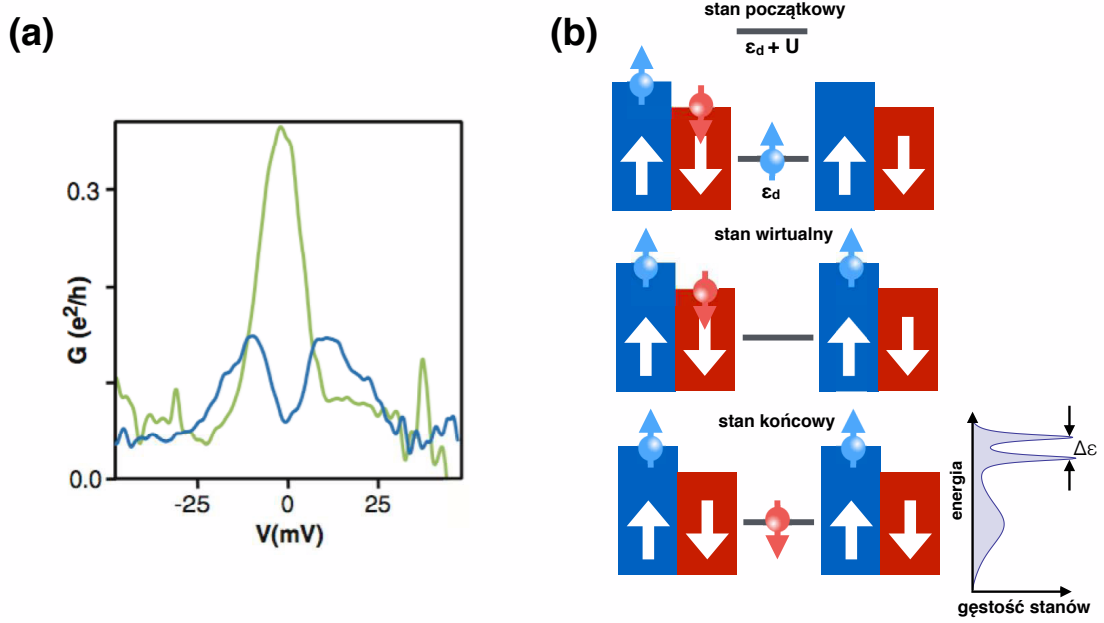
gdzie $\rho_l(T)$ jest zależnym od temperatury (w niskich temperaturach $\sim T^5$) oporem właściwym wynikającym z rozpraszania elektronów na sieci krystalicznej, a ρ_d jest niezależnym od temperatury oporem właściwym resztkowym wynikającym z istnienia defektów i domieszek magnetycznych w kryształach. W niskich temperaturach w przypadku metali z domieszkami niemagnetycznymi obserwowano nasycenie się oporu do wartości ρ_d . Efekty wielociałowe jednak



Rysunek 1.3: Efekt Kondo w kropkach kwantowych. (a) Zależność konduktancji liniowej od napięcia bramkującego na kropce dla zakresu temperatur od 15 mK (czarna krzywa) do 800 mK (czerwona krzywa). (b) Zależność konduktancji różniczkowej od napięcia transportowego pomiędzy elektrodami dla zakresu temperatur od 15 mK (czarna krzywa) do 900 mK (czerwona krzywa). (c) Schemat energetyczny zjawiska. Rysunki (a) i (b) zostały zaadaptowane z pracy [29].

mogą powodować inne zachowanie oporu właściwego w niskich temperaturach. W przypadku nadprzewodnictwa oznacza to przejście fazowe i zanik oporu. W przypadku efektu Kondo obserwowana zależność jest przeciwna — jak wspomniano powyżej opór wykazuje minimum dla pewnej temperatury T_K (tzw. temperatura Kondo). W kolejnych latach zjawisko to zostało wyjaśnione na przykładzie modelu oddziaływania s - d [33], a następnie równoważnego mu modelu Andersona [36–38]. Z analizy opartej na tych modelach wynika, że efekt Kondo pochodzi od oddziaływania momentu magnetycznego domieszki z morzem elektronów otaczającej ją matrycy krystalicznej. Elektrony w metalu opisywane są jako fale płaskie o określonej wartości wektora falowego $\mathbf{k}$. Rozpraszanie elektronów na domieszce powoduje mieszanie się fal o różnych wektorach falowych. Wypadkowa zmiana wektora falowego powoduje w następstwie wzrost oporu.

W przypadku kropek kwantowych efekt jest odwrotny. Jako, że kropka kwantowa jest oddzielona od elektrod barierami tunelowymi, fale elektronów z elektrod mogą ulec mieszanii jedynie poprzez stany kropki kwantowej, co powoduje obniżenie oporu (wzrost przewodnictwa elektrycznego). Rysunek 1.3(a) przedstawia wykres konduktancji liniowej w zależności od napięcia bramkującego na kropce dla różnych wartości temperatur. Dla niskich temperatur i wartości napięcia bramkującego odpowiadającego kropce obsadzonej przez nieparzystą liczbę elektronów, konduktancja wykazuje maksymalną wartość. Niesparowany spin na kropce jest konieczny w celu utworzenia singletu pomiędzy kropką a elektrodą i koniecznego do zajścia efektu Kondo. Podobnie, rozważając zależność konduktancji różniczkowej w zależności od napięcia



Rysunek 1.4: Efekt Kondo w kropkach kwantowych połączonych z elektrodami ferromagnetycznymi. (a) Zależność konduktancji liniowej od napięcia bramkującego. Niebieska krzywa odpowiada przypadkowi elektrod ferromagnetycznych, zielona przypadkowi elektrod niemagnetycznych. (b) Schemat energetyczny zjawiska. Rysunek (a) pochodzi z pracy [40] i dotyczy transportu przez molekułę C_{60} .

przyłożonego pomiędzy elektrodami z rys. 1.3(b), zauważalna jest tzw. anomalia zerowego napięcia transportowego, która jest charakterystyczna dla zjawiska Kondo. Sytuację można wyjaśnić na podstawie diagramu energetycznego układu kropki kwantowej przedstawionego na rys. 1.3(c), zakładając istnienie jednego poziomu ε_0 poniżej poziomu Fermiego elektrod. Jeżeli początkowo poziom kropki ε_d jest obsadzony elektronem o spinie $\sigma = \uparrow$ ($\downarrow$), możliwe jest jego przetunelowanie do elektrody [na rys. 1.3(a) po prawej stronie], podczas gdy z drugiej z elektrod [na rys. 1.3(a) po lewej stronie] tuneluje elektron o przeciwnym spinie $\bar{\sigma} = \downarrow$ ($\uparrow$). Taki proces jest dopuszczalny przez zasadę nieoznaczoności Heisenberga dla czasu życia stanu elektronu na kropce, $\Delta t \geq \hbar/|\varepsilon_d|$, i nazywany jest procesem wirtualnym. Uwzględniając dużą liczbę takich procesów, na wykresie gęstości stanów w zależności od energii oprócz standardowego pik odpowiadającego przetunelowaniu elektronu przez poziom ε_0 pojawia się również pik rezonansowy dla energii poziomu kropki odpowiadającego energii Fermiego elektrod (tzw. rezonans Abrikosova-Suhl'a lub pik Kondo).

Charakterystyczna temperatura, czyli temperatura Kondo, może zostać powiązana z podstawowymi parametrami kropki kwantowej, jej poziomem energetycznym ε_d , wartością parametru oddziaływania kulombowskiego U oraz wartością parametru sprzężenia Γ kropki z elektrodami następująco [39]:

$$T_K \approx \frac{1}{2} \sqrt{U\Gamma} \exp \frac{\pi \varepsilon_d (\varepsilon_d + U)}{U\Gamma}. \quad (1.6)$$

Temperatura ta osiąga minimum w punkcie symetrii $\varepsilon_d = -U/2$, czyli w sytuacji kropki obsadzonej pojedynczym elektronem.

Sytuacja ulega dalszemu skomplikowaniu w przypadku kropki kwantowej silnie sprzężonej z elektrodami ferromagnetycznymi w konfiguracji równoległej. Rys. 1.4(a) przedstawia zależność konduktancji liniowej od napięcia bramkującego. Kropką jest w tym przypadku molekula C_{60} [40]. W tym przypadku pik Kondo ulega rozszczepieniu (krzywa niebieska), co jest związane z faktem, że elektrody ferromagnetyczne stanowią źródło pola wymiany, które prowadzi do zniesienia degeneracji spinowej poziomu energetycznego ε_d kropki [40–42]. Spinowo-zależny wkład do energii kropki, pochodzący od pola wymiany, można zapisać następująco [41, 43, 44]:

$$\delta\varepsilon_{d\sigma} \approx \frac{1}{\pi} \int d\varepsilon \left\{ \frac{\Gamma_\sigma [1 - f(\varepsilon)]}{\varepsilon - \varepsilon_{d\sigma}} - \frac{\Gamma_{\bar{\sigma}} f(\varepsilon)}{\varepsilon - \varepsilon_{d\bar{\sigma}} - U} \right\}, \quad (1.7)$$

gdzie $f(\varepsilon)$ jest rozkładem Fermiego-Diraca elektronów w elektrodach, Γ_σ jest parametrem sprzężenia elektronu o spinie σ pomiędzy kropką a elektrodą, a U jest parametrem opisującym oddziaływanie kulombowskie na kropce. Pierwszy człon w powyższym wzorze opisuje przejście pomiędzy stanem pojedynczo-obsadzonej spinem $\sigma = \uparrow, \downarrow$ kropki, $|\sigma\rangle$, a stanem $|0\rangle$, czyli pustej kropki. Z kolei, drugi człon opisuje przejścia pomiędzy stanem pojedynczo obsadzonym, $|\sigma\rangle$, a podwójnie obsadzonym, $|2\rangle$. Przejście w drugim przypadku związane jest z tunelowaniem dziury o spinie $\bar{\sigma}$, czyli spinie przeciwnym do spinu elektronu już przebywającego na kropce. Rysunek 1.4(b) przedstawia schemat energetyczny procesu. Podobnie do przypadku niemagnetycznych elektrod, w zjawisku bierze udział pośredni stan wirtualny.

Dla temperatury $T = 0\text{K}$ rozszczepienie poziomu kropki można zapisać następującym wzorem [41, 43, 44]:

$$\Delta\varepsilon_d = \delta\varepsilon_\uparrow - \delta\varepsilon_\downarrow \approx \frac{p\Gamma}{\pi} \ln \left(\frac{|\varepsilon_d|}{\varepsilon_d + U} \right), \quad (1.8)$$

gdzie p jest parametrem opisującym polaryzację magnetyczną elektrod.

Ważnym wnioskiem wynikającym z powyższego wzoru jest zanik rozszczepienia poziomu kropki w punkcie symetrii elektron-dziura, czyli dla energii $\varepsilon_d = -U/2$. Pole to również nie odgrywa roli w przypadku konfiguracji antyrównoległej elektrod i takiej samej wartości sprzężenia kropki z obydwoma elektrodami, ponieważ spinowo-zależne wkłady do energii kropki kompensują się, co powoduje przywrócenie degeneracji spinowej poziomu kropki i w konsekwencji przywrócenie pik Kondo.

Zjawiska i właściwości kropek kwantowych opisane powyżej uzasadniają wykorzystanie kropek kwantowych w badaniach zarówno stosowanych, jako nowe elementy elektroniczne, ale i podstawowych, oferujących możliwość stosunkowo łatwo kontrolowanego badania zjawisk wielociałowych i w szczególności efektów kwantowych, trudnych do zrealizowania w innych układach.

1.2 Zjawiska termoelektryczne

Jednym z najważniejszych, z punktu widzenia zastosowań elektronicznych, zjawisk termoelektrycznych jest efekt Seebecka odkryty w 1821 roku [45] oraz odwrotny do niego efekt Peltiera (1834) [46, 47]. Konwencjonalny efekt Seebecka polega w ogólności na wytworzeniu napięcia (tzw. napięcia termoelektrycznego albo napięcia Seebecka) pod wpływem gradientu temperatury pomiędzy końcami badanego układu. Jeden z podstawowych układów, w którym dane zjawisko

zostało zademonstrowane składa się z przewodów wykonanych z dwóch różnych metali, które są połączone ze sobą na jednym z końców, podczas gdy wolne końce przewodów podłączone są do woltomierza. Następnie złącze jest podgrzewane, co powoduje powstanie napięcia rejestrowanego na woltomierzu. Mierzone napięcie termoelektryczne V jest proporcjonalne do różnicy temperatur ΔT pomiędzy końcami złącza [48]:

$$V = -S\Delta T, \quad (1.9)$$

gdzie S jest współczynnikiem Seebecka (nazywanym również termosilą), mówiącym o tym jak duże napięcie powstanie w wyniku przyłożonego gradientu temperatur.

Podobny efekt można zaobserwować w przypadku złącza dwóch półprzewodników typu p i typu n . W układach tego typu nośniki ładunku (dziury i elektrony) charakteryzują się innymi współczynnikami Seebecka, co również prowadzi do powstania napięcia termoelektrycznego na jednym z końców złącza pod wpływem gradientu temperatur pomiędzy końcami.

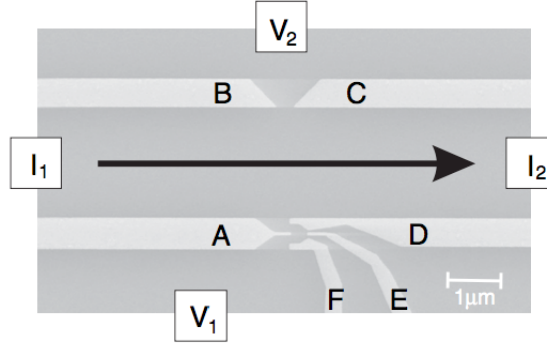
W celu polepszenia konwersji prądu cieplnego na ładunkowy konieczne jest zastosowanie materiałów charakteryzujących się wysoką wartością przewodnictwa elektrycznego i współczynnika Seebecka, ale niską wartością przewodnictwa cieplnego (w celu zapobieżenia zbyt szybkiemu wyrównywaniu się temperatur). W celu opisu sprawności i porównania układów termoelektrycznych wprowadzono bezwymiarową wielkość ZT wiążącą podstawowe właściwości transportowe [49]:

$$ZT = \frac{GS^2}{\kappa}T, \quad (1.10)$$

gdzie G jest przewodnictwem elektrycznym, S wprowadzonym wcześniej współczynnikiem Seebecka, κ przewodnictwem cieplnym, a T średnią temperaturą układu. Do końca poprzedniego wieku badania w dziedzinie zjawisk termoelektrycznych nie cieszyły się znacznym zainteresowaniem, ze względu na fakt, że dostępne materiały uzyskiwały współczynnik ZT nie większy, albo rzadko większy niż 1, co jest wartością niewystarczającą do zastosowań na większą skalę. Jednakże przełom w tej dziedzinie dokonał się poprzez zastosowanie struktur niskowymiarowych [50–53].

Znaczne zmniejszenie skali materiału, do rozmiarów rzędu nanometrów, prowadzi do ogromnych różnic w gęstości stanów i możliwości kontrolowania powyższych parametrów, a w rezultacie zwiększenia efektywności termoelektrycznej, co początkowo pokazano na przykładzie dwuwymiarowych struktur studni kwantowych oraz jednowymiarowych drutów kwantowych, dla których pokazano teoretycznie możliwość uzyskania wartości $ZT \approx 2 - 3.5$ w temperaturze pokojowej [51, 54]. Oprócz innego przebiegu gęstości stanów, w niskiej skali uwidaczniają się efekty kwantowe, takie jak np. efekty interferencyjne, które wprowadzają dodatkowe możliwości modyfikowania odpowiedzi termoelektrycznej układu.

Jedną z prac, w której w szczególności pokazano przewagę układów nanoskopowych jako elementów termoelektrycznych jest praca Mahana i Sofo [55]. Autorzy potraktowali problem maksymalizacji współczynnika ZT jako problem matematyczny, co pozwoliło im na dowiedzenie, że spełnienie warunków koniecznych dla uzyskania urządzenia termoelektrycznego o dużej efektywności termoelektrycznej jest możliwe wtedy, gdy gęstość stanów jest dystrybucją delta



Rysunek 1.5: Obraz SEM przedstawiający układ kropki kwantowej w eksperymencie termoelektrycznym. Bramki A, B, C, D definiują kanał przez który płynie prąd zmienny powodujący wzrost temperatury. Elektroda E odpowiada za zmianę napięcia bramkującego na kropce. Rysunek pochodzi z pracy [56].

Diraca. Taką właściwość wykazują idealne struktury zerowymiarowe, których jednymi z rzeczywistych przedstawicieli są kropki kwantowe. Gęstość stanów kropek kwantowych wyraża się w ogólności poprzez funkcję rozkładu typu Lorentza, która dąży do delty Diraca ze zmniejszającą się szerokością piku.

Dotychczas największą trudnością z punktu widzenia eksperymentu stanowiło uzyskanie odpowiedniego gradientu temperatur przez kropkę kwantową tak by nie przykryć efektów kwantowych oraz nie zniszczyć samej struktury. Metoda obecnie stosowana w wielu eksperymentach termoelektrycznych polega na podgrzewaniu wywołanym przepływem prądu zmiennego. Typowy przykład układu do pomiaru termosily kropki kwantowej został pokazany na rys. 1.5 [56]. W układzie stosowana jest kropka kwantowa powstała z odpowiedniego bramkowania dwuwymiarowego gazu elektronowego. Na rysunku zostały zaznaczone elektrody A-D, które definiują elektrodę o wyższej temperaturze oraz elektrody F i E, które odpowiadają za kontrolę napięcia bramkującego kropki kwantowej. Ponadto elektrody A i D oddzielają kanał o niższej temperaturze. Wzrost temperatury w rezerwarze elektronów wynika z wyindukowania prądu I_1 w tym kanale, którego przepływ powoduje podgrzanie gazu elektronowego do temperatury $T_{ch} > T_L$, gdzie T_L jest temperaturą sieci i kanału, przez który nie płynie prąd zmienny. Stąd pomiędzy tymi dwoma kanałami, na kropce kwantowej, różnica temperatur wynosi $\Delta T = T_{ch} - T_L$. Ponadto pomiędzy bramkami B i C znajduje się kwantowy kontakt punktowy, który charakteryzuje się referencyjną wartością współczynnika Seebecka S_{ref} i umożliwia pomiar napięcia termoelektrycznego V_2 , niezależnego od napięcia bramkującego w elektrodzie E. W efekcie napięcie termoelektryczne powstałe między kanałami poprzez kropkę kwantową wyraża się wzorem: $V_{th} = V_1 - V_2 = (S_{dot} - S_{ref})\Delta T$. Do tej pory zbadano układy zarówno pojedynczych jak i podwójnych kropek kwantowych w reżimach słabego i silnego sprzężenia, uzyskując zgodność z przewidywaniami teoretycznymi. Badania te pokazały, między innymi, że badanie termosily umożliwia uzyskanie informacji niedostępnych w eksperymentach badających samo przewodnictwo, takich jak np. symetria lokalnej gęstości stanów kropki kwantowej i rodzaj transportowanych nośników (elektrony bądź dziury) na podstawie znajomości samego znaku współczynnika Seebecka [56–61].

Pomimo możliwości uzyskania znacznych wartości współczynnika ZT w układach nanoskopowych, wciąż poważny problem stanowi ciepło Joule’a-Lenza generowane przez przepływ ładunków prowadzące nawet do uszkodzenia nanostruktury. Problem ten najprawdopodobniej będzie rozwiązany poprzez wykorzystanie spinowych stopni swobody nośników.

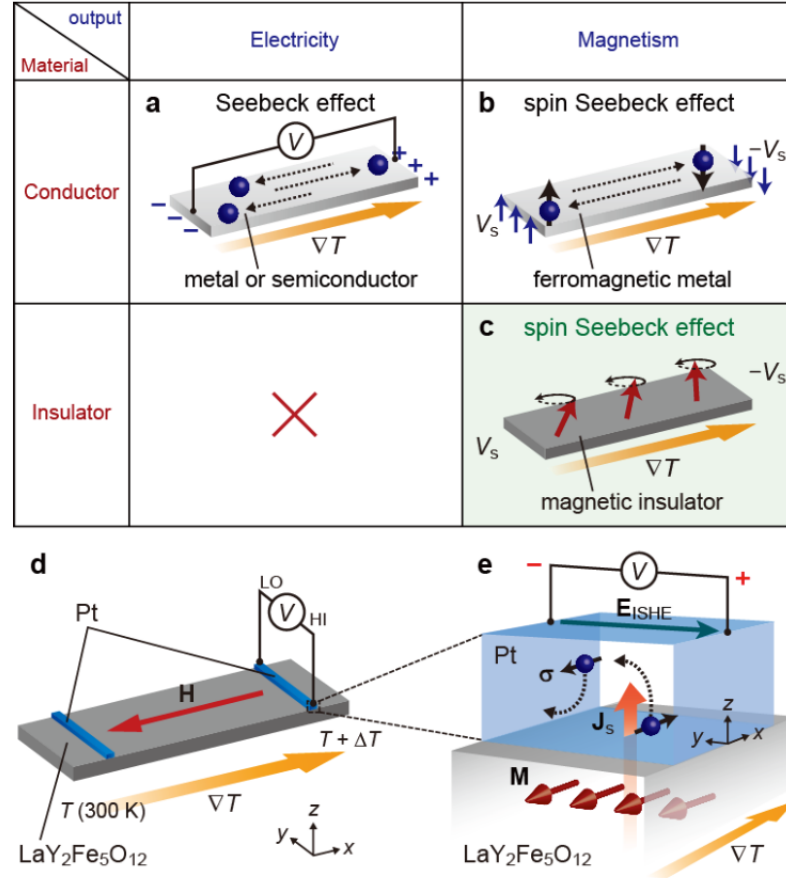
W 2008 roku po raz pierwszy ogłoszono zaobserwowanie tzw. spinowo-zależnego efektu Seebecka [62]. Materiałem, na którym przeprowadzono doświadczenie był permaloj (stop niklu i żelaza $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$), na którego jednym z końców przymocowano warstwę platyny. Permaloj jest przewodzącym materiałem magnetycznym, co oznacza, że elektrony o przeciwnych spinach charakteryzują się różnymi gęstościami rozkładu oraz różnymi prawdopodobieństwami rozproszeń, dzięki czemu transport w tym układzie można rozumieć w oparciu o model dwukanałowy, w którym transport nośników o spinie $\uparrow$ i $\downarrow$ przebiega niezależnie od siebie. W doświadczeniu pokazano, że różnica temperatur pomiędzy końcami warstwy, prowadzi do powstania różnicy potencjałów elektrochemicznych $\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$ na końcach permaloju. Różnica ta powoduje wyindukowanie prądu spinowego przez granicę międzywarstwową permaloju i platyny. Platyna jako metal szlachetny charakteryzuje się stosunkowo silnym sprzężeniem spinowo-orbitalnym, które umożliwia zajście odwrotnego spinowego efektu Halla. Pod wpływem tego sprzężenia wzdłuż warstwy platyny (prostopadle do namagnesowania permaloju) powstaje siła elektromotoryczna $\mathbf{E}_{\text{SHE}}$, która skupia elektrony o przeciwnych spinach na jednym z końców platynowej warstwy powodując powstanie mierzalnej różnicy potencjałów pomiędzy końcami tej warstwy. Schematycznie zjawisko to przedstawiono na rys. 1.6(b) i (e). Siła ta wyraża się następującym wzorem [62]:

$$\mathbf{E}_{\text{SHE}} = D_{\text{ISHE}} \mathbf{J}_s \times \boldsymbol{\sigma}, \quad (1.11)$$

gdzie D_{ISHE} jest efektywnością odwrotnego spinowego efektu Halla, $\mathbf{J}_s$ kierunkiem prądu spinowego wzdłuż warstwy permaloju, a $\boldsymbol{\sigma}$ wektorem polaryzacji spinowej prądu spinowego.

Od momentu publikacji powyższej obserwacji ogromnym zainteresowaniem cieszą się badania w obrębie dziedziny nazwanej spinową kalorytroniką [63, 64], której początki sięgają lat 80-tych [65]. W ramach tej dziedziny powstało wiele prac, w których pokazano m. in. spinowy odpowiednik efektu Peltiera [66], a także uzyskanie spinowego efektu Seebecka w różnych układach takich jak wyżej opisane przewodzące metale magnetyczne, półprzewodniki ferromagnetyczne [67] oraz magnetyczne izolatory [68]. Podział efektów termoelektrycznych ze względu na zastosowany materiał, przedstawiony na rys. 1.6, wskazuje na szczególną rolę izolatorów magnetycznych.

Zastosowanie izolatorów magnetycznych umożliwia uzyskanie prądu spinowego przenoszonego przez kwanty fal spinowych, czyli magnony, co pokazano schematycznie na rys. 1.6(c). Możliwość transportu informacji przy pomocy magnonów znalazła ujście w postaci nowych poddziedzin spintroniki zwanych magnoniką i magnonową spintroniką [69]. Przewaga jaką stanowią fale spinowe nad spinem przenoszonym przez elektrony wyraża się m. in. w możliwości tworzenia nowych algorytmów nie opartych na logice Boole’a, ze względu na dodatkowe stopnie swobody oferowane przez propagację fal (np. faza), dalszą miniaturyzację układów elektronicznych, która jednocześnie może być przełożona na zwiększenie szybkości obliczeniowej, a także możliwość uproszczenia architektur elektronicznych poprzez pozbycie się przewodowych połączeń pomiędzy



Rysunek 1.6: Podział efektów termoelektrycznych ze względu na materiał. Rysunek pochodzi z pracy [68].

podzespołami. Ponadto w większości przewodzących materiałów magnetycznych prąd spinowy przenoszony przez elektrony ma bardzo krótki zasięg ze względu na małą drogę dyfuzji spinu, podczas gdy w obecnie badanych izolatorach magnetycznych (YIG, $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$) tłumienie fal spinowych jest bardzo słabe, a co za tym idzie prąd spinowy przenoszony przez magnony może propagować się na odległości rzędu centymetrów [70]. Szczególnie dużym zainteresowaniem cieszą się tzw. wymienne fale spinowe (ang. *exchange spin waves*), które charakteryzują się małą długością fali ($\lambda < 1\mu\text{m}$ [69]) i w przeciwieństwie do długofalowych fal spinowych (tzw. dipolowych lub magnetostatycznych) mogą być stosowane w nanourządzeniach. Największe sukcesy, które już można zaliczyć w poczet magnoniki to stworzenie różnych elementów do przetwarzania informacji [71] i tranzystorów opartych w całości na transporcie magnonów [72], a także zaproponowanie nowych rozwiązań innych komponentów elektronicznych [73–75].

Pomimo wyżej opisanych sukcesów i nadziei związanej z nowymi rozwiązaniami w elektronice, koszty przetworzenia obecnie wykorzystywanych architektur elektronicznych na oparte całkowicie na magnonach mogą być zbyt wysokie, dlatego wiele badań prowadzonych jest nad konwersją prądu ładunkowego i spinowego przenoszonego przez elektrony na prąd spinowy przenoszony przez magnony i *vice versa* [76–78]. Konwersja taka jest możliwa dzięki zjawiskom przeniesienia spinowego momentu siły, spinowego pompowania oraz spinowego efektu Halla [79–82]. Kropki kwantowe, które do tej pory stanowiły głównie pole badań dla transportu elektronowego,

również z uwzględnieniem spinu, mogą także umożliwić dokładniejsze badanie konwersji prądów elektronowych i magnonowych [83–85].

W kolejnych dwóch podrozdziałach wyprowadzone zostaną wyrażenia na współczynniki termoelektryczne wykorzystywane w dalszej części rozprawy. Uwzględniony został tutaj podział na efekty ładunkowe oraz spinowe.

1.2.1 Efekty ładunkowe

Opis zjawisk termoelektrycznych zostanie przeprowadzony przy użyciu formalizmu Onsagera [86], tzn. wyprowadzeniu współczynników termoelektrycznych jako współczynników proporcjonalności pomiędzy odpowiednimi prądami (ładunkowym, spinowym i cieplnym) oraz uogólnionymi siłami termodynamicznymi je wywołującymi (napięcie, napięcie spinowe oraz różnica temperatur).

W ogólnym przypadku prąd ładunkowy płynący przez układ można zapisać jako [87]:

$$I = \frac{2e}{\hbar} \int d\varepsilon (f_L - f_R) T(\varepsilon), \quad (1.12)$$

gdzie $e > 0$ jest ładunkiem elementarnym, $f_{L,R}$ jest rozkładem Fermiego-Diraca lewej i prawej elektrody, $T(\varepsilon)$ współczynnikiem transmisji, który zostanie dokładniej potraktowany w następnych rozdziałach.

Prąd cieplny płynący pomiędzy wybranym rezerwuarem a kropką można zapisać jako:

$$I_Q = \frac{1}{\hbar} \int d\varepsilon (\varepsilon - \mu_0) (f_L - f_R) T(\varepsilon). \quad (1.13)$$

Funkcja rozkładu Fermiego-Diraca w przypadku niemagnetycznym jest dana następującym wzorem:

$$f_{L,R} = \left[\exp \left(\frac{\varepsilon - \mu_{L,R}}{k_B T_{L,R}} \right) + 1 \right]^{-1}, \quad (1.14)$$

gdzie potencjały elektrochemiczne i temperatury dwóch elektrod zostały zdefiniowane następująco:

$$\begin{aligned} \mu_L &= \mu_0, \\ \mu_R &= \mu_0 + \Delta\mu, \\ T_L &= T, \\ T_R &= T + \Delta T. \end{aligned} \quad (1.15)$$

W powyższych wyrażeniach $\Delta\mu = \mu_R - \mu_L = -e\Delta V$, gdzie $\Delta V = V_R - V_L$ jest napięciem pomiędzy elektrodami, a $\Delta T = T_L - T_R$ oznacza różnicę temperatur pomiędzy elektrodami.

Wykorzystując powyżej zdefiniowane siły uogólnione można dokonać rozwinięcia w szereg Taylora funkcji rozkładu Fermiego-Diraca ze wzoru (1.14) wokół różnicy potencjałów $\Delta\mu$ oraz różnicy temperatur ΔT , co, przy założeniu zanikających $\Delta\mu$ i ΔT , prowadzi do następującego

wyrażenia na różnicę funkcji rozkładu lewej i prawej elektrody $f_L - f_R$:

$$f_L - f_R \equiv \Delta f \approx \left. \frac{\partial(\Delta f)}{\partial(\Delta\mu)} \right|_{\Delta T, \Delta\mu=0} \Delta\mu + \left. \frac{\partial(\Delta f)}{\partial(\Delta T)} \right|_{\Delta T=\Delta\mu=0} \Delta T. \quad (1.16)$$

Powyższe wyrażenie można dodatkowo uprościć korzystając z następujących zależności:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial(\Delta f)}{\partial(\Delta\mu)} \right|_{\Delta T=\Delta\mu=0} &= \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}, \\ \left. \frac{\partial(\Delta f)}{\partial(\Delta T)} \right|_{\Delta T=\Delta\mu=0} &= -\frac{\varepsilon - \mu}{T} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}, \end{aligned} \quad (1.17)$$

gdzie f_0 jest równowagowym rozkładem Fermiego-Diraca (dla $\Delta\mu = 0$ i $\Delta T = 0$). Podstawiając wyrażenie (1.16) wraz z wyrażeniami (1.17) do wzorów (1.12) i (1.13), otrzymane zostają wyrażenia na prądy ładunkowy i cieplny w przybliżeniu liniowej odpowiedzi, co można zapisać w postaci macierzowej:

$$\begin{bmatrix} I \\ I_Q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^2 L_0 & -\frac{e}{T_0} L_1 \\ e L_1 & -\frac{e}{T} L_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta V \\ \Delta T \end{bmatrix}, \quad (1.18)$$

gdzie współczynniki

$$L_k = 1/h \int d\varepsilon (\varepsilon - \mu_0)^k \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) T(\varepsilon), \quad (1.19)$$

dla $k = 0, 1, 2$ są współczynnikami Onsagera [86]. Konduktancja elektryczna wyrażona przy pomocy powyższych współczynników (gdy $\Delta T=0$):

$$G = e^2 L_0. \quad (1.20)$$

Efekt Seebecka jest mierzony pod warunkiem znikania prądu ładunkowego, $I = 0$, co prowadzi do wzoru na współczynnik Seebecka wyrażonego poprzez współczynniki L_k (uwzględniając znak „minus” ze względu na fakt, że napięcie termoelektryczne jest spolaryzowane przeciwnie do kierunku gradientu temperatur):

$$S = -\frac{\Delta V}{\Delta T} = -\frac{1}{e T_0} \frac{L_1}{L_0}. \quad (1.21)$$

Za znak współczynnika Seebecka odpowiada typ nośnika ładunku. We współczynniku L_1 występuje wyrażenie $\varepsilon - \mu_0$, co oznacza, że dodatni współczynnik Seebecka będzie opisywał transport przenoszony przez dziury ($\varepsilon < \mu_0$), a ujemny przez elektrony ($\varepsilon > \mu_0$).

Wprowadzając do wyrażenia na prąd ciepła zależność na $\Delta\mu$ ($\Delta\mu = -e\Delta V_{sd}$) otrzymany zostaje wzór na wkład elektronowy do przewodnictwa cieplnego (zgodnie z prawem Fouriera):

$$\kappa = -\frac{I_Q}{\Delta T} = \frac{1}{T} \left(L_2 - \frac{L_1^2}{L_0} \right). \quad (1.22)$$

W ogólności, przewodnictwo cieplne κ zawiera wkład zarówno od elektronów, κ_e , jak i wkład od sieci krystalicznej (wkład fononowy), κ_l . Fononowy wkład do przewodnictwa cieplnego można

zapisać w postaci [88]:

$$\kappa_l = \frac{1}{2} C \langle v \rangle \Lambda, \quad (1.23)$$

gdzie C jest ciepłem właściwym gazu fononowego, $\langle v \rangle$ średnią prędkością fononów (równą prędkości dźwięku), a Λ ich średnią drogą swobodną. W masywnych układach wkład ten jest o wiele istotniejszy niż wkład elektronowy. W przypadku układów niskowymiarowych, dla których doświadczenia przeprowadzane są w stosunkowo niskich temperaturach (poniżej temperatury Debye'a) występują głównie fonony o małej długości fali, charakteryzujące się małą prędkością grupową, w związku z czym wkład κ_l jest pomijalny i usprawiedliwia zrównanie przewodnictwa cieplnego z wkładem elektronowym do przewodnictwa cieplnego, $\kappa \approx \kappa_e$.

Ostatecznie współczynnik efektywności termoelektrycznej opisującej efektywność przetwarzania dostarczonego ciepła na prąd termoelektryczny badanego układu opisywany jest następującym wzorem:

$$ZT = \frac{GS^2}{\kappa} T. \quad (1.24)$$

Współczynnik efektywności termoelektrycznej można również wyrazić w innej postaci:

$$ZT = \frac{S^2}{L}, \quad (1.25)$$

gdzie

$$L = \frac{\kappa}{GT}, \quad (1.26)$$

jest tzw. stosunkiem Lorenza lub liczbą Lorenza. Jak wiadomo, w przypadku metali, prawo Wiedemanna-Franza stwierdza, że powyższa liczba, przyjmuje stałą, niezależną od temperatury, wartość [88]

$$L = L_0 = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2. \quad (1.27)$$

W układach innych niż metale, np. w półprzewodnikach i w układach niskowymiarowych, takich jak kropki kwantowe, prawo Wiedemanna-Franza ulega naruszeniu [89–94].

Powyższe współczynniki zostały wyprowadzone przy założeniu braku akumulacji spinowej. W układach magnetycznych jednak, akumulacja spinowa odgrywa ważną rolę w transporcie, umożliwiając przepływ tzw. prądu spinowego. Uwzględnienie akumulacji spinowej prowadzi do innej postaci powyższych współczynników, co zostanie przedstawione poniżej.

1.2.2 Efekty spinowe

W przypadku uwzględnienia skończonej akumulacji spinowej w elektrodach zarówno współczynnik transmisji jak i funkcja rozkładu Fermiego-Diraca są zależne od spinu, co powoduje konieczność wyznaczenia składowych spinowych prądu:

$$I_\sigma = \frac{e}{h} \int d\varepsilon (f_L - f_{R\sigma}) T_\sigma(\varepsilon). \quad (1.28)$$

Prąd ładunkowy można wyrazić jako sumę składowych prądów nośników o spinie σ :

$$I = I_{\uparrow} + I_{\downarrow}, \quad (1.29)$$

podczas, gdy prąd spinowy jako różnicę:

$$I_s = \frac{\hbar}{2e} (I_{\uparrow} - I_{\downarrow}). \quad (1.30)$$

W wyrażeniu na składową prądu o spinie σ zależność od spinu pojawia się również w przypadku funkcji rozkładu Fermiego-Diraca prawej elektrody:

$$f_R = \left[\exp \left(\frac{\varepsilon - \mu_{R\sigma}}{k_B T_L} \right) + 1 \right]^{-1}. \quad (1.31)$$

W ogólnym przypadku temperatura może również zależeć od spinu elektronów, jednakże w dalszej dyskusji ta zależność zostanie pominięta, ze względu na przyjęcie założenia o szybszej relaksacji energii. W rozpatrywanym obecnie przypadku poszczególne symbole wchodzące w skład formuły (1.31) wyrażają się następująco:

$$\begin{aligned} \mu_L &= \mu_0, \\ \mu_{R\sigma} &= \mu_0 + \Delta\mu_{\sigma}, \\ T_L &= T, \\ T_R &= T + \Delta T. \end{aligned} \quad (1.32)$$

W powyższych wyrażeniach spinowa zależność potencjału elektrochemicznego pojawia się w różnicy $\Delta\mu_{\sigma}$ następująco:

$$\Delta\mu_{\sigma} = \Delta\mu + \hat{\sigma}\Delta\mu_s, \quad (1.33)$$

gdzie $\hat{\sigma} = 1$ dla spinu $\sigma = \uparrow$, a $\hat{\sigma} = -1$ dla $\sigma = \downarrow$. Różnica potencjałów elektrochemicznych $\Delta\mu$ jest zdefiniowana jako:

$$\Delta\mu = \mu_R - \mu_L = -e\Delta V, \quad (1.34)$$

Ponadto wprowadzono parametr opisujący akumulację spinową $\Delta\mu_s$, który wyraża się następująco:

$$\Delta\mu_s = \frac{1}{2} (\mu_{R\uparrow} - \mu_{R\downarrow}) = -e\Delta V_s, \quad (1.35)$$

gdzie ΔV_s jest tzw. napięciem spinowym.

Rozwijając w szereg Taylora różnicę $f_L - f_{R\sigma}$ względem $\Delta\mu$, ΔT i $\Delta\mu_s$ analogicznie do przypadku z poprzedniego podrozdziału, można zapisać prądy w postaci macierzowej:

$$\begin{bmatrix} I \\ I_s \\ I_Q \end{bmatrix} = \sum_{\sigma} \begin{bmatrix} e^2 L_{0\sigma} & e^2 \hat{\sigma} L_{0\sigma} & -\frac{e}{T} L_{1\sigma} \\ \frac{e\hbar}{2} \hat{\sigma} L_{0\sigma} & \frac{e\hbar}{2} L_{0\sigma} & -\frac{\hbar}{2T} \hat{\sigma} L_{1\sigma} \\ e L_{1\sigma} & e \hat{\sigma} L_{1\sigma} & -\frac{1}{T} L_{2\sigma} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta V \\ \Delta V_s \\ \Delta T \end{bmatrix}, \quad (1.36)$$

Ostatecznie zależność współczynników transportowych również ulegnie zmianie. Konduktancja ładunkowa:

$$G = e^2 \sum_{\sigma} L_{0\sigma}. \quad (1.37)$$

Można również wprowadzić współczynnik konduktancji spinowej:

$$G_s = \frac{e\hbar}{2} \sum_{\sigma} \hat{\sigma} L_{0\sigma}. \quad (1.38)$$

Przyjmując zanikanie jednocześnie prądu ładunkowego i spinowego lub, równoważnie, zanikanie prądu w obydwu kanałach spinowych można wprowadzić współczynnik Seebecka dla spinu σ :

$$S_{\sigma} = -\frac{\Delta V_{\sigma}}{\Delta T} = -\frac{1}{eT} \frac{L_{1\sigma}}{L_{0\sigma}}. \quad (1.39)$$

Powyższe wyrażenie pozwala na zapisanie współczynnika Seebecka ładunkowego i spinowego następująco:

$$\begin{aligned} S &= -\frac{\Delta V}{\Delta T} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} S_{\sigma}, \\ S_s &= -\frac{\Delta V_s}{\Delta T} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \hat{\sigma} S_{\sigma}. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Wkład elektronowy do przewodnictwa cieplnego κ wyrażony jest wzorem:

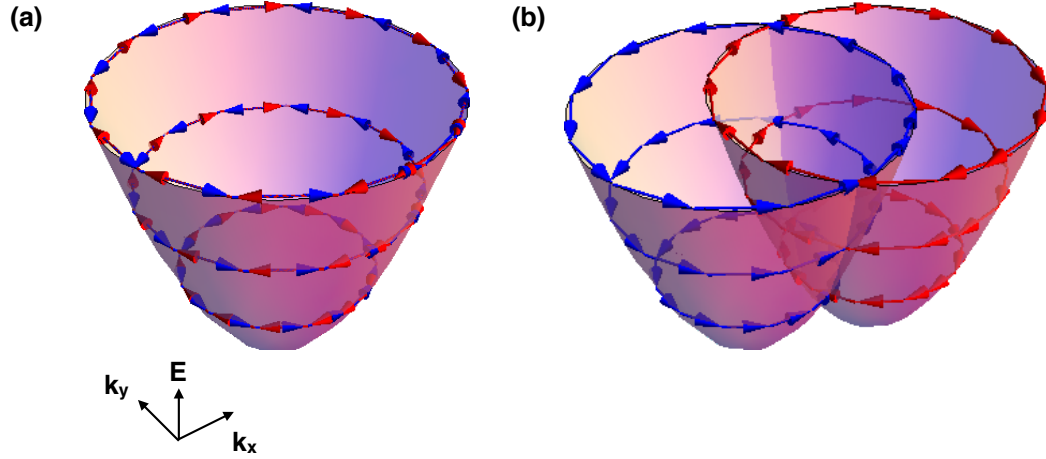
$$\kappa = \sum_{\sigma} \kappa_{\sigma} = \frac{1}{T} \sum_{\sigma} \left(L_{2\sigma} - \frac{L_{1\sigma}^2}{L_{0\sigma}} \right). \quad (1.41)$$

Ostatecznie poza współczynnikiem ładunkowym ZT , którego definicja nie zmienia się w stosunku do poprzedniego podrozdziału, można wprowadzić przez analogię spinowy współczynnik efektywności termoelektrycznej $Z_s T$:

$$Z_s T = \frac{2e}{\hbar} \frac{|G_s| S_s^2}{\kappa} T. \quad (1.42)$$

1.3 Oddziaływanie spinowo-orbitalne typu Rashby

Od wielu lat prowadzone są badania nad połączeniem transportu spinowo spolaryzowanego i układów półprzewodnikowych w celu efektywnego zintegrowania coraz bardziej imponujących osiągnięć spintroniki i obecnie wykorzystywanej technologii stosowanej w produkcji układów



Rysunek 1.7: (a) Zależność energii od wektorów falowych dla układu bez oddziaływania spinowo-orbitalnego typu Rashby. (b) Zależność energii od wektorów falowych w przypadku z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym typu Rashby.

scalonych. Jedną z ważnych idei realizujących powyższy cel jest idea spinowego tranzystora polowego (sFET) zaproponowana w 1990 r. przez S. Dattę i B. Dasa [95, 96]. Mechanizm działania takiego tranzystora jest oparty na modulatorze elektrooptycznym, ale zastosowanym do spinowo spolaryzowanych elektronów zamiast fotonów. W zamyśle autorów układ taki miał być zbudowany z wielowarstwy złożonej z półprzewodnikowych stopów InAlAs i InGaAs oraz kontaktów wykonanych z ferromagnetycznego metalu (np. żelazo), które odgrywają rolę źródła i drenu prądu spinowego. Elektrony o spinie skierowanym w kierunku wyznaczonym przez namagnesowanie źródła mogą zostać przetransportowane przez półprzewodnikowy kanał transportowy do drenu (stan „1”) albo ulec odbiciu od bariery półprzewodnik-ferromagnetyk w przypadku niedopasowania spinu do kierunku namagnesowania drenu (stan „0”). Dopasowanie to może być kontrolowane elektrycznie przez napięcie bramkujące, powodujące powstanie efektywnego pola magnetycznego, które wzbudza precesję lub powoduje nawet całkowite odwrócenie spinu nośnika. Efekt ten jest możliwy dzięki oddziaływaniu spinowo-orbitalnemu typu Rashby (RSO) [97–99].

W przypadku studni kwantowych opartych o półprzewodniki ze złamaną symetrią inwersyjną w kierunku wzrostu warstw na granicy warstw powstaje gradient potencjału indukujący pole elektryczne w kierunku $\mathbf{y}$, które sprzęga się z orbitalnym ruchem elektronów. Hamiltonian oddziaływania spinowo-orbitalnego można wtedy zapisać następująco [95, 97]:

$$H_R = \alpha_R (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{y}, \quad (1.43)$$

gdzie α_R jest stałą sprzężenia Rashby, $\boldsymbol{\sigma}$ jest wektorem macierzy Pauliego, a $\mathbf{p}$ pędem elektronu. Gdy w układzie nie ma ani sprzężenia Rashby, ani innych oddziaływań znoszących degenerację, wartość własna hamiltonianu dla nieoddziałującego gazu elektronowego została schematycznie przedstawiona na rys. 1.7(a) w zależności od składowych wektora falowego: k_x i k_y . Z kolei, gdy w układzie występuje oddziaływanie RSO, wartości własne hamiltonianu pokazano na rys. 1.7(b) — widoczne jest przesunięcie podpasów odpowiadających poszczególnym spinom. Wykorzystując

podstawowe właściwości algebry wektorów hamiltonian (1.43) można również wyrazić wzorem:

$$H_R = -\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_{\text{eff}}, \quad (1.44)$$

gdzie $\mathbf{B}_{\text{eff}} = \mathbf{y} \times \mathbf{p}$ jest efektywnym polem magnetycznym, w którym na spin działa siła starająca się go zwrócić zgodnie z płaszczyzną gazu elektronowego. Parametr Rashby α_R jest związany z polem elektrycznym na granicy heterostruktury i może być kontrolowany przez przyłożenie napięcia bramkującego, które modyfikuje asymetrię studni kwantowej, co w rezultacie umożliwia elektryczną kontrolę interferencji spinowej.

Elektrony o jednakowych energiach, poruszające się w kierunku $\mathbf{x}$ o spinach $\uparrow$ i $\downarrow$, przechodząc przez obszar oddziaływania Rashby o długości L uzyskują przesunięcie fazowe wektorów falowych postaci [95, 100, 101]:

$$\Delta\theta \equiv \phi_R = (k_{x\uparrow} - k_{x\downarrow}) L = \frac{2m^* \alpha_R L}{\hbar^2}. \quad (1.45)$$

Istnienie oddziaływania Rashby prowadzi do powstania spinowej akumulacji w strukturze w przypadku zaburzenia równowagi zewnętrznym polem elektrycznym. Wtedy liczba elektronów o jednym kierunku spinu i wartości wektora falowego $k_x > 0$ jest większa niż liczba elektronów o przeciwnym spinie z $k_x < 0$.

W nanostrukturach oddziaływanie spinowo-orbitalne typu Rashby można podzielić na silne i słabe. Silne oddziaływanie oznacza, że efekty mieszania się podpasm spinowych odgrywają większą rolę niż precesja spinów. W przypadku quazi 1-wymiarowych drutów kwantowych krytyczna wartość oddziaływania, poniżej której definiowane jest słabe oddziaływanie, a powyżej silne, wyrażona jest następującym wzorem [101]:

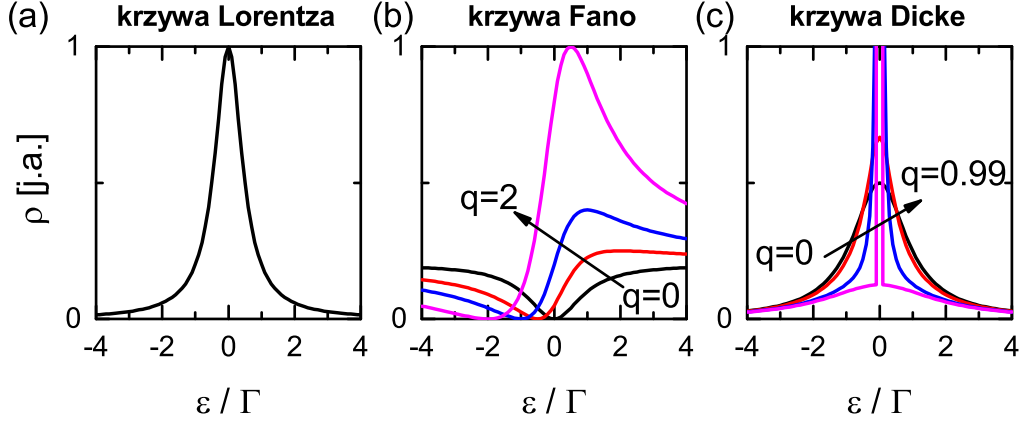
$$\beta_{so}^c \approx \frac{\left(\frac{\pi a}{W}\right)^2}{\frac{\pi a}{W} + a k_F}, \quad (1.46)$$

gdzie a jest stałą sieciową, W szerokością drutu, a k_F wartością wektora falowego elektronu na poziomie Fermiego. Uwzględnienie spinowo-orbitalnego oddziaływania w nanostrukturach prowadzi do możliwości obserwacji zjawisk interferencji spinów [102]. Owe zjawiska ulegają znacznej modyfikacji w układach kropek kwantowych [103, 104].

1.4 Zjawiska interferencji kwantowej

Jak wielokrotnie wspomniano w niniejszym rozdziale, w układach mezoskopowych istotną rolę odgrywają efekty interferencyjne wynikające z dualizmu korpuskularno-falowego materii. Zjawiska te mogą objawiać się na wiele sposobów — jednym z nich jest kształt krzywych współczynników transmisji lub konduktancji w badanym układzie, które odbiegają od krzywej Lorentza, pokazanej na rys. 1.8(a). Krzywa ta, w typowym procesie rezonansowym Breita-Wignera, może zostać opisana formułą:

$$\rho = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\varepsilon - \varepsilon_d)^2 + \Gamma^2}, \quad (1.47)$$



Rysunek 1.8: Kształt linii rezonansowych: (a) Lorentza, (b) Fano, (c) Dicke.

gdzie ϵ_d jest położeniem maksimum pików, a Γ szerokością połówkową pików.

Dwa podstawowe efekty interferencyjne, które będą rozpatrywane w niniejszej rozprawie to efekt Fano i efekt Dicke. Zostały wybrane ze względu na ich istotny wpływ na transport w układach kropek kwantowych [105–107] i zostaną pokrótce omówione poniżej.

Efekt Fano

Zjawisko interferencyjne Fano wynika z interferencji pomiędzy dyskretnym, zlokalizowanym stanem a kontinuum i objawia się antysymetrycznym pikiem w wykresie linii spektralnych [108]. Typowy kształt antyrezonansu Fano można opisać funkcją [108]:

$$\rho = \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1}. \quad (1.48)$$

Przyjmując $\epsilon = (\epsilon - \epsilon_d)/\Gamma$ można wzór (1.48) zapisać w postaci:

$$\rho = \frac{(\epsilon - \epsilon_d + q\Gamma)^2}{(\epsilon - \epsilon_d)^2 + \Gamma^2}, \quad (1.49)$$

gdzie q jest parametrem asymetrii. Antyrezonans Fano pokazano na rys. 1.8(b) dla kilku wartości parametru q . Dla $q = 0$ minimum (czyli antyrezonans) znajduje się w punkcie $\epsilon = \epsilon_d = 0$. Wzrost wartości q prowadzi do przesunięcia antyrezonansu i wzrostu asymetrii w kształcie pików.

Zjawisko to wynika z faktu interferencji dwóch amplitud rozpraszania stanu dyskretnego poprzez stany kontinuum (lub tła). Interferencja ta zachodzi z różnymi fazami po dwóch stronach rezonansu $\epsilon = \epsilon_d$, prowadząc do destruktywnej interferencji i zaniku pików po jednej, a do konstruktywnej interferencji i wzmocnienia intensywności pików po drugiej stronie rezonansu $\epsilon = \epsilon_d$ [108]. Ważnym jest by energia stanu dyskretnego znajdowała się w przedziale energii kontinuum.

W układach kropek kwantowych efekty interferencyjne mogą prowadzić do wyodrębnienia się antyrezonansu Fano we współczynnikach transportowych, a w rezultacie do wzmocnienia odpowiedzi termoelektrycznej tego układu [94, 109–111].

Efekt Dicke

Efekt Dicke został wpierw zaproponowany do opisu wpływu kolizji atomów w gazach na efekt Dopplera, który pochodzi ze zmiany energii kinetycznej atomu poprzez odrzut wywołany wyemitowaniem fotonu. Energia fotonu również ulega zmianie — jego częstotliwość ulega przesunięciu zgodnie ze zjawiskiem Dopplera. W pracy rozważono rozkład promieniowania emitowanego przez atom zlokalizowany w jednowymiarowym „pudełku” i pokazano, że kolizje atomów w gazie powodują zwięźnienie linii spektralnej rozkładu promieniowania [112]. Podobny efekt zaobserwowano dla dwóch spulapkowanych jonów [113].

Analogicznie do powyżej opisanego efektu optycznego, zaproponowano efekt Dicke do opisu zachowania funkcji spektralnych w układach elektronowych, takich jak zlokalizowanych stanów sprzężonych z dwuwymiarowym gazem elektronowym w silnym polu magnetycznym lub układach kropek kwantowych [114–116].

Kształt krzywej funkcji spektralnej, charakterystyczny dla zjawiska Dicke, został przedstawiony na rys. 1.8(c) i można go opisać wzorem [114, 115]:

$$\begin{aligned} \rho &\equiv \rho_+ + \rho_- \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[\frac{\Gamma_-}{(\varepsilon - \varepsilon_d)^2 + \Gamma_-^2} + \frac{\Gamma_+}{(\varepsilon - \varepsilon_d)^2 + \Gamma_+^2} \right], \end{aligned} \quad (1.50)$$

gdzie $\Gamma_{\pm} = (1 \pm q)\Gamma$, przy czym q jest parametrem, który pochodzi z pośredniego sprzężenia dwóch atomów lub ogólniej, poziomów energetycznych, poprzez środowisko w jakim się znajdują, a więc jego podłoże fizyczne jest inne niż w przypadku parametru q występującego w przypadku antyrezonansu Fano. W przypadku atomów znajdujących się we wnętrzu optycznej środowiskiem jest koherentne pole elektromagnetyczne wynikające z emitowanych przez te atomy fotonów. W przypadku układów elektronicznych środowiskiem jest morze Fermiego w elektrodach.

Wprowadzony w powyższym wzorze parametr Γ_+ (Γ_-) odpowiada stanowi, który został nazwany stanem nadpromienistym (podpromienistym). Na rys. 1.8(c) pokazano, że wzrost wartości parametru q prowadzi do silnego zwięźnienia linii odpowiadającej stanowi podpromienistemu. Dla przypadku $q = 1$ stan ten ulega rozprzęgnięciu od środowiska i jest „związany w kontinuum”.

1.5 Układ rozprawy

Rozprawa została podzielona na trzy części dotyczące różnych reżimów transportowych. Pierwsza część rozprawy składa się z dwóch rozdziałów, w których opisano układy kropek kwantowych w tzw. reżimie blokady kulombowskiej (lub reżimie kulombowskim), tzn. gdy temperatura układu jest dużo wyższa niż tzw. temperatura Kondo. W rozdziale 2, prezentowane są obliczenia oraz wyniki numeryczne dla układu pojedynczej kropki kwantowej sprzężonej z dwiema ferromagnetycznymi elektrodami. Przyjęto również, że kropka jest sprzężona z elektrodami dwójako — poprzez sprzężenie zachowujące spin podczas tunelowania elektronu oraz sprzężenie z obrotem spinu, wywołane silnym oddziaływaniem spinowo-orbitalnym typu Rashby. Do obliczeń zastosowano metodę równań ruchu dla funkcji Greena.

W rozdziale 3 pokazano wyniki dla układu dwóch kropek kwantowych połączonych z dwiema, w ogólnym przypadku magnetycznymi, elektrodami. Przyjęto, że kropki zostały umieszczone w pierścieniu Aharonova-Bohma, w którym dodatkowo włączono oddziaływanie spinowo-orbitalne typu Rashby, powodujące w tym przypadku pojawienie się spinowo-zależnej fazy tunelujących elektronów.

W części drugiej rozważono układy kropek w reżimie Kondo. W rozdziale 4 prezentowane są obliczenia oraz wyniki numeryczne dla układu pojedynczej kropki kwantowej rozważanej w rozdziale 2. W celu uwzględnienia silnych korelacji pomiędzy kropką a elektrodami zastosowano w obliczeniach metodę bozonów pomocniczych.

W rozdziale 5 zaprezentowano wyniki dla układu dwóch kropek kwantowych w reżimie Kondo. Przeanalizowano wpływ zjawisk interferencyjnych na efekty termoelektryczne. Pokazano, że w pewnych warunkach układ wykazuje zachowanie podobne do obserwowanego w układach atomowych zjawiska Dicke. Istnienie tego zjawiska powoduje zwiększenie sprawności termoelektrycznej układu.

W rozdziale 6 rozważono układ dwóch kropek kwantowych wprowadzony w rozdziale 3, ale w reżimie Kondo. Pokazano, że oddziaływanie spinowo-orbitalne typu Rashby powoduje powstanie oscylującego ze spinowo-zależną fazą pola wymiany, które znosi degenerację spinową układu i wywiera wpływ na efekty termoelektryczne.

Ostatnia część zawiera rozdział dotyczący transportu fal spinowych przez kropkę kwantową. W rozdziale tym pokazano konwersję prądu spinowego przenoszonego przez elektrony na czysty prąd spinowy magnonów i vice versa. Pokazano także możliwość uzyskania spinowej diody termicznej oraz układ silnika cieplnego.

Część I

Układy słabo skorelowanych kropek kwantowych

Rozdział 2

Wpływ oddziaływania spinowo-orbitalnego Rashby na transport termoelektryczny przez kropkę kwantową

W poniższym rozdziale przedstawiono analizę efektów termoelektrycznych w układzie pojedynczej kropki kwantowej sprzężonej z dwiema magnetycznymi elektrodami. Sprzężenie kropki i elektrod jest dwojakie – z zachowaniem spinu elektronu tunelującego pomiędzy kropką a elektrodami oraz z obrotem spinu, wywołanym silnym oddziaływaniem spinowo-orbitalnym typu Rashby.

W celu analizy badanego modelu wykorzystano metodę nierównowagowych funkcji Gre-ena [87, 117], która zostanie przedstawiona w dalszej części rozdziału. Metoda ta będzie stosowana również w pozostałych rozdziałach niniejszej rozprawy.

2.1 Opis teoretyczny

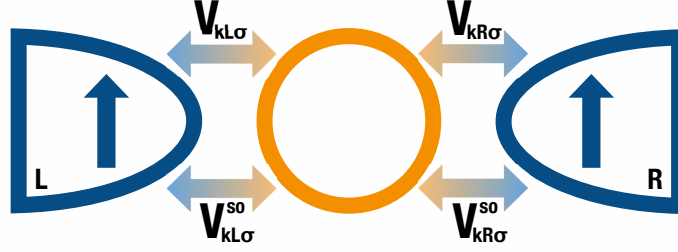
2.1.1 Model układu

Układ kropki kwantowej połączonej z dwiema elektrodami, przedstawiony schematycznie na rys. 2.1, może zostać w ogólnym przypadku opisany następującym hamiltonianem:

$$H = H_e + H_{qd} + H_t . \quad (2.1)$$

Pierwszy człon opisuje elektrody:

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}\beta\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma} , \quad (2.2)$$



Rysunek 2.1: Schematyczne przedstawienie rozpatrywanego układu kropki kwantowej połączonej z dwiema magnetycznymi elektrodami: lewą (L) i prawą (R). Tunelowanie elektronów (oraz dziur) pomiędzy kropką a elektrodami zachodzi dwojako: z zachowaniem spinu, który to proces opisywany jest energiami $V_{kL\sigma}$ oraz $V_{kR\sigma}$, gdzie $\sigma = \uparrow, \downarrow$, a także z obrotem spinu, wywołanym spinowo-orbitalnym sprzężeniem typu Rashby, opisywanym przez energie $V_{kL\sigma}^{so}$ oraz $V_{kR\sigma}^{so}$

gdzie $\mathbf{k}$ jest wektorem falowym elektronu w elektrodzie $\beta = L, R$ o spinie $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Drugi człon wyrażenia (2.1) dotyczy kropki kwantowej i jest opisany hamiltonianem:

$$H_{qd} = \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow}, \quad (2.3)$$

gdzie $\varepsilon_{\sigma} = \varepsilon_0 + \hat{\sigma} g \mu_B B / 2$ jest energią elektronu o spinie σ , w polu magnetycznym B , podczas gdy U jest energią oddziaływania kulombowskiego na kropce. Ostatni człon, H_t , opisuje tunelowanie elektronów pomiędzy kropką kwantową a elektrodą. W układzie rozważanym w niniejszym rozdziale człon ten jest sumą $H_t = H_t^0 + H_t^{so}$, gdzie H_t^0 jest członem opisującym tunelowanie elektronów z zachowaniem spinu:

$$H_t^0 = \sum_{\mathbf{k}\beta\sigma} V_{\mathbf{k}\beta\sigma} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \text{H.c.}, \quad (2.4)$$

podczas gdy H_t^{so} opisuje tunelowanie elektronu z jednoczesnym obrotem spinu [103, 104]:

$$H_t^{so} = - \sum_{\mathbf{k}\beta\sigma} \left[V_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{so} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{\dagger} (i\sigma_x)_{\sigma\bar{\sigma}} d_{\bar{\sigma}} \right] + \text{H.c.}, \quad (2.5)$$

Całkowity hamiltonian po diagonalizacji jest równoważny hamiltonianowi układu dwupoziomowego [118, 119], co pokazano w dodatku A.1. W tym przypadku spinowo-orbitalne oddziaływanie przeciwdziała degeneracji poziomów indukowanej zewnętrznym polem magnetycznym.

2.1.2 Prąd elektryczny i prąd spinowy

Aby wyznaczyć prąd ładunkowy i prąd spinowy, które przepływają przez rozpatrywany układ, konieczne jest wpierw wyznaczenie składowej prądu o spinie σ przepływającego pomiędzy elektrodą β a kropką. Wyrażenie opisujące tę składową można wyznaczyć rozważając szybkość zmian średniej liczby cząstek o spinie $\sigma = \uparrow, \downarrow$ pochodzących z elektrody $\beta = L, R$:

$$I_{\beta\sigma} \equiv \frac{dN_{\beta\sigma}}{dt} = -\frac{ie}{\hbar} \langle [N_{\beta\sigma}, H] \rangle, \quad (2.6)$$

gdzie

$$N_{\beta\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma} \quad (2.7)$$

jest operatorem obsadzeń stanów o spinie σ i wektorze falowym $\mathbf{k}$ w elektrodzie β , a H jest całkowitym hamiltonianem układu, wyrażonym wzorem (2.1). Komutator występujący w wyrażeniu na prąd, (2.6), jest niezerowy jedynie dla hamiltonianu tunelowego, co pozwala na zapisanie wzoru (2.6) z uwzględnieniem procesów zachowujących spin przy tunelowaniu oraz procesów bez zachowania spinu:

$$I_{\beta\sigma} = I_{\beta}^{\sigma\sigma} + I_{\beta}^{\sigma\bar{\sigma}}, \quad (2.8)$$

gdzie

$$I_{\beta}^{\sigma\sigma} = -\frac{ie}{\hbar} \langle [N_{\beta\sigma}, H_t^0] \rangle, \quad (2.9)$$

$$I_{\beta}^{\sigma\bar{\sigma}} = -\frac{ie}{\hbar} \langle [N_{\beta\sigma}, H_t^{so}] \rangle. \quad (2.10)$$

W przypadku gdy spin elektronu pozostaje niezmienny w procesie tunelowania, prąd elektronów o spinie σ jest wyznaczony jedynie przy pomocy wyrażenia (2.9).

Wyznaczenie komutatorów zawartych w powyższych wyrażeniach prowadzi do następujących wyrażeń na składowe prądu z zachowaniem spinu i z obroceniem spinu:

$$I_{\beta}^{\sigma\sigma}(t) = -\frac{e}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ V_{\mathbf{k}\beta\sigma} G_{\sigma,\mathbf{k}\beta\sigma}^<(t,t) - V_{\mathbf{k}\beta\sigma}^* G_{\mathbf{k}\beta\sigma,\sigma}^<(t,t) \right\}, \quad (2.11)$$

$$I_{\beta}^{\sigma\bar{\sigma}}(t) = -\frac{e}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ -i V_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{so} G_{\bar{\sigma},\mathbf{k}\beta\sigma}^<(t,t) - i V_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{so,*} G_{\mathbf{k}\beta\sigma,\bar{\sigma}}^<(t,t) \right\}, \quad (2.12)$$

gdzie wprowadzono korelacyjne funkcje Greena zdefiniowane następująco:

$$G_{\sigma,\mathbf{k}\beta\sigma}^<(t,t') = i \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger(t') d_{\sigma}(t) \rangle, \quad (2.13a)$$

$$G_{\mathbf{k}\beta\sigma,\sigma}^<(t,t') = i \langle d_{\sigma}^\dagger(t') c_{\mathbf{k}\beta\sigma}(t) \rangle, \quad (2.13b)$$

$$G_{\bar{\sigma},\mathbf{k}\beta\sigma}^<(t,t') = i \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger(t') d_{\bar{\sigma}}(t) \rangle, \quad (2.13c)$$

$$G_{\mathbf{k}\beta\sigma,\bar{\sigma}}^<(t,t') = i \langle d_{\bar{\sigma}}^\dagger(t') c_{\mathbf{k}\beta\sigma}(t) \rangle. \quad (2.13d)$$

Wykorzystując zależność

$$G_{i,j}^< = -[G_{j,i}^<]^* \quad (2.14)$$

wyrażenia na prąd przyjmują postać:

$$I_{\beta}^{\sigma\sigma}(t) = -\frac{2e}{\hbar} \text{Re} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}\beta\sigma} G_{\sigma,\mathbf{k}\beta\sigma}^<(t,t) \right\}, \quad (2.15)$$

$$I_{\beta}^{\sigma\bar{\sigma}}(t) = -\frac{2e}{\hbar} \text{Im} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{so} G_{\bar{\sigma},\mathbf{k}\beta\sigma}^<(t,t) \right\}. \quad (2.16)$$

W kolejnym kroku konieczne jest wyznaczenie korelacyjnych funkcji Greena zawartych w powyższych wyrażeniach. W tym celu zastosowana zostanie wpierw metoda równań ruchu dla

funkcji Greena czasowo uporządkowanej na konturze Kiełdysza [87, 117]:

$$G_{\mathbf{k}\beta\sigma,\sigma}^C(\tau, \tau_1) = -i\langle \mathcal{T} d_{\sigma}^{\dagger}(\tau_1) c_{\mathbf{k}\beta\sigma}(\tau) \rangle \equiv \langle \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma}(\tau) | d_{\sigma}^{\dagger}(\tau_1) \rangle \rangle^C, \quad (2.17)$$

gdzie $\mathcal{T}$ jest operatorem uporządkowania chronologicznego, którego działanie na iloczyn operatorów $A(\tau_1)B(\tau_2)$ jest następujące [87]:

$$\mathcal{T}A(\tau_1)B(\tau_2) = \theta(\tau_1 - \tau_2)A(\tau_1)B(\tau_2) - \theta(\tau_2 - \tau_1)A(\tau_1)B(\tau_2), \quad (2.18)$$

gdzie $\theta(x)$ jest funkcją skokową Heaviside'a.

Równanie ruchu dla powyższej funkcji przedstawia się następująco:

$$G_{\mathbf{k}\beta\sigma,\sigma}^C(\tau, \tau_1)(g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^C)^{-1} = V_{\mathbf{k}\beta\sigma}G_{\sigma\sigma}^C(\tau, \tau_1) - iV_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{so}G_{\sigma\bar{\sigma}}^C(\tau, \tau_1), \quad (2.19)$$

gdzie wprowadzono skrócony zapis:

$$G_{\sigma\sigma_1}^C(\tau, \tau_1) = \langle \langle d_{\sigma}(\tau) | d_{\sigma_1}^{\dagger}(\tau_1) \rangle \rangle^C. \quad (2.20)$$

Występująca w wyrażeniu (2.19) funkcja $g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^C$ oznacza funkcję Greena uporządkowaną na konturze Kiełdysza dla izolowanej kropki kwantowej i jest zdefiniowana następująco [87]:

$$g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^C = \left(i \frac{\partial}{\partial \tau} - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma} \right)^{-1}. \quad (2.21)$$

Wymnożenie równania (2.19) przez funkcję (2.21), a następnie scałkowanie po konturze zespolonym C prowadzi do wyrażenia:

$$G_{\mathbf{k}\beta\sigma,\sigma}^C(\tau, \tau_1) = \int_C d\tau \left[g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^C V_{\mathbf{k}\beta\sigma} G_{\sigma\sigma}^C(\tau, \tau_1) - i g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^C V_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{so} G_{\sigma\bar{\sigma}}^C(\tau, \tau_1) \right]. \quad (2.22)$$

W celu wyznaczenia korelacyjnej funkcji Greena należy wykorzystać przedłużenie analityczne, które sprowadza się do zastosowania reguł Langretha [87, 117]. Odpowiednia reguła, która prowadzi do przejścia od funkcji $C = AB$ na konturze do funkcji korelacyjnej w domenie rzeczywistej, przyjmuje postać [87, 117]:

$$\int_C C(\tau, \tau_1)^{<} = \int A^r(t, t') B^{<}(t, t') + A^{<}(t, t') B^a(t, t'), \quad (2.23)$$

gdzie funkcje A^r i B^a oznaczają odpowiednio funkcję opóźnioną i przedwczesną. Zastosowanie tej reguły do wyrażenia (2.22) prowadzi do następujących wzorów na korelacyjne funkcje Greena [gdzie zastosowano również równość (2.14)]:

$$G_{\sigma,\mathbf{k}\beta\sigma}^{<}(t, t) = V_{\mathbf{k}\beta\sigma}^* \left(g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^a G_{\sigma\sigma}^{<}(t, t) + g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{<} G_{\sigma\sigma}^r(t, t) \right) + i V_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{so,*} \left(g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^a G_{\sigma\bar{\sigma}}^{<}(t, t) + g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{<} G_{\sigma\bar{\sigma}}^r(t, t) \right), \quad (2.24)$$

$$G_{\bar{\sigma},\mathbf{k}\beta\sigma}^{<}(t, t) = V_{\mathbf{k}\beta\sigma}^* \left(g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^a G_{\bar{\sigma}\sigma}^{<}(t, t) + g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{<} G_{\bar{\sigma}\sigma}^r(t, t) \right) + i V_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{so,*} \left(g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^a G_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{<}(t, t) + g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{<} G_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^r(t, t) \right). \quad (2.25)$$

Następnie zastosowana zostanie transformata Fouriera dla powyższych funkcji. Wykorzystując twierdzenie Cauchy’ego, opóźniona (górny indeks r) lub przedwczesna (górny indeks a) funkcja Greena izolowanej od elektrod kropki kwantowej wyrażona jest następująco:

$$g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{r,a} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma} \pm i\eta} \equiv \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma} \pm i0^+} = \mathcal{P} \int_{-W}^W \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma}} d\varepsilon \mp \pi i \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma}), \quad (2.26)$$

gdzie W jest połową szerokości pasma energetycznego w elektrodzie, a symbol $\mathcal{P} \int$ oznacza wartość główną całki w sensie Cauchy’ego. Część rzeczywista funkcji Greena $g_{\mathbf{k}\beta\sigma}$ przyjmuje następującą wartość (biorąc pod uwagę fakt, że w transporcie biorą udział przede wszystkim elektrony o energii znajdującej się blisko poziomowi Fermiego):

$$\text{Re } g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{r,a} = \mathcal{P} \int_{-W}^W \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma}} d\varepsilon = \ln \left| \frac{W - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma}}{W + \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma}} \right| \xrightarrow{W \gg \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma}} 0. \quad (2.27)$$

Funkcja korelacyjna izolowanej od elektrod kropki kwantowej $g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^<$, z kolei, wyrażona jest poniższą formułą:

$$g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^< = 2\pi i f_{\beta\sigma} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma}), \quad (2.28)$$

gdzie $f_{\beta\sigma}$ jest funkcją rozkładu Fermiego-Diraca, której postać została podana w rozdziale poprzednim.

Wprowadzając wyrażenia (2.24)–(2.28) do wzorów (2.9) oraz (2.10) i stosując podstawowe zależności dla liczby zespolonej $z = a + ib$ ($\text{Re } z = (z + z^*)/2$, $\text{Im } z = (z - z^*)/2i$), uzyskane zostaje wyrażenie

$$I_{\beta\sigma} = \frac{e}{2h} \int d\varepsilon \text{Tr} \left\{ \left(\Sigma_{\beta\sigma}^a - \Sigma_{\beta\sigma}^r \right) \mathbf{G}^<(\varepsilon) + \Sigma_{\beta\sigma}^< [\mathbf{G}^r(\varepsilon) - \mathbf{G}^a(\varepsilon)] \right\}, \quad (2.29)$$

gdzie macierze: korelacyjnej funkcji Greena, $\mathbf{G}^<(\varepsilon)$, opóźnionej funkcji Greena, $\mathbf{G}^r(\varepsilon)$ oraz przedwczesnej funkcji Greena, $\mathbf{G}^a(\varepsilon)$, zostaną wyznaczone w następnym podrozdziale. W powyższym wzorze, (2.29), wprowadzono macierze korelacyjnej energii własnej,

$$\Sigma_{\beta\sigma}^< = i f_{\beta\sigma} \mathbf{\Gamma}_{\beta\sigma}, \quad (2.30)$$

opóźnionej energii własnej,

$$\Sigma_{\beta\sigma}^r = -\frac{i}{2} \mathbf{\Gamma}_{\beta\sigma}, \quad (2.31)$$

oraz przedwczesnej energii własnej,

$$\Sigma_{\beta\sigma}^a = \left[\Sigma_{\beta\sigma}^r \right]^\dagger. \quad (2.32)$$

W definicji powyższych macierzy energii własnych skorzystano z przybliżenia szerokiego pasma (2.26). W wyrażeniach (2.30)–(2.32) symbol $\mathbf{\Gamma}_{\beta\sigma}$ oznacza macierz sprzężenia elektronu o spinie $\sigma = \uparrow, \downarrow$ w obszarze kropki i elektrody $\beta = L, R$. Macierze te zdefiniowane są następująco:

$$\mathbf{\Gamma}_{\beta\uparrow} = \begin{bmatrix} \Gamma_{\beta\uparrow\uparrow} & -i\sqrt{\Gamma_{\beta\uparrow\uparrow}\Gamma_{\beta\uparrow\uparrow}^{so}} \\ i\sqrt{\Gamma_{\beta\uparrow\uparrow}\Gamma_{\beta\uparrow\uparrow}^{so}} & \Gamma_{\beta\uparrow\uparrow}^{so} \end{bmatrix}, \quad (2.33)$$

dla spinu $\sigma = \uparrow$, oraz

$$\mathbf{\Gamma}_{\beta\downarrow} = \begin{bmatrix} \Gamma_{\beta\downarrow\downarrow}^{so} & i\sqrt{\Gamma_{\beta\downarrow\downarrow}\Gamma_{\beta\downarrow\downarrow}^{so}} \\ -i\sqrt{\Gamma_{\beta\downarrow\downarrow}\Gamma_{\beta\downarrow\downarrow}^{so}} & \Gamma_{\beta\downarrow\downarrow} \end{bmatrix}, \quad (2.34)$$

dla spinu $\downarrow$. Poszczególne współczynniki sprzężenia (elementy macierzowe) zdefiniowane są następująco:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\beta\sigma\sigma} &= 2\pi|V_{\mathbf{k}\beta\sigma}|^2\rho_{\beta\sigma} \\ \Gamma_{\beta\sigma\sigma}^{so} &= 2\pi|V_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{so}|^2\rho_{\beta\sigma}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

przy czym $\rho_{\beta\sigma}$ jest zależną od spinu gęstością stanów w elektrodzie β . W przybliżeniu szerokiego pasma gęstość stanów, $\rho_{\beta\sigma}$, jest niezależna od energii. Sprzężenie $\Gamma_{\beta\sigma\sigma}^{so}$ można również wyrazić przy pomocy parametru $\Gamma_{\beta\sigma\sigma}$ w następujący sposób:

$$\Gamma_{\beta\sigma\sigma}^{so} = q\Gamma_{\beta\sigma\sigma}, \quad (2.36)$$

gdzie parametr q opisuje wielkość sprzężenia spinowo-orbitalnego typu Rashby. W przypadku elektrod ferromagnetycznych stosowne jest wprowadzenie parametru polaryzacji magnetycznej, p_β , dla elektrody β :

$$p_\beta = \frac{\rho_{\beta\uparrow} - \rho_{\beta\downarrow}}{\rho_{\beta\uparrow} + \rho_{\beta\downarrow}}. \quad (2.37)$$

2.1.3 Funkcje Greena i współczynnik transmisji

Ponownie zastosowane zostanie równanie ruchu dla przyczynowej funkcji Greena w domenie energii [87, 117]

$$\varepsilon\langle\langle d_{\sigma_1}|d_{\sigma_2}^\dagger\rangle\rangle_\varepsilon^C = \langle\{d_{\sigma_1}, d_{\sigma_2}^\dagger\}\rangle + \langle\langle [d_{\sigma_1}, H]|d_{\sigma_2}^\dagger\rangle\rangle_\varepsilon^C, \quad (2.38)$$

gdzie σ_i ($i = 1, 2, 3, 4$) jest dowolnym spinem $\uparrow$ lub $\downarrow$. Wyznaczenie odpowiednich komutatorów i antykomutatorów prowadzi do równania postaci:

$$(\varepsilon - \varepsilon_{\sigma_1})G_{\sigma_1\sigma_2}^C = \delta_{\sigma_1\sigma_2} + UG_{\sigma_1\sigma_2}^{(2)C} + \sum_{\mathbf{k}\beta} \left(V_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^* G_{\mathbf{k}\beta\sigma_1, \sigma_2}^C + V_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^{so,*} G_{\mathbf{k}\beta\sigma_1, \sigma_2}^C \right), \quad (2.39)$$

gdzie funkcje $G_{\mathbf{k}\beta\sigma_1, \sigma_2}^C$ i $G_{\mathbf{k}\beta\sigma_1, \sigma_2}^C$ zostały już wprowadzone w poprzedniej sekcji. W celu uproszczenia zapisu dalszych równań zastosowano również następującą notację:

$$G_{\sigma_1\sigma_2}^C \equiv \langle\langle d_{\sigma_1}|d_{\sigma_2}^\dagger\rangle\rangle_\varepsilon^C \quad (2.40)$$

$$G_{\sigma_1\sigma_2}^{(2)C} \equiv \langle\langle d_{\sigma_1}n_{\sigma_1}|d_{\sigma_2}^\dagger\rangle\rangle_\varepsilon^C. \quad (2.41)$$

Równanie ruchu dla funkcji $G_{\sigma_1\sigma_2}^{(2)C}$ prowadzi do następującego wyrażenia:

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon - \varepsilon_{\sigma_1} - U) G_{\sigma_1\sigma_2}^{(2)C} = & \langle n_{\sigma_1} \rangle \delta_{\sigma_1\sigma_2} + \langle d_{\sigma_1}^\dagger d_{\sigma_1} \rangle \delta_{\sigma_2\sigma_1} + \sum_{\mathbf{k}\beta} \left\{ V_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^* \langle \langle d_{\sigma_1} d_{\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C \right. \\
 & - V_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} \langle \langle d_{\sigma_1} c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^\dagger d_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C + V_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^* \langle \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} n_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C \\
 & + i V_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^{so,*} \langle \langle d_{\sigma_1} d_{\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C + i V_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^{so} \langle \langle d_{\sigma_1} c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^\dagger d_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C \\
 & \left. - i V_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^{so,*} \langle \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} n_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C \right\}. \quad (2.42)
 \end{aligned}$$

Aby uzyskać zamkniętą formułę na funkcję Greena konieczne jest zastosowanie odpowiedniego przybliżenia, polegającego na ucięciu równań ruchu na wybranym poziomie hierarchii i rozszczepieniu funkcji Greena wyższego rzędu. Schematycznie to przybliżenie można zapisać następująco:

$$\langle \langle \overline{AB}^\dagger C | D^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C \approx -\langle B^\dagger A \rangle \langle \langle C | D^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C + \langle B^\dagger C \rangle \langle \langle A | D^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C, \quad (2.43)$$

gdzie linie łączące odpowiednie operatory oznaczają kontrakcję w sensie twierdzenia Wicka. Stosując powyższy schemat, funkcje Greena wyższego rzędu pojawiające się w równaniu (2.42) można przybliżyć następująco:

$$\langle \langle d_{\sigma_1} d_{\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C \approx -\langle d_{\sigma_1}^\dagger d_{\sigma_1} \rangle \langle \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C + \langle d_{\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} \rangle \langle \langle d_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C, \quad (2.44)$$

$$\langle \langle d_{\sigma_1} c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^\dagger d_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C \approx -\langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^\dagger d_{\sigma_1} \rangle \langle \langle d_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C + \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^\dagger d_{\sigma_1} \rangle \langle \langle d_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C, \quad (2.45)$$

$$\langle \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} n_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C \approx -\langle d_{\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} \rangle \langle \langle d_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C + \langle n_{\sigma_1} \rangle \langle \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C, \quad (2.46)$$

$$\langle \langle d_{\sigma_1} d_{\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C \approx -\langle d_{\sigma_1}^\dagger d_{\sigma_1} \rangle \langle \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C + \langle d_{\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} \rangle \langle \langle d_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C, \quad (2.47)$$

$$\langle \langle d_{\sigma_1} c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^\dagger d_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C \approx -\langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^\dagger d_{\sigma_1} \rangle \langle \langle d_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C + \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1}^\dagger d_{\sigma_1} \rangle \langle \langle d_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C, \quad (2.48)$$

$$\langle \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} n_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C \approx -\langle d_{\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} \rangle \langle \langle d_{\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C + \langle n_{\sigma_1} \rangle \langle \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma_1} | d_{\sigma_2}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^C. \quad (2.49)$$

Ze względu na fakt, że w niniejszym rozdziale rozpatrywany jest transport w reżimie kulombowskim, czyli w przypadku słabych korelacji pomiędzy kropką a elektrodami i temperatury układu wyższej niż temperatura Kondo, funkcje korelacji typu $\langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma_4}^\dagger d_{\sigma_3} \rangle$ oraz $\langle d_{\sigma_3}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma_4} \rangle$ zostaną zaniedbane dla dowolnych wartości spinu σ_3 i σ_4 . W celu uproszczenia dalszych rozważań wprowadzono oznaczenia:

$$N_{\sigma_3} \equiv \langle n_{\sigma_3} \rangle, \quad (2.50)$$

$$N_{\sigma_3\sigma_3} \equiv \langle d_{\sigma_3}^\dagger d_{\sigma_3} \rangle. \quad (2.51)$$

Powyższe wyrażenia, czyli średnie obsadzenie stanu kropki o spinie σ_3 oraz korelacja elektronów o przeciwnych spinach, zostaną wyznaczone z poniższego równania w sposób samoczynny:

$$N_{\sigma_3\sigma_4} = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi i} G_{\sigma_3\sigma_4}^<, \quad (2.52)$$

Po zastosowaniu powyższego przybliżenia w funkcji (2.42) i wprowadzeniu otrzymanej funkcji do wyrażenia (2.39) otrzymana zostaje zamknięta formuła na przyczynową funkcję Greena. W celu uzyskania funkcji korelacyjnej, opóźnionej i przedwczesnej, stosowane są odpowiednie reguły Langretha [87, 117]. Reguła stosowana dla przejścia od funkcji przyczynowej do korelacyjnej

została zapisana w poprzedniej sekcji wzorem (2.23). Reguła stosowana w celu przejścia od funkcji przyczynowej do opóźnionej (przedwczesnej) jest zdefiniowana następującym wzorem [87, 117]:

$$\int_C AB = \int A^{r(a)} B^{r(a)}. \quad (2.53)$$

Powyższe obliczenia prowadzą do równań macierzowych na funkcje Greena znanych również pod nazwą równania Dysona [87, 117]:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^{a,r} &= \mathbf{g}_0^{r,a} + \mathbf{g}_0^{r,a} \Sigma^{r,a} \mathbf{G}^{a,r} \\ &\equiv \left[(\mathbf{g}_0^{r,a})^{-1} - \Sigma^{r,a} \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (2.54)$$

gdzie

$$\Sigma^{r,a} = \mp \frac{i}{2} \sum_{\beta} (\Gamma_{\beta\uparrow} + \Gamma_{\beta\downarrow}), \quad (2.55)$$

oraz równania Kiełdysa [87, 117]:

$$\mathbf{G}^< = \mathbf{G}^r \Sigma^< \mathbf{G}^a. \quad (2.56)$$

Elementy diagonalne macierzy funkcji Greena $\mathbf{g}_0^{r(a)}$ izolowanej od elektrod kropki są wyrażone wzorem

$$g_{0\sigma_1\sigma_1}^{r(a)} = \frac{1 - N_{\bar{\sigma}_1}}{\varepsilon - \varepsilon_{\sigma_1} \pm i0^+} + \frac{N_{\bar{\sigma}_1}}{\varepsilon - \varepsilon_{\sigma_1} - U \pm i0^+}, \quad (2.57)$$

podczas gdy elementy nediagonalne wyrażone są następującym wzorem:

$$g_{0\sigma_1\bar{\sigma}_1}^{r(a)} = N_{\sigma_1\bar{\sigma}_1} \left(\frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\sigma_1} \pm i0^+} - \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\sigma_1} - U \pm i0^+} \right). \quad (2.58)$$

Wstawienie równań (2.54) i (2.56) do równania (2.29) prowadzi ostatecznie do następującej postaci wyrażenia na prąd:

$$I_{L\sigma} = \frac{e}{h} \int d\varepsilon (f_{L\sigma} - f_{R\sigma}) T_{\sigma}, \quad (2.59)$$

gdzie współczynnik transmisji elektronu o spinie σ przez kropkę wyrażony jest następująco:

$$T_{\sigma} = \text{Tr} \{ \Gamma_{L\sigma} \mathbf{G}^r \Gamma_R \mathbf{G}^a \}. \quad (2.60)$$

Znając dokładne postaci funkcji Greena, a więc i współczynnika transmisji, możliwe jest zastosowanie formuł opisujących współczynniki termoelektryczne wyprowadzonych w rozdziale 1.

2.2 Wyniki numeryczne

W rozdziale tym zostaną zaprezentowane wyniki analizy numerycznej współczynników termoelektrycznych. Podrozdział ten został podzielony na dwa mniejsze: w pierwszym opisane zostały zjawiska termoelektryczne w liniowej odpowiedzi, natomiast drugi dotyczy sytuacji nierównowagowej w związku ze skończoną różnicą temperatur pomiędzy elektrodami. Ponadto w pierwszym przypadku sekcję dodatkowo podzielono na dwie części. Pierwsza z nich dotyczy przypadku, w którym w elektrodach relaksacja spinowa jest na tyle szybka, że nie pojawia

się akumulacja spinowa. W drugiej części opisane zostały zjawiska termoelektryczne, gdy akumulacja spinowa odgrywa znaczącą rolę. Przeanalizowano również przypadek szczególny związany z pojawieniem się zjawiska Fano.

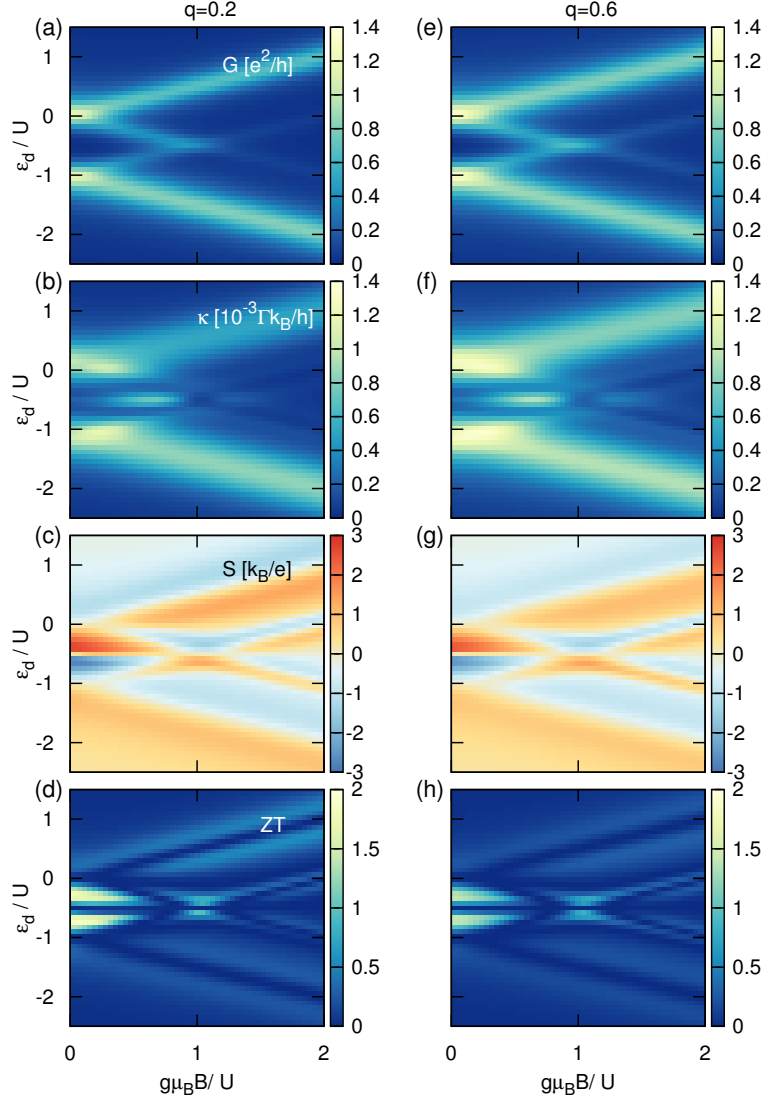
W obliczeniach numerycznych przyjęto połowę szerokości pasma elektronowego $W = 1$ za jednostkę energii. Pozostałe parametry wyrażono w jednostkach sprzężenia pomiędzy kropką a elektrodami $\Gamma = 0.001W$. Parametr oddziaływania kulombowskiego na kropce założono równy $U = 8\Gamma$. Ponadto, analiza macierzy sprzężeń wyrażonych wzorami (2.33) i (2.34) wskazuje, że wpływ oddziaływania spinowo-orbitalnego Rashby będzie zauważalny, gdy uwzględnione zostaną elektrody magnetyczne, czyli gdy $p_L \neq 0$ oraz $p_R \neq 0$. W przypadku elektrod niemagnetycznych powyższe macierze są diagonalne, a sprzężenie spinowo-orbitalne będzie powodowało jedynie poszerzenie poziomu kropki. W poniższych rozważaniach przyjęto $p_L = p_R \equiv p = 0.4$. Energia kropki została wyrażona w jednostkach parametru oddziaływania kulombowskiego U i jest mierzona względem potencjału elektrochemicznego $\mu_0 = 0$ w stanie równowagowym elektrod.

2.2.1 Transport w liniowej odpowiedzi

Przypadek braku akumulacji spinowej w elektrodach

Rysunek 2.2 przedstawia wykresy gęstościowe współczynników termoelektrycznych w zależności od wielkości zewnętrznego pola magnetycznego $g\mu_B B$ oraz położenia poziomu ε_d kropki dla dwóch wartości parametru q , opisującego wielkość sprzężenia spinowo-orbitalnego typu Rashby, $q = 0.2$ i $q = 0.6$.

Dla małych wartości pola magnetycznego, $g\mu_B B \approx 0$, na wykresach konduktancji elektrycznej oraz wkładu elektronowego do konduktancji cieplnej, przedstawionych na rys. 2.2 (a) i (b), odpowiednio, widoczne są dwa główne piki odpowiadające energiom rezonansowym $\varepsilon_d = 0$ oraz $\varepsilon_d = -U$. W punkcie symetrii elektron-dziura, $\varepsilon_d = -U/2$, konduktancja ładunkowa jest równa zeru, a w wykresie konduktancji cieplnej pojawia się charakterystyczny pik. Znikoma wartość konduktancji elektrycznej wynika z pojedynczego obsadzenia kropki, kiedy układ znajduje się w reżimie blokady kulombowskiej. Z kolei, niezerowa wartość konduktancji cieplnej pojawia się, ponieważ w punkcie symetrii $\varepsilon_d = -U/2$ może płynąć skończony prąd cieplny elektronów i dziur. Chociaż prąd ten niesie efektywny ładunek równy zeru $[e + (-e)]$, to zarówno elektrony jak i dziury niosą pewną energię, która daje niezerowy wkład do konduktancji cieplnej. Ze wzrostem pola magnetycznego piki w konduktancji elektrycznej i cieplnej odpowiadające energiom $\varepsilon_d = 0$ i $\varepsilon_d = -U$ ulegają zeemanowskiemu rozszczepieniu. Jednak dla stosunkowo małych pól magnetycznych, gdy poszerzenie poziomów związane z temperaturą oraz sprzężeniem kropki z elektrodami jest większe niż rozszczepienie Zeemana piki ulegają poszerzeniu zanim ulegną rozszczepieniu. Owo poszerzenie pików odpowiadających położeniom poziomu kropki $\varepsilon_d = 0$ i $\varepsilon_d = -U$ nie jest jednakowe, ponieważ szerokość pików odpowiadających energiom poziomów $\varepsilon_\uparrow$ oraz $\varepsilon_\downarrow$ jest inna dla spinu $\uparrow$ i $\downarrow$. Jest to związane z różnym wkładem od spinowo-orbitalnego oddziaływania Rashby do poszczególnych poziomów. Gdy rozszczepienie Zeemana osiągnie wartość U , na wykresie konduktancji elektrycznej, oprócz dwóch pobocznych pików, pojawia się pojedynczy centralny pik, podczas gdy w przypadku konduktancji cieplnej centralny pik zanika. Jest to związane z degeneracją poziomów odpowiadających energiom rezonansowym, $\varepsilon_\uparrow^U \equiv -U + g\mu_B B/2 = -U/2 = -g\mu_B B/2 \equiv \varepsilon_\downarrow^0$. Dla dużych pól magnetycznych centralny



Rysunek 2.2: Ładunkowe współczynniki termoelektryczne w funkcji położenia poziomu ε_d kropki kwantowej oraz pola magnetycznego $g\mu_B B$ dla $q = 0.2$ i $q = 0.6$. Pozostałe parametry: $U = 8\Gamma$, $p_L = p_R = p = 0.4$, $k_B T = \Gamma/2$.

pik na wykresie konduktancji elektrycznej ulega ponownemu rozszczepieniu na dwa piki, ale o mniejszej intensywności, podczas gdy intensywność pików głównych nie ulega zmianom. Ponadto konduktancja cieplna jest większa dla położenia poziomu $\varepsilon_\uparrow^U$ niż dla położenia $\varepsilon_\downarrow^0$.

Rysunek 2.2(c) przedstawia wykres współczynnika Seebecka, S , w zależności od wielkości zewnętrznego pola magnetycznego $g\mu_B B$ oraz położenia poziomu ε_d kropki. Dla małych wartości pola magnetycznego, tzn. dla $g\mu_B B \approx 0$, widoczne są trzy wartości położenia poziomu ε_d kropki, w których zmienia się znak termosyły: dwa odpowiadają energiom rezonansowym $\varepsilon_d = 0$ i $\varepsilon_d = -U$ a jeden punktowi symetrii elektron-dziura, $\varepsilon_d = -U/2$. Dla energii $\varepsilon_d > 0$ w transporcie przez kropkę dominującymi nośnikami są elektrony, podczas gdy dla przedziału $\varepsilon_d \in (0, -U/2)$ dziury. Następnie, dla $\varepsilon_d \in (-U, -U/2)$, transport znów ma charakter elektronowy i ostatecznie dla $\varepsilon_d < -U$ dziurowy. Wzrost wartości pola magnetycznego prowadzi do pojawienia się niezerowej wartości termosyły dla energii $\varepsilon_d = -U/2$. Ponadto termosyła zanika dla energii odpowiadających poziomom: $\varepsilon_\uparrow^0$ oraz $\varepsilon_\downarrow^U$. Dla położenia poziomu kropki $\varepsilon_d > \varepsilon_\uparrow^0$ transport

wciąż jest zdominowany przez elektrony, podczas gdy dla $\varepsilon_d > \varepsilon_{\uparrow}^U$ przez dziury, niezależnie od wielkości pola magnetycznego. W przypadku zakresu energii $\varepsilon_d \in (0, -U)$ wzrost pola prowadzi do wyodrębnienia dodatkowych pików współczynnika Seebecka. Gdy wielkość pola magnetycznego osiąga wartość $g\mu_B B = U$, zachodzi równość $\varepsilon_{\uparrow}^U = \varepsilon_{\downarrow}^0$ i współczynnik Seebecka osiąga niezerową, dodatnią wartość. Dalszy wzrost pola przywraca jednak wcześniejsze dwa piki z tym samym znakiem, ale o mniejszej intensywności. Warto zaznaczyć, że współczynnik Seebecka jest antysymetryczny względem energii $\varepsilon_d = -U/2$.

Współczynnik efektywności termoelektrycznej ZT , przedstawiony na rys. 2.2(d), przyjmuje największe wartości, gdy czynnik mocy, GS^2 , jest maksymalny, czyli dla stosunkowo małej wartości pola magnetycznego. Warte jest odnotowanie to, że wartości maksymalne przewyższają wartość $ZT = 1$, która uznawana jest za granicę praktycznej stosowalności. Zanik współczynnika ZT występuje dla energii $\varepsilon_d = -U/2$, ze względu na stosunkowo dużą wartość konduktancji cieplnej.

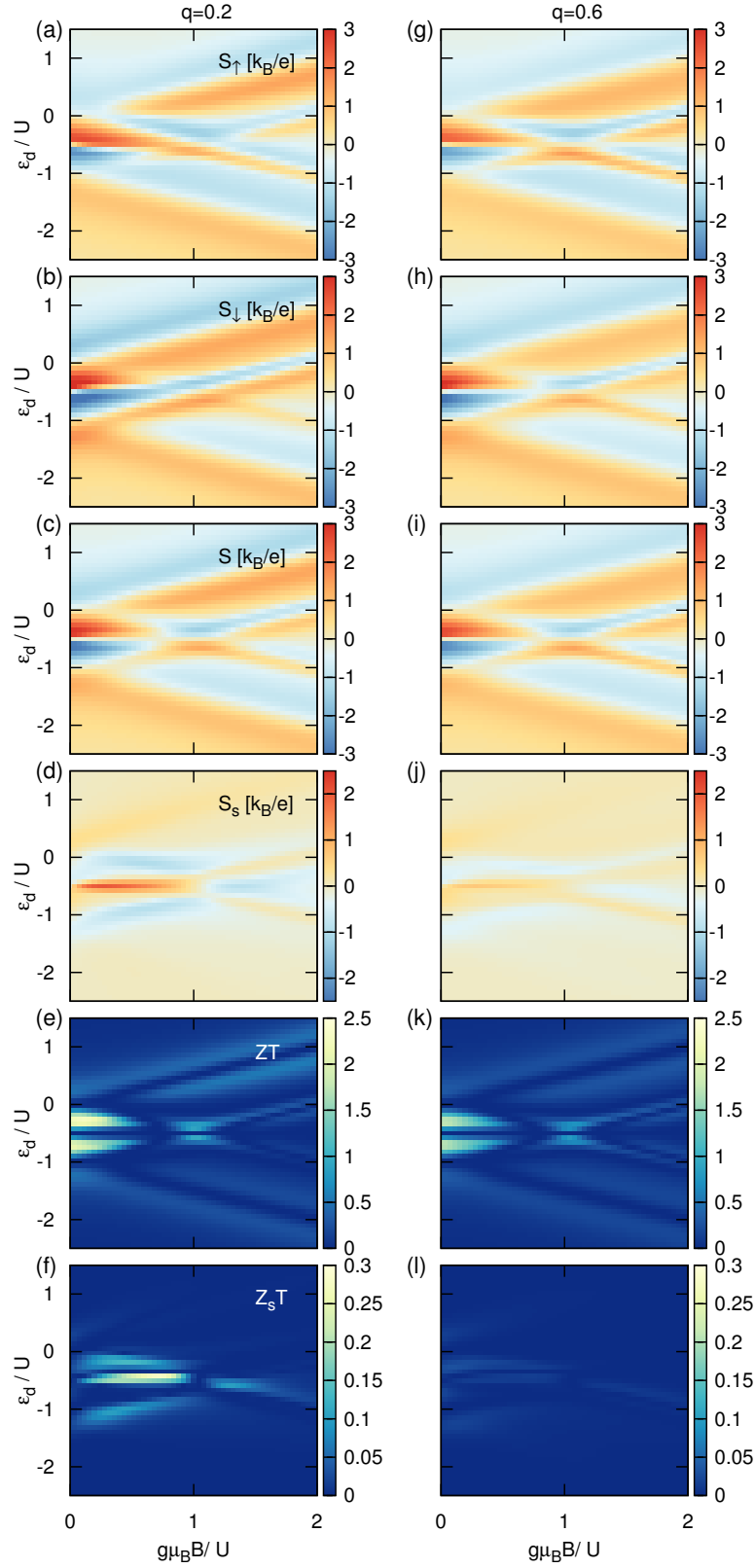
Wzrost wartości parametru q powoduje, co zostało pokazane w dodatku A.1, zmniejszenie rozszczepienia Zeemana, a w rezultacie zmniejszenie asymetrii pików. Wartość q jest jednak zbyt mała, żeby całkowicie przywrócić degenerację spinową, co powoduje dalsze rozszczepienie pików w pobliżu $\varepsilon_d = -U/2$ dla konduktancji i wkładu elektronowego do konduktancji cieplnej. W przypadku termosyły oraz współczynnika ZT wpływ zmian wartości parametru q jest niewielki i dotyczy jedynie maksymalnej wartości tych współczynników.

Przypadek skończonej akumulacji spinowej w elektrodach

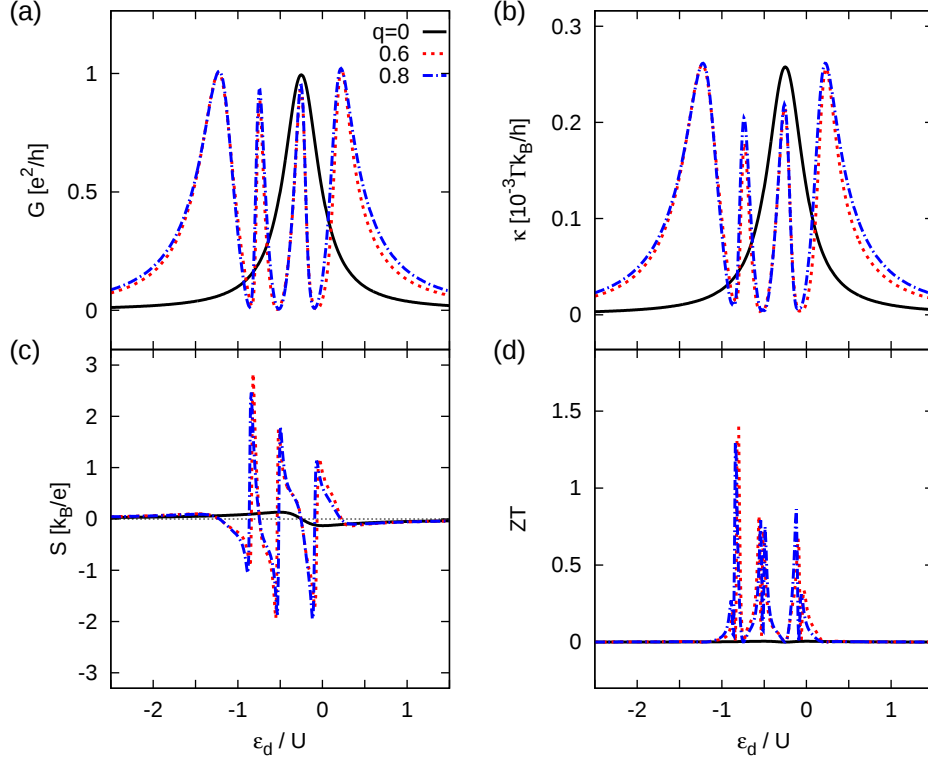
Rysunki 2.3 (a) i (b) przedstawiają współczynnik Seebecka dla nośników o spinie $\uparrow$ oraz $\downarrow$, odpowiednio, w zależności od wielkości przyłożonego pola magnetycznego $g\mu_B B$ oraz położenia poziomu ε_d kropki dla $q = 0.2$ oraz dla $q = 0.6$ w przypadku rys. 2.3 (g) i (h). Zarówno spin $\uparrow$ jak i $\downarrow$ jest przenoszony przez elektrony dla energii poziomu kropki powyżej energii $\varepsilon_d = 0$, a przez dziury poniżej $\varepsilon_d = -U$. W przypadku braku pola magnetycznego, $g\mu_B B = 0$, obydwa współczynniki zmieniają znak dla tych samych wartości energii poziomu kropki. Wzrost wartości parametru q powoduje niewielkie zmniejszenie maksymalnej wartości składowej $S_{\uparrow}$ współczynnika Seebecka, a zwiększenie składowej $S_{\downarrow}$. Jest to związane z malejącą wraz ze wzrostem parametru q degeneracją poziomu kropki, co jest wynikiem przeciwdziałania efektywnego pola magnetycznego wywołanego oddziaływaniem spinowo-orbitalnym Rashby zewnętrznemu polu magnetycznemu.

Ładunkowy współczynnik Seebecka, przedstawiony na rys. 2.3 (c) i (i), jest sumą składowych dla poszczególnych spinów, więc zachowanie tego współczynnika jest podobne do zachowania ładunkowego współczynnika Seebecka w przypadku braku akumulacji spinowej. W tym przypadku wpływ sprzężenia spinowo-orbitalnego typu Rashby jest niewielki.

Spinowy współczynnik Seebecka, przedstawiony na rys. 2.3(d), wykazuje silne wzmocnienie dla zakresu pola magnetycznego $0 < g\mu_B B < U$ oraz energii $\varepsilon_d = -U/2$. W obszarze tego maksimum termosyła $S_{\uparrow}$ jest większa niż $S_{\downarrow}$, co wiąże się z większym prądem elektronów i dziur o spinie $\uparrow$ niż o spinie $\downarrow$. W punkcie tym i dla wspomnianego zakresu pól magnetycznych, termosyła spinowa jest większa niż jej ładunkowy odpowiednik. Gdy $\varepsilon_{\uparrow}^U = \varepsilon_{\downarrow}^0$, spinowa termosyła zmienia znak, ze względu na całkowitą kompensację prądów nośników o przeciwnych spinach, a następnie



Rysunek 2.3: Współczynniki Seebecka oraz współczynniki efektywności termoelektrycznej w funkcji położenia poziomu ε_d kropki kwantowej oraz pola magnetycznego $g\mu_B B$ dla $q = 0.2$ i $q = 0.6$. Pozostałe parametry: $U = 8\Gamma$, $p_L = p_R = p = 0.4$, $k_B T = \Gamma/2$.



Rysunek 2.4: Współczynniki termoelektryczne w funkcji położenia poziomu ε_d kropki kwantowej oraz wyróżnionych wartości parametru q . Pozostałe parametry: $U = 8\Gamma$, $p_L = p_R = p = 1$, $k_B T = 0.08\Gamma$, $g\mu_B B = U/2$.

przewagę nośników o spinie $\downarrow$ w transporcie. Porównując rys. 2.3 (d) i (j), można zauważyć, że wraz ze wzrostem wartości parametru q spinowa termosila ulega znacznemu wygaszeniu. Ten zanik spinowej termosily związany jest z malejącą różnicą pomiędzy spinowymi składowymi współczynnika Seebecka, $S_\uparrow$ i $S_\downarrow$.

Współczynniki efektywności termoelektrycznej ładunkowy, ZT , i spinowy, $Z_s T$, zostały przedstawione na rys. 2.3 (e) i (k) dla $q = 0.2$ oraz na rys. 2.3 (f) i (l) dla $q = 0.6$. Ładunkowy współczynnik ZT przyjmuje największą wartość dla położenia poziomu kropki $\varepsilon_d \in (0, -U/2)$ oraz $\varepsilon_d \in (-U/2, -U)$. Jednocześnie wartość ta jest większa niż maksymalna wartość współczynnika ZT w przypadku braku akumulacji spinowej [rys. 2.2 (e) i (k)]. Efektywność termoelektryczna układu maleje dla energii odpowiadających rezonansom: $\varepsilon_d = 0$ i $\varepsilon_d = -U$ oraz w punkcie symetrii $\varepsilon_d = -U/2$. Z kolei, maksymalne wartości jakie przyjmuje współczynnik $Z_s T$ są o rząd wielkości mniejsze niż w przypadku jego ładunkowego odpowiednika. Spinowa współczynnik efektywności termoelektrycznej, $Z_s T$, w przeciwieństwie do ładunkowego współczynnika, ZT , przyjmuje niezerowe wartości w punkcie symetrii, $\varepsilon_d = -U/2$, ze względu na, również niezerową, wartość spinowej termosily. W wyniku zwiększenia wartości parametru q spinowa efektywność termoelektryczna ulega prawie całkowitemu wygaszeniu.

Efekt Fano

W przypadku szczególnym, gdy kropka jest połączona z elektrodami półmetalicznymi, czyli dla przypadku gdy $p_L = p_R = 1$, kanał przewodnictwa dla elektronów o spinie $\downarrow$

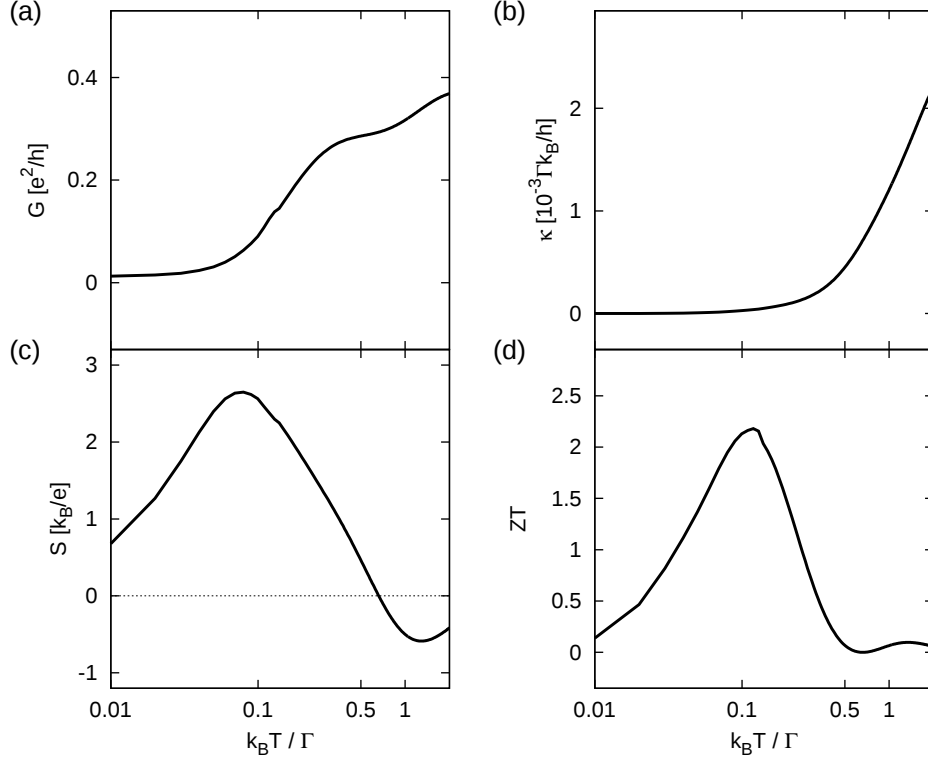
przestaje być aktywny. Ponadto, w tym przypadku, obniżenie temperatury prowadzi do osiągnięcia maksymalnych wartości przez współczynnik Seebecka i współczynnik efektywności termoelektrycznej. Ponadto spinowe i ładunkowe efekty są sobie równoważne, gdyż współczynnik transmisji dla nośników o spinie $\downarrow$ jest równy zero, $T_{\downarrow} = 0$. W przypadku półmetalicznych elektrod pojawiają się efekty interferencyjne typowe dla zjawiska Fano, w którym rolę tzw. kanału tła, odgrywa kanał nośników o spinie $\uparrow$, podczas, gdy tzw. kanałem rezonansowym jest kanał nośników o spinie $\downarrow$. Wzrost wartości współczynników termoelektrycznych w niższej temperaturze związany jest ze zwężeniem pików i pojawieniem się antyrezonansu Fano, związanego z destruktywną interferencją nośników o spinie $\uparrow$ i $\downarrow$ na kropce.

Zarówno konduktancja elektryczna G jak i wkład elektronowy do konduktancji cieplnej κ , przedstawione na rys. 2.4(a) i (b), dla przypadku $q = 0$ wykazują pojedyncze maksimum, opisywane krzywą Lorentza, związane z tunelowaniem elektronu o spinie $\uparrow$ przez poziom $\varepsilon_{\uparrow} = g\mu_B B/2 = U/4$. Wzrost wartości parametru q prowadzi do wyodrębnienia bardziej złożonej struktury. Jest to związane z pojawieniem się poprzecznego, efektywnego pola magnetycznego B_y [wzór (A.4) z dodatku A.1], które powoduje obrócenie spinu $\uparrow$. Maksymalne wartości obydwu konduktancji przypadają na wartości energii odpowiadające bezspinowym poziomom $\varepsilon_1^{0,U}$ i $\varepsilon_2^{0,U}$, w których występuje jawna zależność od parametru q w postaci $(1 - q)/(1 + q)$ dla ustalonej wartości pola. Dla $q = 0.6$ widoczna jest większa asymetria pików — pik odpowiadający poziomowi ε_2^0 jest węższy niż pik odpowiadający poziomowi ε_1^U .

Na rys. 2.4(c), pokazano, że współczynnik Seebecka jest najmniejszy dla $q = 0$. Ponadto zmiana znaku termosily zachodzi tylko dla energii odpowiadającej energii $\varepsilon_d = \varepsilon_{\uparrow} = -U/4$, związana z kompensacją prądów elektronowych i dziurowych przepływających przez kropkę. Wzrost wartości parametru q , związanego ze sprzężeniem spinowo-orbitalnym typu Rashby, powoduje, tak jak w przypadku konduktancji cieplnej, pojawienie się większej liczby maksimów i miejsc zerowych w zależności transmisji od energii poziomu kropki. Miejsca zerowe w tym przypadku przypadają na wartości energii odpowiadające poziomom $\varepsilon_1^{0,U}$ i $\varepsilon_2^{0,U}$, w których następuje zmiana charakteru transportu, zaczynając od energii $\varepsilon_d \approx 0$, z dziurowego na elektronowy, a następnie z powrotem z elektronowego na dziurowy.

W rezultacie wyodrębnienia się antyrezonansu, współczynnik efektywności termoelektrycznej ulega znacznemu wzmocnieniu ze wzrostem wartości parametru q . Wzrost ten nie jest monotoniczny, gdyż powyżej wartości $q = 0.6$ współczynnik ZT ulega zmniejszeniu. Jest to związane z faktem, że dla $q \rightarrow 1$ różnica pomiędzy poziomami ε_1 i ε_2 (zdefiniowanymi w dodatku A.1) maleje, prowadząc w rezultacie do degeneracji poziomu ε_d i zaniku antyrezonansu Fano.

Na rys. 2.5 przedstawiono zależność współczynników termoelektrycznych w funkcji temperatury dla ustalonego poziomu kropki $\varepsilon_d = -0.81U$ (odpowiadającemu antyrezonansowi w konduktancji) i dla parametru $q = 0.6$. Dla temperatur $k_B T < 0.5\Gamma$ zarówno konduktancja elektryczna jak i wkład elektronowy do konduktancji cieplnej, pokazane na rys. 2.5 (a) i (b), są silnie stłumione. Jest to związane z istnieniem antyrezonansu Fano dla wybranej wartości energii poziomu kropki oraz faktem, że w niskich temperaturach pochodna rozkładu Fermiego-Diraca, $\partial f/\partial \varepsilon$, wchodząca do współczynników Onsagera, zbliża się kształtem do funkcji typu delty Diraca. Iloczyn tej pochodnej oraz zerowej lub bliskiej zero wartości współczynnika transmisji



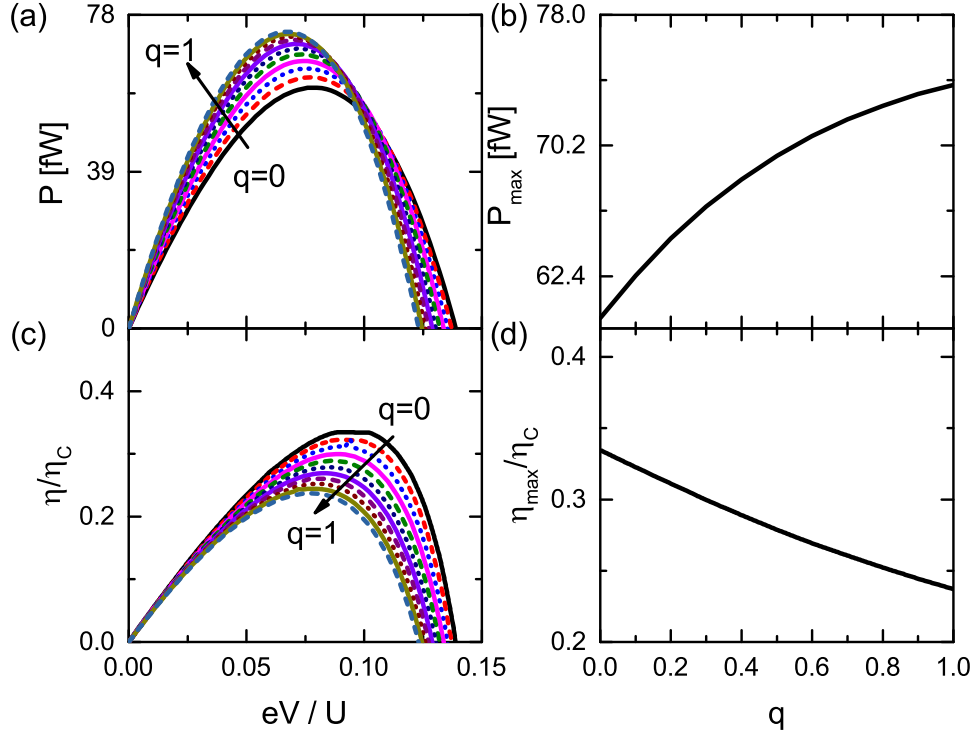
Rysunek 2.5: Współczynniki termoelektryczne w funkcji temperatury $k_B T$ (w skali logarytmicznej). Pozostałe parametry: $U = 8\Gamma$, $p_L = p_R = p = 1$, $\varepsilon_d = -0.81U$, $g\mu_B B = U/2$.

proceeds to zero value of electrical and thermal conductance. Increase of temperature above the value $k_B T = 0.5\Gamma$ causes broadening of resonant peaks in conductances and is related to the fact that „covering” antiresonance results in an increase of both coefficients.

Seebeck coefficient, presented in fig. 2.5(c), takes its maximum value for temperature $k_B T \approx 0.1\Gamma$ and its minimum for $k_B T \approx \Gamma$. The change of sign is observed for $0.5\Gamma < k_B T < \Gamma$. Positive value of Seebeck coefficient for $k_B T < 0.5\Gamma$ indicates a hole-like character of transport, while above this temperature the dominant carriers are electrons. The decrease of the thermopower with increasing temperature is related, similarly to the increase of conductance, to the broadening of energy levels and the destruction of destructive interference, leading to the emergence of the Fano antiresonance.

Thermoelectric efficiency, presented in fig. 2.5(d), is the highest for temperature above $k_B T = 0.1\Gamma$, i.e. when the product GS^2 reaches its maximum value. At higher temperatures, when thermal conductance begins to increase, the thermoelectric efficiency of the system decreases until it reaches a complete zero at temperature $k_B T \approx 0.5\Gamma$. Above this temperature, there is a new increase related to the increase of the negative thermopower.

This case indicates the possibility of achieving higher thermoelectric efficiency at lower temperatures, in which the states involved in interference are well-resolved.



Rysunek 2.6: (a) Moc silnika cieplnego w zależności od napięcia eV , (b) moc maksymalna w zależności od parametru q , (c) sprawność silnika w stosunku do sprawności Carnota, (d) sprawność maksymalna w stosunku do sprawności Carnot. Do obliczeń przyjęto parametry: $\Gamma = 0.1$ meV, $p = 0.4$, $U = 8\Gamma$, $\varepsilon_d = -U/4$, $k_B T = 0.5\Gamma$, $\Delta T = 2T$, $g\mu_B B = 0$.

2.2.2 Transport nierównowagowy: silnik cieplny

Jak wspomniano w rozdziale 1, jednym z największych problemów obecnych układów scalonych jest problem generowania nadmiernego i niepożądanego ciepła. Możliwość przetworzenia tego ciepła na prąd jest realizowana przez układ silnika cieplnego opartego na kropce kwantowej [120, 121]. Jednym z podstawowych parametrów, które opisują wydajność takiego silnika, jest moc, P , wyrażona następującym wzorem:

$$P = IV, \quad (2.61)$$

gdzie V jest napięciem koniecznym do powstrzymania przepływu prądu I wywołanego różnicą temperatur ΔT pomiędzy elektrodami. Istotniejszym parametrem charakteryzującym silnik cieplny jest jego sprawność dana wzorem:

$$\eta = \frac{P}{|I_Q|}. \quad (2.62)$$

Rysunek 2.6(a) przedstawia moc P w zależności od przyłożonego napięcia (eV) dla różnicy temperatur $\Delta T = 2T$ i wybranych wartości parametru q oraz dla poziomu kropki $\varepsilon_d = -U/4$ i polaryzacji magnetycznej elektrod $p = 0.4$. W przypadku $q = 0$ napięcie przy którym moc zanika, tzw. napięcie kompensujące prąd (eV_{th}) wynosi $eV_{\text{th}} \approx 0.138U$. Maksymalna moc rozpatrywanego silnika znajduje się w zakresie od ok. 60 do 74 fW i osiągana jest dla napięcia $V_{\max} = V_{\text{th}}/2$. Zwiększenie sprzężenia spinowo-orbitalnego poprzez parametr q prowadzi do

wzrostu maksymalnej mocy silnika oraz zmniejszenia napięcia $V_{\max}$, dla którego ta moc jest osiągana. Rysunek 2.6(b) przedstawia moc maksymalną, $P_{\max}$, w zależności od parametru q . Moc maksymalna wzrasta monotonicznie, choć nieliniowo ze wzrostem wartości parametru q . Dla $q = 1$, moc $P_{\max}$, osiąga wartość maksymalną.

Na rys. 2.6(c) przedstawiono zależność ilorazu η/η_C od przyłożonego napięcia eV , gdzie $\eta_C = 1 - T_L/T_R$ jest sprawnością Carnota. Dla zastosowanej różnicy temperatur sprawność Carnota $\eta_C \approx 0.66$. Napięcie, dla którego moc jest maksymalna na ogół nie pokrywa się z napięciem, dla którego maksymalna jest sprawność. W rozpatrywanym przypadku jest to spowodowane faktem, że ze wzrostem parametru q rośnie również prąd ciepła, który obniża maksymalną sprawność. Maksymalna sprawność osiągana w rozpatrywanym przypadku znajduje się w przedziale od ok. 24 do 34% sprawności Carnota.

2.3 Podsumowanie

W niniejszym rozdziale przedstawiono wpływ silnego sprzężenia spinowo-orbitalnego typu Rashby na transport termoelektryczny w układzie pojedynczej kropki kwantowej sprzężonej z dwiema elektrodami ferromagnetycznymi. Pokazano, że w przypadku elektrod ferromagnetycznych oddziaływanie Rashby prowadzi do obniżenia odpowiedzi termoelektrycznej układu. W przypadku szczególnym, gdy elektrody są półmetaliczne (czyli całkowicie spolaryzowane), możliwe jest pojawienie się interferencyjnego zjawiska Fano, które przyczynia się do znacznego wzrostu wartości współczynników termoelektrycznych.

Pokazano również wyniki analizy rozpatrywanego modelu w przypadku transportu nierównowagowego, w którym to przypadku rozpatrywany układ działa na zasadzie silnika cieplnego ze sprawnością rzędu mieszającą się w zakresie 24-34% sprawności Carnota.

Rozdział 3

Spinowo-zależny transport termoelektryczny przez układ dwóch kropek kwantowych z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym Rashby

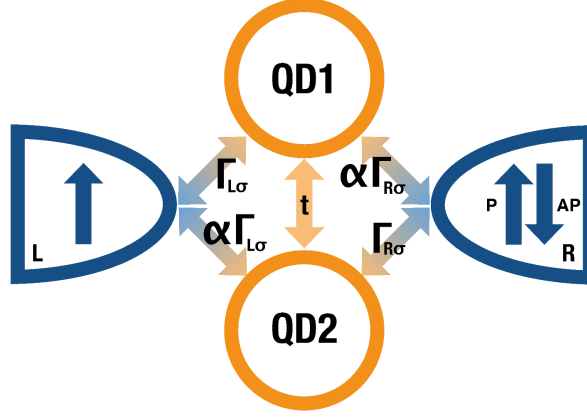
W poniższym rozdziale rozważany jest układ dwóch kropek kwantowych sprzężonych ze sobą oraz dwiema, w ogólnym przypadku, magnetycznymi elektrodami. Ponadto kropki znajdują się w przeciwnych ramionach pierścienia Aharonova-Bohma, w których obecne jest również sprzężenie spinowo-orbitalne typu Rashby. Sprzężenie to objawia się fazą tunelowania zależną od spinu. Kontrola tej fazy jest możliwa przy pomocy pola elektrycznego, co pozwala na stosunkowo łatwe dostrajanie przepływu prądu spinowego i badanie zjawiska interferencji kwantowej. W porównaniu do oddziaływania Rashby opisanego w poprzednim rozdziale, spin elektronów podczas tunelowania jest zachowany — oddziaływanie powoduje jedynie jego precesję.

3.1 Opis teoretyczny

3.1.1 Model układu

Transformację od ogólnego hamiltonianu kropek kwantowych z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym typu Rashby do hamiltonianu w reprezentacji drugiej kwantyzacji przedstawiono w dodatku A.2. Układ dwóch kropek kwantowych, przedstawiony schematycznie na rys. 3.1, połączonych z dwiema elektrodami opisany jest następującym hamiltonianem:

$$H = H_e + H_{\text{dqd}} + H_t . \quad (3.1)$$



Rysunek 3.1: Układ rozpatrywany w niniejszym rozdziale składa się z dwóch jednopoziomowych kropek kwantowych, z których każda charakteryzuje się dodatkowo parametrem kulombowskim U . Sprzężenie kropek kwantowych ze sobą opisuje parametr przeskoku t , a sprzężenie kropki z elektrodą lewą $\beta = L$ oraz prawą $\beta = R$ opisuje czynnik $(\alpha)\Gamma_{\beta\sigma}$, gdzie α stanowi parametr asymetrii sprzężenia kropek z elektrodami. W przypadku magnetycznych elektrod, ich konfiguracja może być równoległa (P) lub antyrównoległa (AP), w zależności od znaku parametru polaryzacji magnetycznej prawej elektrody.

Pierwszy człon opisuje elektrony w elektrodach:

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}\beta\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma}, \quad (3.2)$$

gdzie $\mathbf{k}$ jest wektorem falowym elektronu w elektrodzie $\beta = L, P$ o spinie $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Drugi człon wyrażenia (3.1) dotyczy układu dwóch kropek kwantowych:

$$H_{\text{dqd}} = \sum_{i\sigma} \varepsilon_i d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_\sigma t_\sigma (d_{1\sigma}^\dagger d_{2\sigma} + d_{2\sigma}^\dagger d_{1\sigma}), \quad (3.3)$$

gdzie $\varepsilon_{i\sigma} = \varepsilon_d \pm \Delta\varepsilon$ jest energią poziomu i -tej kropki ($i = 1, 2$). Symbol $\Delta\varepsilon$ oznacza różnicę energii poziomów kropek, a U_i jest energią oddziaływania kulombowskiego na i -tej kropce. Ostatni człon powyższego hamiltonianu opisuje przeskok elektronu pomiędzy kropkami. Możliwość przeskoku pomiędzy kropkami prowadzi w układach kropek kwantowych do wyodrębnienia się stanów molekularnych, przez analogię do molekuly H_2 : stanu wiążącego i stanu antywiązącego.

Tunelowanie elektronów pomiędzy kropkami a elektrodami jest opisane hamiltonianem H_t , który w rozpatrywanym przypadku przyjmuje postać:

$$H_t = \sum_{\mathbf{k}\beta i\sigma} V'_{\mathbf{k}\beta i\sigma} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \text{H.c.} \quad (3.4)$$

Faza Aharonova-Bohma oraz oddziaływanie spinowo-orbitalne Rashby zostały uwzględnione w amplitudzie tunelowej następująco:

$$V'_{\mathbf{k}\beta\sigma i} = V_{\mathbf{k}\beta\sigma i} \exp(\hat{\beta} \hat{\alpha} i \phi_\sigma / 4), \quad (3.5)$$

gdzie $\phi_\sigma = \phi + \hat{\sigma} \phi_R$ jest sumą faz: Aharonova-Bohma, ϕ , oraz fazy pochodzącej od spinowo-orbitalnego sprzężenia typu Rashby, ϕ_R . Dla uproszczenia zapisu faza ϕ_R będzie odtąd

nazywana *fazą Rashby*. W powyższych wyrażeniach $\hat{\sigma} = \pm 1$ (dla $\sigma = \uparrow, \downarrow$), $\hat{\beta} = \delta_{\beta L} - \delta_{\beta R}$ oraz $\hat{\alpha} = \delta_{i2} - \delta_{i1}$, gdzie δ_{ij} jest deltą Kroneckera.

Diagonalizacja hamiltonianu (3.1) prowadzi do hamiltonianu postaci:

$$H' = H_e + H'_{\text{dqd}} + H'_t, \quad (3.6)$$

gdzie hamiltonian opisujący elektrody, H_e , nie ulega zmianie. Natomiast hamiltonian układu kropek kwantowych przyjmuje postać:

$$H'_{\text{dqd}} = \sum_{\eta\sigma} \varepsilon_{\eta\sigma} d_{\eta\sigma}^\dagger d_{\eta\sigma}, \quad (3.7)$$

gdzie

$$\varepsilon_{\eta\sigma} = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 \pm \sqrt{\varepsilon_1 - \varepsilon_2 + 4t^2} \right), \quad (3.8)$$

jest energią stanu wiążącego ($\eta = b$) lub antywiążącego ($\eta = a$). W powyższym wzorze znak „+” dotyczy stanu wiążącego. W przypadku orbitalnie zdegenerowanych poziomów, $\Delta\varepsilon = 0$, powyższe energie stanów własnych ulegają uproszczeniu do postaci:

$$\varepsilon_{\eta\sigma} = \varepsilon_d \pm t. \quad (3.9)$$

Nowe operatory kreacji i anihilacji cząstki w stanie wiążącym (antywiążącym) wyrażone są wyjściowymi operatorami dla poszczególnych kropek następująco:

$$d_{\eta\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{1\sigma} \pm d_{2\sigma}). \quad (3.10)$$

Hamiltonian tunelowy, H'_t , przyjmuje postać:

$$H'_t = \sum_{\beta\sigma\eta} V_{\beta\sigma\eta} c_{\beta\sigma}^\dagger d_{\eta\sigma} + \text{H.c.}, \quad (3.11)$$

gdzie amplitudy tunelowe $V_{\beta\sigma\eta}$ odpowiadające stanom: wiążącemu i antywiążącemu, wyrażone są następującą formułą:

$$V_{\beta\sigma\eta} = \frac{\sqrt{2}}{2} (V_{\beta\sigma 2} \pm V_{\beta\sigma 1}). \quad (3.12)$$

3.1.2 Funkcje Greena i współczynnik transmisji

W celu wyznaczenia współczynników termoelektrycznych, konieczne jest wyznaczenie wpierw współczynnika transmisji. Stosując metodę funkcji Greena, wprowadzoną w rozdziale poprzednim, funkcje Greena: opóźniona (r) i przedwczesna (a) dla rozpatrywanego układu mogą zostać wyznaczone z równania Dysona

$$\mathbf{G}_\sigma^{r,a} = \left[(\mathbf{g}_{0\sigma}^{r,a})^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}_d - \boldsymbol{\Sigma}_\sigma^{r,a} \right]^{-1}, \quad (3.13)$$

w którym wprowadzono opóźnioną i przedwczesną energię własną:

$$\Sigma_{\sigma}^{r,a} = \mp \frac{i}{2} \sum_{\beta} \Gamma_{\beta\sigma}. \quad (3.14)$$

Korelacyjna funkcja Greena wyznaczona jest z równania Kiełdysza,

$$\mathbf{G}_{\sigma}^{<} = \mathbf{G}_{\sigma}^r \Sigma_{\sigma}^{<} \mathbf{G}_{\sigma}^a, \quad (3.15)$$

w którym wprowadzono korelacyjną energię własną

$$\Sigma_{\sigma}^{<} = i f_{\beta\sigma} \Gamma_{\beta\sigma}. \quad (3.16)$$

Macierz współczynników sprzężeń pomiędzy kropką a elektrodą $\beta = L$ przyjmuje następującą postać:

$$\mathbf{\Gamma}_{L\sigma} = \begin{bmatrix} 1 & q\sqrt{\alpha} \exp\left(-\frac{i}{2}\phi_{\sigma}\right) \\ q\sqrt{\alpha} \exp\left(\frac{i}{2}\phi_{\sigma}\right) & \alpha \end{bmatrix} \Gamma_{L\sigma}, \quad (3.17)$$

podczas gdy dla sprzężenia kropki z elektrodą $\beta = R$ następującą:

$$\mathbf{\Gamma}_{R\sigma} = \begin{bmatrix} \alpha & q\sqrt{\alpha} \exp\left(\frac{i}{2}\phi_{\sigma}\right) \\ q\sqrt{\alpha} \exp\left(-\frac{i}{2}\phi_{\sigma}\right) & 1 \end{bmatrix} \Gamma_{R\sigma}, \quad (3.18)$$

gdzie

$$\Gamma_{\beta\sigma} = (1 + \hat{\sigma} p_{\beta}) \Gamma_{\beta}. \quad (3.19)$$

W wyrażeniach (3.17) i (3.18) symbol p_{β} oznacza polaryzację magnetyczną elektrody $\beta = L, R$. Dodatkowo przyjęto założenie o jednakowym sprzężeniu kropek z elektrodami, $\Gamma_{1\beta} = \Gamma_{2\beta} = \Gamma_{\beta}$. Ponadto w powyższych macierzach symbol $\phi_{\sigma} \equiv \phi + \hat{\sigma} \phi_R$ oznacza zależną od spinu fazę, będącą sumą fazy Aharonova-Bohma, ϕ , oraz fazy Rashby, ϕ_R . Parametr $\alpha \in [0, 1]$ opisuje symetrię sprzężenia kropek i elektrod. Dla $\alpha = 0$ kropki połączone są szeregowo, a dla $\alpha = 1$ równolegle. Parametr q związany jest ze sprzężeniem pośrednim kropek przez stany elektrod, które prowadzi do efektów interferencyjnych. Wartości tego parametru mogą być kontrolowane przez zmiany fizycznej odległości kropek od elektrod [114]. W przypadku odległości rzędu długości fali elektronu z elektrody β , $q \rightarrow 1$, podczas gdy $q = 0$, gdy kropki są odseparowane.

Ponadto, ze względu na zespoloną fazę występującą w elementach macierzy (3.17) i (3.18), można te macierze rozdzielić na część rzeczywistą i urojoną:

$$\mathbf{\Gamma}_{\beta\sigma} = \text{Re } \mathbf{\Gamma}_{\beta\sigma} + i \text{Im } \mathbf{\Gamma}_{\beta\sigma}, \quad (3.20)$$

gdzie, np. dla $\beta = R$:

$$\text{Re } \mathbf{\Gamma}_{R\sigma} = \begin{bmatrix} \alpha & q\sqrt{\alpha} \cos\left(\frac{\phi_{\sigma}}{2}\right) \\ q\sqrt{\alpha} \cos\left(\frac{\phi_{\sigma}}{2}\right) & 1 \end{bmatrix} \Gamma_{R\sigma}, \quad (3.21)$$

oraz

$$\text{Im } \Gamma_{R\sigma} = \begin{bmatrix} 0 & q\sqrt{\alpha} \sin\left(\frac{\phi_\sigma}{2}\right) \\ -q\sqrt{\alpha} \sin\left(\frac{\phi_\sigma}{2}\right) & 0 \end{bmatrix} \Gamma_{R\sigma}. \quad (3.22)$$

Energia własna związana z wzajemnym sprzężeniem kropek wyrażona jest następująco:

$$\Sigma_d = \begin{bmatrix} 0 & t \\ t & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.23)$$

W powyższych formułach macierze odpowiednich funkcji Greena oraz energii własnych opatrzone zostały indeksem „ σ ”. W przeciwieństwie do przypadku rozpatrzonego w poprzednim rozdziale tunelowanie elektronów zachodzi z zachowaniem spinu, skutkując koniecznością wyznaczenia odpowiednich funkcji osobno dla obydwu wartości spinu. Ponadto przyjęto, że w rozpatrywanym przypadku temperatura jest wyższa od odpowiedniej temperatury Kondo, wobec czego efekt Kondo nie jest brany tutaj pod uwagę. Pominięto również korelacje pomiędzy samymi kropkami. Zgodnie z tym przybliżeniem funkcje Greena $\mathbf{g}_{0\sigma}^{r,a}$ izolowanych od elektrod kropek można zapisać następująco:

$$\mathbf{g}_{0\sigma}^{r,a} = \begin{bmatrix} g_{0\sigma,1}^{r,a} & 0 \\ 0 & g_{0\sigma,2}^{r,a} \end{bmatrix}, \quad (3.24)$$

gdzie

$$g_{0\sigma,i}^{r,a} = \frac{1 - N_{i\bar{\sigma}}}{\varepsilon - \varepsilon_i \pm i0^+} + \frac{N_{i\bar{\sigma}}}{\varepsilon - \varepsilon_i - U_i \pm i0^+}, \quad (3.25)$$

W powyższym wyrażeniu

$$N_{i\sigma'} = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi i} G_{i\sigma'}^<, \quad (3.26)$$

jest średnim obsadzeniem i -tej kropki elektronem o spinie σ' , a $G_{i\sigma'}^<$ jest odpowiednim elementem macierzy korelacyjnej funkcji Greena $\mathbf{G}_\sigma^<$.

Zależny od spinu współczynnik transmisji rozpatrywanego układu wyrażony jest formułą:

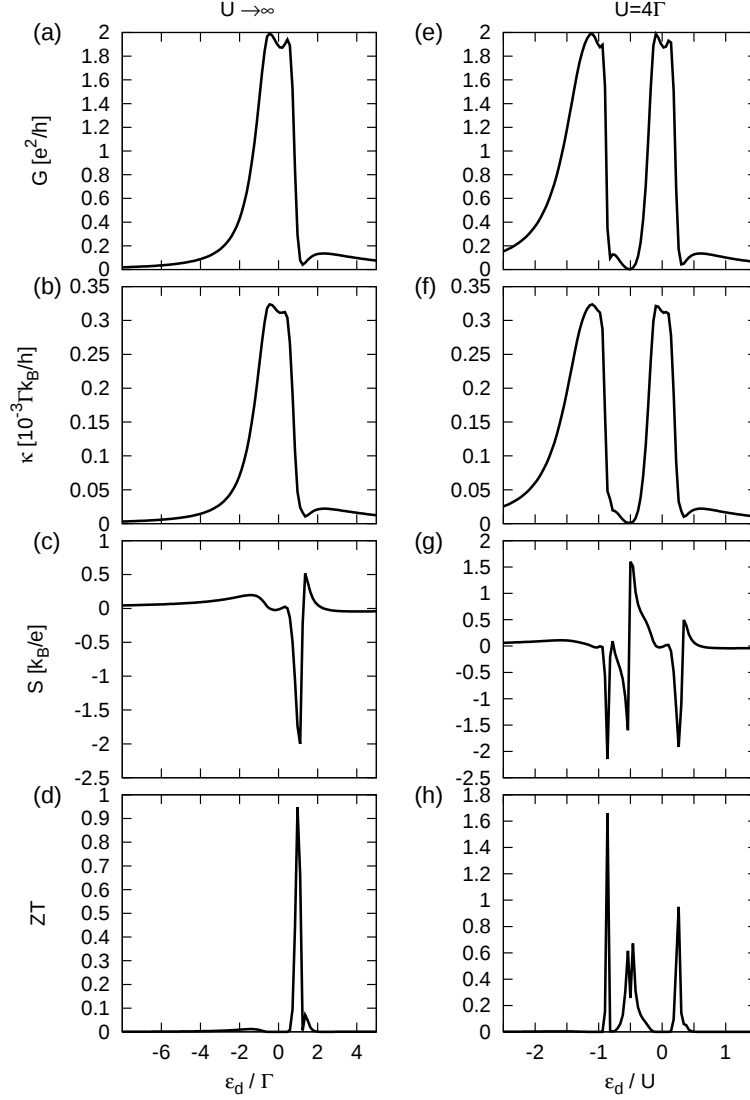
$$T_\sigma = \text{Tr} \{ \Gamma_{L\sigma} \mathbf{G}_\sigma^r \Gamma_{R\sigma} \mathbf{G}_\sigma^a \}. \quad (3.27)$$

Wyznaczenie powyższego współczynnika pozwala na zastosowanie wzorów na współczynniki termoelektryczne wyprowadzone w rozdziale 1.

3.2 Wyniki numeryczne

Niniejszy podrozdział zawiera analizę numeryczną transportu termoelektrycznego w układzie opisanym powyżej. W szczególności pokazano wpływ korelacji kulombowskich na kropkach na transport oraz wpływ spinowo-zależnej fazy na efekty termoelektryczne.

W obliczeniach przyjęto, że poziomy energetyczne kropek są zdegenerowane, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 \equiv \varepsilon_d$. Ponadto przyjęto również jednakowe wartości parametru korelacji kulombowskich, $U_1 = U_2 \equiv U$. Założono również, że kropki są silnie sprzężone ze sobą, bezpośrednio, $t = 1\Gamma$, oraz pośrednio, przez stany elektrod, $q = 1$, a także są połączone równolegle, $\alpha = 1$. Przyjęto również stałą wartość temperatury, $k_B T = 0.05\Gamma$ oraz $\phi = \pi/2$ i $\phi_R = \pi/20$, o ile nie napisano wprost o innej



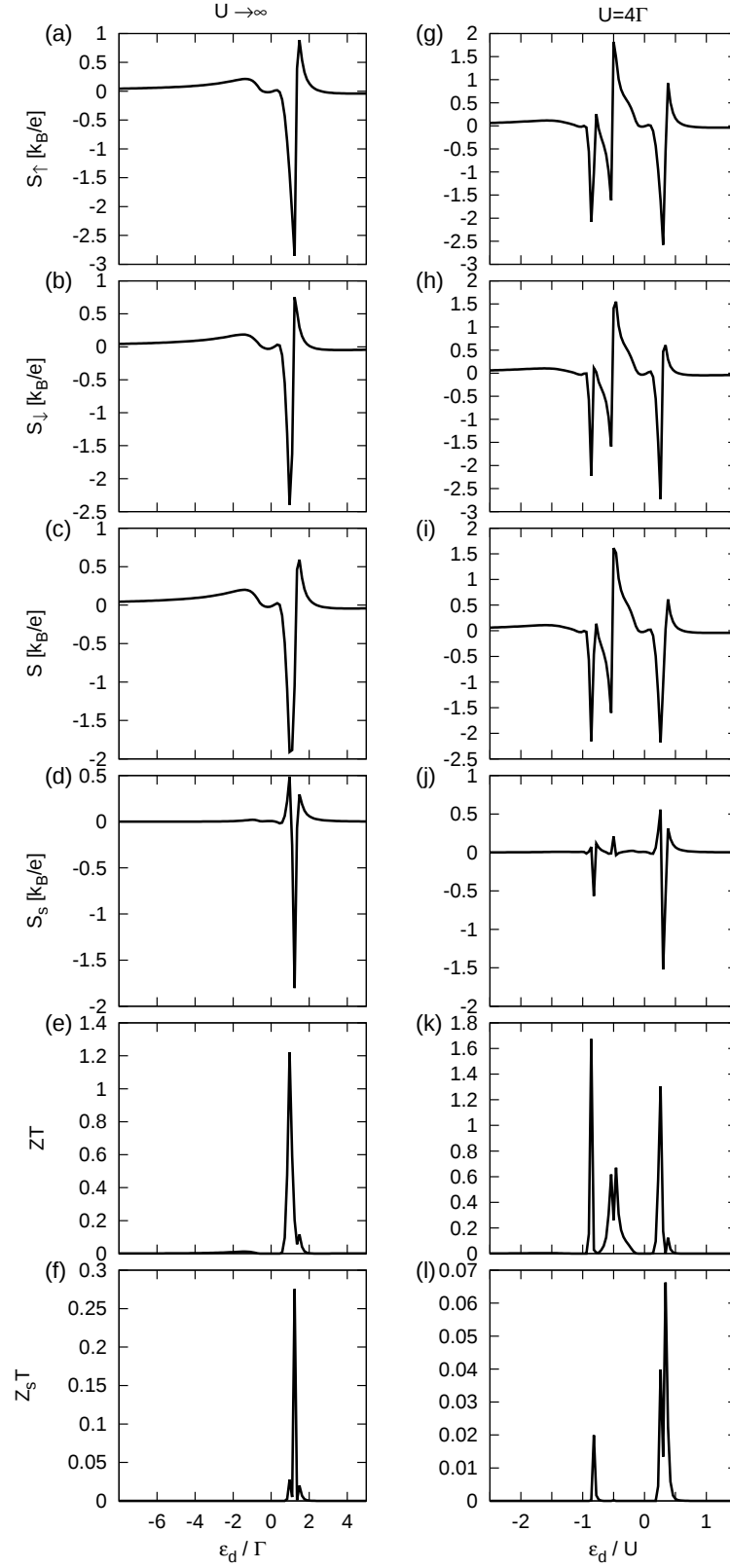
Rysunek 3.2: Współczynniki termoelektryczne w funkcji położenia poziomu ε_d kropek dla wyróżnionych wartości parametru korelacji kulombowskich U . Pozostałe parametry: $\phi = \pi/2$, $\phi_R = \pi/20$, $t = 1\Gamma$, $k_B T = 0.05\Gamma$, $\alpha = 1$, $q = 1$, $p_L = p_R = 0$.

wartości tych parametrów. Ponadto, o ile nie zaznaczono inaczej, przyjęto, że kropki połączone są z elektrodami niemagnetycznymi, $p_L = p_R = p = 0$.

3.2.1 Wpływ korelacji kulombowskich na efekty termoelektryczne

Jedną z cech opisujących układy niskowymiarowe, takie jak kropki kwantowe, jest oddziaływanie kulombowskie. Oddziaływanie to sprawia, że aby kropka kwantowa mogła zostać obsadzona kolejnym elektronem, konieczne jest pokonanie przez niego bariery energetycznej U .

Na rys. 3.2 (a) i (e) oraz (b) i (f) przedstawiono konduktancję elektryczną i konduktancję cieplną w zależności od położenia poziomu ε_d kropek dla wyróżnionych wartości parametru U . We wszystkich przypadkach konduktancja przyjmuje postać niesymetrycznej krzywej Fano. Jest to związane z utworzeniem stanów molekularnych: wiążącego i antywiążącego, odseparowanych



Rysunek 3.3: Spinowe współczynniki Seebecka i efektywności termoelektrycznej w funkcji położenia poziomu ε_d kropek dla wyróżnionych wartości parametru korelacji kulombowskich U . Pozostałe parametry: $\phi = \pi/2$, $\phi_R = \pi/20$, $t = 1\Gamma$, $k_B T = 0.05\Gamma$, $\alpha = 1$, $q = 1$, $p_L = p_R = 0$.

od siebie o energię $2t$ ze względu na silne sprzężenie pomiędzy kropkami, $t = \Gamma$. Należy zauważyć, że maksymalna wartość konduktancji elektrycznej, $2e^2/h$, wynika z tunelowania elektronów przez obydwa stany molekularne. W przypadku $t = 0$ dopuszczalna maksymalna wartość konduktancji elektrycznej to $4e^2/h$, ponieważ każda z kropek zawiera dwa kanały transportowe, które niezależnie wnoszą kwant konduktancji. Wartość minimalna obydwu konduktancji jest przyjmowana dla energii $\varepsilon_d \approx t$, dla której zachodzi destruktywna interferencja fal elektronowych. W przypadku silnego oddziaływania kulombowskiego, tzn. $U \rightarrow \infty$, każda z kropek może być obsadzona co najwyżej jednym elektronem i na wykresach przedstawiających konduktancje widoczny jest tylko jeden antyrezonans, związany z pojedynczym stanem antywiązącym. W przypadku skończonej wartości oddziaływania kulombowskiego pojawia się możliwość tunelowania elektronu o przeciwnym spinie przez, już obsadzony, układ kropek, co prowadzi do wyodrębnienia się dodatkowych pików na wykresach konduktancji. W ogólnym przypadku energie związane ze stanami: wiążącym i antywiązącym, będące biegunami funkcji Greena opisanej wzorem (3.13), można zapisać następująco:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{b,\sigma} &= \varepsilon_d + \frac{1}{2} \left(t + U + \sqrt{(t - U)^2 + 4tUN_{\bar{\sigma}}} \right), \\ \varepsilon_{a,\sigma} &= \varepsilon_d + \frac{1}{2} \left(-t + U - \sqrt{(t - U)^2 + 4tUN_{\bar{\sigma}}} \right).\end{aligned}\quad (3.28)$$

Współczynnik Seebecka, przedstawiony na rys. 3.2 (c) i (g), przyjmuje ujemną wartość maksymalną dla energii odpowiadającej stanowi antywiązącemu. Jest to związane z faktem, że energia ta leży powyżej poziomu Fermiego elektrod, skutkując dominacją elektronów w transporcie. W przypadku istnienia pojedynczego stanu antywiążącego, dla $U \rightarrow \infty$, krzywa opisująca termosilę wykazuje maksymalną ujemną wartość dla energii odpowiadającej tylko jednemu stanowi antywiązącemu. W przypadku słabszego oddziaływania kulombowskiego na kropkach, $U = 4\Gamma$, na wykresie termosily pojawiają się dodatkowe piki związane ze stanem antywiązącym odpowiadającym energii $\varepsilon_d \approx U - t$. Ponadto współczynnik Seebecka przyjmuje największą dodatnią wartość dla energii odpowiadającej punktowi symetrii elektronowo-dziurowej, tj. dla $\varepsilon_d = -U/2$. W obydwu rozpatrywanych przypadkach termosila zanika dla energii odpowiadających energiom rezonansowym kropki oraz energiom odpowiadającym stanom molekularnym, $\varepsilon_d = U \pm t$ oraz $\pm t$.

Współczynniki efektywności termoelektrycznej, przedstawione na rys. 3.2 (d) i (h), przyjmują wartości maksymalne dla energii w pobliżu energii odpowiadającej stanom antywiązącym. W przypadku energii odpowiadającej dokładnie tym stanom, konduktancja elektryczna zanika, skutkując również zanikiem współczynników ZT . Umożliwienie obsadzenia kropki przez drugi elektron, poprzez obniżenie bariery energetycznej, prowadzi do wzrostu maksymalnej wartości współczynnika ZT w pobliżu drugiego antyrezonansu. Ponadto, wzmocnienie tego współczynnika zachodzi dla energii w pobliżu punktu symetrii, $\varepsilon_d = -U/2$, wokół którego krzywa opisująca współczynnik ZT wykształca dwa piki, związane z odpowiednimi pikami termosily.

Wpływ korelacji kulombowskich na spinowy współczynnik Seebecka i efektywności termoelektrycznej jest inny niż w przypadku ładunkowych odpowiedników. Rys. 3.3 (a)-(j) przedstawia

składowe spinowe współczynników Seebecka oraz wynikające z nich ładunkowe i spinowe współczynniki. W rozpatrywanym przypadku kropki połączone są z elektrodami niemagnetycznymi, jednakże ze względu na niezerową wartość fazy Rashby i fazy Aharonova-Bohma, pojawia się akumulacja spinowa, dzięki której możliwe jest zajście spinowego efektu termoelektrycznego. Dla wybranych wartości tych faz, zarówno składowa $S_{\uparrow}$, jak i $S_{\downarrow}$ zachowują się jakościowo tak samo i podobnie do przypadku ładunkowego współczynnika Seebecka omówionego powyżej. Zarówno spin $\uparrow$, jak i $\downarrow$ jest przenoszony w większym stopniu przez elektrony niż dziury. Ponadto maksymalne ujemne wartości przyjmowane przez składowe spinowe współczynnika Seebecka oraz ładunkowe współczynniki Seebecka przypadają dla energii odpowiadającej stanom antywiązącym. W przypadku spinowego współczynnika Seebecka, powyżej opisane zależności skutkują jego dużą i ujemną wartością, ze względu na przewagę elektronów o spinie $\downarrow$ w transporcie przez stan antywiązący.

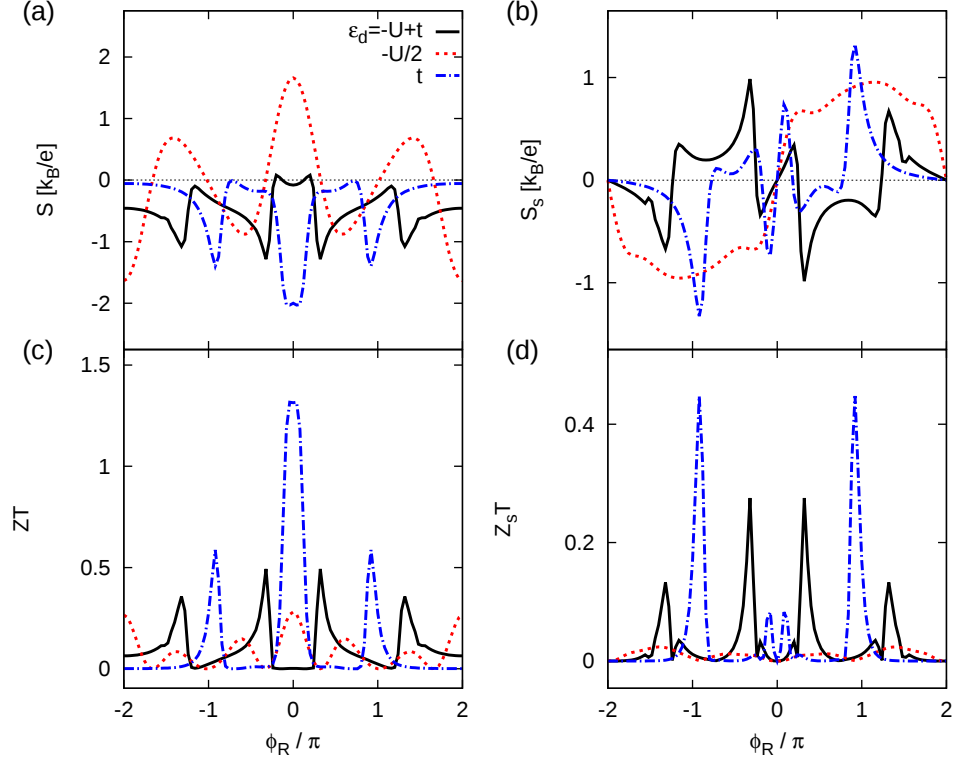
Ładunkowe i spinowe współczynniki efektywności termoelektrycznej, przedstawione na rys. 3.3 (e)-(l), wykazują odmienne zachowanie dla przypadku $U = 4\Gamma$. Współczynnik ZT przyjmuje wartość maksymalną dla energii $\varepsilon_d \approx U - t$ oraz niewiele mniejszą wartość dla energii $\varepsilon_d \approx -t$, podczas gdy spinowy współczynnik Seebecka przyjmuje maksymalną wartość dla energii $\varepsilon_d \approx -t$ a dużo mniejszą dla $\varepsilon_d \approx U - t$. Ponadto maksymalna wartość współczynnika $Z_s T$ w przypadku skończonych wartości parametru korelacji kulombowskich jest dużo mniejsza niż gdy $U \rightarrow \infty$.

3.2.2 Modulacja efektów termoelektrycznych fazą Rashby

Dla skończonej wartości parametru korelacji kulombowskich $U = 4\Gamma$ w układzie wyodrębnione są dwa stany antywiązące wokół odpowiednich energii rezonansowych kropek. Z analizy przeprowadzonej powyżej największe wartości współczynników Seebecka osiągane są dla energii odpowiadającej stanom antywiązącym oraz w obrębie energii punktu symetrii elektronowo-dziurowej. Obecność fazy Rashby, zależnej od spinu tunelujących elektronów, prowadzi do pojawienia się akumulacji spinowej, umożliwiającej zajście spinowo-zależnego efektu Seebecka. Ładunkowy współczynnik Seebecka, przedstawiony na rys. 3.4(a), osiąga największą wartość w przypadku braku fazy Rashby dla poziomu kropki $\varepsilon_d = -U/2$ oraz dla $\varepsilon_d = t$. Dla energii odpowiadającej stanom antywiązącym, $\varepsilon_d = t$ oraz $\varepsilon_d = -U + t$ współczynnik Seebecka jest ujemny ze względu na dominujący charakter elektronowy w transporcie spinów $\uparrow$ i $\downarrow$.

Spinowy współczynnik Seebecka, przedstawiony na rys. 3.4(b), zanika dla fazy Rashby $\phi_R = 2\pi n$, dla $n \in \mathbb{Z}$. Dla energii poziomu kropki $\varepsilon_d = -U/2$ oraz $\varepsilon_d = t$ i dla dodatniej wartości fazy Rashby spinowy współczynnik Seebecka przyjmuje dodatnie wartości, $S_s > 0$, podczas gdy przeciwna zależność jest prawdziwa dla $\phi_R < 0$. W przypadku gdy $\phi_R > 0$ składowa $S_{\downarrow}$ jest ujemna i większa niż składowa $S_{\uparrow}$.

Ładunkowy i spinowy współczynnik efektywności termoelektrycznej, przedstawione na rys. 3.4 (c) i (d), przyjmują największe wartości dla energii $\varepsilon_d = t$, odpowiadającej jednemu ze stanów antywiązących. Ponadto ładunkowy współczynnik efektywności termoelektrycznej osiąga największą wartość dla $\phi_R = 0$, podczas gdy $Z_s T$ jest maksymalny dla $\phi_R \approx \pm\pi$. Choć maksymalne wartości współczynnika Seebecka osiągane są dla $\varepsilon_d = -U/2$, to współczynniki ZT



Rysunek 3.4: Spinowe współczynniki Seebecka i efektywności termoelektrycznej w funkcji fazy Rashby dla wyróżnionych wartości położenia poziomu ϵ_d kropek. Pozostałe parametry: $\phi = \pi/2$, $t = 1\Gamma$, $k_B T = 0.05\Gamma$, $\alpha = 1$, $q = 1$, $p_L = p_R = 0$, $U = 4\Gamma$.

i $Z_s T$ przyjmują niewielkie wartości dla tej wartości energii poziomu kropek. Jest to związane z małą wartością konduktancji elektrycznej, która obniża wartość czynnika mocy GS^2 .

3.3 Podsumowanie

W niniejszym rozdziale rozpatrzono układ dwóch kropek kwantowych połączonych z dwiema elektrodami. Ponadto kropki znajdują się w ramionach pierścienia Aharonova-Bohma z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym Rashby. Oddziaływanie to prowadzi do pojawienia się zależnej od spinu fazy tunelujących elektronów. Pomimo wykorzystania niemagnetycznych elektrod, spinowe efekty termoelektryczne pojawiają się w związku z akumulacją spinową wywołaną oddziaływaniem Rashby.

Część II

Układy silnie skorelowanych kropek kwantowych

Rozdział 4

Efekty termoelektryczne w układzie silnie skorelowanej kropki kwantowej z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym Rashby

Postępująca miniaturyzacja urządzeń elektronicznych powoduje, że silne korelacje pomiędzy elektronami będą nieuniknione. W kropkach kwantowych objawia się to zjawiskiem Kondo. Możliwość kontrolowania tego zjawiska oraz modyfikacji transportu termoelektrycznego w tym reżimie jest przedmiotem niniejszego rozdziału. Układ rozpatrywany w tym rozdziale jest opisany modelem wprowadzonym w rozdziale 2. W celu uwzględnienia silnych korelacji zastosowano metodę bozonów pomocniczych Kotliara i Ruckensteina [122, 123] oraz metodę funkcji Greena opisaną w rozdziale 2.

4.1 Opis teoretyczny

4.1.1 Metoda bozonów pomocniczych

Metoda bozonów pomocniczych wykorzystana w tym rozdziale, a także dwóch następnych, jest wariantem wprowadzonym przez Kotliara i Ruckensteina [122–124]. W odróżnieniu od podejścia zaproponowanego przez Barnes’a i Colemana [125, 126], w metodzie Kotliara i Ruckensteina możliwe jest uwzględnienie skończonej wartości oddziaływania kulombowskiego U na kropce. W układach kropek kwantowych metoda ta pozwala na poprawne jakościowo uwzględnienie silnych korelacji w reżimie liniowej odpowiedzi oraz w przypadku niewielkiej nierównowagi [130–132].

Metoda bozonów pomocniczych polega na rozszerzeniu przestrzeni Focka kropki kwantowej o dodatkowe stany. Metoda ta zostanie omówiona na przykładzie układu pojedynczej kropki sprzężonej z zewnętrznymi elektrodami, który został opisany hamiltonianem (2.1). W wyniku tego rozszerzenia w wyjściowym hamiltonianie, np. (2.3), operatory fermionowe kropki

kwantowej zamieniane są na iloczyn operatora bozonowego oraz pseudofermionowego:

$$d_{\sigma}^{(\dagger)} \rightarrow f_{\sigma}^{(\dagger)} \hat{z}_{\sigma}^{(\dagger)}, \quad (4.1)$$

gdzie

$$\hat{z}_{\sigma} = \hat{e}^{\dagger} \hat{p}_{\sigma} + \hat{p}_{\sigma}^{\dagger} \hat{d} \quad (4.2)$$

jest operatorem projekcji fermionowych stanów kropki na stany rozszerzonej przestrzeni. Pozostałe operatory bozonowe działają następująco na i -ty stan kropki kwantowej, $|i\rangle \equiv |b\rangle \otimes |f\rangle$, gdzie $|b\rangle$ jest stanem bozonowym a $|f\rangle$ pseudofermionowym:

$$\hat{e} |0\rangle = \hat{e} |e\rangle \otimes |0\rangle = |\text{vac}\rangle, \quad (4.3a)$$

$$\hat{p}_{\sigma} f_{\sigma} |\sigma\rangle = \hat{p}_{\sigma} |p_{\sigma}\rangle \otimes f_{\sigma} |\sigma\rangle = |\text{vac}\rangle, \quad (4.3b)$$

$$\hat{d} f_{\uparrow} f_{\downarrow} |2\rangle = \hat{d} |d\rangle \otimes f_{\uparrow} f_{\downarrow} |\uparrow\downarrow\rangle = |\text{vac}\rangle. \quad (4.3c)$$

W dalszych rozważaniach zostanie przyjęte przybliżenie punktu siodłowego, które pozwala na zastąpienie powyższych operatorów bozonowych oraz operatora projekcji przez ich wartości oczekiwane: $z_{\sigma} \equiv \langle \hat{z}_{\sigma}^{(\dagger)} \rangle$, $e \equiv \langle \hat{e}^{(\dagger)} \rangle$, $p_{\sigma} \equiv \langle \hat{p}_{\sigma}^{(\dagger)} \rangle$, $d \equiv \langle \hat{d}^{(\dagger)} \rangle$ [122].

Aby rozszerzona przestrzeń stanów pozwalała na uzyskanie fizycznych rozwiązań konieczne jest nałożenie ograniczeń na wartości średnie operatorów bozonowych oraz zapisanie odpowiedniej reguły opisującej zależność między średnim obsadzeniem kropki kwantowej a wartościami średnimi operatorów bozonowych (zasada odpowiedniości). Pierwsze ograniczenie można zapisać następująco:

$$\sum_{\sigma} p_{\sigma}^2 + d^2 + e^2 - 1 = 0, \quad (4.4)$$

podczas gdy drugie wyraża się następującym równaniem:

$$p_{\sigma}^2 + d^2 = \langle f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \rangle. \quad (4.5)$$

Powyżej opisana zamiana operatorów oraz wprowadzenie równań ograniczających stany prowadzi do modyfikacji hamiltonianu, który można obecnie zapisać następująco:

$$\tilde{H} = H_e + \tilde{H}_{\text{qd}} + \tilde{H}_t + \Lambda, \quad (4.6)$$

gdzie pierwszy człon opisuje elektrody i nie ulega zmianie w stosunku do hamiltonianu wyjściowego. Hamiltonian kropki kwantowej, z kolei, wyrażony jest obecnie następującą formułą:

$$\tilde{H}_{\text{qd}} = \sum_{\sigma} \tilde{\varepsilon}_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}, \quad (4.7)$$

gdzie $\tilde{\varepsilon}_{\sigma} = \varepsilon_{\sigma} + \lambda_{\sigma}^{(2)}$. W wyrażeniu tym $\lambda_{\sigma}^{(2)}$ jest zależnym od spinu mnożnikiem Lagrange'a. Należy zwrócić uwagę na brak członu związanego z oddziaływaniem kulombowskim na kropce, którego wpływ jest uwzględniony w członie Λ opisanym poniższym wyrażeniem:

$$\Lambda = U d^2 + \lambda^{(1)} \left(\sum_{\sigma} p_{\sigma}^2 + d^2 + e^2 - 1 \right) - \sum_{\sigma} (p_{\sigma}^2 + d^2), \quad (4.8)$$

gdzie $\lambda^{(1)}$ jest mnożnikiem Lagrange’a związanym z równaniem opisującym zachowanie stanów. Powyższe wyrażenie nie ma już charakteru operatorowego, w związku z czym oddziaływanie kulombowskie U jest uwzględnione w sposób efektywny.

Przedostatni człon we wzorze (4.6) opisuje tunelowanie i po transformacji wyraża się następującą formułą:

$$\tilde{H}_t = \tilde{H}_t^0 + \tilde{H}_t^{so}, \quad (4.9)$$

gdzie pierwszy człon dotyczy tunelowania elektronów pomiędzy kropką a elektrodami z zachowaniem spinu i jest wyrażony następującym wzorem:

$$\tilde{H}_t^0 = \sum_{\mathbf{k}\beta\sigma} \tilde{V}_{\mathbf{k}\beta\sigma} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger f_\sigma + \text{H.c.}, \quad (4.10)$$

podczas gdy drugi człon we wzorze (4.9) opisuje tunelowanie bez zachowania spinu:

$$\tilde{H}_t^{so} = - \sum_{\mathbf{k}\beta\sigma} \tilde{V}_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{so} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger (i\sigma_x)_{\sigma\bar{\sigma}} f_\sigma + \text{H.c.} \quad (4.11)$$

W powyższych wyrażeniach, (4.10) i (4.11), występuje zrenormalizowana amplituda tunelowa $\tilde{V}_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{(so)} = z_\sigma V_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{(so)}$.

W celu wyznaczenia wartości średnich operatorów bozonowych wykorzystane zostało twierdzenie Hellmanna-Feynmana zapisane w następujący sposób dla hamiltonianu efektywnego $\tilde{H}$:

$$\frac{\partial \langle \tilde{H} \rangle}{\partial \chi} = 0, \quad (4.12)$$

gdzie χ jest jednym z parametrów: $\lambda^{(1)}$, $\lambda_\sigma^{(2)}$, e , p_σ lub d . Powyższe równanie prowadzi do następującego układu równań:

$$\sum_{\sigma} p_\sigma^2 + d^2 + e^2 - 1 = 0, \quad (4.13)$$

$$p_\sigma^2 + d^2 - \int \frac{d\varepsilon}{2\pi i} G_\sigma^< = 0, \quad (4.14)$$

$$\sum_{\sigma} \frac{\partial \ln(z_\sigma)}{\partial e} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi i} (\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_\sigma) G_\sigma^< + \lambda^{(1)} e = 0, \quad (4.15)$$

$$\sum_{\sigma} \frac{\partial \ln(z_\sigma)}{\partial p_{\sigma'}} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi i} (\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_\sigma) G_\sigma^< + \left(\lambda^{(1)} - \lambda_{\sigma'}^{(2)} \right) p_{\sigma'} = 0, \quad \text{dla } \sigma' = \uparrow, \downarrow \quad (4.16)$$

$$\sum_{\sigma} \frac{\partial \ln(z_\sigma)}{\partial d} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi i} (\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_\sigma) G_\sigma^< + \left(U + \lambda^{(1)} - \sum_{\sigma} \lambda_\sigma^{(2)} \right) d = 0. \quad (4.17)$$

Aby rozwiązać powyższy układ równań konieczna jest znajomość postaci korelacyjnej funkcji Greena $G_\sigma^<$.

4.1.2 Funkcje Greena i współczynnik transmisji

Aby uzyskać korelacyjną funkcję Greena $G_\sigma^<$, która jest elementem macierzy $\mathbf{G}^<$, można zastosować równanie Kiełdysza zapisane wzorem (2.56) w rozdziale 2:

$$\mathbf{G}^< = i(f_L \mathbf{G}^r \tilde{\Gamma}_L \mathbf{G}^a + f_R \mathbf{G}^r \tilde{\Gamma}_R \mathbf{G}^a), \quad (4.18)$$

gdzie funkcję Greena opóźnioną, $\mathbf{G}^r$, i przedwczesną, $\mathbf{G}^a = (\mathbf{G}^r)^\dagger$, można uzyskać przy pomocy równania Dysona:

$$\mathbf{G}^r = [\mathbf{g}_0^r - \Sigma^r]^{-1}, \quad (4.19)$$

w którym funkcja Greena izolowanej od elektrod kropki przyjmuje diagonalną postać ze względu na spin i której elementy opisane są formułą: $g_{0\sigma\sigma'}^r = \delta_{\sigma\sigma'} (\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_\sigma + i0^+)^{-1}$. Natomiast macierz efektywnej energii własnej wyrażona jest następująco:

$$\Sigma^{r,a} = \sum_{\beta\sigma} \Sigma_{\beta\sigma}^{r,a}. \quad (4.20)$$

Części składowe sumy w powyższym wyrażeniu spełniają relację:

$$\Sigma_{\beta\sigma}^a - \Sigma_{\beta\sigma}^r = i\tilde{\Gamma}_{\beta\sigma}. \quad (4.21)$$

W formule (4.18), a także w powyższej relacji pojawiają się zmodyfikowane macierze sprzężeń $\tilde{\Gamma}_\beta = \sum_\sigma \tilde{\Gamma}_{\beta\sigma}$ kropki z elektrodą $\beta = L, R$. Składowa tej macierzy dla spinu $\sigma = \uparrow$ jest następująca:

$$\tilde{\Gamma}_{\beta\uparrow} = \begin{bmatrix} \tilde{\Gamma}_{\beta\uparrow\uparrow} & -i\sqrt{\tilde{\Gamma}_{\beta\uparrow\uparrow}\tilde{\Gamma}_{\beta\uparrow\uparrow}^{so}} \\ i\sqrt{\tilde{\Gamma}_{\beta\uparrow\uparrow}\tilde{\Gamma}_{\beta\uparrow\uparrow}^{so}} & \tilde{\Gamma}_{\beta\uparrow\uparrow}^{so} \end{bmatrix}. \quad (4.22)$$

Z kolei, dla spinu $\sigma = \downarrow$ macierz sprzężeń przyjmuje postać:

$$\tilde{\Gamma}_{\beta\downarrow} = \begin{bmatrix} \tilde{\Gamma}_{\beta\downarrow\downarrow}^{so} & i\sqrt{\tilde{\Gamma}_{\beta\downarrow\downarrow}\tilde{\Gamma}_{\beta\downarrow\downarrow}^{so}} \\ -i\sqrt{\tilde{\Gamma}_{\beta\downarrow\downarrow}\tilde{\Gamma}_{\beta\downarrow\downarrow}^{so}} & \tilde{\Gamma}_{\beta\downarrow\downarrow} \end{bmatrix}, \quad (4.23)$$

gdzie współczynniki sprzężenia przyjmują zmodyfikowaną postać:

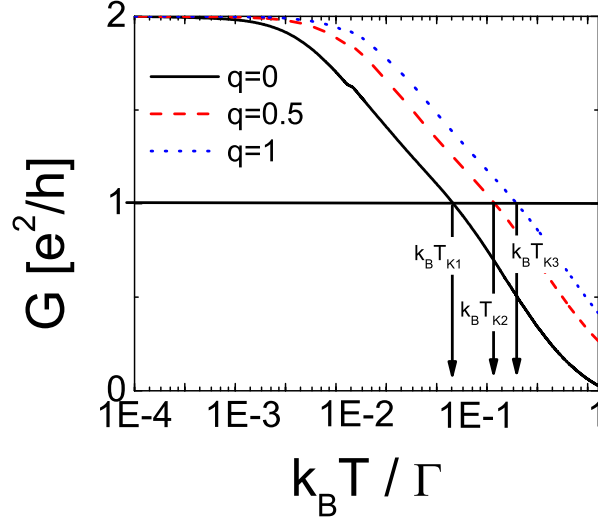
$$\tilde{\Gamma}_{\beta\sigma\sigma} = 2\pi|\tilde{V}_{\mathbf{k}\beta\sigma}|^2\rho_{\beta\sigma} = z_\sigma^2\Gamma_{\beta\sigma\sigma} \quad (4.24a)$$

$$\tilde{\Gamma}_{\beta\sigma\sigma}^{so} = 2\pi|\tilde{V}_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{so}|^2\rho_{\beta\sigma} = z_\sigma^2\Gamma_{\beta\sigma\sigma}^{so}. \quad (4.24b)$$

W równaniu (4.24a) i (4.24b) symbol $\rho_{\beta\sigma}$ oznacza zależną od spinu gęstość stanów w elektrodzie $\beta = L, R$ w przybliżeniu szerokiego pasma.

W obecnie rozważanym układzie współczynnik transmisji spinu σ można wyrazić za pomocą zmodyfikowanego wzoru (2.60):

$$T_\sigma = \text{Tr} \left\{ \tilde{\Gamma}_{L\sigma} \mathbf{G}^r \tilde{\Gamma}_R \mathbf{G}^a \right\}. \quad (4.25)$$



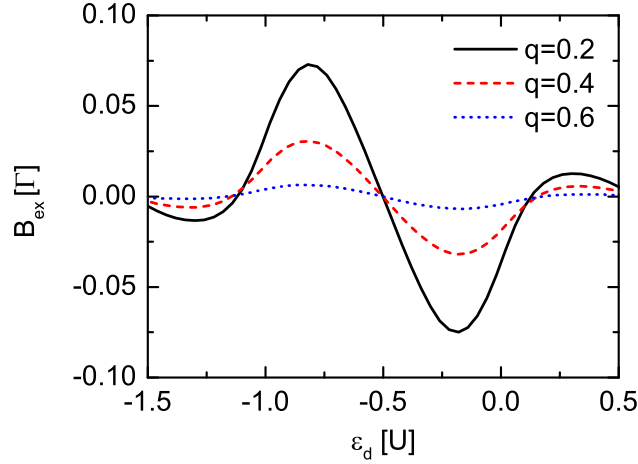
Rysunek 4.1: Konduktancja elektryczna G w funkcji temperatury $k_B T$ dla wyróżnionych wartości parametru q . Pozostałe parametry: $g\mu_B B = 0$, $U = 6\Gamma$, $\varepsilon_d = -U/2$, $p_L = p_R = p = 0$. Strzałkami oznaczono wartości temperatury odpowiadające temperaturze Kondo, T_K , dla zaznaczonych wartości q .

4.2 Wyniki numeryczne

W niniejszym podrozdziale zostały pokazane wyniki obliczeń dla transportu termoelektrycznego w przybliżeniu liniowej odpowiedzi. Podrozdział ten został podzielony na mniejsze, dotyczące przypadku zerowej oraz niezerowej akumulacji spinowej w elektrodach. Dodatkowo wprowadzono podrozdziały dotyczące ważnych zagadnień, z punktu widzenia fizyki zjawiska Kondo, takich jak temperatura Kondo oraz pole wymiany związane z elektrodami ferromagnetycznymi. Przeprowadzono również analizę współczynnika transmisji i funkcji spektralnych. W przeciwieństwie do przypadków rozważanych w rozdziale 2, przypadek półmetalicznych elektrod, tzn. $p_L = p_R = p = 1$, nie będzie obecnie brany pod uwagę. W tym szczególnym przypadku stan $|\downarrow\rangle$ ulega rozprzęgnięciu od elektrod (*vide* Dodatek A.1) co uniemożliwia zajście zjawiska Kondo.

4.2.1 Temperatura Kondo i pole wymiany

Temperatura Kondo może zostać oszacowana jako wartość temperatury, dla której konduktancja elektryczna ulega zmniejszeniu o połowę swojej wartości maksymalnej. W przypadku pojedynczej kropki kwantowej i symetrycznego modelu Andersona maksimum przypada na wartość energii $\varepsilon_d = -U/2$. Oszacowanie to zostało przedstawione na rys. 4.1, na którym pokazano konduktancję elektryczną w funkcji temperatury dla wybranych wartości parametru q . W układzie bez sprzężenia spinowo-orbitalnego typu Rashby, $q = 0$, temperatura Kondo $k_B T_{K,1} \approx 0.05\Gamma$. Wzrost wartości parametru q powoduje jednocześnie wzrost temperatury Kondo do wartości powyżej 0.1Γ . Temperatura stosowana w dalszych obliczeniach, $k_B T = 0.009\Gamma$, jest dużo niższa niż wartości temperatury Kondo uzyskane z powyższego oszacowania.



Rysunek 4.2: Pole wymiany w funkcji położenia poziomego ε_d kropki dla wyróżnionych wartości parametru q . Pozostałe parametry: $g\mu_B B = 0$, $U = 6\Gamma$, $p_L = p_R = p = 0.9$.

Gdy kropka połączona jest z ferromagnetycznymi elektrodami, jej poziom energetyczny ulega rozszczepieniu ze względu na pole wymiany. Wpływ tego rozszczepienia jest zanedbywalny w reżimie blokady kulombowskiej ze względu na mniejsze sprzężenie i wyższe temperatury, ale odgrywa znaczącą rolę w reżimie Kondo. Podstawowe własności tego rozszczepienia zostały opisane w rozdziale 1: zależność od polaryzacji magnetycznej p elektrod w konfiguracji równoległej oraz zanik rozszczepienia w punkcie symetrii $\varepsilon_d = -U/2$. W przypadku metody bozonów pomocniczych, zrenormalizowane wartości energii poziomu kropki $\tilde{\varepsilon}_\sigma$ są zależne od spinu, dzięki czemu można wyznaczyć pole wymiany jako różnicę zrenormalizowanych poziomów kropki: $B_{ex} = \tilde{\varepsilon}_\uparrow - \tilde{\varepsilon}_\downarrow$. Różnica ta w przypadku braku zewnętrznego pola magnetycznego, tzn. $g\mu_B B = 0$, sprowadza się do różnicy spinowo-zależnych mnożników Lagrange’a, $\lambda_\uparrow^{(2)} - \lambda_\downarrow^{(2)}$. Rozszczepienie poziomu wywołane polem wymiany, przedstawione na rys. 4.2, zmienia znak w punkcie symetrii $\varepsilon_d = -U/2$. Ponadto maksymalna wartość tego rozszczepienia maleje ze wzrostem wartości parametru q . Efektywne pole wywołane sprzężeniem spinowo-orbitalnym typu Rashby przeciwdziała polu wymiany wynikającemu ze sprzężenia z magnetycznymi elektrodami.

4.2.2 Funkcja spektralna i współczynnik transmisji

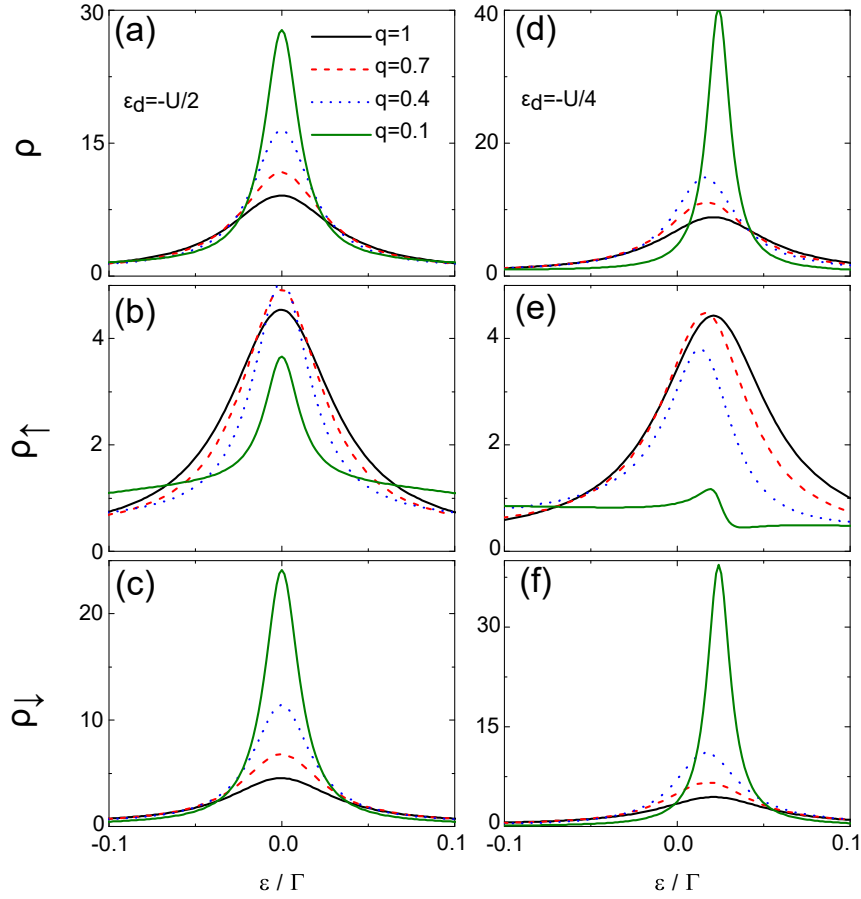
Całkowita gęstość stanów ρ_{qd} kropki kwantowej jest sumą składowych gęstości stanów dla poszczególnych spinów $\sigma = \uparrow, \downarrow$,

$$\rho_{qd} = \sum_{\sigma} \rho_{\sigma}, \quad (4.26)$$

gdzie

$$\rho_{\sigma} = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G_{\sigma}^r. \quad (4.27)$$

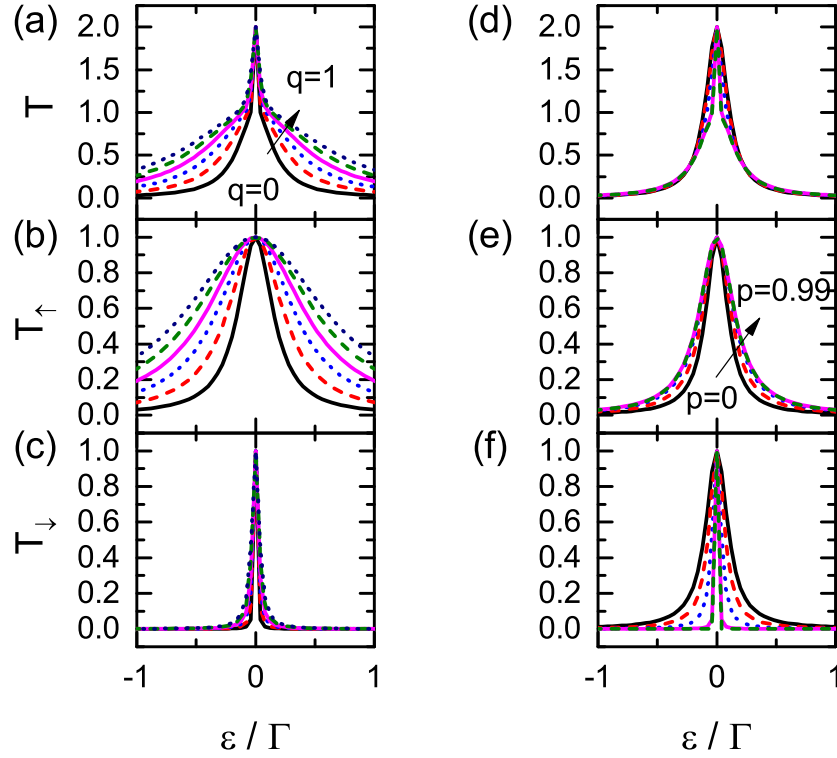
W powyższym wyrażeniu G_{σ}^r jest elementem macierzy opóźnionej funkcji Greena, $\mathbf{G}^r$. Należy pamiętać, że w wyniku zastosowanej w tym rozdziale metody bozonów pomocniczych, modyfikacji uległ hamiltonian układu. Oddziaływania kulombowskie na kropce uwzględniane są w sposób efektywny w ramach wartości średnich operatorów bozonowych, a opóźniona funkcja Greena przyjmuje postać funkcji dla układu bez oddziaływania.



Rysunek 4.3: Gęstość stanów kropki kwantowej i jej spinowe składowe w zależności od energii pasma elektrod oraz wyróżnionych wartości parametru q dla energii poziomu kropki $\varepsilon_d = -U/2$ i $\varepsilon_d = -U/4$. Pozostałe parametry: $p = 0.9$, $g\mu_B B = 0$, $U = 6\Gamma$, $\varepsilon_d = -U/2$, $k_B T = 0$.

Powyższe wielkości zostały przedstawione na rys. 4.3. W przypadku zjawiska Kondo największa wartość gęstości stanów przypada na energię poziomu kropki odpowiadającą punktowi symetrii elektron-dziura, $\varepsilon_d = -U/2$ oraz energię Fermiego elektrod, $\varepsilon = \mu_0 = 0$, co zostało przedstawione na rys. 4.3(a). Ponadto, zgodnie z wcześniejszymi uwagami, pole wymiany pochodzące od elektrod ferromagnetycznych znika w tym punkcie, w związku z czym składowe dla spinu $\uparrow$ i $\downarrow$ przedstawione na rys. 4.3 (b) i (c) również przyjmują wartość maksymalną dla energii odpowiadającej energii Fermiego elektrod. Ponadto, zarówno gęstość stanów ρ_{qd} , jak i jej składowe, są symetryczne względem energii Fermiego. Składowe te, jednak, różnią się szerokościami pików. Rozpatrując wpieryw przypadek $q = 0.1$, dla przyjętej dużej wartości polaryzacji elektrod, $p = 0.9$, składowa gęstości stanów o spinie $\uparrow$ jest poszerzona w porównaniu do składowej gęstości stanów o spinie $\downarrow$, ale jej wartość maksymalna jest dużo mniejsza. Wzrost wartości parametru q powoduje mieszanie się stanów o przeciwnych spinach, objawiające się jednoczesnym wzrostem maksymalnej intensywności składowej $\uparrow$ i spadkiem maksymalnej intensywności składowej $\downarrow$. W przypadku granicznym, $q = 1$, krzywe obydwu składowych charakteryzują się taką samą szerokością piku jak również jednakową wartością maksymalną. W związku z tym maleje również całkowita gęstość stanów ρ_{qd} .

W przypadku tzw. niesymetrycznego modelu Andersona, gdy $\varepsilon_d = -U/4$, gęstość stanów ρ_{qd} , przedstawiona na rys. 4.3(d), nie przyjmuje już wartości maksymalnej dla energii

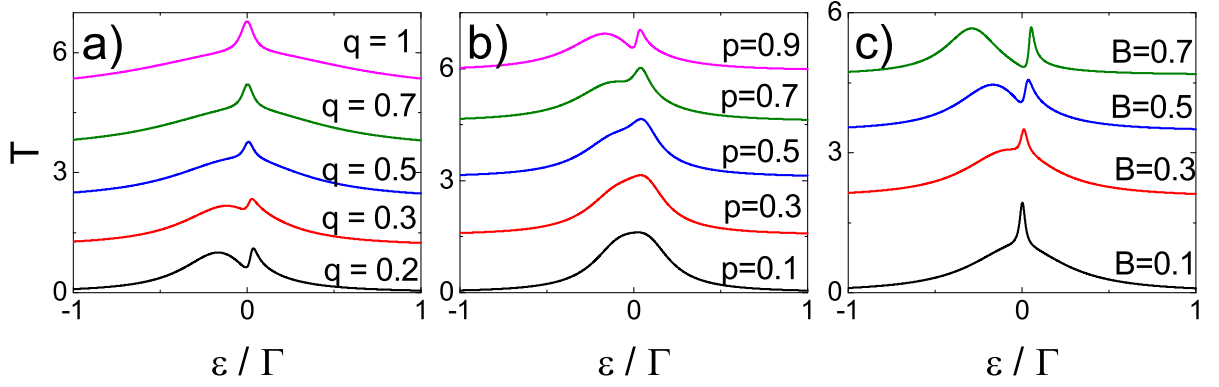


Rysunek 4.4: Współczynniki transmisji i spinowe składowe w funkcji energii pasma elektrod i wyróżnionych wartości parametru q wyznaczone dla $p = 0.9$ oraz współczynnik transmisji i odpowiednie składowe dla przypadku $q = 1$ i wskazanych wartości parametru p . Pozostałe parametry: $g\mu_B B = 0$, $U = 6\Gamma$, $\varepsilon_d = -U/2$, $k_B T = 0$.

odpowiadającej energii Fermiego elektrod, ale dla wyższej wartości energii. W przypadku $q = 0.1$ składowe $\uparrow$ i $\downarrow$, przedstawione na rys. 4.3 (e) i (f), znacznie różnią się intensywnością – widoczna jest przewaga stanów o spinie $\downarrow$ dla wyróżnionej wartości energii ε_d poziomu kropki. Wzrost wartości parametru q , podobnie do przypadku omówionego powyżej, powoduje zrównanie składowych ze sobą i zmniejszenie całkowitej gęstości stanów.

Współczynniki transmisji wyznaczone w temperaturze $k_B T = 0$ dla nośników o spinie $\uparrow$ oraz $\downarrow$ zostały przedstawione na rys. 4.4 (a) i (b). W rozpatrywanym przypadku, dla $p = 0.9$, poszerzenie krzywych odpowiadających współczynnikom transmisji przeciwnych spinów jest odmienne. Dodatkowy kanał transportowy nośników, który uaktywnia się ze wzrostem wartości parametru q , prowadzi do poszerzenia krzywych współczynników transmisji. Całkowita transmisja, przedstawiona na rys. 4.4(c), jako suma składowych o przeciwnych spinach, osiąga maksymalną wartość dla energii $\varepsilon = 0$. Podobnie jak jej składowe, krzywa opisująca całkowity współczynnik transmisji ulega poszerzeniu ze wzrostem wartości parametru q .

W przypadku gdy zmianie ulega polaryzacja p , przy ustalonej wartości parametru q ($q = 1$), krzywa opisująca współczynnik transmisji $T_\uparrow$, przedstawiony na rys. 4.4(d), ulega poszerzeniu ze wzrostem wartości p , podczas gdy krzywa opisująca współczynnik $T_\downarrow$, przedstawiona na rys. 4.4(e), ulega zwężeniu. W rezultacie, krzywa całkowitego współczynnika transmisji, pokazana na rys. 4.4(f), przyjmuje kształt przypominający krzywą charakterystyczną dla zjawiska Dicke [112], w którym funkcja spektralna ulega zwężeniu dla energii odpowiadającej energii rezonansowej (w tym przypadku energii Fermiego elektrod).



Rysunek 4.5: Współczynnik transmisji w funkcji energii pasma w elektrodach dla wyróżnionych wartości parametru q , (a), polaryzacji magnetycznej p elektrod, (b), oraz pola magnetycznego $g\mu_B B$, (c). Pozostałe parametry: (a) $p = 0.9$, $g\mu_B B = 0.5\Gamma$, (b) $q = 0.2$, $g\mu_B B = 0.5\Gamma$, (c) $p = 0.9$, $q = 0.2$, dla wszystkich rysunków: $U = 6\Gamma$, $\varepsilon_d = -U/2$, $k_B T = 0$. Krzywe są przesunięte względem siebie.

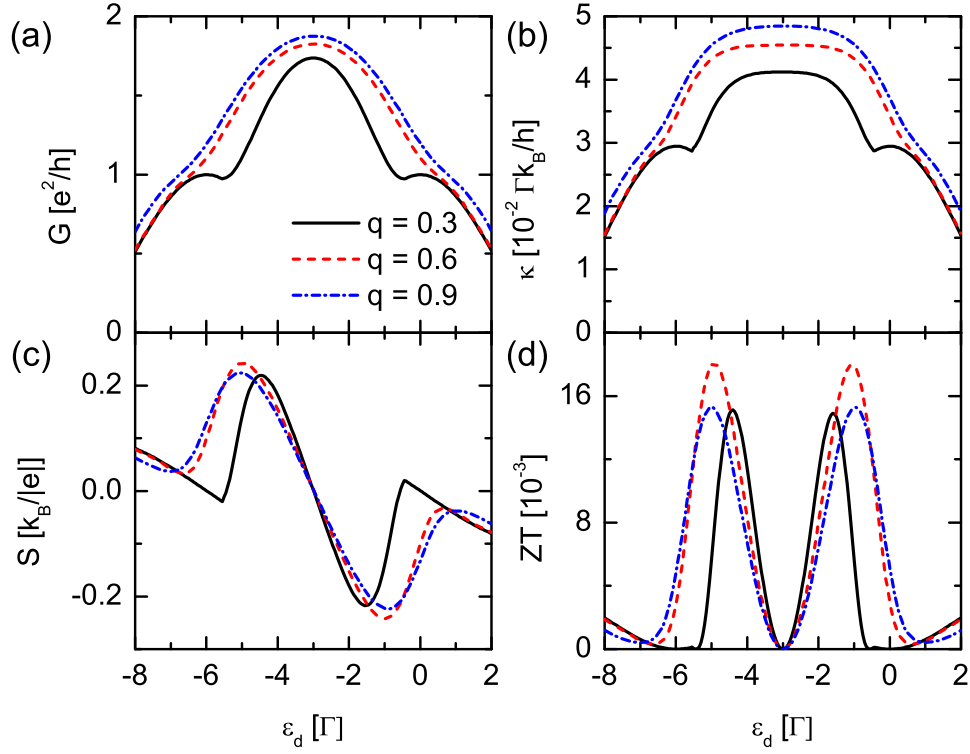
Uwzględnienie pola magnetycznego powoduje zniesienie degeneracji poziomu kropki ε_d , a w przypadku elektrod ferromagnetycznych współdziałanie z polem wymiany. Rys. 4.5(a) przedstawia współczynnik transmisji w zależności od energii elektronów oraz dla wyróżnionych wartości parametru q . Dla stosunkowo małych wartości parametru, $q = 0.2$ i $q = 0.3$, krzywe odzwierciedlające współczynnik transmisji przyjmują niesymetryczną postać krzywej Fano, z minimum dla energii odpowiadającej energii Fermiego elektrod, szerokim maksimum poniżej, a wąskim powyżej tej wartości. Wzrost wartości parametru q prowadzi do zniesienia degeneracji wywołanej polem magnetycznym, poszerzenie pików odpowiadających składowym transmisji dla przeciwnych spinów, a w rezultacie zniszczenie antyrezonansu Fano na rzecz symetrycznej krzywej typu Lorentza z maksimum w punkcie $\varepsilon = 0$, związanym z efektem Kondo.

Ustalając wartość parametru q na $q = 0.2$ oraz wartość pola magnetycznego na $g\mu_B B = 0.5\Gamma$, który to przypadek został przedstawiony na rys. 4.5(b), można pokazać, że dla małych wartości polaryzacji, $p = 0.1$ i $p = 0.3$, krzywa transmisji jest niesymetryczna względem $\varepsilon = 0$, ale nie jest krzywą Fano. Dalszy wzrost polaryzacji magnetycznej prowadzi do wzrostu wartości pola wymiany i przywrócenia krzywej typu Fano.

Ostatecznie przejście pomiędzy krzywymi związanymi z różnymi efektami interferencyjnymi pokazano na rys. 4.5(c), który otrzymano dla ustalonej wartości parametru q ($q = 0.2$) i ustalonej wartości polaryzacji p ($p = 0.9$). Dla małych wartości pola magnetycznego krzywa transmisji przyjmuje krzywą charakterystyczną dla efektu Dicke. Zwiększenie pola magnetycznego, które wiąże się ze wzrostem różnicy pomiędzy poziomami odpowiadającymi spinom $\uparrow$ i $\downarrow$, prowadzi do współczynnika transmisji opisanego przez krzywą Fano.

4.2.3 Efekty termoelektryczne: przypadek braku akumulacji spinowej

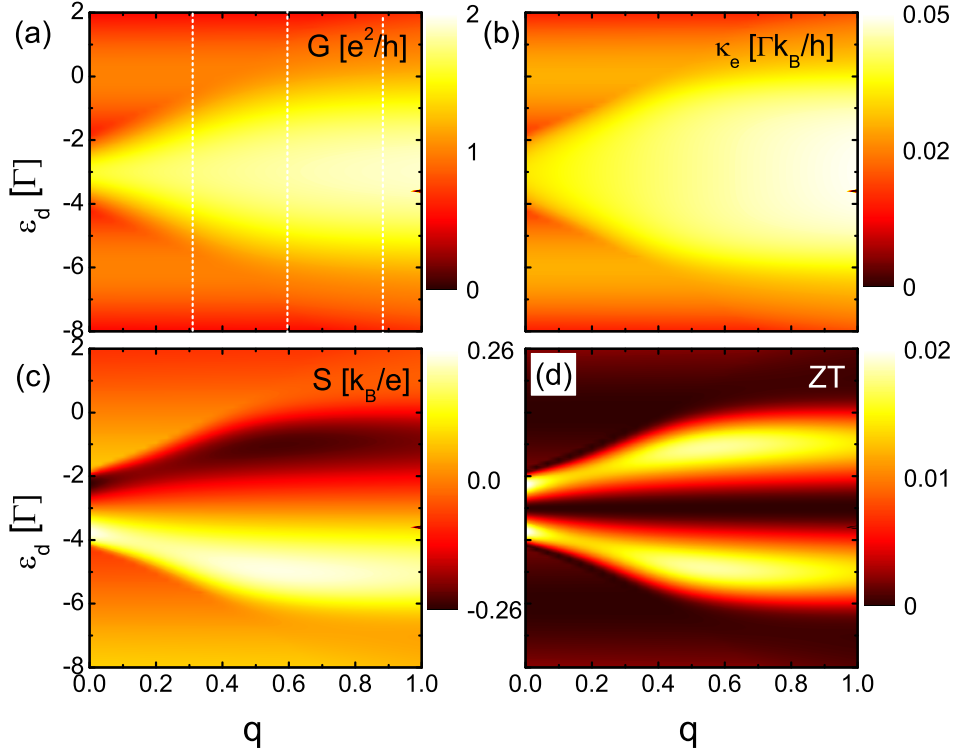
Współczynniki termoelektryczne w zależności od położenia poziomu ε_d kropki i dla wybranych wartości parametru q zostały przedstawione na rys. 4.6. Rozpatrywany jest tutaj przypadek elektrod magnetycznych w konfiguracji równoległej.



Rysunek 4.6: Współczynniki termoelektryczne w funkcji położenia poziomu kropki ε_d dla wyróżnionych wartości parametru q . Pozostałe parametry: $U = 6\Gamma$, $p = 0.9$, $g\mu_B B = 0$, $k_B T = 0.009\Gamma$.

W przypadku gdy $q = 0.1$, konduktancja oraz wkład elektronowy do konduktancji cieplnej, przedstawione na rys. 4.6(a) i (b), przyjmują wartości maksymalne dla położenia poziomu kropki kwantowej $\varepsilon_d = -U/2$, czyli gdy układ znajduje się w głębokim reżimie Kondo. Jest to również zgodne z wcześniejszą analizą współczynnika transmisji oraz gęstości stanów. Maksymalna wartość konduktancji elektrycznej jest niższa niż kwant konduktancji, $2e^2/h$, ze względu na niezerową temperaturę, która jednak jest wciąż niższa niż temperatura Kondo oszacowana dla tego układu. Ze względu na wysoką wartość polaryzacji, $p = 0.9$, pole wymiany powoduje rozszczepienie poziomu energetycznego kropki, w wyniku którego na wykresach obydwu konduktancji pojawiają się, symetrycznie względem pików Kondo, dodatkowe dwa piki o intensywności mniejszej o połowę. Piki te pojawiają się dla energii odpowiadających energiom rezonansowym kropki $\varepsilon_d = 0$ oraz $\varepsilon_d = -U$, dla których tuneluje pojedynczy spin, podczas gdy w przypadku rezonansu Kondo przez obsadzony już poziom kropki przetunelować może drugi elektron. W przypadku konduktancji cieplnej, odpowiadająca jej krzywa w obszarze rezonansu Kondo jest wypłaszczona i poszerzona w porównaniu do krzywej odpowiadającej konduktancji elektrycznej.

Zgodnie z dyskusją dotyczącą zachowania się współczynnika transmisji oraz gęstości stanów przeprowadzoną w poprzedniej sekcji, wzrost wartości parametru q przywraca degenerację spinową poziomu energetycznego kropki. Wiąże się to z poszerzeniem centralnego pików Kondo w konduktancji i przekryciem pików bocznych. W poprzednich podrozdziałach pokazano również,

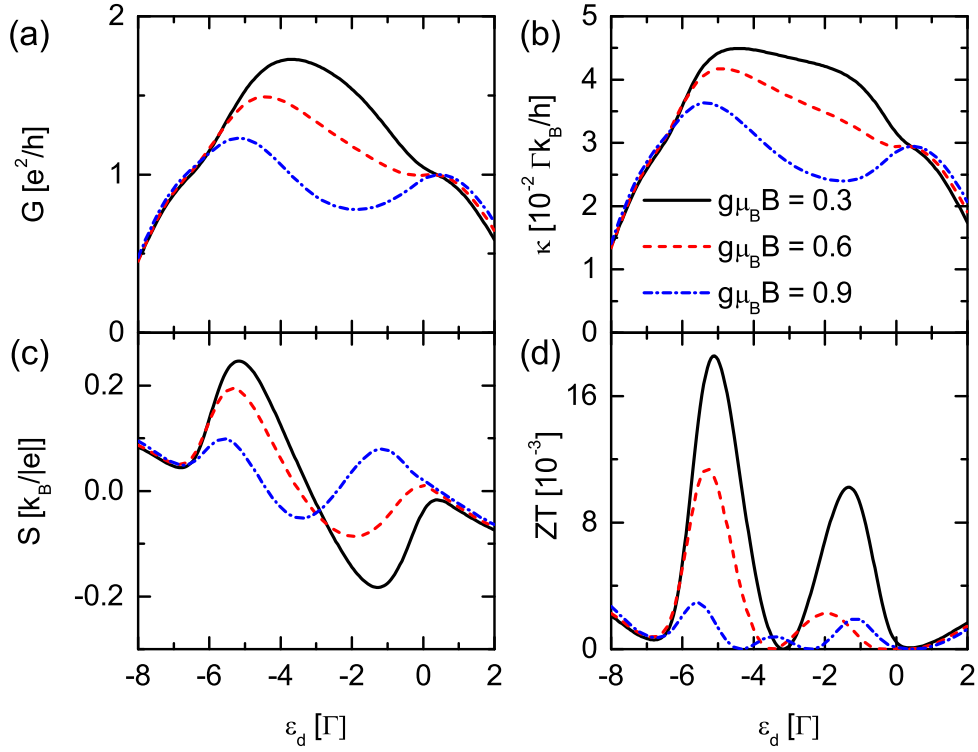


Rysunek 4.7: Współczynniki termoelektryczne w funkcji położenia poziomu ε_d oraz parametru q . Przerywane linie oznaczają przekroje wykreślone na rys. 4.6. Pozostałe parametry: $U = 6\Gamma$, $p = 0.9$, $g\mu_B B = 0$, $k_B T = 0.009\Gamma$

że wzrost wartości parametru q powoduje jednoczesny wzrost temperatury Kondo, skutkując tym, że maksymalna wartość konduktancji elektrycznej zdąża do kwantu konduktancji.

Współczynnik Seebecka, przedstawiony na rys. 4.6(c), zmienia znak dla energii odpowiadających energiom rezonansowym kropki, w tym również rezonansowi Kondo dla $\varepsilon_d = -U/2$, niezależnie od wartości parametru q . Wzrost wartości sprzężenia spinowo-orbitalnego typu Rashby od wartości $q = 0.3$ do $q = 0.6$ prowadzi do jednoczesnego wzrostu maksymalnej wartości $|S|$. Dalszy wzrost wartości parametru q obniża jednak maksymalną wartość $|S|$. Jest to związane ze zmieniającą się symetrią współczynnika transmisji oraz gęstości stanów, których krzywe ze wzrostem wartości q ulegają poszerzeniu a ich intensywności ulegają zmniejszeniu. Współczynnik efektywności termoelektrycznej, pokazany na rys. 4.6(d), przyjmuje maksymalne wartości, gdy iloczyn GS^2 jest maksymalny, a κ małe. Ze względu na, wspomnianą wcześniej, zmianę symetrii współczynników transmisji i gęstości stanów, punkty spełniające powyższe warunki ulegają przesunięciu. Maksymalne wartości współczynnika efektywności termoelektrycznej, ZT , można otrzymać dla $q = 0.6$. Powyżej tej wartości konduktancja cieplna wzrasta, a współczynnik Seebecka maleje, co prowadzi również do spadku maksymalnej wartości współczynnika ZT .

Zależności współczynników termoelektrycznych od położenia poziomu ε_d kropki zostały przedstawione dla szerszego zakresu wartości parametru q na rys. 4.7. Centralne piki konduktancji elektrycznej, G , i konduktancji cieplnej, κ , odpowiadające rezonansowi Kondo, dla obydwu konduktancji ulegają zwięźeniu dla wartości parametru q mniejszych od 0.6, a ich szerokości nie ulegają znaczącym zmianom powyżej tej wartości, co zostało przedstawione na



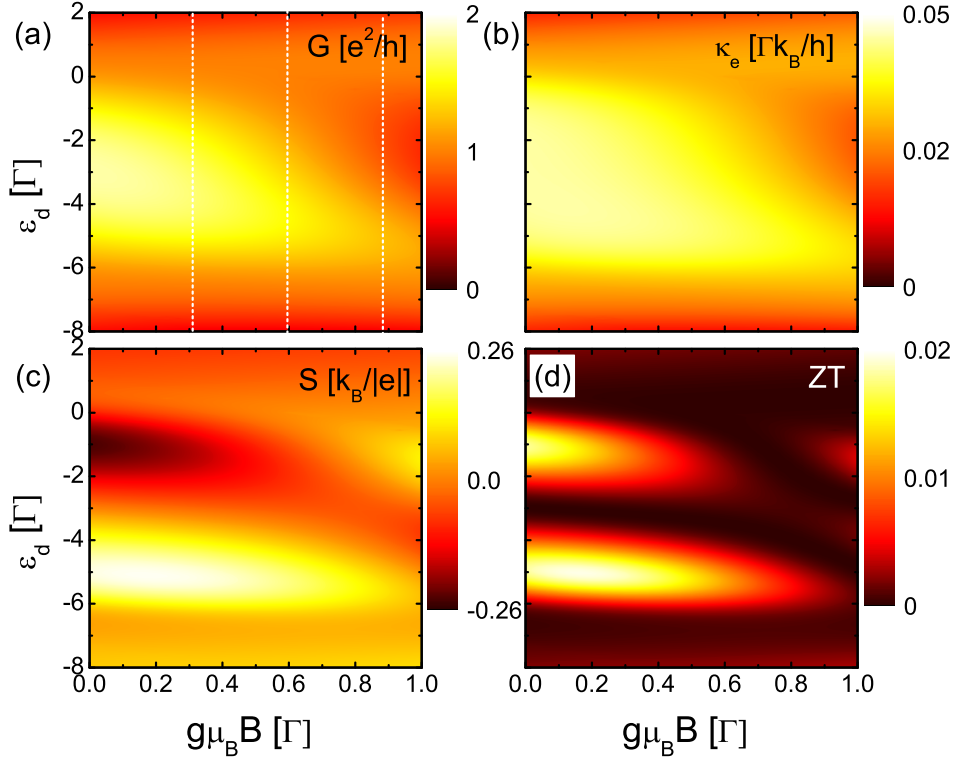
Rysunek 4.8: Współczynniki termoelektryczne w funkcji położenia poziomu ε_d oraz wyróżnionych wartości rozszczepienia Zeemana $g\mu_B B$. Pozostałe parametry: $U = 6\Gamma$, $q = 0.6$, $p = 0.9$, $g\mu_B B = 0$, $k_B T = 0.009\Gamma$.

rys. 4.7 (a) i (b). Zmienia się, jednak, maksymalna wartość obydwu konduktancji, która wzrasta wraz ze wzrostem parametru q . Jest to związane z wyostreniem się centralnego piku transmisji i gęstości stanów oraz jednoczesnym wzrostem temperatury Kondo.

Zarówno współczynnik Seebecka, jak i współczynnik efektywności termoelektrycznej ZT , przedstawione na rys. 4.7 (c) i (d), osiągają wartości maksymalne (z dokładnością do wartości bezwzględnej) dla zakresu energii pomiędzy energiami rezonansowymi $\varepsilon_d = 0$, $\varepsilon_d = -U$ oraz $\varepsilon_d = -U/2$. W punktach tych termosila zmienia znak i jednocześnie charakter transportowanych nośników. Gdy poziom kropki znajduje się poniżej energii $\varepsilon_d = -U/2$, w transporcie dominują elektrony, podczas gdy powyżej tej energii dominującymi nośnikami są dziury. Maksymalne wartości zarówno współczynnika Seebecka, jak i współczynnika ZT osiągane są dla wartości $q \approx 0.6$, powyżej której następuje spadek wartości obydwu współczynników. Spadek ten jest związany ze wzrostem konduktancji cieplnej, którego mechanizm został opisany w poprzednim akapicie.

W obecności zewnętrznego pola magnetycznego konduktancja i konduktancja cieplna, przedstawione na rys. 4.8 (a) i (b), stają się niesymetryczne a ich maksymalne wartości maleją. Jest to związane z niszczeniem symetrii elektronowo-dziurowej oraz zanikaniem piku Kondo. Dla dużych wartości pola magnetycznego, $g\mu_B B = 0.9\Gamma$, konduktancje osiągają minimum dla $\varepsilon_d \approx -2\Gamma$.

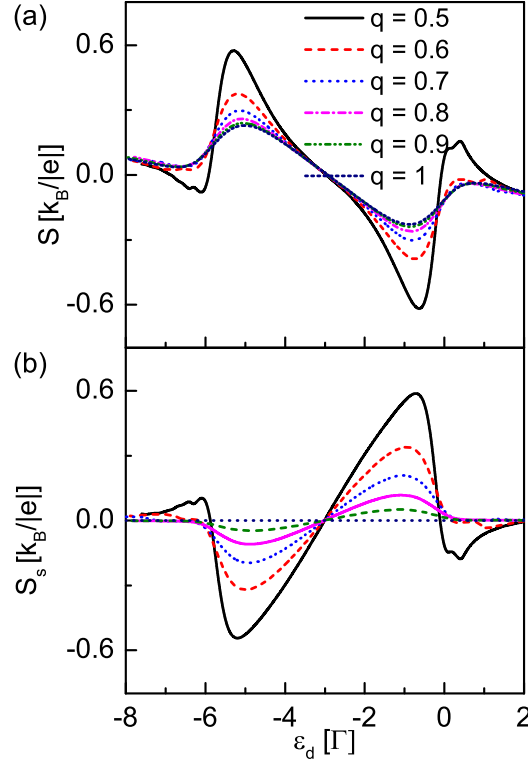
Przejście między stanem z silnym rezonansem Kondo, a stanem, w którym pik Kondo ulega zanikowi, może zostać również zaobserwowane na wykresie termosily, przedstawionym



Rysunek 4.9: Współczynniki termoelektryczne w funkcji położenia poziomu kropki ε_d oraz wartości rozszczepienia Zeemana $g\mu_B B$. Pozostałe parametry: $U = 6\Gamma$, $q = 0.6$, $p = 0.9$, $g\mu_B B = 0$, $k_B T = 0.009\Gamma$.

na rys. 4.8(c). Dla małych wartości pola magnetycznego, które należy rozumieć jako wartości, w których boczne piki nie są dobrze odseparowane, współczynnik Seebecka wykazuje podobną symetrię zarówno dla $g\mu_B B = 0.3\Gamma$, jak i $g\mu_B B = 0.6\Gamma$. Dla energii poniżej $\varepsilon_d = -U/2$, transport zdominowany jest przez elektrony, a powyżej przez dziury. Zauważalny jest jednak spadek maksymalnej (co do wartości bezwzględnej) wartości termosily. Dla dużej wartości pola, $g\mu_B B = 0.9\Gamma$, termosila zmienia znak dla energii poniżej $\varepsilon_d = -U/2$, a zachowuje swój znak powyżej tej energii. Owa zmiana znaku może stanowić pewien rozpoznawalny atrybut przejścia pomiędzy stanem Kondo, w którym występuje silny rezonans i symetria elektronowo-dziurowa, oraz stanem pozbawionym tych cech. Ostatecznie współczynnik efektywności termoelektrycznej, przedstawiony na rys. 4.8(d), maleje ze wzrostem pola magnetycznego, ale wzrasta w pobliżu punktu $\varepsilon_d = -U/2$ dla dużej wartości pola.

Konduktancja i konduktancja cieplna w funkcji poziomu ε_d kropki i większego zakresu wartości rozszczepienia Zeemana $g\mu_B B$, przedstawione na rys. 4.9 (a) i (b), wykazują silną asymetrię ze wzrostem pola. Wzrost tego parametru skutkuje zmniejszeniem szerokości piku oraz intensywności piku Kondo i w rezultacie niszczy ten efekt dla dużej wartości pola. Wspomniana asymetria jest również widoczna na wykresach współczynnika Seebecka i współczynnika efektywności termoelektrycznej, przedstawionych na rys. 4.8 (c) i (d). Maksymalne wartości (z dokładnością do wartości bezwzględnej) tych współczynników są osiągnięte dla rozszczepienia Zeemana, $g\mu_B B \approx 0.2\Gamma$. Widoczna jest również zmiana znaku termosily ze wzrostem wartości pola magnetycznego, dla energii z zakresu $\varepsilon_d \in (0, -U/2)$. Związane jest to, jak wspomniano wcześniej, ze zmianą symetrii współczynnika transmisji i zniszczeniem efektu Kondo.



Rysunek 4.10: Współczynniki Seebecka w funkcji położenia poziomu ε_d kropki dla wyróżnionych wartości parametru q . Pozostałe parametry: $U = 6\Gamma$, $k_B T = 0.009\Gamma$, $g\mu_B B = 0$.

4.2.4 Efekty termoelektryczne: przypadek skończonej akumulacji spinowej

W przypadku skończonej akumulacji spinowej, ładunkowy i spinowy współczynnik Seebecka, przedstawione na rys. 4.10, przyjmują jednakowe wartości maksymalne, jednak różnią się znakiem. Obydwa współczynniki zmieniają znak dla energii odpowiadających energiom rezonansowym kropek oraz energii odpowiadającej punktowi symetrii elektron-dziura, dla której na wykresach transmisji i gęstości stanów pojawia się pik związany z efektem Kondo. Różnica znaku obydwu współczynników związana jest z dużą dodatnią wartością składowej $S_\downarrow$, większą niż wartość składowej $S_\uparrow$. Wraz ze wzrostem wartości parametru q obydwie współczynniki zanikają, co jest związane z przeciwdziałaniem pola wywołanego oddziaływaniem Rashby polu wymiany pochodzącemu od sprzężenia kropki kwantowej z magnetycznymi elektrodami. W przypadku $q = 1$ spinowa termosila zanika, gdyż obydwie składowe $S_\uparrow$ i $S_\downarrow$ przyjmują jednakowe wartości i są jednakowego znaku. Ładunkowa termosila, jednak, przyjmuje skończone wartości.

4.3 Podsumowanie

Podsumowując, w rozdziale pokazano analizę modelu pojedynczej kropki kwantowej sprzężonej z dwiema elektrodami z uwzględnieniem oddziaływania spinowo-orbitalnego typu Rashby w reżimie Kondo. Pokazano, że wzrost sprzężenia oddziaływania Rashby prowadzi do wzrostu temperatury Kondo, i, w rezultacie, przywróceniem efektu Kondo w postaci odpowiadającej przypadkowi niemagnetycznych elektrod i/lub brakowi pola magnetycznego.

Ewolucja stanu Kondo może być obserwowana przy pomocy współczynników termoelektrycznych takich jak wkład elektronowy do konduktancji cieplnej lub współczynnik Seebecka. Dodatkowo, współczynnik Seebecka pozwala na dokładne zbadanie transportu w obszarze rezonansu Kondo.

Rozdział 5

Wpływ zjawisk interferencyjnych na transport termoelektryczny przez dwie silnie skorelowane kropki kwantowe

W niniejszym rozdziale rozważany jest transport termoelektryczny w układzie dwóch silnie skorelowanych kropek kwantowych. Jak zaprezentowano w rozdziale 3, układy wielopoziomowe wprowadzają możliwość badania efektów interferencyjnych, które w znaczny sposób wpływają na charakterystyki transportowe rozważanych układów. W szczególności efekty te mogą znacznie wzmocnić odpowiedź termoelektryczną.

W przypadku układu dwóch silnie skorelowanych kropek kwantowych, gdzie silne korelacje występują pomiędzy kropkami a elektrodami, transport zachodzi w niskotemperaturowym reżimie Kondo. Efekty termoelektryczne pozwalają na dokładną analizę zjawiska Kondo oraz współdziałania zjawiska Kondo z efektami interferencyjnymi. W przypadku układów dwóch kropek, pokazano możliwość zajścia zjawiska Kondo nie tylko dla degeneracji spinowej, ale również orbitalnej układu [127–129].

W przypadku układu dwóch kropek przewidziana została możliwość zajścia elektronowego odpowiednika optycznego zjawiska Dickego. Innym efektem interferencyjnym, który można zaobserwować w układach kropek kwantowych, jest efekt Fano. Istnienie kanału rezonansowego prowadzi do powstania tzw. antyrezonansu w funkcji transmisji w zależności od energii układu. Jest to związane z destruktywną interferencją fal elektronowych przepływających przez układ.

5.1 Opis teoretyczny

5.1.1 Model układu

Rozpatrywany układ składa się z dwóch kropek kwantowych połączonych ze sobą oraz z dwiema, w ogólności, magnetycznymi elektrodami. Ogólny hamiltonian układu pozostaje niezmienny w stosunku do użytego w rozdziale 2. Różnica polega na tym, że w rozpatrywanym obecnie przypadku układ nie znajduje się w pierścieniu Aharonova-Bohma oraz nie podlega

oddziaływaniu spinowo-orbitalnym typu Rashby, co oznacza, że $\phi_{AB} = 0$ oraz $\phi_R = 0$. W związku z tym, w hamiltonianie (3.4), opisującym tunelowanie elektronów między kropkami a elektrodami, $V'_{\mathbf{k}\beta\sigma} = V_{\mathbf{k}\beta\sigma}$.

W celu rozpatrzenia efektu silnych korelacji pomiędzy lokalnym momentem magnetycznym utworzonym na kropkach a elektronami z elektrod wykorzystana została metoda bozonów pomocniczych dla skończonej wartości parametru kulombowskiego U . Poniżej zostanie przedstawiona transformacja hamiltonianu układu dwóch kropek kwantowych do hamiltonianu efektywnego z wykorzystaniem bozonów pomocniczych.

Całkowity hamiltonian układu przed transformacją można zapisać następująco:

$$H = H_e + H_{\text{dqd}} + H_t. \quad (5.1)$$

Poszczególne składowe hamiltonianu mają takie samo znaczenie jak w rozdziałach poprzednich: hamiltonian H_e , wyrażony wzorem (3.2), opisuje elektrody, podczas gdy hamiltonian H_{dqd} dotyczy układu dwóch kropek kwantowych i został wyrażony formułą (3.3). Ostatni człon w ogólnym hamiltonianie (5.1) opisuje tunelowanie elektronów pomiędzy kropkami a elektrodami i zdefiniowany jest formułą (3.4), przy czym uwzględniono zmiany opisane w pierwszym akapicie niniejszego podrozdziału związane z brakiem fazy Aharonova-Bohma i fazy Rashby. Transformacja przy użyciu metody bozonów pomocniczych prowadzi do zmiany wyjściowego hamiltonianu (5.1) w hamiltonian efektywny wyrażony następującym wzorem:

$$\tilde{H} = H_e + \tilde{H}_{\text{dqd}} + \tilde{H}_t + \Lambda. \quad (5.2)$$

Zastosowana transformacja nie zmienia składowej H_e opisującej elektrony w elektrodach, ale modyfikuje hamiltonian H_{dqd} układu kropek kwantowych oraz hamiltonian tunelowy H_t . W wyniku zastosowania metody bozonów pomocniczych pojawia się dodatkowy człon, Λ , uwzględniający więzy nałożone na układ. Ponadto, operatory $d_{\sigma}^{(\dagger)}$, odpowiadające anihilacji (kreacji) elektronu o spinie σ na i -tej kropce, które wchodzi w skład wyjściowego hamiltonianu (5.1), ulegają zamianie na iloczyn $f_{i\sigma} \hat{z}_{i\sigma}$ ($\hat{z}_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}^\dagger$), wyrażony przez operator pseudofermionowy $f_{i\sigma}^{(\dagger)}$ i złożony operator bozonowy $\hat{z}_{i\sigma}^{(\dagger)}$ [122–124]. Operator $\hat{z}_{i\sigma}^\dagger = \hat{e}_i \hat{p}_\sigma^\dagger + \hat{p}_{i\bar{\sigma}} \hat{d}_i^\dagger$ ($\hat{z}_{i\sigma} = \hat{p}_{i\sigma} \hat{e}_i^\dagger + \hat{d}_i \hat{p}_{i\bar{\sigma}}^\dagger$) działa jako operator projekcji wyjściowych stanów kropki kwantowej na stany rozszerzonej przestrzeni Focka kropki. Każdy ze stanów w tej rozszerzonej przestrzeni można zdefiniować następująco: $|\chi\rangle_i = |b\rangle_i \otimes |f\rangle_i$, gdzie $|b\rangle_i$ jest bozonowym a $|f\rangle_i$ fermionowym stanem i -tej kropki ($i = 1, 2$). Stan podstawowy (stan próżni, ang. *vacuum*) i -tej kropki jest zdefiniowany jako $|\text{vac}\rangle_i = |0\rangle_i \otimes |0\rangle_i$.

Operatory $\hat{e}_i$, $\hat{p}_{i\sigma}$, $\hat{d}_i$ działają odpowiednio na stan pusty, pojedynczo obsadzony o spinie σ oraz podwójnie obsadzony, a operator $f_{i\sigma}^{(\dagger)}$ anihiluje (kreuje) cząstkę o spinie σ w rozszerzonej przestrzeni Focka i -tej kropki. Operatory te działają na odpowiednie stany w sposób następujący:

$$\hat{e}_i |0\rangle_i = \hat{e}_i |e\rangle_i \otimes |0\rangle_i = |\text{vac}\rangle_i, \quad (5.3a)$$

$$\hat{p}_{i\sigma} f_{i\sigma} |\sigma\rangle_i = \hat{p}_{i\sigma} |p_\sigma\rangle_i \otimes f_{i\sigma} |\sigma\rangle_i = |\text{vac}\rangle_i, \quad (5.3b)$$

$$\hat{d}_i f_{i\uparrow} f_{i\downarrow} |2\rangle_i = \hat{d}_i |d\rangle_i \otimes f_{i\uparrow} f_{i\downarrow} |\uparrow\downarrow\rangle_i = |\text{vac}\rangle_i. \quad (5.3c)$$

Podobnie iloczyn bozonowych i pseudofermionowych operatorów kreacji działa na stan $|\text{vac}\rangle_i$ kreując w rezultacie stan pusty, pojedynczo obsadzony o spinie σ oraz podwójnie obsadzony. Do dalszych rozważań przyjęto założenie o przybliżeniu siodłowym dla operatorów bozonów pomocniczych, które pozwala na zamianę tych operatorów na ich wartości średnie: $z_{i\sigma} \equiv \langle \hat{z}_{i\sigma}^{(\dagger)} \rangle$, $e_i \equiv \langle \hat{e}_i^{(\dagger)} \rangle$, $p_{i\sigma} \equiv \langle \hat{p}_{i\sigma}^{(\dagger)} \rangle$, $d_i \equiv \langle \hat{d}_i^{(\dagger)} \rangle$ [122].

W wyniku transformacji hamiltonian $\tilde{H}_{\text{dqd}}$ z wyrażenia (5.2) przyjmuje postać:

$$\tilde{H}_{\text{dqd}} = \sum_{i\sigma} \tilde{\varepsilon}_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \sum_{\sigma} \tilde{t}_{\sigma} (f_{1\sigma}^\dagger f_{2\sigma} + \text{H.c.}). \quad (5.4)$$

Następnie, hamiltonian opisujący tunelowanie $\tilde{H}_t$ przyjmuje postać:

$$\tilde{H}_t = \sum_{\beta\sigma i} (\tilde{V}_{\beta\sigma i} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \text{H.c.}), \quad (5.5)$$

podczas, gdy człon $\Lambda = \sum_i \Lambda_i$ opisuje więzy nałożone na układ. Składowa dla kropki i -tej wyrażona jest następująco:

$$\Lambda_i = U_i d_i^2 + \lambda_i^{(1)} \left(e_i^2 + \sum_{\sigma} p_{i\sigma}^2 + d_i^2 - 1 \right) - \sum_{\sigma} \lambda_{i\sigma}^{(2)} (p_{i\sigma}^2 + d_i^2), \quad (5.6)$$

gdzie współczynniki $\lambda_i^{(1)}$ oraz $\lambda_{i\sigma}^{(2)}$ są mnożnikami Lagrange'a. W powyższych wzorach, (5.4)-(5.6), wprowadzono oznaczenia $\tilde{\varepsilon}_{i\sigma} = \varepsilon_{i\sigma} + \lambda_{i\sigma}^{(2)}$, $\tilde{t}_{\sigma} = tz_{1\sigma}z_{2\sigma}$ oraz $\tilde{V}_{\beta\sigma i} = z_{i\sigma}V_{\beta\sigma i}$. Pierwsze z wyrażeń wskazuje na fakt, że poziom kropki i -tej jest odpowiednio zrenormalizowany. Drugie z wyrażeń, oprócz modyfikacji amplitudy parametru przeskoku elektronu pomiędzy kropkami, wskazuje również na zależność tego parametru od spinu. Ostatnie wyrażenie wskazuje na renormalizację energii tunelowania elektronów pomiędzy kropkami a elektrodami. Na dalszy etap obliczeń wprowadzono współczynnik sprzężenia $\tilde{\Gamma}_{ij\sigma} = 2\pi \tilde{V}_{\beta\sigma i} \tilde{V}_{\beta\sigma j}^* \rho_{\beta\sigma}$, gdzie $\rho_{\beta\sigma}$ jest gęstością stanów w elektrodzie $\beta = L, R$. Ponadto założono przybliżenie szerokiego pasma, które oznacza, że współczynnik $\tilde{\Gamma}_{ij\sigma}$ nie zależy od energii elektronu. Człon Λ związany jest z energią podwójnego obsadzenia kropek oraz z więzami nałożonymi na nową przestrzeń stanów. Drugi człon we wzorze (5.6) opisuje zasadę zachowania stanów, która wyrażona jest następującym równaniem:

$$e_i^2 + \sum_{\sigma} p_{i\sigma}^2 + d_i^2 = 1. \quad (5.7)$$

Ostatni człon we wzorze (5.6) związany jest z zasadą odpowiedniości pomiędzy pseudofermionowymi i bozonowymi operatorami, która wyraża się następująco:

$$p_{i\sigma}^2 + d_{i\sigma}^2 = \langle f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \rangle. \quad (5.8)$$

Zastosowana transformacja prowadzi do pojawienia się parametrów $\lambda_i^{(1)}$, $\lambda_{i\sigma}^{(2)}$, e_i , $p_{i\sigma}$, d_i , które należy wyznaczyć. W tym celu zastosowano twierdzenie Hellmanna-Feynmana w odniesieniu do hamiltonianu efektywnego, tzn., $\partial_{\chi_i} \tilde{H} = 0$, gdzie $\chi_i = (\lambda_i^{(1)}, \lambda_{i\sigma}^{(2)}, e_i, p_{i\sigma}, d_i)$ dla $i = 1, 2$. W wyniku otrzymane zostaje 14 równań (7 równań dla jednej kropki, biorąc pod uwagę, że równanie dla parametru $p_{i\sigma}$ pojawia się dwukrotnie, w przypadku spinowo-spolaryzowanego transportu,

dla obydwu wartości spinu):

$$e_i^2 + \sum_{\sigma} p_{i\sigma}^2 + d_i^2 - 1 = 0, \quad (5.9a)$$

$$\partial_{e_i} \ln z_{i\sigma} K_{1,i,\sigma} + \lambda_i^{(1)} e_i = 0, \quad (5.9b)$$

$$\sum_{\sigma} \partial_{p_{i\sigma'}} \ln z_{i\sigma} K_{1,i,\sigma} + \left(\lambda_i^{(1)} - \lambda_{i\sigma'}^{(2)} \right) p_{i\sigma'} = 0, \quad (5.9c)$$

$$\sum_{\sigma} \partial_{d_i} \ln z_{i\sigma} K_{1,i,\sigma} + \left(U_i + \lambda_i^{(1)} - \sum_{\sigma} \lambda_{i\sigma}^{(2)} \right) d_i = 0. \quad (5.9d)$$

W powyższych równaniach wprowadzono następujące oznaczenie:

$$K_{k,i,\sigma} = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi i} (\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{i\sigma})^k G_{ii,\sigma}^<, \quad (5.10)$$

dla $k = 0, 1$ oraz $i = 1, 2$. W wyrażeniu tym $G_{ii,\sigma}^<$ jest transformatą Fouriera korelacyjnej funkcji Greena zdefiniowanej przy pomocy pseudofermionowych operatorów jako $G_{ii,\sigma}^<(t, t') = i \langle f_{i\sigma}^\dagger(t') f_{i\sigma}(t) \rangle$.

5.1.2 Funkcje Greena i współczynnik transmisji

Korelacyjna funkcja Greena $\mathbf{G}_\sigma^<$ łącznie z elementami macierzowymi $G_{ii,\sigma}^<$ zostaje wyznaczona przy pomocy formuły Kiełdysza [87, 117]:

$$\mathbf{G}_\sigma^< = i \mathbf{G}_\sigma^r \left(f_L \tilde{\Gamma}_{L\sigma} + f_R \tilde{\Gamma}_{R\sigma} \right) \mathbf{G}_\sigma^a, \quad (5.11)$$

gdzie $f_{L(R)}$ jest rozkładem Fermiego-Diraca lewej (prawej) elektrody, podczas gdy $\mathbf{G}_\sigma^r$ oraz $\mathbf{G}_\sigma^a = (\mathbf{G}_\sigma^r)^\dagger$ oznaczają odpowiednio opóźnioną i przedwczesną funkcję Greena. Ponadto, $\tilde{\Gamma}_{L(R)\sigma}$ oznacza efektywne sprzężenie pomiędzy kropkami a elektrodami.

Opóźniona funkcja Greena została wyznaczona przy pomocy równania Dysona:

$$\mathbf{G}_\sigma^r = \left(\mathbf{g}_{0\sigma}^{r-1} - \Sigma_\sigma \right)^{-1}. \quad (5.12)$$

Elementy macierzowe opóźnionej funkcji Greena dla kropki i -tej odizolowanej od elektrod oraz od drugiej kropki wyrażone są następująco:

$$[\mathbf{g}_{0\sigma}^r]_{ij,\sigma} \equiv g_{ij\sigma}^r = \delta_{ij} \left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{i\sigma} + i0^+ \right)^{-1}. \quad (5.13)$$

Ponadto $\Sigma_\sigma = \Sigma_{d\sigma} + \sum_{\beta} \Sigma_{\beta\sigma}$ jest sumą efektywnej energii własnej układu kropek, wynikającej z ich wzajemnego sprzężenia, oraz efektywnej energii własnej pochodzącej od sprzężenia kropek z elektrodami.

Macierz efektywnej energii własnej kropek przyjmuje postać:

$$\Sigma_{d\sigma} = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{t}_\sigma \\ \tilde{t}_\sigma & 0 \end{bmatrix}, \quad (5.14)$$

podczas gdy efektywną macierz energii własnej pochodzącej od sprzężenia kropek z elektrodami można powiązać z macierzą współczynników sprzężeń poprzez wyrażenie: $\Sigma_{\beta\sigma} = -(i/2)\tilde{\Gamma}_{\beta\sigma}$, przy czym macierz zrenormalizowanych współczynników sprzężeń przyjmuje postać:

$$\tilde{\Gamma}_{\beta\sigma} = \begin{bmatrix} \tilde{\Gamma}_{11\beta\sigma} & q\sqrt{\tilde{\Gamma}_{11\beta\sigma}\tilde{\Gamma}_{22\beta\sigma}} \\ q\sqrt{\tilde{\Gamma}_{11\beta\sigma}\tilde{\Gamma}_{22\beta\sigma}} & \tilde{\Gamma}_{22\beta\sigma} \end{bmatrix}. \quad (5.15)$$

Elementy powyższej macierzy sprzężeń, $\tilde{\Gamma}_{\beta\sigma}$, można sparametryzować następująco:

$$\tilde{\Gamma}_{11L\sigma} = z_{1\sigma}^2 \Gamma_{L\sigma}, \quad (5.16a)$$

$$\tilde{\Gamma}_{22L\sigma} = \alpha z_{2\sigma}^2 \Gamma_{L\sigma}, \quad (5.16b)$$

$$\tilde{\Gamma}_{11R\sigma} = \alpha z_{1\sigma}^2 \Gamma_{R\sigma}, \quad (5.16c)$$

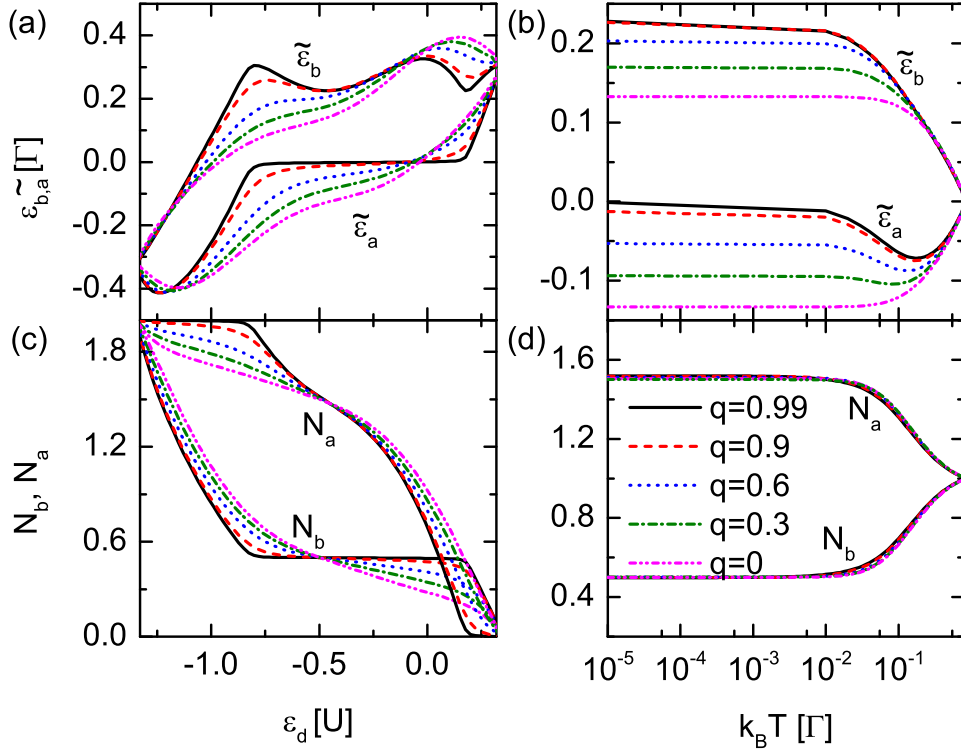
$$\tilde{\Gamma}_{22R\sigma} = z_{2\sigma}^2 \Gamma_{R\sigma}. \quad (5.16d)$$

W powyższych wzorach, (5.16a)-(5.16d), $\Gamma_{\beta\sigma} = (1 + \hat{\sigma}p_\beta)\Gamma$, gdzie $\hat{\sigma} = 1$ ($\hat{\sigma} = -1$) dla $\sigma = \uparrow$ ($\sigma = \downarrow$), a p_β oznacza polaryzację magnetyczną elektrody $\beta = L, R$. W przypadku równoległej konfiguracji elektrod $p_\beta = p$, podczas, gdy dla antyrównoległej konfiguracji $p_L = -p_R = p$. Parametr $\alpha \in \langle 0, 1 \rangle$ opisuje różnicę w sprzężeniu danej elektrody z układem kropek ($\alpha = 0$ odpowiada konfiguracji szeregowej układu kropek, podczas gdy $\alpha = 1$ odpowiada symetrycznej, równoległej konfiguracji układu). Parametr q wprowadzony w wyrażeniu (5.15) opisuje wielkość sprzężenia pośredniego elektronów na poszczególnych kropkach poprzez stany elektronowe w elektrodach. Sprzężenie to prowadzi to szeregu efektów interferencyjnych, m.in. efektu analogicznego do optycznego efektu Dicke. Parametr ten zależy w szczególności od fizycznej odległości pomiędzy kropkami kwantowymi w badanym układzie. Dla odległości pomiędzy kropkami porównywalnej z długością fali elektronu w elektrodzie β , $q \rightarrow 1$. Gdy kropki są od siebie znacznie oddalone $q = 0$. W pozostałych przypadkach parametr q przyjmuje wartości pośrednie z przedziału $(0, 1)$ [114].

5.2 Wyniki numeryczne

Niniejszy podrozdział został podzielony na osobne, dotyczące przypadku niemagnetycznych elektrod, elektrod magnetycznych bez akumulacji spinowej oraz elektrod magnetycznych z akumulacją spinową. Ponadto omówione zostały podstawowe zjawiska interferencji kwantowej pojawiające się w układzie i mające znaczący wpływ na własności transportowe.

W podrozdziale dotyczącym transportu przez kropki kwantowe połączone z elektrodami magnetycznymi, ale bez uwzględniania akumulacji spinowej ($\Delta\mu_s = 0$), opisano wpływ efektywnego pola wymiany, pochodzącego od spinowo-zależnego sprzężenia kropek kwantowych z elektrodami magnetycznymi, na energię układu kropek poprzez renormalizację ich poziomów energetycznych. Pokazano również zależności współczynników termoelektrycznych dla równoległej (P) i antyrównoległej (AP) konfiguracji magnetycznej elektrod. W ostatnim podrozdziale uwzględniono akumulację spinową w elektrodach, co pozwoliło na wyznaczenie spinowych współczynników termoelektrycznych.



Rysunek 5.1: Energia $\tilde{\varepsilon}_b$ stanu wiążącego i energia $\tilde{\varepsilon}_a$ stanu antywiążącego w funkcji położenia poziomu ε_d kropek (a) i temperatury (b), oraz obsadzenie stanu wiążącego i antywiążącego w funkcji położenia poziomu (c) i temperatury (w skali logarytmicznej) (d), dla wyróżnionych wartości parametru q . Pozostałe parametry: $U = 6\Gamma$, $\alpha = 1$, $t = \Gamma$, $k_B T = 0.001\Gamma$ [(a) i (c)], $\varepsilon_d = -U/2$ [(b) i (d)]. Na rysunkach (a) i (c) górne krzywe odpowiadają stanowi wiążącemu, podczas gdy na rysunkach (b) i (d) dolne krzywe odpowiadają temu stanowi.

W obliczeniach prowadzących do poniżej opisanych rezultatów przyjęto za jednostkę energii parametr sprzężenia $\Gamma = 1$. Dodatkowo założono, że obydwie kropki kwantowe charakteryzują się jednakowym położeniem poziomu względem poziomu Fermiego elektrod, tzn. $\varepsilon_{i\sigma} = \varepsilon_d$ dla $i = 1, 2$ oraz $\sigma = \uparrow, \downarrow$, a także jednakową wartość parametru korelacji kulombowskich $U_i = U = 6\Gamma$. Ponadto przyjęto stałą wartość parametru przeskoku elektronu pomiędzy kropkami $t = \Gamma$.

5.2.1 Efekty interferencyjne

W przypadku kropek kwantowych sprzężonych bezpośrednio z elektrodami i ze sobą nawzajem oraz sprzężonych z sobą pośrednio przez stany elektrod, które to sprzężenie jest kontrolowane w obliczeniach przy pomocy parametru q . Wzór opisujący transmisję przez układ jest wyrażony następująco:

$$T(\varepsilon) = \frac{\tilde{\Gamma}_b^2}{(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_b)^2 + \tilde{\Gamma}_b^2} + \frac{\tilde{\Gamma}_a^2}{(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_a)^2 + \tilde{\Gamma}_a^2}, \quad (5.17)$$

gdzie

$$\tilde{\varepsilon}_{b(a)} = \tilde{\varepsilon}_d \pm \tilde{t} \quad (5.18)$$

oraz

$$\tilde{\Gamma}_{b(a)} = (1 \pm q)\tilde{\Gamma}. \quad (5.19)$$

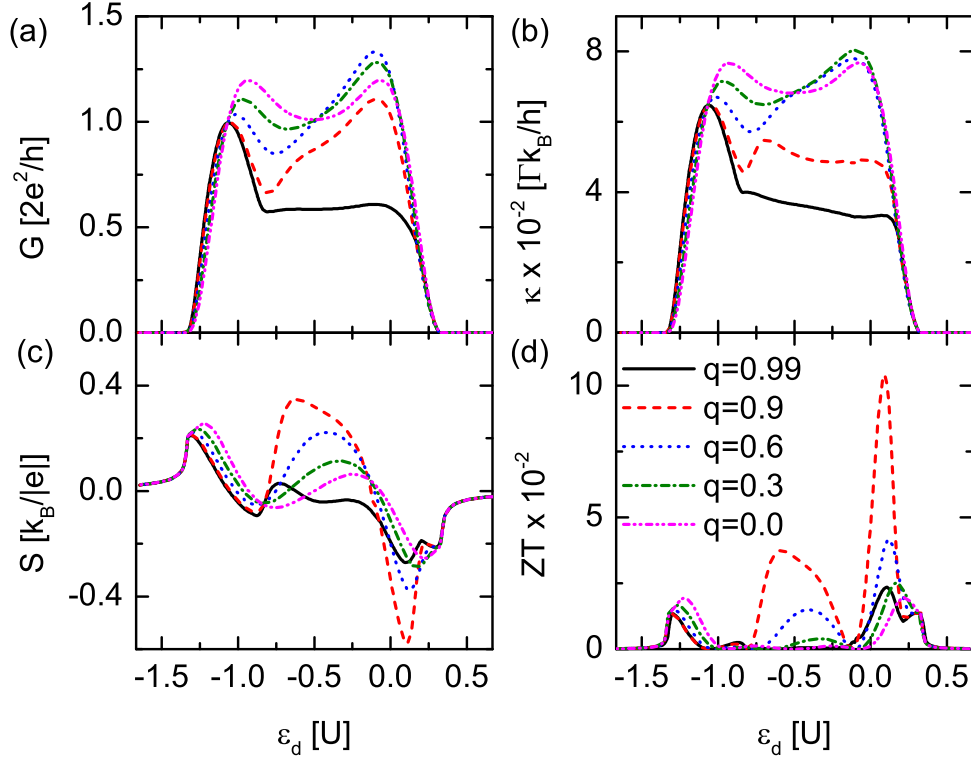
Podobnie, jak w przypadku dyskusji zawartej w poprzednim rozdziale, formuła opisująca transmisję przyjmuje postać taką jak dla przypadku bez oddziaływania kulombowskiego. Jednakże oddziaływanie to brane jest pod uwagę w sposób efektywny poprzez wartości średnie operatorów bozonowych. Należy zauważyć, że w przypadku $q = 0$ stany molekularne: wiążący i antywiązący, są jednakowej szerokości, co gwarantuje symetryczną postać współczynnika transmisji. Parametr q można utożsamić z „polaryzacją” orbitalną tych stanów, przez analogię do polaryzacji magnetycznej w przypadkach omawianych w poprzednich rozdziałach. Stany te można opisać w języku teorii zjawiska Dickego, czyli stanów: nad- i podpromienistego [112,116].

Stan podpromienisty (antywiązący) jest stanem o długim czasie życia ($\tau_a = 1/\tilde{\Gamma}_a$), który pozwala na wirtualną wymianę elektronów pomiędzy kropkami a elektrodami. Gdy sprzężenie pośrednie przyjmuje największą dozwoloną wartość, $q = 1$, stan podpromienisty ulega rozprzęgnięciu od elektrod i tylko stan nadpromienisty, którego szerokość jest równa $2\tilde{\Gamma}$, bierze udział w transporcie.

W przypadku $q = 0$, energie stanów: wiążącego $\tilde{\varepsilon}_b$ i antywiązącego $\tilde{\varepsilon}_a$, przedstawione na rys. 5.1(a) w funkcji energii poziomu ε_d kropek, różnią się od siebie tylko czynnikiem $\tilde{t}_\sigma$, który pełni rolę analogiczną do pola magnetycznego znoszącego degenerację spinową poziomów, powodując zniesienie degeneracji orbitalnej kropek. W przypadku zakresu energii, dla których kropki nie są obsadzone, $\varepsilon_d > 0$, oraz przypadku podwójnego obsadzenia obydwu kropek, $\varepsilon_d < -U$, degeneracja poziomów zostaje przywrócona pomimo, że $t \neq 0$. Wzrost wartości parametru q prowadzi do pojawienia się asymetrii w zależności energii stanów molekularnych od energii poziomu ε_d . Dla wartości parametru q ($q = 0.99$) bliskiej maksymalnej dopuszczalnej wartości (czyli $q = 1$) energia ε_a stanu antywiązącego jest, dla dużego zakresu energii ε_d , stała i odpowiada energii poziomu Fermiego elektrod, $\mu_0 = 0$. Energia ε_b , odpowiadająca stanowi wiążącemu jest równa wartości energii poziomu Fermiego jedynie dla $\varepsilon_d \approx -U$.

Zależność powyższych energii od temperatury dla $\varepsilon_d = -U/2$ została przedstawiona na rys. 5.1(b). Podobnie, jak w przypadku zależności od położenia poziomu kropek, dla $q = 0$ wartości energii stanu wiążącego i antywiązącego są symetrycznie oddalone od poziomu Fermiego, $\tilde{\varepsilon}_a(b) = \pm\tilde{t}$. Wzrost wartości parametru q prowadzi do zrównania energii stanu antywiązącego z energią Fermiego elektrod, a także powoduje wzrost wartości energii stanu wiążącego, która ulega nasyceniu dla $q > 0.9$. Dla temperatury $k_B T = \Gamma$ zrenormalizowane poziomy molekularne ulegają degeneracji, ze względu na fakt, że temperatura jest wyższa niż różnica pomiędzy nimi oraz dużo wyższa niż temperatura Kondo, która dla wybranych w obecnym przypadku parametrów wynosi $k_B T_K \approx \Gamma/4$. W zakresie temperatur $k_B T \in (0.01\Gamma, \Gamma)$ układ znajduje się w stanie przejściowym pomiędzy stanem Kondo, a stanem blokady kulombowskiej.

Powyżej opisane zależności energii mają również konsekwencje w postaci różnego obsadzenia układu kropek przez elektrony. W szczególności, na rys. 5.2 (c) i (d) przedstawiono zależności obsadzenia N_b stanu wiążącego oraz obsadzenia N_a stanu antywiązącego odpowiednio od położenia poziomu ε_d kropek i temperatury. Funkcje falowe elektronów propagujących przez układ ulegają swoistemu „rozmyciu” na obydwa stany, przy czym większym obsadzeniem

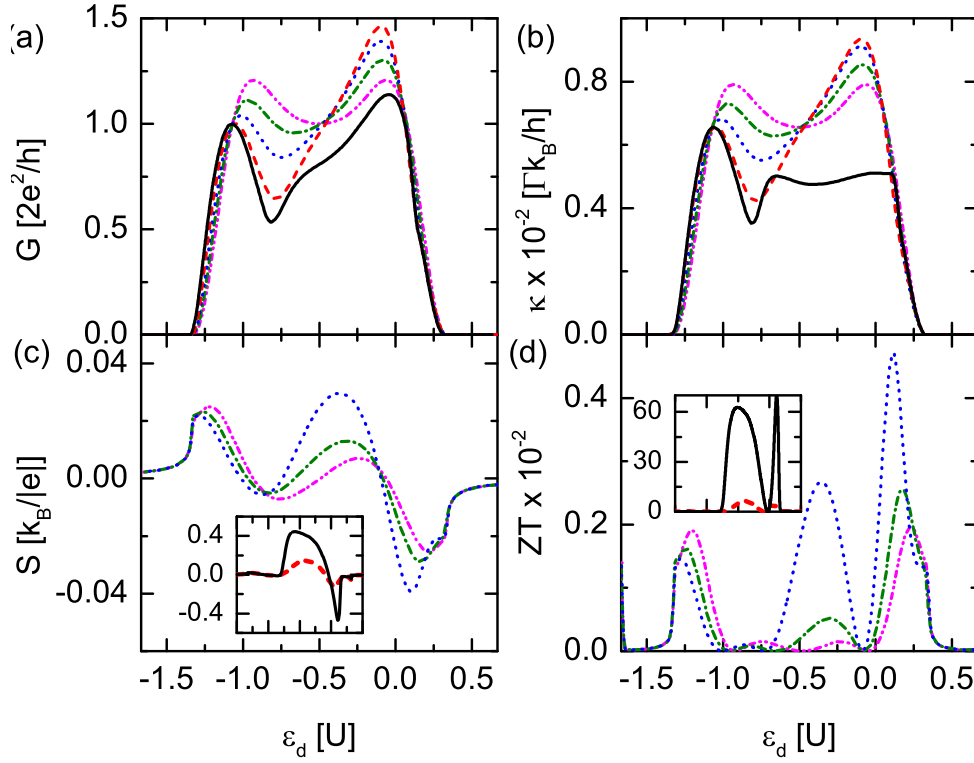


Rysunek 5.2: Współczynniki termoelektryczne w funkcji położenia poziomu ε_d kropek dla wyróżnionych wartości parametru q . Pozostałe parametry: $k_B T = 0.01\Gamma$, $U = 6\Gamma$, $\alpha = 1$, $t = \Gamma$.

charakteryzuje się stan antywiązący, którego energia przypada na energię Fermiego elektrod, podczas gdy obsadzenie stanu wiążącego jest stałe dla energii $\varepsilon_d > -U$, ale wzrasta poniżej tej energii. Jest to związane z malejącą szerokością stanu antywiązącego i wzrastającą szerokością stanu wiążącego wraz ze wzrostem wartości q . Zmiany wartości parametru q oraz zmiany temperatury w reżimie Kondo, czyli dla temperatur $k_B T < \Gamma/4$, nie wpływają na zmiany obsadzeń stanów, gdy energia poziomu kropki odpowiada energii $\varepsilon_d = -U/2$.

5.2.2 Elektrody niemagnetyczne

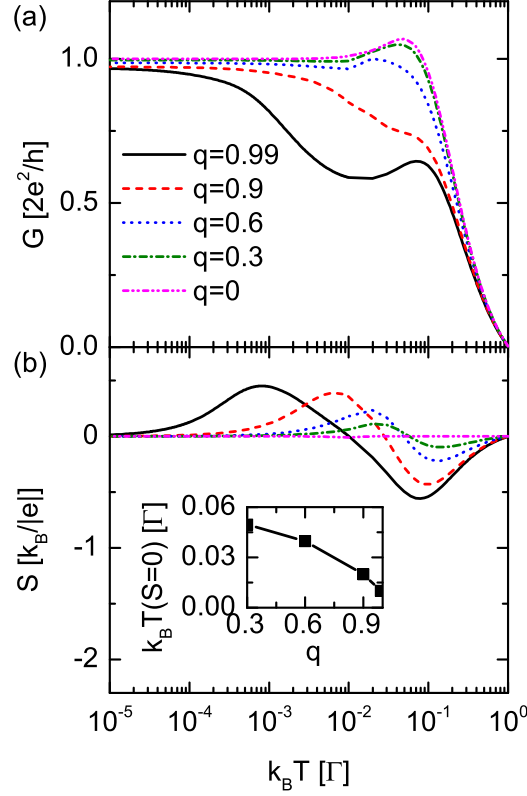
Współczynniki transportowe w reżimie Kondo są czułe na zmiany temperatury oraz zmiany w symetrii wywołane wprowadzeniem sprzężenia pośredniego. Gdy w układzie symetria jest zachowana, $q = 0$, krzywe opisujące konduktancję i konduktancję cieplną, przedstawione na rys. 5.2 (a) i (b) dla temperatury $k_B T = 0.01\Gamma$, wykazują dwa piki, symetrycznie położone względem $\varepsilon_d = -U/2$ i odpowiadające energiom $\varepsilon_d = -U$ i $\varepsilon_d = 0$. Maksymalna wartość konduktancji jest niższa niż maksymalna dopuszczalna dla rozważanego układu konduktancja ($4e^2/h$) ze względu na rozszczepienie poziomów wywołane przeskokiem elektronów pomiędzy kropkami i wyodrębnieniem stanów molekularnych o energiach $\tilde{\varepsilon}_{b,a}$. Zgodnie z wcześniejszą dyskusją, ze wzrostem wartości parametru q w układzie pojawia się asymetria, która wpływa na położenie poziomów $\tilde{\varepsilon}_{b,a}$ oraz obsadzenia odpowiadających im stanów. Asymetria ta prowadzi do przesunięcia położenia piku konduktancji odpowiadającego energii $\varepsilon_d = -U$ do energii odpowiadającej stanowi wiążącemu $\varepsilon_d = -U - \tilde{t}$ oraz obniżenia jego wartości maksymalnej do



Rysunek 5.3: Współczynniki termoelektryczne w funkcji położenia poziomu ε_d kropek dla wartości parametru q jak na rys. 5.2. Pomniejszone rysunki przedstawiają odpowiednie współczynniki dla $q = 0.9$ i $q = 0.99$. Pozostałe parametry: $k_B T = 0.001\Gamma$, $U = 6\Gamma$, $\alpha = 1$, $t = \Gamma$.

jednego kwantu konduktancji. Dla $q = 0.9$ widoczny jest drugi pik, położony niesymetrycznie względem $\varepsilon_d = -U/2$. Dla $q > 0.9$ pik znika i pojawia się *plateau* dla szerokiego zakresu energii. Jest to związane z faktem, że dla $q \rightarrow 1$ pik, odpowiadający stanowi antywiążącemu, jest znacznie zwężony. Gdy szerokość ta jest mniejsza niż odpowiednie poszerzenie związane z temperaturą układu, pik w konduktancji znika. Obniżenie temperatury, przedstawione dla omawianych współczynników na rys. 5.3 (a) i (b), prowadzi do utrzymania się piku odpowiadającego energii $\varepsilon_d \approx 0$ dla większych wartości q oraz większą maksymalną wartość dla $q = 0.9$, podczas gdy w przypadku piku położonego poniżej $\varepsilon_d = -U$, temperatura nie wpływa znacząco na maksymalną wartość konduktancji.

Współczynnik Seebecka, przedstawiony na rys. 5.2 (c) i (d), dla przypadku $q = 0$, przyjmuje, zgodnie z oczekiwaniami, antysymetryczną postać względem energii $\varepsilon_d = -U/2$. Zmiana znaku i, jednocześnie, zmiana charakteru nośników dominujących w transporcie, zachodzi dla energii odpowiadających energiom stanów molekularnych oraz w punkcie symetrii. Dla energii ε_d powyżej energii stanu antywiążącego, ε_a , transport ma charakter elektronowy. Dla $\varepsilon_d < \varepsilon_a$ w transporcie dominują dziury. Dla $\varepsilon_d < -U/2$, zgodnie z uwagą zamieszczoną wyżej, charakter nośników ulega odwróceniu. Zwiększenie wartości q od 0 do 0.9 prowadzi do wzrostu wartości współczynnika Seebecka w pobliżu energii $\varepsilon_d = -U/2$. Podobnie jak w opisanym powyżej przypadku konduktancji, w temperaturze $k_B T = 0.01\Gamma$, współczynnik Seebecka również ulega zmniejszeniu dla $q > 0.9$. W przypadku $\varepsilon_d < -U$ maksymalna wartość konduktancji oraz charakter krzywej nie ulegają znacznej zmianie, co jest związane z faktem, że stan wiążący ulega

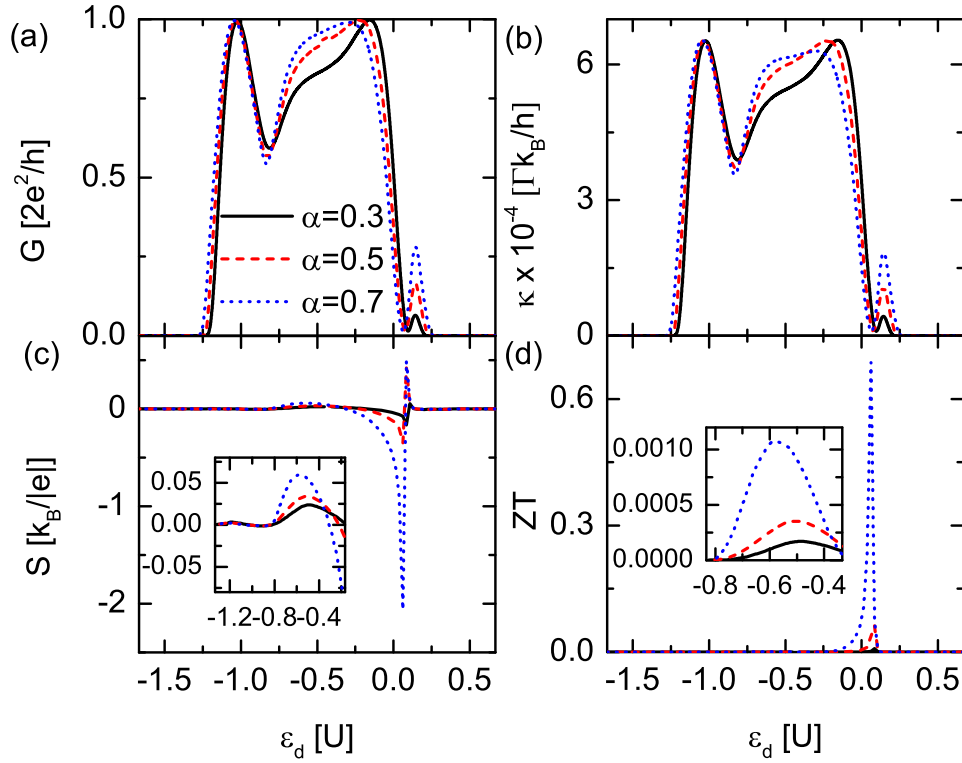


Rysunek 5.4: Współczynniki termoelektryczne w funkcji temperatury (w skali logarytmicznej) dla wyróżnionych wartości parametru q . Pozostałe parametry: $p = 0$, $\varepsilon_d = -U/2$, $U = 6\Gamma$, $\alpha = 1$, $t = \Gamma$. Wstawka przedstawia zależność temperatury, w których współczynnik Seebecka zanika w funkcji parametru q .

jedynie poszerzeniu ze wzrostem wartości q , podczas gdy stan antywiązący ulega stopniowemu rozprężaniu, które jakościowo zmienia charakter transportu w obrębie energii obejmujących ten stan. W niższej temperaturze współczynnik Seebecka, pokazany na rys. 5.3(c), jakościowo zachowuje się podobnie, z wyjątkiem maksymalnych wartości, które są mniejsze niż dla $k_B T = 0.01\Gamma$. Ponadto dla $q = 0.99$ termosila wraz z obniżeniem temperatury osiąga znaczne wartości, co jest związane, podobnie jak w przypadku konduktancji, z lepszym wyodrębnieniem w niższej temperaturze, zwężonego stanu antywiążącego.

Współczynniki efektywności termoelektrycznej, przedstawione na rys. 5.2(d) i 5.3(d) wskazują, że efektywność termoelektryczna układu jest większa dla niższych temperatur, $k_B T = 0.001\Gamma$, oraz przypadku $q = 0.99$. Jest to związane z faktem, że iloczyn GS^2 wzrasta wraz ze zmniejszeniem temperatury – zarówno termosila S , jak i konduktancja G wzrasta. W przypadku niższej temperatury konduktancja jest, w przybliżeniu stała, a współczynnik Seebecka przyjmuje małą wartość.

Wpływ zmian temperatury i wartości parametru q na symetrię współczynników termoelektrycznych został dokładniej przedstawiony na rys. 5.4, na którym pokazano konduktancję i współczynnik Seebecka dla $\varepsilon_d = -U/2$. W przypadku $q = 0$ i wyróżnionej wartości energii poziomu ε_d kropek, konduktancja dla niskich temperatur, tzn. $k_B T < 0.1\Gamma$, przyjmuje stałą wartość, odpowiadającą minimum widocznemu na rysunkach 5.2 i 5.3. Dla wyższych temperatur piki odpowiadające energiom rezonansowym układu ulegają przekryciu, ponieważ

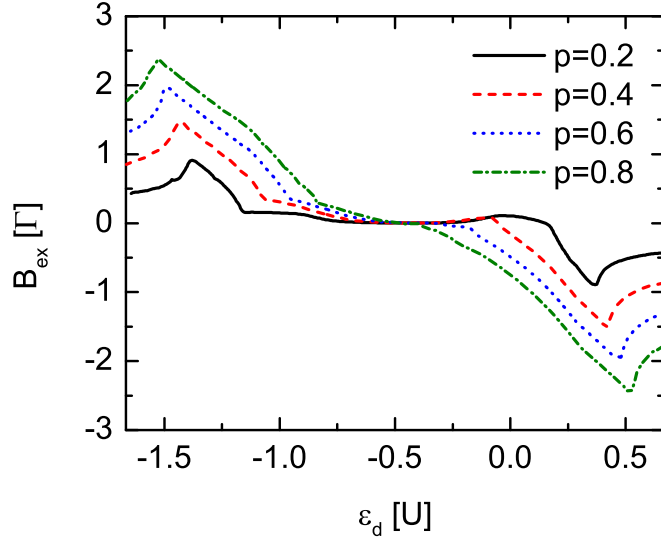


Rysunek 5.5: Współczynniki termoelektryczne w funkcji położenia poziomu ε_d kropek i wyróżnionych wartości parametru α . Pomniejszone rysunki pokazuje powiększenie wykresu odpowiednich współczynników. Pozostałe parametry: $k_B T = 10^{-4} \Gamma$, $U = 6 \Gamma$, $q = 1$, $t = \Gamma$.

poszerzenie wywołane temperaturą, $k_B T$, zrównuje się z wartością poszerzenia wywołanego sprzężeniem z elektrodami, Γ . Przekrycie to skutkuje niewielkim wzrostem maksymalnej wartości konduktancji. Dalszy wzrost temperatury powoduje spadek konduktancji. Wzrost wartości q powoduje powstanie minimum w konduktancji, które dla $q = 0.99$ przypada dla temperatury $k_B T \approx 0.01 \Gamma$. Jest to temperatura graniczna, poniżej której stan antywiązący zaczyna brać aktywny udział w transporcie, co prowadzi do wzrostu konduktancji.

Współczynnik Seebecka, przedstawiony na rys. 5.4(b), znika w przypadku $q = 0$ dla całego zakresu temperatur, ze względu na symetrię elektronowo-dziurową. Wzrost wartości parametru q prowadzi do pojawienia się asymetrii krzywej opisującej współczynnik transmisji. W rezultacie wzrasta maksymalna wartość $|S|$ oraz przesunięciu ulega wartość temperatury $k_B T = k_B T(S = 0) \equiv k_B T_0$, w której współczynnik Seebecka zmienia znak. Przesunięcie to przedstawiono we wstawce do wykresu zawartej na rys. 5.4(b), gdzie wspomniana temperatura maleje ze wzrostem wartości parametru q . Jest to związane m. in. ze zmniejszaniem się temperatury Kondo. Ponadto, na wykresie głównym, przedstawiającym współczynnik Seebecka, poniżej temperatury $k_B T_0$, transport jest zdominowany przez dziury, podczas gdy powyżej tej temperatury, czyli przypadku przejścia układu ze stanu Kondo do stanu mieszanej walencyjności, charakter elektronowy.

W szczególnym przypadku, gdy $q = 1$ i dla asymetrycznego sprzężenia kropek i elektrod, $\alpha \neq 1$, konduktancja i wkład elektronowy do konduktancji cieplnej, przedstawione na rys. 5.5 (a) i (b) wykazują jakościowo podobną zależność od położenia poziomu ε_d kropek. Dla



Rysunek 5.6: Pole wymiany $\tilde{\epsilon}_\uparrow - \tilde{\epsilon}_\downarrow$ w funkcji położenia poziomów ϵ_d kropek dla wyróżnionych wartości parametru p . Pozostałe parametry: $k_B T = 0.01\Gamma$, $U = 6\Gamma$, $q = 0.99$, $\alpha = 1$, $t = \Gamma$.

wszystkich wyróżnionych wartości parametru α , krzywe opisujące konduktancje przyjmują postać niesymetrycznej krzywej Fano.

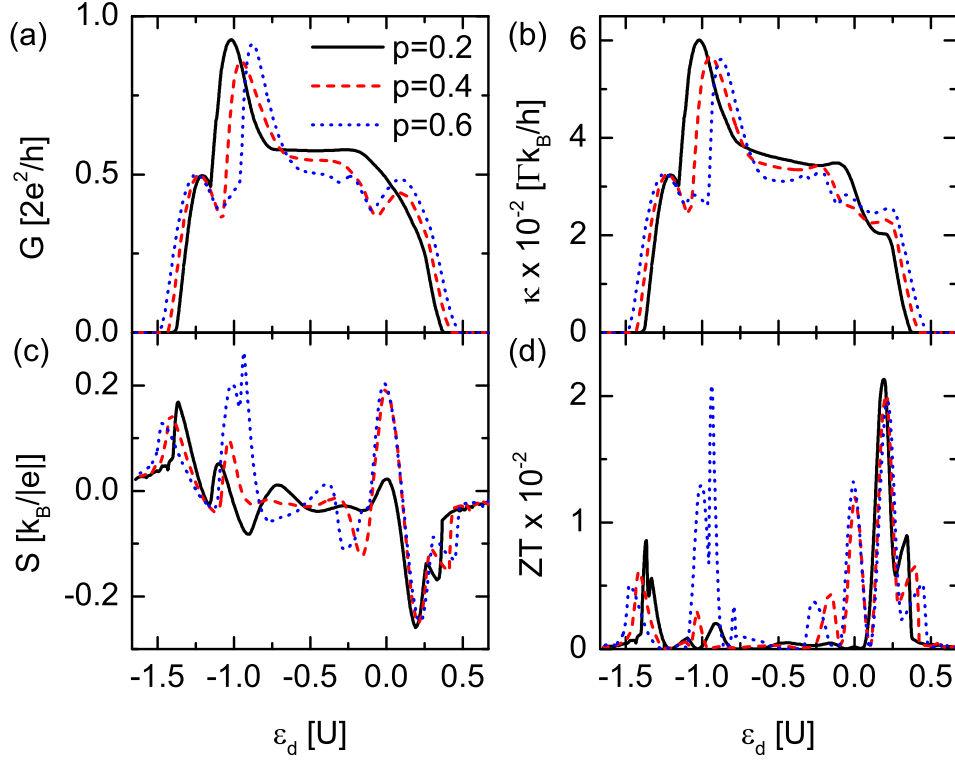
Współczynnik Seebecka oraz współczynnik efektywności termoelektrycznej, pokazane na rys. 5.5 (c) i (d), przyjmują największe wartości dla energii odpowiadających antyrezonansowi Fano. Ponadto wzrost wartości parametru α prowadzi również do wzrostu maksymalnej wartości omawianych współczynników. Wstawki do wykresów pokazują, że wzrost wartości obydwu współczynników odbywa się również dla energii $\epsilon_d \approx -U/2$, jednak maksymalne wartości w tym zakresie są dużo mniejsze niż w zakresie energii obejmujących antyrezonans.

Należy zauważyć, że podobnie do przypadków omawianych we wcześniejszych rozdziałach, wzmocnienie efektów termoelektrycznych przez zjawiska interferencji, wymaga odpowiednio niskich temperatur, czyli takich, w których efekty interferencji kwantowej mają możliwość uaktywnienia się.

5.2.3 Elektrody magnetyczne: brak akumulacji spinowej

W niniejszym podrozdziale rozpatrywany jest układ z elektrodami magnetycznymi, których magnetyczną polaryzację opisuje parametr p . Rozpatrywany jest kolinearny przypadek elektrod magnetycznych, tzn. ich konfiguracja może być równoległa (elektrody namagnesowane zgodnie z wyróżnionym kierunkiem, $p_L = p_R = p$) bądź antyrównoległa (elektroda prawa namagnesowana przeciwnie do namagnesowania elektrody lewej, $p_L = -p_R = p$).

Jedną ze znanych konsekwencji zastosowania elektrod magnetycznych w układach kropek kwantowych w reżimie Kondo jest pojawienie się efektywnego pola magnetycznego, zwanego polem wymiany, pomiędzy elektrodami. Pole to powoduje powstanie zależnego od spinu rozszczepienia poziomów energetycznych kropek kwantowych. Jest to związane z różnym sprzężeniem elektronów o danym spinie w obszarze kropek kwantowych ze stanami spinowymi w elektrodach. Rozszczepienie to występuje wyłącznie w przypadku równoległej polaryzacji



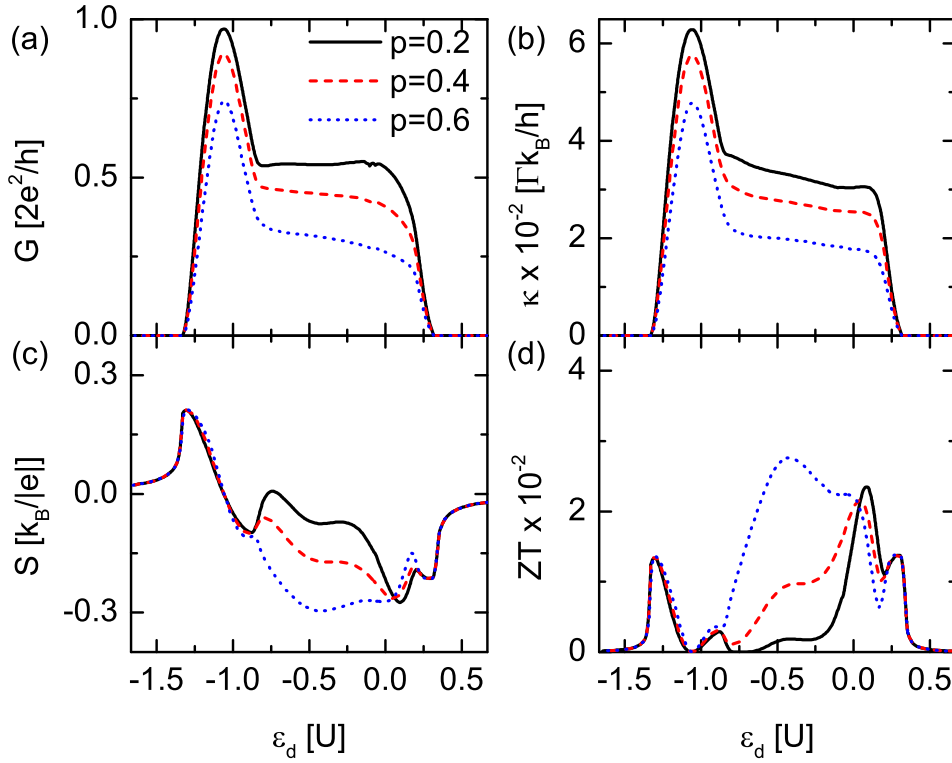
Rysunek 5.7: Współczynniki termoelektryczne w funkcji położenia poziomu ε_d kropek dla wyróżnionych wartości parametru p i konfiguracji równoległej elektrod. Pozostałe parametry: $k_B T = 0.01\Gamma$, $U = 6\Gamma$, $q = 0.99$, $\alpha = 1$, $t = \Gamma$.

elektrod, gdyż w przypadku antyrównoległym wkłady od przeciwnie namagnesowanych elektrod znoszą się.

W przypadku metody bozonów pomocniczych rozszczepienie to pojawia się *explicite* w spinowej zależności mnożników Lagrange’a, tzn. $B_{\text{ex}} \equiv \tilde{\varepsilon}_{\uparrow} - \tilde{\varepsilon}_{\downarrow} = \lambda_{\uparrow}^{(2)} - \lambda_{\downarrow}^{(2)}$. Rys. 5.6 pokazuje zależność pola wymiany, B_{ex} , w funkcji położenia poziomu kropek względem poziomu Fermiego elektrod dla wskazanych wartości parametru polaryzacji p elektrod w przypadku konfiguracji równoległej. W punkcie symetrii elektronowo-dziurowej ($\varepsilon_d = -U/2$) pole wymiany, a co za tym idzie rozszczepienie poziomów kropek, jest równe zero niezależnie od wartości parametru polaryzacji. Wzrost lub spadek energii orbitalu kropek kwantowych powyżej lub poniżej punktu symetrii objawia się wzrostem (wartości bezwzględnej) pola wymiany. Dodatkowo obserwowane jest zwiększenie pola wymiany wraz ze wzrostem wartości parametru p , gdyż zwiększeniu ulega różnica pomiędzy sprzężeniami elektronów o spinie $\uparrow$ i $\downarrow$ z odpowiednimi stanami w elektrodach.

Pole wymiany ma istotny wpływ na przebieg zjawiska Kondo, co znajduje swoje odzwierciedlenie we współczynnikach termoelektrycznych. Największe rozszczepienie poziomów, $\tilde{\varepsilon}_{\uparrow} - \tilde{\varepsilon}_{\downarrow}$, zachodzi dla energii poziomu $\varepsilon_d < -U$ i $\varepsilon_d > 0$ i prowadzi do pojawienia się dodatkowych pików w wykresach konduktancji i konduktancji cieplnej, przedstawionych na rys. 5.7 (a) i (b). Wzrostowi polaryzacji, p , elektrod towarzyszy również przesunięcie pików krzywych konduktancji.

W przypadku współczynnika Seebecka oraz współczynnika efektywności termoelektrycznej, przedstawionych na rys. 5.7 (c) i (d), obecność pola wymiany skutkuje złożoną strukturą krzywych opisujących te współczynniki. Wzrost polaryzacji p prowadzi do znacznego wzrostu maksymalnej wartości współczynnika Seebecka i współczynnika ZT w pobliżu położenia



Rysunek 5.8: Współczynniki termoelektryczne w funkcji położenia poziomu ε_d kropek dla wyróżnionych wartości parametru p i konfiguracji antyrównoległej elektrod. Pozostałe parametry: $k_B T = 0.01\Gamma$, $U = 6\Gamma$, $q = 0.99$, $\alpha = 1$, $t = \Gamma$.

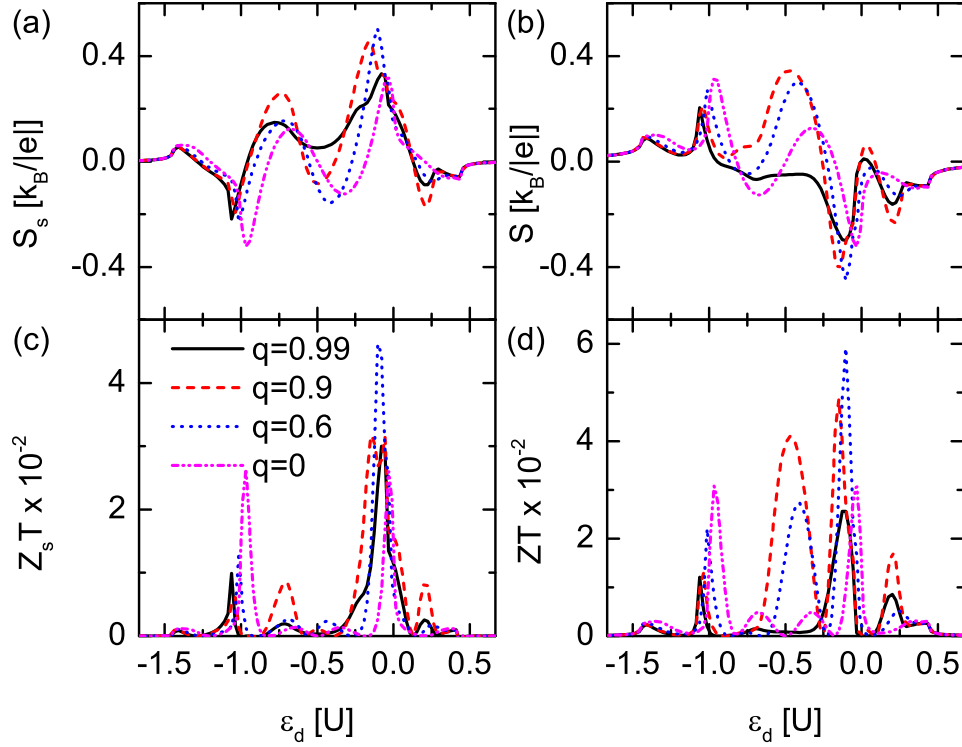
poziomów $\varepsilon_d = -U$. Jest to związane ze zmianą symetrii współczynnika transmisji w obszarze energii rezonansowej.

Dla przypadku antyrównoległego namagnesowania elektrod, $p_L = -p_R = p$, pole wymiany nie wpływa na rozszczepienie poziomów kropki. Z tego względu przebieg parametrów termoelektrycznych w zależności od położenia poziomu kropek przedstawiony na rys. 5.8 nie różni się jakościowo od przebiegu dla elektrod niemagnetycznych. Jediną różnicą jest spadek konduktancji i konduktancji cieplnej, przedstawiony na rys. 5.8 (a) i (b), ze wzrostem wartości parametru polaryzacji p , związany z mniejszą liczbą dostępnych stanów, do których mogą przetunelować elektrony. W przypadku współczynnika Seebecka i ZT , pokazanych na rys. 5.8 (c) i (d), wzrost polaryzacji prowadzi do wzrostu $|S|$ i ZT dla energii $\varepsilon_d \approx -U/2$.

5.2.4 Elektrody magnetyczne: akumulacja spinowa

Uwzględnienie spinowej akumulacji w elektrodach prowadzi do znacznej modyfikacji spinowego i ładunkowego współczynnika Seebecka oraz współczynników efektywności termoelektrycznej. W szczególności silny wpływ na charakterystyki termoelektryczne układu mają parametry q i α , które, jak pokazano w poprzednich podrozdziałach, są kluczowe dla zajścia efektów interferencyjnych w rozpatrywanym układzie.

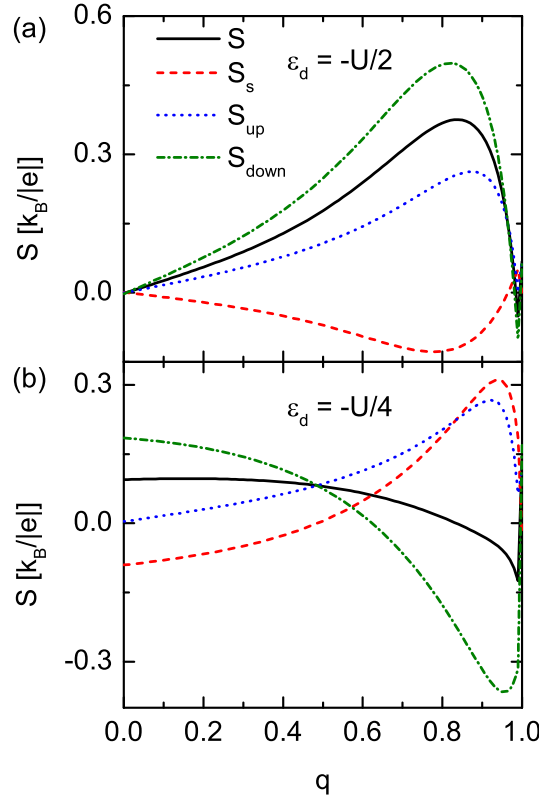
W przypadku $q = 0$, współczynniki Seebecka, przedstawione na rys. 5.9(a) i (b), różnią się znakiem, ale zachowanie ich wartości bezwzględnych jest zarówno jakościowo, jak i ilościowo, zbliżone. W punkcie symetrii, $\varepsilon_d = -U/2$, obydwie termosyły zmieniają znak na przeciwny,



Rysunek 5.9: Spinowe oraz ładunkowe współczynniki Seebecka oraz odpowiednie współczynniki efektywności termoelektrycznej w funkcji położenia poziomów ε_d kropek i wyróżnionych wartości parametru q . Pozostałe parametry: $k_B T = 0.01\Gamma$, $p = 0.4$, $\alpha = 1$, $t = \Gamma$, $U = 6\Gamma$.

ze względu na kompensację ich składowych spinowych, $S_\uparrow$ i $S_\downarrow$. Wzrost wartości parametru q prowadzi do wzrostu asymetrii współczynników transmisji, co skutkuje odmiennym zachowaniem się termosil S_s i S . Zgodnie z wcześniejszą dyskusją, dla przypadku $p \neq 0$, składowe $\uparrow$ i $\downarrow$ współczynników termoelektrycznych wykazują różne zachowanie, które jest dodatkowo wzmacniane przez wzrost wartości parametru q , który niszczy orbitalną symetrię. Z tego względu ładunkowa termosila ulega większym zmianom wraz ze wzrostem wartości q niż spinowy współczynnik Seebecka. Dla wartości $q > 0.9$ widoczny jest spadek maksymalnej wartości obydwu współczynników. W zakresie energii $\varepsilon_d \in (-3U/4, -U/2)$ ładunkowy współczynnik Seebecka, podobnie jak konduktancja, przyjmuje w przybliżeniu stałą wartość. Z kolei, spinowy współczynnik Seebecka, przyjmuje lokalne minimum w pobliżu punktu symetrii $\varepsilon_d \approx -U/2$. Zachowanie tych współczynników odzwierciedla się również w zależności współczynników efektywności termoelektrycznej, przedstawionych na rys. 5.9 (c) i (d), od położenia poziomów kropek. Wartości maksymalne tych współczynników, dla energii $\varepsilon_d \approx -\tilde{t}$, rosną ze wzrostem wartości q aż do wartości $q = 0.6$, powyżej której następuje spadek maksymalnych wartości tych współczynników. Dla energii $\varepsilon_d \approx -U/2$ ładunkowy współczynnik ZT przyjmuje większą wartość dla $q = 0.9$ niż dla $q = 0.6$, a następnie ulega gwałtownemu spadkowi wraz z dalszym wzrostem q . Spinowy odpowiednik efektywności termoelektrycznej przyjmuje dla tej energii poziomów kropek dużo mniejsze wartości i praktycznie nie zależy od wartości parametru q .

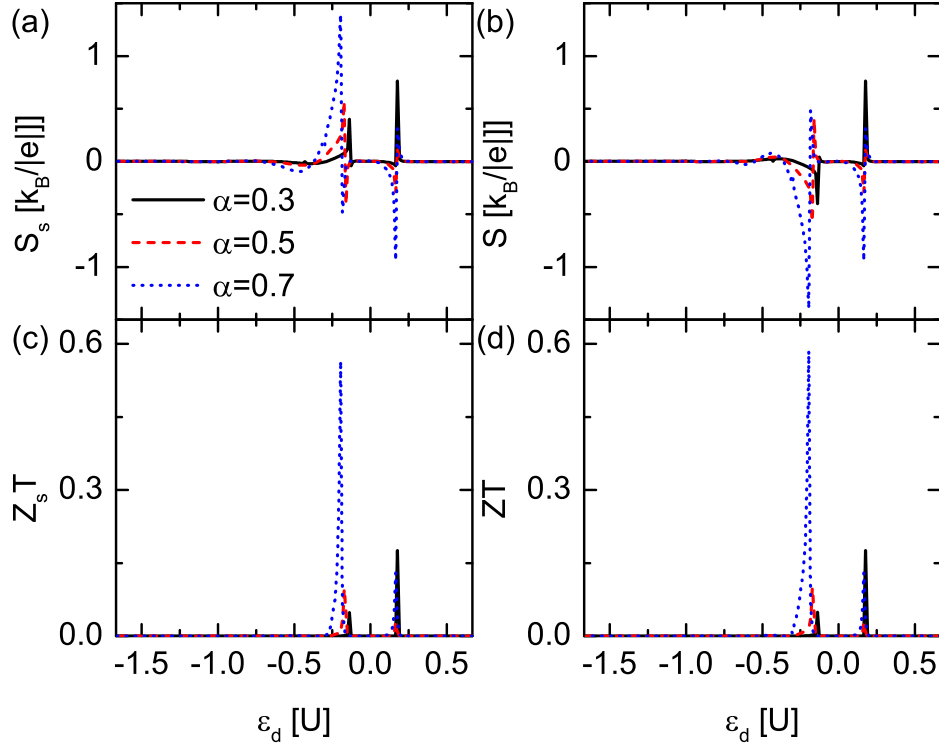
Rozpatrując zależność współczynników Seebecka i ich spinowych składowych w funkcji parametru q , przedstawioną dla wybranych wartości położenia poziomów ε_d kropek na rys. 5.10 (a) i (b), widoczny jest duży wpływ parametru q na te współczynniki. W przypadku $q = 0$, zgodnie



Rysunek 5.10: Współczynniki Seebecka w funkcji parametru q dla wskazanych wartości energii poziomu ε_d kropek. Pozostałe parametry: $k_B T = 0.01\Gamma$, $p = 0.4$, $\alpha = 1$, $t = \Gamma$, $U = 6\Gamma$.

z wcześniejszą dyskusją, symetria elektronowo-dziurowa jest zachowana, w związku z czym znika pole wymiany, skutkując jednocześnie zanikiem i zmianą znaku współczynników Seebecka. Wzrost wartości parametru q prowadzi do wzrostu maksymalnej wartości współczynników Seebecka i ich spinowych składowych aż do wartości $q \approx 0.9$, powyżej której obserwowany jest gwałtowny zanik współczynników Seebecka, związany z rozprężeniem stanu antywiążącego od elektrod. Ponadto, dla $q > 0$, składowe $S_\uparrow$ i $S_\downarrow$ mają ten sam znak, co prowadzi do znacznego wzrostu ładunkowego współczynnika Seebecka, który jest widoczny na rys. 5.9 (b) i (d), oraz ujemnej wartości spinowego współczynnika Seebecka. Dla poziomu kropek $\varepsilon_d = -U/4$ i dla $q = 0$, współczynniki Seebecka są niezerowe, z wyjątkiem składowej $S_\uparrow$. Wzrost wartości parametru q prowadzi do wzrostu wartości składowej $S_\uparrow$ i jednoczesnego spadku wartości $S_\downarrow$. Dla $q \approx 0.5$ obydwie składowe przyjmują równe wartości, a następnie ich znaki zmieniają się na przeciwne i widoczny jest wzrost (co do wartości bezwzględnej) obydwu współczynników aż do wartości $q \approx 1$, dla której obydwa współczynniki osiągają maksymalną wartość.

W przypadku ustalonej wartości $q = 1$ oraz zmian wartości parametru α współczynniki Seebecka, przedstawione na rys. 5.11 (a) i (b), wykazują silny wzrost ze wzrostem α . Jest to związane z wyodrębnieniem antyrezonansu Fano, który został opisany dla przypadku $p = 0$ przy okazji dyskusji rys. 5.5. Wzrost wartości α prowadzi do wyostrenia antyrezonansu we współczynniku transmisji, skutkując silnym wzrostem maksymalnych wartości współczynników Seebecka oraz współczynników efektywności termoelektrycznej, przedstawionych na rys. 5.11 (c) i (d).



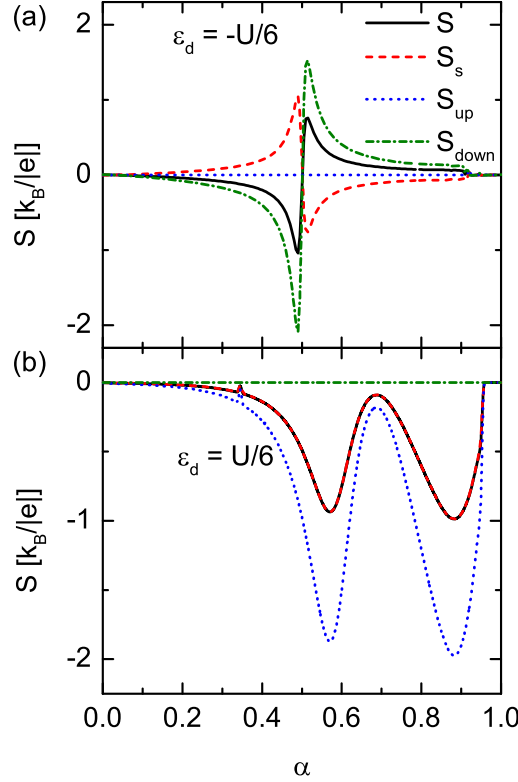
Rysunek 5.11: Spinowe oraz ładunkowe współczynniki Seebecka oraz odpowiednie współczynniki efektywności termoelektrycznej w funkcji położenia poziomu ε_d kropek i wyróżnionych wartości parametru α . Pozostałe parametry: $k_B T = 10^{-4} \Gamma$, $p = 0.4$, $q = 1$, $t = \Gamma$, $U = 6 \Gamma$.

Wpływ zmian wartości parametru α w szerszym zakresie, przedstawiony na rys. 5.12, jest istotny dla energii poziomów kropek odpowiadających energiom stanów antywiążącego i wiążącego. W przypadku pierwszego ze stanów, współczynniki Seebecka przedstawione na rys. 5.12(a) zmieniają znak dla $\alpha \approx 0.5$, z wyjątkiem składowej $S_{\uparrow}$, która jest równa zero dla całego zakresu wartości parametru α . Z kolei, składowa $S_{\downarrow}$ jest równa zero w całym zakresie parametru α dla energii ε_d odpowiadającej stanowi wiążącemu, co pokazano na rys. 5.12(b). W tym przypadku składowa $S_{\uparrow}$ jest ujemna i nie zmienia znaku, a jej wartość bezwzględna przyjmuje wartość minimalną dla $\alpha \approx 0.7$. Spinowa i ładunkowa termosila w tym przypadku wykazują takie samo zachowanie, zgodne z zachowaniem składowej $S_{\uparrow}$.

Temperaturowa zależność spinowych współczynników termoelektrycznych

Oprócz zależności współczynnika Seebecka zarówno ładunkowego jak i spinowego od napięcia bramkującego oraz parametrów q oraz α , ważnym punktem w analizie efektów termoelektrycznych jest zbadanie zależności tych współczynników od temperatury. Rysunek 5.13 pokazuje zależności współczynnika Seebecka ładunkowego S i spinowego S_s oraz odpowiednich współczynników efektywności termoelektrycznej ZT i $Z_s T$ od temperatury dla trzech wartości polaryzacji elektrod. Rozpatrywany jest przypadek równoległego namagnesowania elektrod.

Z rys. 5.13(a) wynika znikomy wpływ polaryzacji elektrod poniżej temperatury Kondo na ładunkowy współczynnik Seebecka. Największa zmiana zachodzi w obszarze wyższych temperatur ($T \geq T_K$), dla którego można zauważyć przesunięcie minimum termosily w stronę niższych

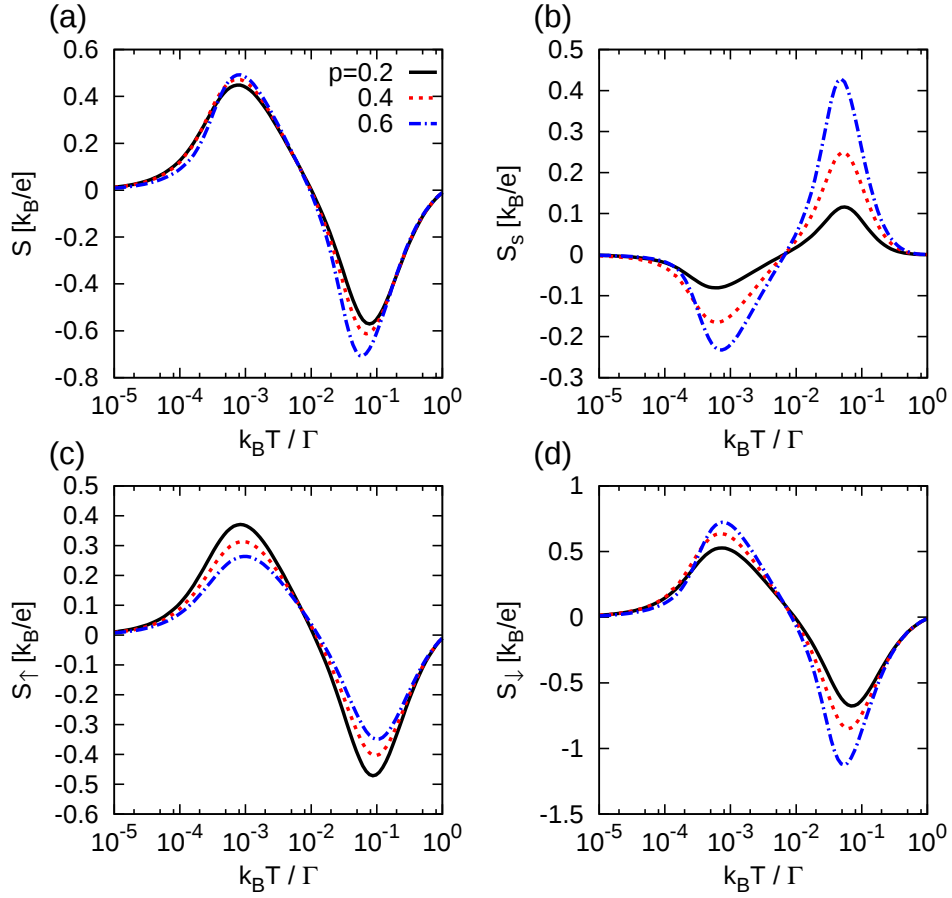


Rysunek 5.12: Współczynniki Seebecka w funkcji parametru α dla wskazanych wartości energii poziomu ε_d kropek. Pozostałe parametry: $k_B T = 10^{-4} \Gamma$, $p = 0.4$, $q = 1$, $t = \Gamma$, $U = 6 \Gamma$.

temperatur ze wzrostem wartości parametru polaryzacji p elektrod. Następnie, podobnie jak dla przypadku $q = 0.99$ i dla elektrod niemagnetycznych rozpatrywanego w poprzednich podrozdziałach, termosila zmienia znak w pobliżu temperatury $k_B T = 0.01 \Gamma$. Poniżej tej temperatury współczynnik Seebecka osiąga maksimum w temperaturze $k_B T \approx 0.001 \Gamma$. Wzrost polaryzacji magnetycznej elektrod nieznacznie zwiększa tę maksymalną wartość termosily. Powyżej temperatury $k_B T = 0.01 \Gamma$, termosila ulega zmniejszeniu i osiąga minimum. Wzrost polaryzacji magnetycznej ma w tym przypadku nieznacznie większy wpływ na minimalną wartość termosily, niż w przypadku temperatur poniżej temperatury Kondo. Wraz z dalszym wzrostem temperatury ładunkowy współczynnik Seebecka zanika.

Rysunek 5.13(b) przedstawia spinowy współczynnik Seebecka. Wpływ polaryzacji p na wartość spinowej termosily jest znaczący, zarówno poniżej jak i powyżej temperatury Kondo. Zgodnie z definicją, spinowy współczynnik Seebecka ma znak przeciwny do jego ładunkowego odpowiednika. Dla temperatur powyżej $k_B T \approx 0.01$ spinowa termosila osiąga maksimum, które wzrasta wraz ze wzrostem polaryzacji magnetycznej elektrod. Odpowiednio mniejszy wzrost wartości bezwzględnej spinowego współczynnika Seebecka wraz ze wzrostem polaryzacji jest obserwowany poniżej temperatury Kondo.

Powyższe zależności można wytłumaczyć rozważając składowe spinowe współczynniki Seebecka: $S_\uparrow$ i $S_\downarrow$, przedstawione na rys. 5.13 (c) i (d), odpowiednio. Ze wzrostem polaryzacji p wzrasta składowa termosila elektronów o spinie $\downarrow$, a maleje składowa dla elektronów o spinie $\uparrow$. Dla większych wartości parametru p wartość bezwzględna składowej $S_\downarrow$ jest większa od składowej $S_\uparrow$, co powoduje dodatnią wartość termosily spinowej, a ujemną termosily



Rysunek 5.13: Współczynniki Seebecka: ładunkowy (a), spinowy (b) oraz ich składowe spinowe: $S_{\uparrow}$ (c) i $S_{\downarrow}$ (d), w zależności od temperatury $k_B T$ (w skali logarytmicznej) dla wskazanych wartości parametru polaryzacji magnetycznej p elektrod. Pozostałe parametry: $q = 0.99$, $t = \Gamma$, $\varepsilon_d = -U/2$.

ładunkowej dla temperatur $k_B T \approx 0.01\Gamma$, podczas gdy przeciwna prawidłowość zachodzi dla niższych temperatur. Dla temperatur powyżej temperatury Kondo, na znak i wartość termosily największy wpływ ma ilość wolnych stanów wokół poziomu Fermiego elektrod. Jako że w wyrażeniu na składową $\sigma = \uparrow, \downarrow$ termosily, współczynnik Onsagera $L_{1\sigma}$ (który odpowiada m.in. za znak termosily) można rozdzielić na sumę całek, z których jedna jest wyznaczana w granicach poniżej potencjału elektrochemicznego elektrod, a druga powyżej, można wyjaśnić ujemny znak składowych spinowych współczynników Seebecka faktem, że całka w granicy wyznaczona w granicy powyżej potencjału elektrochemicznego elektrod jest większa niż całka wyznaczona poniżej tego potencjału.

5.3 Podsumowanie

Podsumowując, w rozdziale pokazano wpływ efektów interferencyjnych, związanych z istnieniem stanów: wiążącego i antywiążącego, na transport termoelektryczny. Efekty te w połączeniu z fizyką zjawiska Kondo zachodzącego w stosunkowo niskich temperaturach prowadzą do

zwiększenia odpowiedzi termoelektrycznej w postaci większej wartości współczynnika Seebecka S oraz współczynnika efektywności termoelektrycznej ZT .

Rozdział 6

Wpływ oddziaływania spinowo-orbitalnego Rashby na transport termoelektryczny przez dwie silnie skorelowane kropki kwantowe

W niniejszym rozdziale zaprezentowane zostaną wyniki dotyczące transportu termoelektrycznego w reżimie Kondo przez układ dwóch kropek kwantowych umieszczonych w pierścieniu Aharonova-Bohma z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym typu Rashby. Dokładny opis modelu badanego układu został przedstawiony w rozdziale 2 niniejszej rozprawy. Do analizy wykorzystano metodę bozonów pomocniczych, która dla układu dwóch kropek kwantowych została omówiona w rozdziale poprzednim.

6.1 Opis teoretyczny

Amplitudy tunelowania elektronów pomiędzy i -tą (dla $i = 1, 2$) kropką a elektrodą $\beta = L, R$ przyjmują obecnie postać:

$$\tilde{V}'_{\mathbf{k}\beta\sigma i} = V_{\mathbf{k}\beta\sigma i} \exp(\hat{\beta}\hat{\alpha}i\phi_{\sigma}/4)z_{i\sigma}, \quad (6.1)$$

gdzie $\phi_{\sigma} = \phi + \hat{\sigma}\phi_R$ jest sumą faz: Aharonova-Bohma, ϕ , oraz fazy pochodzącej od spinowo-orbitalnego sprzężenia typu Rashby (w skrócie: fazy Rashby), ϕ_R . W powyższych wyrażeniach $\hat{\sigma} = \pm 1$ (dla $\sigma = \uparrow, \downarrow$), $\hat{\beta} = \delta_{\beta L} - \delta_{\beta R}$ oraz $\hat{\alpha} = \delta_{i2} - \delta_{i1}$, gdzie δ_{xy} jest deltą Kroneckera. Ponadto, $z_{i\sigma}$ jest operatorem projekcji, wprowadzonym do hamiltonianu w wyniku transformacji ogólnego hamiltonianu (3.1) przy pomocy metody bozonów pomocniczych, w sposób opisany w poprzednim rozdziale.

W rozpatrywanym przypadku macierz sprzężenia kropki i elektrod przyjmuje następującą postać:

$$\tilde{\Gamma}_{\beta\sigma} = \begin{pmatrix} z_{1\sigma}^2 & qz_1z_2e^{-\hat{\beta}i\frac{\phi_\sigma}{2}} \\ qz_1z_2e^{\hat{\beta}i\frac{\phi_\sigma}{2}} & z_{2\sigma}^2 \end{pmatrix} \Gamma_\beta, \quad (6.2)$$

gdzie parametry zawarte w powyższej macierzy zostały opisane w rozdziale poprzednim oraz rozdziale 3.

Efektywne szerokości stanów: wiążącego (b) i antywiążącego (a), mogą zostać wyrażone następującym wzorem:

$$\Gamma_{b(a),\sigma} = \tilde{\Gamma}(1 \pm q \cos \phi_\sigma), \quad (6.3)$$

gdzie znak „+” dotyczy stanu wiążącego. W przypadku $q = 1$ oraz $\phi_\sigma = n\pi$, gdzie $n = 0, 1, 2, \dots$, jeden ze stanów ulega rozprzęgnięciu od elektrod, co prowadzi do zniszczenia zjawiska Kondo w rozpatrywanym układzie. Z kolei dla $\phi_\sigma = (n - 1/2)\pi$ poszerzenie stanów staje się niezależne od wartości parametru q .

6.2 Wyniki numeryczne

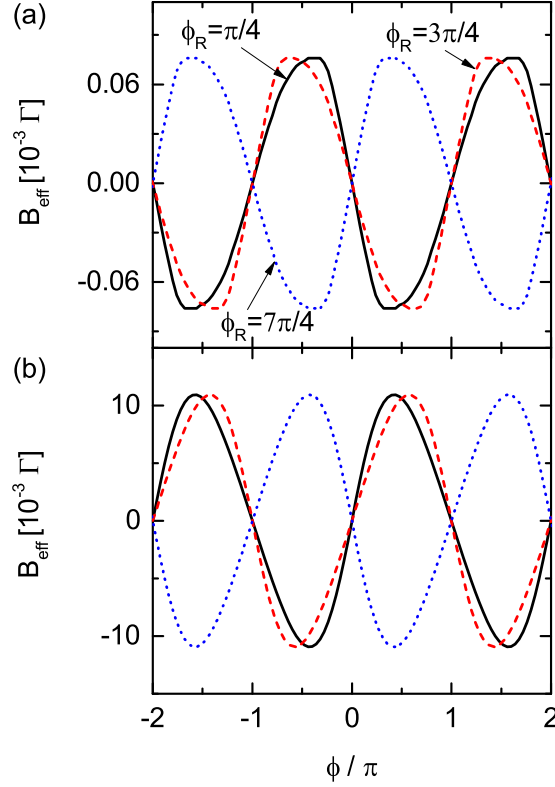
W niniejszej części została przedstawiona analiza efektów termoelektrycznych dla opisanego powyższej modelu. Przyjęto założenie, że kropki są sprzężone z elektrodami niemagnetycznymi, $p = 0$. Ponadto, obliczenia przeprowadzono dla $q = 0.95$ i $t = 1\Gamma$, co prowadzi do wyodrębnienia stanów: wiążącego i antywiążącego o różnym poszerzeniu. Zaprezentowano zależności współczynników transportowych dla wybranych położeń poziomów kropek: $\varepsilon_d = -U/2$ oraz $\varepsilon_d = -U/4$, gdzie U jest parametrem korelacji kulombowskich, przyjętym za identyczny w obydwu kropkach.

6.2.1 Rozszczepienie poziomów kropek

W poprzednich rozdziałach opisano przypadki transportu przez kropkę lub układ kropek połączonych z dwiema elektrodami ferromagnetycznymi. Pokazano, że elektrody te, w reżimie Kondo, są źródłem pola wymiany, które powoduje zniesienie degeneracji spinowej poziomów kropek. W przypadku elektrod niemagnetycznych, ale obecności fazy Aharonova-Bohma oraz fazy pochodzącej od spinowo-orbitalnego sprzężenia typu Rashby, pojawia się również rozszczepienie poziomów kropek związane z tymi fazami. Efektywne rozszczepienie, zdefiniowane wzorem:

$$B_{eff} \equiv \tilde{\varepsilon}_\uparrow - \tilde{\varepsilon}_\downarrow = \lambda_\uparrow^{(2)} - \lambda_\downarrow^{(2)}, \quad (6.4)$$

przedstawione na rys. 6.1, wykazuje periodyczne oscylacje wraz ze zmianą wartości fazy Aharonova-Bohma, ϕ . W przypadku $\varepsilon_d = -U/2$, przedstawionym na rys. 6.1(a), pole efektywne jest niezerowe, ze względu na skończoną wartość parametru q . Zgodnie z dyskusją przeprowadzoną w poprzednim rozdziale, ta skończona wartość parametru q prowadzi do różnej szerokości pików współczynnika transmisji odpowiadających stanowi wiążącemu i antywiązącemu. Porównując pola efektywne wyznaczone dla $\varepsilon_d = -U/2$ oraz $\varepsilon_d = -U/4$ można zauważyć, że w drugim przypadku, przedstawionym na rys. 6.1(b), amplituda tego pola jest 5 rzędów



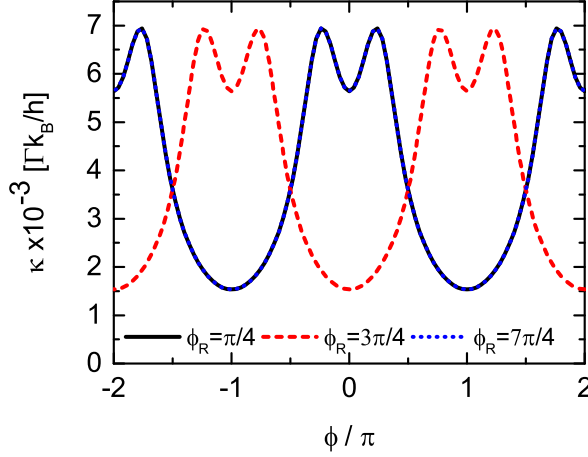
Rysunek 6.1: Efektywne rozszczepienie poziomów kropek w funkcji fazy Aharonova-Bohma dla wyróżnionych wartości fazy Rashby i energii $\varepsilon_d = -U/2$ (a) oraz $\varepsilon_d = -U/4$ (b). Pozostałe parametry: $q = 0.95$, $T = 0.001\Gamma$, $U = 6\Gamma$, $t = \Gamma$.

wielkości większa. Jest to związane z faktem, że w punkcie symetrii elektron-dziura, czyli dla poziomu $\varepsilon_d = -U/2$, degeneracja poziomów jest preferowana przez zjawisko Kondo. W obydwu przypadkach pole zanika dla $\phi = n\pi$, gdzie $n = 0, 1, 2, \dots$, czyli przypadku, w którym jeden ze stanów ulega rozprzęgnięciu. Ponadto, dla ustalonej wartości fazy Rashby, ϕ_R , efektywne pole dla obydwu wartości energii poziomu ε_d kropek jest w przeciwfazie. Dla przypadku $\phi_R = \pi/4$ maksymalne wartości B_{eff} przypadają na $\phi = (2n + 11/25)\pi$, podczas gdy minimalne na $\phi = (2n + 1 + 14/25)\pi$. Z kolei dla $\phi_R = 7\pi/4$ prawdziwa jest zależność odwrotna. Dla $\phi_R = 3\pi/4$ maksymalne i minimalne wartości są przesunięte w stosunku do poprzednich wartości faz ϕ_R i przypadają na $\phi = (2n + 14/25)\pi$ i $\phi = (2n + 11/25)\pi$.

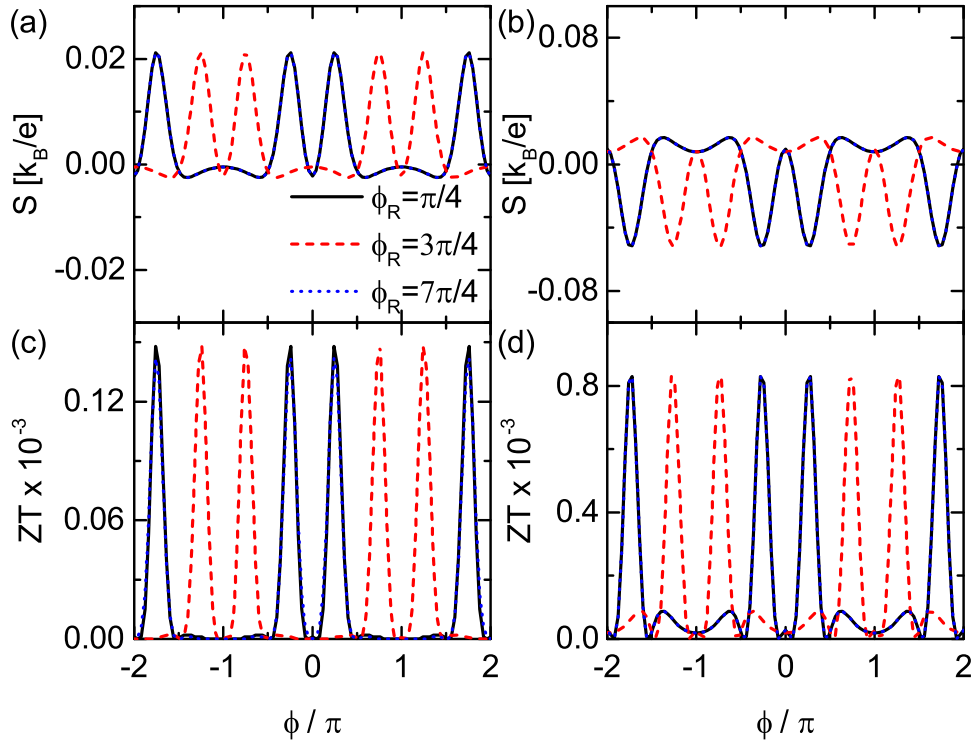
6.2.2 Efekty termoelektryczne

Wkład elektronowy do konduktancji cieplnej, przedstawiony na rys. 6.2, zachowuje się jednakowo dla faz $\phi_R = \pi/4$ oraz $\phi_R = 7\pi/4$. W tych przypadkach krzywe opisujące konduktancję posiadają dwa piki położone symetrycznie względem $\phi = 2n\pi$ ($n = 0, 1, 2, \dots$). W przypadku $\phi = (n + 1)\pi$ konduktancja cieplna przyjmuje wartość minimalną. Przeciwnie zachowanie występuje dla $\phi_R = 3\pi/4$. Konduktancje dla wszystkich wyróżnionych faz ϕ_R przyjmują jednakową wartość dla $\phi = (n - 1/2)\pi$, czyli gdy zależność szerokości poziomu $\tilde{\varepsilon}_{b(a)}$ od parametru q znika a efektywne pole magnetyczne przyjmuje wartość maksymalną.

Na rys. 6.2 (a) i (b) przedstawiono współczynniki Seebecka, przyjmując $\phi_R = \pi/4$ oraz $7\pi/4$. Współczynnik Seebecka przyjmuje największe wartości (co do wartości bezwzględnej) dla

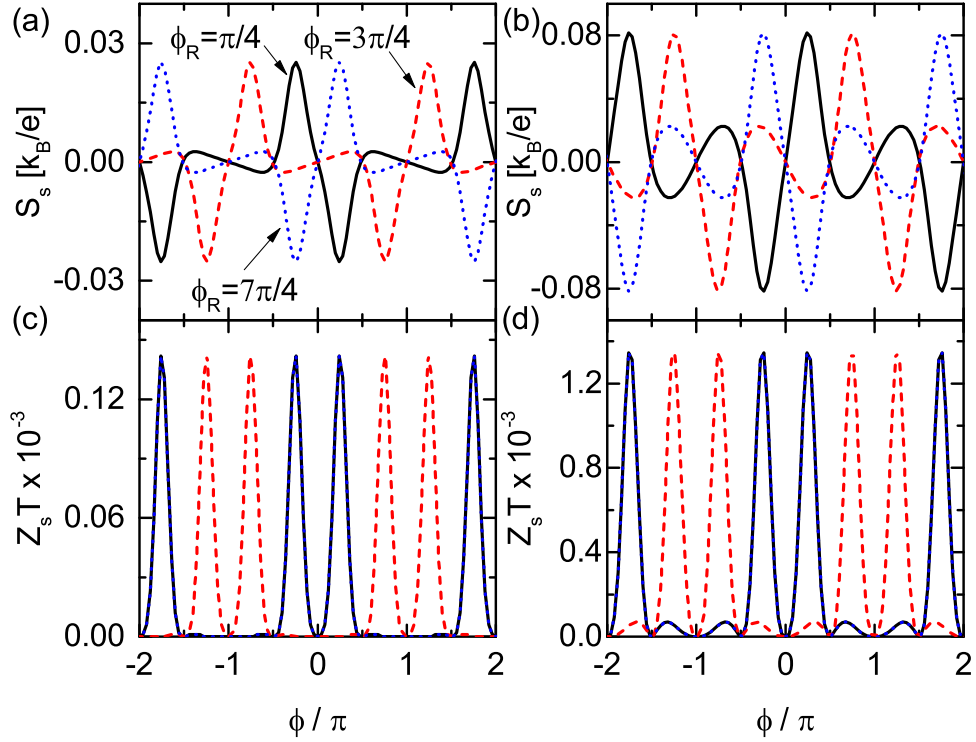


Rysunek 6.2: Konduktancja cieplna w funkcji fazy Aharonova-Bohma i wyróżnionych wartości fazy Rashby. Pozostałe parametry: $q = 0.95$, $T = 0.001\Gamma$, $U = 6\Gamma$, $\varepsilon_d = -U/4$, $t = \Gamma$.



Rysunek 6.3: Współczynniki Seebecka i efektywności termoelektrycznej w funkcji fazy Aharonova-Bohma dla wyróżnionych wartości fazy Rashby i energii $\varepsilon_d = -U/2$ (a), (c) oraz $\varepsilon_d = -U/4$ (b), (d). Pozostałe parametry: $q = 0.95$, $T = 0.001\Gamma$, $U = 6\Gamma$, $t = \Gamma$.

$\phi = (n - 1/2)\pi$, a najmniejsze dla $\phi = n\pi$. Ponadto dla $\phi = 2n\pi$ współczynnik Seebecka znika, ale nie zmienia znaku. Wartości maksymalne współczynnika Seebecka są dodatnie, wskazując na dominujący dziurowy charakter transportu. Z kolei minimalna wartość jest ujemna. Dla $\varepsilon_d = -U/4$ znak współczynnika Seebecka jest przeciwny w stosunku do poprzednio omówionego przypadku, wskazując na silnie elektronowy charakter składowych współczynników $S_\uparrow$ i $S_\downarrow$. Ponadto maksymalna wartość współczynnika jest w tym przypadku większa niż dla $\varepsilon_d = -U/2$. Zachowanie to jest również odzwierciedlone we współczynnikach efektywności termoelektrycznej przedstawionych na rys. 6.2 (b) i (d). Miejsca zerowe i maksima krzywych opisujących te



Rysunek 6.4: Spinowe współczynniki Seebecka i efektywności termoelektrycznej w funkcji fazy Aharonova-Bohma dla wyróżnionych wartości fazy Rashby i energii $\varepsilon_d = -U/2$ (a), (c) oraz $\varepsilon_d = -U/4$ (b), (d). Pozostałe parametry $q = 0.95$, $T = 0.001\Gamma$, $U = 6\Gamma$, $t = \Gamma$.

współczynniki odpowiadają tym samym punktom co w przypadku krzywych współczynników Seebecka. Dodatkowo wartość maksymalna współczynnika ZT jest większa dla $\varepsilon_d = -U/4$.

Zachowanie spinowych współczynników Seebecka, przedstawionych na rys. 6.4 (a) i (c), jest w ogólności odmienne niż w przypadku ich ładunkowych odpowiedników. Jedyne podobieństwo polega na tym, że zarówno S_s , jak i S znikają dla $\phi = n\pi$. Jest to związane z kompensacją prądów nośników o przeciwnych spinach, wynikające z faktu zaniku zależności szerokości stanów molekularnych układu kropek od fazy Rashby oraz zaniku efektywnego rozszczepienia. Zniesienie degeneracji jest w tym przypadku konieczne do zajścia spinowego efektu termoelektrycznego. Dla $\phi_R = \pi/4$ oraz $\phi_R = 7\pi/4$ współczynniki Seebecka są w przeciwfazie, podczas gdy dla $\phi_R = 3\pi/4$ odpowiedni współczynnik jest przesunięty w fazie względem współczynnika Seebecka dla $\phi_R = 7\pi/4$ o π . Dla energii $\varepsilon_d = -U/4$ maksymalna wartość $|S_s|$ jest większa niż w przypadku $\varepsilon_d = -U/2$.

Spinowe współczynniki efektywności termoelektrycznej, przedstawione na rys. 6.4 (b) i (d), jakościowo zachowują się podobnie do ich ładunkowych odpowiedników, przy czym wartość maksymalna współczynnika $Z_s T$ jest większa dla $\varepsilon_d = -U/4$ niż w przypadku współczynnika ZT dla tej samej wartości energii poziomu kropek.

6.3 Podsumowanie

Podsumowując, niniejszy rozdział dotyczył transportu termoelektrycznego przez dwie silnie skorelowane kropki kwantowe umieszczone w pierścieniu Aharonova-Bohma, w którego ramionach uwzględniono oddziaływanie spinowo-orbitalne typu Rashby. Oddziaływanie to powoduje, m. in., pojawienie się efektywnego pola magnetycznego, prowadzącego do zniesienia degeneracji spinowej poziomów kropek i w konsekwencji do rozszczepienia. Z kolei rozszczepienie to prowadzi do wystąpienia spinowego efektu termoelektrycznego. Pokazano, że zjawiska termoelektryczne mogą być łatwo kontrolowane przez zmianę odpowiednich faz. W szczególności, w przypadku $\varepsilon_d = -U/4$ możliwe jest uzyskanie zależności $Z_s T > ZT$.

Część III

Układ hybrydowy słabo sprzężonej kropki kwantowej

Rozdział 7

Transport fal spinowych przez kropkę kwantową

W ostatnich latach dużym zainteresowaniem cieszą się badania nad wykorzystaniem kwantów fal spinowych zwanych magnonami w zastosowaniach elektronicznych. W rozdziale 1 niniejszej rozprawy wskazano największe zalety i możliwości wynikające z wykorzystania magnonów w elektronice. Jednym z najczęściej wykorzystywanych materiałów w magnonice jest YIG, czyli tlenek itrowo-żelazowy o strukturze granatu ($\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$). Związek ten cieszy się tak dużym zainteresowaniem ze względu na niewielki współczynnik tłumienia fal spinowych ($\sim 10^{-4}$), co pociąga za sobą możliwość propagacji informacji w postaci prądu magnonów na makroskopowe odległości.

W niniejszym rozdziale przedstawiono analizę transportu kwantów fal spinowych przez układ kropki kwantowej połączonej z dwiema elektrodami metalicznymi (niemagnetycznymi lub ferromagnetycznymi) (M) oraz dwiema wykonanymi z izolatora magnetycznego (MI). W dalszych rozważaniach pierwsze będą traktowane jako rezerwuary elektronów, a drugie jako rezerwuary magnonów.

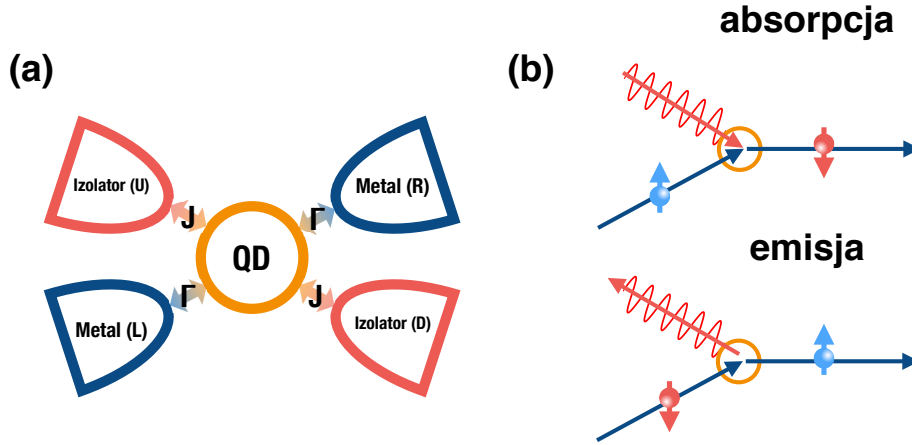
7.1 Opis teoretyczny

7.1.1 Model

Badany układ został przedstawiony schematycznie na rys. 7.1(a). Układ składa się z jednopoziomowej kropki kwantowej oraz, w ogólnym przypadku, czterech elektrod. Dwie z elektrod traktowane są jako źródło elektronów, a pozostałe dwie jako źródło magnonów. Ogólny hamiltonian opisujący badany układ można zapisać następująco:

$$H = H_e + H_{qd} + H_{t-e} + H_m + H_{t-m}, \quad (7.1)$$

gdzie człony H_e , H_{qd} oraz H_{t-e} opisują odpowiednio: elektrody metaliczne, kropkę kwantową oraz tunelowanie pomiędzy kropką a elektrodami. Hamiltonian kropki kwantowej z oddziaływaniem kulombowskim U oraz hamiltonian opisujący elektrody metaliczne, a także tunelowanie elektronów pomiędzy kropką a elektrodami metalicznymi zostały omówione w rozdziale 2, więc



Rysunek 7.1: (a) Schemat przedstawiający rozpatrywany układ kropki kwantowej połączonej, w ogólnym przypadku, z dwiema elektrodami metalicznymi (L i R) i dwiema wykonanymi z izolatora magnetycznego (U i D). Symbole Γ oraz J oznaczają sprzężenie odpowiednich elektrod z kropką. (b) Podstawowe procesy absorpcji i emisji magnonu zachodzące w rozpatrywanym układzie.

w tym rozdziale uwaga zostanie poświęcona wyłącznie rozszerzeniu modelu wynikającemu z dołączenia izolatorów magnetycznych. Badany układ znajduje się w zewnętrznym polu magnetycznym, które powoduje rozszczepienie Zeemana poziomów kropki kwantowej: $\varepsilon_\sigma = \varepsilon_d \pm g\mu_B B$. Rozszerzenie modelu o układ magnonów zawiera się w członach H_m i H_{t-m} , które opisują odpowiednio: magnetyczne elektrody dielektryczne oraz tunelowanie magnonów pomiędzy elektrodami a kropką. Ferromagnetyczny dielektryk można opisać modelem Heisenberga:

$$H_m = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, i, \delta} J_{ex}^\alpha \mathbf{S}_{\alpha i} \mathbf{S}_{\alpha i+\delta} + g_m^\alpha \mu_B B \sum_{\alpha, i} S_{\alpha, i}^z, \quad (7.2)$$

gdzie suma przebiega po najbliższych sąsiadach o spinie $\mathbf{S}_{i(j)}$, g_m^α jest czynnikiem Landégo odpowiedniego rezerwuaru magnonowego α , a B to zewnętrzne pole magnetyczne. W przypadku połączenia elektrody wykonanej z izolatora magnetycznego do kropki kwantowej, kontakt taki można opisać również oddziaływaniem wymiennym postaci:

$$H_{t-m} = \sum_{\alpha, i} j_{ex}^{\alpha i} \mathbf{S}_{\alpha i} \cdot \mathbf{s}, \quad (7.3)$$

gdzie $\mathbf{s}$ jest wektorem spinu kropki kwantowej. W celu dalszej analizy, dokonana zostaje transformacja Holsteina-Primakoffa. Transformacja ta polega na przekształceniu operatorów spinowych do operatorów w reprezentacji drugiej kwantyzacji opisujących kreację i anihilację magnonów. Transformacja i jej zastosowanie w badanym modelu została dokładnie przedstawiona w dodatku A.3, a poniżej zaprezentowano wyniki końcowe.

Transformacja hamiltonianu (7.2) prowadzi do następującej postaci:

$$H_m = \sum_{\mathbf{q}\alpha} \hbar \omega_{\mathbf{q}\alpha} a_{\mathbf{q}\alpha}^\dagger a_{\mathbf{q}\alpha}, \quad (7.4)$$

co należy rozumieć jako gaz swobodnych magnonów. Transformacja hamiltonianu (7.3) opisującego tunelowanie magnonów prowadzi do postaci:

$$H_{t-m} = \sum_{\mathbf{q}\alpha} j_{\mathbf{q}\alpha} a_{\mathbf{q}\alpha}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + \text{H.c.} . \quad (7.5)$$

Procesy opisane tym hamiltonianem zostały schematycznie przedstawione na rys. 7.1(b). Absorpcja magnonu na kropce następuje, gdy znajdzie się na niej elektron o spinie $\uparrow$. W wyniku absorpcji magnonu, spin tego elektronu ulega obróceniu. W przypadku, gdy na kropkę przeskoczy elektron o spinie $\downarrow$, magnon zostaje wyemitowany, a spin elektronu również ulega obróceniu.

7.1.2 Metoda obliczeniowa

Kropka kwantowa w ogólnym przypadku może znaleźć się w jednym ze stanów: pustym ($|0\rangle$), pojedynczo obsadzonym elektronem o spinie σ ($|\sigma\rangle$) lub podwójnie obsadzonym $2\rangle$. Każdy ze stanów można opisać prawdopodobieństwem P_i , gdzie $i = 0, \sigma, 2$. Zakładając przybliżenie Markowa, równanie master można zapisać w następującej postaci:

$$\dot{P}_i = \sum_j (W_{ji} P_j - W_{ij} P_i) , \quad (7.6)$$

gdzie

$$W_{ij} = 2\pi \sum_{ji} |\langle j|H|i\rangle|^2 W_i \delta(E_i - E_j) \quad (7.7)$$

jest elementem macierzy przejścia, wyznaczonym ze złotej reguły Fermiego, pomiędzy stanem początkowym $|i\rangle$ o energii E_i a stanem końcowym $|j\rangle$ o energii E_j oraz $\dot{P}_i \equiv dP_i/dt$.

Układ równań (7.6) można zapisać również w postaci macierzowej:

$$\dot{\mathbf{P}} = \mathbf{W}\mathbf{P} . \quad (7.8)$$

W dalszych rozważaniach przyjęto założenie o stacjonarności prawdopodobieństw ($\dot{P}_i = 0$ dla $i = 0, \sigma, 2$), co redukuje powyższe równanie różniczkowe do następującego równania algebraicznego:

$$\mathbf{0} = \mathbf{W}\mathbf{P} , \quad (7.9)$$

gdzie $\mathbf{0}$ jest jednokolumnową macierzą, której elementami są zera. W związku z zachowaniem prawdopodobieństwa na rozwiązanie powyższego równania nałożony jest dodatkowy warunek:

$$\sum_i P_i = 1 . \quad (7.10)$$

Szczegółowa postać równania (7.9) zostanie przedstawiona w odpowiednim podrozdziale dotyczącym rozpatrywanego przypadku. W ogólnym przypadku, w celu wyznaczenia elementów macierzy przejścia $\mathbf{W}$ przyjęte zostanie przybliżenie szerokiego pasma w elektrodach zarówno metalicznych jak i dielektrycznych, co oznacza, że sprzężenie kropki z rezerwuarami elektronów i

magnonów jest niezależne od energii. Współczynniki sprzężeń, podlegające powyżej wspomnianemu przybliżeniu, można sparametryzować następująco:

$$\Gamma_{\beta\sigma} = 2\pi|V_{k\beta\sigma}|^2\rho_{\beta\sigma} = (1 \pm p_\beta)\Gamma_\beta, \quad (7.11)$$

$$J_\alpha = 2\pi|j_{q\alpha}|^2\rho_\alpha, \quad (7.12)$$

gdzie $\rho_{\beta\sigma(\alpha)}$ jest gęstością stanów danej elektrody, a p_β opisuje polaryzację magnetyczną metalicznej elektrody β .

W wyprowadzeniu odpowiednich elementów macierzy $\mathbf{W}$ pojawiają się wartości średnie $\langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma} \rangle \equiv f_{\beta\sigma}^+$ oraz $\langle a_{\mathbf{q}\alpha}^\dagger a_{\mathbf{q}\alpha} \rangle \equiv n_\alpha^+$. Funkcje $f_{\beta\sigma}^{(+)}$ to funkcja rozkładu Fermiego-Diraca dla elektronów (dziur), a $n_\alpha^{(+)}$ to funkcja Bosego-Einsteina. Funkcje te, a także funkcje pomocnicze, są zdefiniowane następująco:

$$\begin{aligned} f_{\beta\sigma}^+(\varepsilon) &= \frac{1}{\exp(\frac{\varepsilon - \mu_{\beta\sigma}}{k_B T_\beta}) + 1} = 1 - f_{\beta\sigma}^-(\varepsilon), \\ n_\alpha^+(\epsilon) &= \frac{1}{\exp(\frac{\epsilon}{k_B T_\alpha}) - 1} = n_\alpha^-(\epsilon) - 1. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Odpowiednie temperatury T_β , T_α oraz potencjały elektrochemiczne $\mu_{\beta\sigma}$ zostaną omówione w poniższym podrozdziale.

7.1.3 Prądy płynące przez kropkę

Przepływ elektronów lub magnonów przez kropkę kwantową jest wywołany, w rozpatrywanym układzie, różnicą temperatur pomiędzy elektrodami lub napięciem transportowym przyłożonym pomiędzy elektrodami metalicznymi. Siły wywołujące przepływ odpowiednich prądów zostały zdefiniowane następująco:

$$\Delta T_{\text{el}} = T_L - T_R, \quad (7.14)$$

$$\Delta T_{\text{mag}} = T_U - T_D, \quad (7.15)$$

$$\Delta\mu = \mu_L - \mu_R, \quad (7.16)$$

$$\Delta\mu_s = \mu_{sL} - \mu_{sR}, \quad (7.17)$$

gdzie μ_s jest akumulacją spinową, która może pojawić się w metalicznych elektrodach w wyniku długiego czasu relaksacji spinowej. W dalszych rozważaniach, jednakże, czynnik ten nie będzie brany pod uwagę. Temperatury oraz potencjały elektrochemiczne poszczególnych elektrod, znajdujące się w powyższych wyrażeniach, zdefiniowane są następująco:

$$T_\beta = T_\beta^0 \pm \Delta T_{\text{el}}/2, \quad (7.18)$$

$$\mu_{\beta\sigma} = \mu_\beta^0 \pm \Delta\mu/2 + \hat{\sigma}\Delta\mu_s/2, \quad (7.19)$$

$$T_\alpha = T_\alpha^0 \pm \Delta T_{\text{mag}}/2, \quad (7.20)$$

gdzie indeks górny „0” oznacza równowagową temperaturę (lub poziom Fermiego) danego rezerwuaru β , w przypadku elektrod metalicznych, α , w przypadku elektrod wykonanych z izolatora magnetycznego.

Prąd ładunkowy i spinowy

W ogólnym przypadku przedstawionym na rys. 7.1 w układzie może płynąć zarówno prąd spinowy jak i ładunkowy. Całkowity prąd ładunkowy opisany jest wyrażeniem:

$$e \frac{d\langle N \rangle}{dt} = \frac{e}{\hbar} (\dot{P}_\uparrow + \dot{P}_\downarrow) = I_c^L + I_c^R, \quad (7.21)$$

gdzie $I_c^\beta = I_\uparrow^\beta + I_\downarrow^\beta$ jest prądem ładunkowym przepływającym przez złącze β . Prąd elektronów o spinie σ , $I_\sigma^\beta = I_\sigma^{\beta(1)} + I_\sigma^{\beta(2)}$, został zapisany jako suma dwóch członów, z których pierwszy jest rozważany w przypadku obsadzenia kropki kwantowej wyłącznie jednym elektronem o spinie σ ($U \rightarrow \infty$) a obydwa, gdy dozwolone jest obsadzenie kropki dwoma elektronami o przeciwnych spinach (U skończone). W pierwszym przypadku prąd elektronów o spinie σ wyrażony jest następująco:

$$I_\sigma^{\beta(1)} = \frac{e}{\hbar} (P_0 W_{0\sigma}^\beta - P_\sigma W_{\sigma 0}^\beta), \quad (7.22)$$

podczas gdy dozwolone jest obsadzenie dwoma elektronami, drugi człon wchodzący w skład prądu elektronów o spinie σ jest niezerowy i przyjmuje następującą postać:

$$I_\sigma^{\beta(2)} = \frac{e}{\hbar} (P_{\bar{\sigma}} W_{\sigma 2}^\beta - P_2 W_{2\bar{\sigma}}^\beta). \quad (7.23)$$

Z kolei wyrażenie na prąd magnonowy przepływający przez złącze α można zapisać następująco:

$$I_{mag}^\alpha = \frac{1}{\hbar} (P_\uparrow W_{\uparrow\downarrow}^\alpha - P_\downarrow W_{\downarrow\uparrow}^\alpha). \quad (7.24)$$

Ostatecznie, całkowity prąd spinowy przepływający przez kropkę kwantową jest równy zmianie w czasie składowej z spinu kropki kwantowej i zawiera zarówno wkład elektronowy, $I_s^\beta = I_\uparrow^\beta - I_\downarrow^\beta$, jak i magnonowy. Prąd ten opisany jest wzorem:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle s_z \rangle}{dt} &= \frac{1}{2\hbar} (\dot{P}_\uparrow - \dot{P}_\downarrow) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{I_s^L + I_s^R}{e} - 2I_{mag}^U - 2I_{mag}^D \right). \end{aligned} \quad (7.25)$$

Przyjmując założenie o stacjonarności prądu zarówno ładunkowego, jak i spinowego (w układzie nie występują inne procesy zmiany spinu kropki kwantowej poza obrotem związanym z oddziaływaniem z magnonami), można zapisać zasady zachowania prądów:

$$\begin{aligned} I_c^L &= -I_c^R, \\ I_{mag}^U + I_{mag}^D &= \frac{I_s^L + I_s^R}{2e}. \end{aligned} \quad (7.26)$$

Ponadto prąd ładunkowy może zostać sprowadzony do symetrycznej postaci następująco: $I_c = (I_c^L - I_c^R)/2$.

Prąd ciepła

Prąd ciepła zostanie wyznaczony z I zasady termodynamiki:

$$\langle \dot{Q} \rangle = \langle \dot{E} \rangle - \langle \dot{W} \rangle, \quad (7.27)$$

gdzie $\langle \dot{E} \rangle$ jest średnim prądem energii przepływającym przez układ a $\langle \dot{W} \rangle$ średnią pracą wykonaną nad układem. W ogólnym przypadku, przyjmując stacjonarność prądów w układzie oraz zakładając, że praca może zostać wykonana jedynie przez elektrony poruszające się na przekór różnicy potencjałów pomiędzy elektrodami metalicznymi, postać prądu ciepła jest wyrażona następującym wzorem:

$$Q_\sigma^\beta = (\varepsilon_\sigma - \mu_{\beta\sigma}) I_\sigma^{\beta(1)} + (\varepsilon_\sigma + U - \mu_{\beta\sigma}) I_\sigma^{\beta(2)} \quad (7.28)$$

Całkowity prąd ciepła w złączu β jest zdefiniowany jako suma prądów ciepła elektronów o spinie σ :

$$Q^\beta = \sum_\sigma Q_\sigma^\beta \quad (7.29)$$

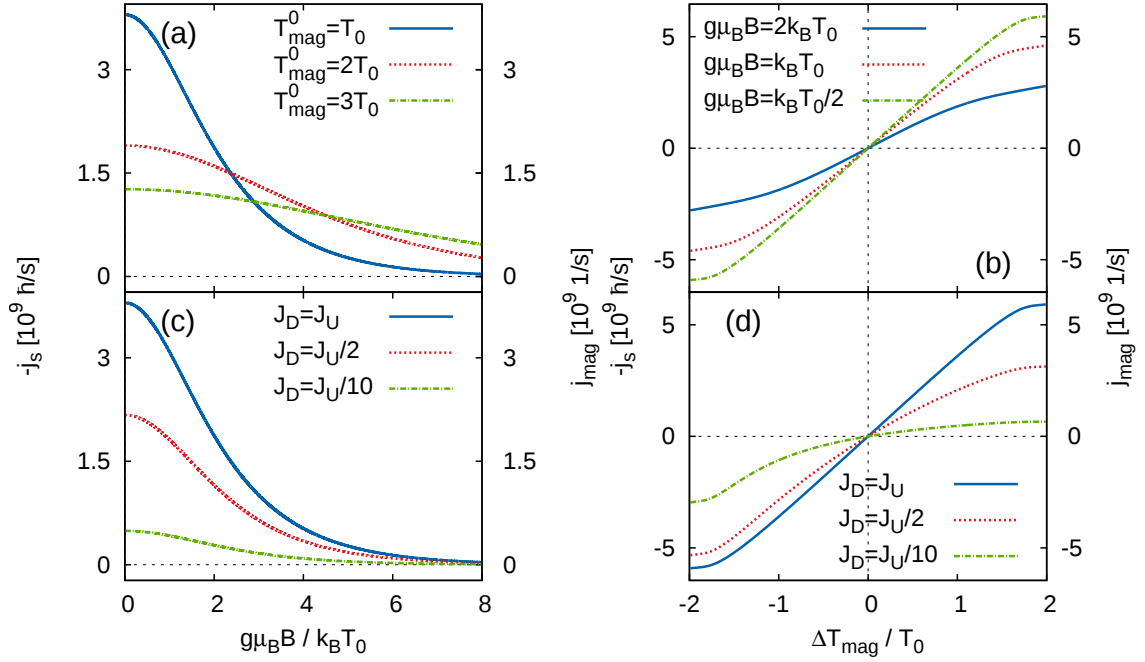
Prąd ciepła przenoszony przez magnony w złączu α w wyniku procesu obrócenia spinu na kropce jest równoważny prądowi energii magnonów, który jest wyrażony następującym wzorem:

$$Q_{mag}^\alpha = g\mu_B B I_{mag}^\alpha. \quad (7.30)$$

7.2 Rezultaty i dyskusja

Niniejszy podrozdział został podzielony na podrozdziały dotyczące różnych konfiguracji kropki kwantowej i elektrod. W pierwszym podrozdziale rozważany jest wyłącznie transport magnonów przez kropkę kwantową obsadzoną pojedynczym elektronem o spinie σ . Nacisk położony jest w tym przypadku na zbadanie wpływu zewnętrznego pola magnetycznego B , temperatury $T_\alpha^0 = T_{mag}^0$ rezerwuarów magnonowych oraz różnicy temperatur ΔT_{mag} pomiędzy elektrodami dielektrycznymi na prąd magnonowy (równoważny prądowi spinowemu z przeciwnym znakiem). Kolejny podrozdział dotyczy przypadku, w którym jeden z rezerwuarów magnonowych jest zastąpiony elektrodą metaliczną, co umożliwia zbadanie konwersji elektronowego prądu spinowego na magnonowy prąd spinowy i *vice versa*. W tym przypadku dodatkowym parametrem, którego wpływ na prąd spinowy został zbadany, jest współczynnik polaryzacji magnetycznej p elektrody metalicznej. Ostatnie podrozdziały dotyczą przypadku ogólnego, w którym kropka kwantowa jest połączona zarówno z elektrodami metalicznymi jak i dielektrycznymi.

W poniższej dyskusji pojęcia prądu magnonowego i prądu spinowego będą wykorzystywane zamiennie (o ile nie zostanie to w inny sposób zaznaczone), przy czym należy pamiętać, że prąd spinowy jest równy, co do wartości bezwzględnej, prądowi magnonowemu, ale różni się znakiem.



Rysunek 7.2: Prąd magnonowy w funkcji pola magnetycznego B i różnicy temperatur ΔT_{mag} pomiędzy elektrodami. Pozostałe parametry: (a) $J_D = J_U = 0.1T_0$, $\Delta T_{\text{mag}} = T_0$, (b) $J_D = J_U = 0.1T_0$, $T_{\text{mag}}^0 = T_0$, (c) $T_{\text{mag}}^0 = T_0$, $\Delta T_{\text{mag}} = T_0$, (d) $B = T_0/2$, $T_{\text{mag}}^0 = T_0$. Dla wszystkich rysunków: $\varepsilon_d = 0$, $T_0 = 0.1 \text{ meV}$.

7.2.1 Przypadek szczególny 1: kropka połączona z dwiema elektrodami dielektrycznymi (I - QD - I).

W niniejszym podrozdziale zostaną przedstawione wyniki analizy przepływu wyłącznie prądu magnonowego (równoważnego prądowi spinowemu z przeciwnym znakiem) przez kropkę kwantową. Przepływ tylko prądu magnonów jest zagwarantowany przez połączenie kropki kwantowej tylko z elektrodami dielektrycznymi, czyli dla współczynników sprzężeń elektrod metalicznych przyjęto $\Gamma_L = \Gamma_R = 0$. Ponadto przyjęto, że oddziaływanie kulombowskie na kropce jest duże ($U \rightarrow \infty$), co prowadzi do możliwości jedynie pojedynczego obsadzenia kropki elektronem o spinie $\uparrow$ lub $\downarrow$. Dodatkowo brak sprzężenia z elektrodą metaliczną oznacza, że kropka kwantowa może znaleźć się tylko w jednym z dwóch stanów: w stanie $|\uparrow\rangle$ z prawdopodobieństwem $P_{\uparrow}$ lub w stanie $|\downarrow\rangle$ z prawdopodobieństwem $P_{\downarrow}$.

W takim przypadku głównymi czynnikami wpływającymi na przepływ prądu spinowego są: pole magnetyczne B , różnica temperatur ΔT pomiędzy rezerwuarami magnonów, równowagowa temperatura T_{α}^0 , gdzie $\alpha = L, R$ w rozpatrywanym przypadku oraz sprzężenie J_{α} pomiędzy elektrodą α a kropką.

Aby wyznaczyć wyrażenie na prąd magnonowy, konieczne jest wpierw rozwiązanie równania master (7.9). W rozpatrywanym przypadku szczególnym macierz $\mathbf{W}$ przyjmie następującą postać:

$$\mathbf{W} = \sum_{\alpha} \frac{1}{\hbar} \begin{bmatrix} -J_{\alpha} n_{\alpha}^{+} & J_{\alpha} n_{\alpha}^{-} \\ J_{\alpha} n_{\alpha}^{+} & -J_{\alpha} n_{\alpha}^{-} \end{bmatrix}. \quad (7.31)$$

Równanie (7.26) opisujące zachowanie stacjonarnego prądu spinowego przyjmie postać $J_s^U = -J_s^D$. Pozwala to na wyrażenie prądu spinowego płynącego przez kropkę w postaci symetrycznej: $J_s^{U \rightarrow D} = (J_s^U - J_s^D)/2$. Ostatecznie prąd spinowy płynący przez kropkę w rozpatrywanym przypadku można wyrazić następującą formułą analityczną:

$$J_s = J_D J_U \frac{n_D - n_U}{J_D(1 + 2n_D) + J_U(1 + 2n_U)}. \quad (7.32)$$

Aby w układzie mógł płynąć prąd spinowy, konieczne jest spełnienie pewnych warunków. Po pierwsze, poziom energetyczny kropki kwantowej musi być niezdegenerowany, który to warunek jest zagwarantowany przez rozszczepienie Zeemana wywołane zewnętrznym polem magnetycznym. Po drugie konieczne jest spełnienie warunku $g_m \leq g$ dla współczynników Landégo elektrod dielektrycznych i kropki, co umożliwia filtrowanie magnonów ze względu na ich energię przez pole magnetyczne. Po trzecie, po spełnieniu powyższych warunków, aby prąd mógł przepłynąć, konieczna jest nierównowaga w rozkładzie magnonów pomiędzy elektrodami. Ta nierównowaga jest w rozpatrywanym przypadku wywołana różnicą temperatur pomiędzy elektrodami dielektrycznymi.

Po spełnieniu powyższych warunków prąd magnonowy płynie z elektrody o wyższej temperaturze do elektrody o temperaturze niższej. W wyniku przepływu tego prądu stan kropki kwantowej ulega zmianie ze stanu o spinie σ na stan o spinie przeciwnym $\bar{\sigma}$.

Na rys. 7.2 przedstawiono prąd magnonowy w zależności od badanych parametrów. Rys. 7.2(a) przedstawia zależność prądu j_m od energii rozszczepienia Zeemana $g\mu_B B$. Należy zauważyć, że dla $B = 0$ wartość prądu nie jest dobrze określona ze względu na rozbieżność w rozkładzie Bosego-Einsteina. Można jednakże wyznaczyć prąd w granicy $B \rightarrow 0$, który wyrażony jest następującym wzorem:

$$\begin{aligned} j_{\text{mag}}(B = 0) &= \lim_{B \rightarrow 0} j_{\text{mag}}^{U \rightarrow D}(B) \\ &= \frac{\frac{\Delta T_{\text{mag}}}{T_{\text{mag}}^0} J_D J_U}{\frac{\Delta T_{\text{mag}}}{T_{\text{mag}}^0} (J_U - J_D) + 2(J_U + J_D)}. \end{aligned} \quad (7.33)$$

Zachowanie prądu magnonowego można wytłumaczyć posługując się zależnością rozkładu Bosego-Einsteina od energii. Populacja magnonów niskoenergetycznych jest większa niż magnonów o wyższych energiach, co powoduje, że prąd magnonowy jest większy dla niskich pól magnetycznych. Następnie wartość tego prądu maleje ze wzrostem energii i malejącą populacją magnonów. Ze wzrostem równowagowej temperatury T_{mag}^0 obydwu rezerwuarów magnonowych (przy czym utrzymywana jest stała wartość różnicy temperatur ΔT_{mag}) maksimum prądu maleje dla małych wartości pól magnetycznych. W przypadku wysokoenergetycznych magnonów, wyższa temperatura powoduje znaczne rozmycie rozkładu i zwiększenie szerokości piku prądu spinowego. Ponadto dodatnia wartość prądu oznacza, że w układzie dominują procesy absorpcji magnonu na kropce.

Rys. 7.2(c) pokazuje prąd magnonowy w zależności od pola magnetycznego i wzrastającej asymetrii w sprzężeniu elektrod z kropką. Zmniejszenie sprzężenia jednego z rezerwuarów z kropką powoduje spadek prądu magnonowego w wyniku zwiększonej trudności przepływu

magnonów przez jedno ze złączy co prowadzi do ograniczenia przepływu magnonów z jednej elektrody do drugiej.

Na rys. 7.2(b) przedstawiono prąd magnonowy w zależności od różnicy temperatur ΔT_{mag} pomiędzy elektrodami i różnych wartości energii Zeemana. W przypadku braku różnicy temperatur, jak to zostało zaznaczone wcześniej, prąd magnonowy nie płynie. Zwiększenie temperatury rezerwuaru prawego względem lewego powoduje wzrost dodatniego prądu magnonowego, co jest związane z większą absorpcją magnonów na kropce. Z kolei odwrócenie różnicy temperatur prowadzi do prądu ujemnego, czyli dominacji procesów emisji magnonów z kropki. Zmniejszenie pola magnetycznego prowadzi do wzrostu prądu magnonowego, co zostało już wytłumaczone powyżej.

Wzrost asymetrii sprzężeń elektrod i kropki w przypadku zmiennej różnicy temperatur pomiędzy elektrodami oraz ustalonej wartości pola magnetycznego został pokazany na na rys. 7.2(d). Prąd magnonowy maleje z obniżaniem sprzężenia elektrody D do kropki, jednak spadek ten wykazuje asymetrię względem $\Delta T_m = 0$. Asymetria ta wskazuje na możliwość stworzenia termicznej diody spinowej. Dla małego sprzężenia elektrody D, $J_D = J_U/10$, w przypadku dodatniej różnicy temperatur prąd magnonowy przyjmuje bardzo małą wartość (kierunek zaporowy), podczas gdy dla ujemnej różnicy temperatur wartość prądu magnonowego jest większa (kierunek przewodzenia).

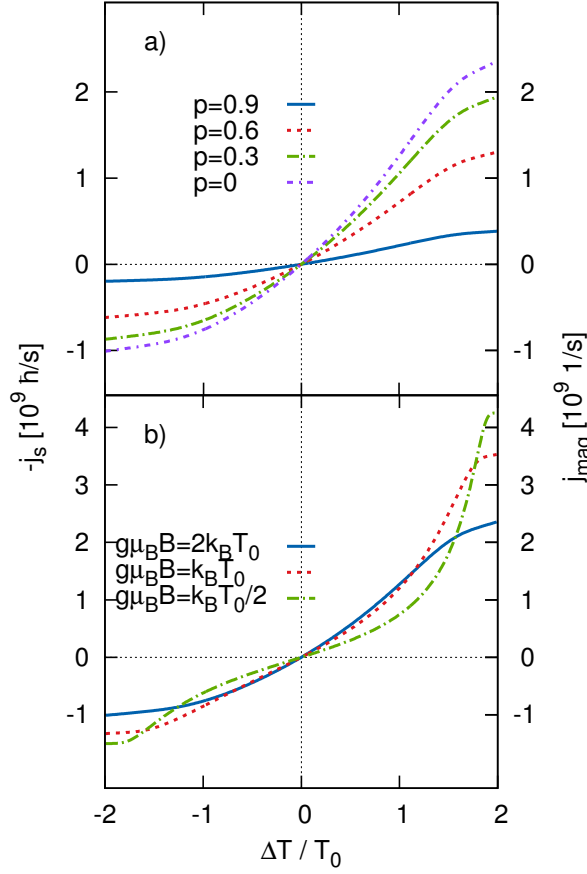
7.2.2 Przypadek szczególny 2: kropka połączona z elektrodą metaliczną i dielektryczną (M - QD - I).

W niniejszym podrozdziale rozpatrzony został przypadek kropki połączonej z jedną elektrodą metaliczną i jedną wykonaną z izolatora magnetycznego. W układzie, podobnie do przypadku rozpatrywanego w poprzednim podrozdziale, płynie wyłącznie prąd spinowy. W tym przypadku, jednak, elektron może znaleźć się również w stanie $|0\rangle$, ze względu na możliwość przepływu elektronów do elektrody metalicznej.

Równanie (7.26) w badanym przypadku przyjmuje postać $J_s^U = -J_s^L \equiv J_s$, gdzie J_s jest prądem spinowym płynącym z elektrody dielektrycznej do metalicznej. W tym przypadku prąd spinowy może być natury elektronowej (przenoszony przez elektrony) lub magnonowej (przenoszony przez magnony), więc można rozumieć badany układ jako przetwornik prądu spinowego, a samą kropkę jako uproszczoną granicę międzywarstwową pomiędzy izolatorem a metalem.

Zgodnie z powyżej opisanymi warunkami w równaniu (7.9) wektor prawdopodobieństw można zapisać następująco: $\mathbf{P}^T = (P_0, P_\uparrow, P_\downarrow)$, podczas gdy macierz $\mathbf{W}$ przyjmuje następującą postać:

$$\mathbf{W} = \frac{1}{\hbar} \begin{bmatrix} W_{00} & W_{0\uparrow} & W_{0\downarrow} \\ W_{\uparrow 0} & W_{\uparrow\uparrow} & W_{\uparrow\downarrow} \\ W_{\downarrow 0} & W_{\downarrow\uparrow} & W_{\downarrow\downarrow} \end{bmatrix}, \quad (7.34)$$



Rysunek 7.3: Prąd magnonowy w funkcji temperatury T_{mag}^0 elektrody dielektrycznej dla wyróżnionych wartości polaryzacji magnetycznej p oraz pola magnetycznego $g\mu_B B$. Pozostałe parametry: (a) $g\mu_B B = 2T_0$, (b) $p = 0$. Dla (a) i (b): $\varepsilon_d = 0$, $T_{\text{el}}^0 = T_0$, $J = \Gamma = 0.1T_0$.

gdzie poszczególne elementy powyższej macierzy wyrażają się następującymi wzorami:

$$\begin{aligned}
 W_{00} &= -\Gamma_{L\uparrow} f_{L\uparrow}^+(\varepsilon_{\uparrow}) - \Gamma_{L\downarrow} f_{L\downarrow}^+(\varepsilon_{\downarrow}), \\
 W_{0\sigma} &= \Gamma_{L\uparrow} f_{L\uparrow}^-(\varepsilon_{\uparrow}), \\
 W_{\sigma 0} &= \Gamma_{L\downarrow} f_{L\downarrow}^+(\varepsilon_{\downarrow}), \\
 W_{\sigma\bar{\sigma}} &= J_U n_U^+(B), \\
 W_{\sigma\sigma} &= -\Gamma_{L\sigma} f_{L\sigma}^-(\varepsilon_{\downarrow}) - J_U n_U^+(B).
 \end{aligned} \tag{7.35}$$

Rozwiązanie równania master umożliwia wyznaczenie wyrażenia na prąd spinowy:

$$J_s^{U \rightarrow L} = \frac{J_U \Gamma_{L\uparrow} \Gamma_{L\downarrow} \left[f_{L\downarrow}^+ (f_{L\uparrow}^+ - 1) + n_U^+ (f_{L\uparrow}^+ - f_{L\downarrow}^+) \right]}{J_U \Gamma_{L\downarrow} \left[f_{L\downarrow}^+ + n_U^+ (1 + f_{L\downarrow}^+) \right] + J_U \Gamma_{L\uparrow} \left[1 + n_U^+ (1 + f_{L\uparrow}^+) \right] + 2\Gamma_{L\uparrow} \Gamma_{L\downarrow} (1 - f_{L\downarrow}^+ f_{L\uparrow}^+)}. \tag{7.36}$$

Rys. 7.3(a) przedstawia zależność prądu spinowego w zależności od różnicy temperatur ΔT pomiędzy elektrodami dla wyszczególnionych wartości współczynnika polaryzacji magnetycznej p elektrody metalicznej. Zgodnie z przyjętymi założeniami prąd spinowy nie płynie przy braku różnicy temperatur. Dodatni prąd spinowy zaczyna się pojawiać wraz ze wzrostem

temperatury rezerwuaru magnonowego, co oznacza przewagę procesów absorpcji magnonu na kropce. Obniżenie temperatury rezerwuaru magnonowego względem elektrody metalicznej prowadzi do przewagi procesów emisji magnonu z kropki i objawia się ujemnym znakiem prądu spinowego. Różnica temperatur skierowana od rezerwuaru elektronowego do magnonowego prowadzi do szybkiego nasycenia się prądu i jego mniejszej wartości niż w przypadku różnicy ustalonej w przeciwnym kierunku. Wzrost magnetycznej polaryzacji elektrody metalicznej skutkuje zmniejszeniem prądu spinowego, co jest związane z faktem, że ze wzrostem różnicy w populacjach nośników większościowych (o spinie $\uparrow$) i nośników mniejszościowych ($\downarrow$) w elektrodzie metalicznej, dla elektronów o spinie $\downarrow$ jest mniej dostępnych stanów do obsadzenia, co wyraża się w mniejszej wartości współczynnika sprzężenia $\Gamma_{L\downarrow}$ i wynikającym z tych faktów mniejszym prądem. Dla polaryzacji $p = 0$ liczba dostępnych stanów jest taka sama zarówno dla elektronów o spinie $\uparrow$ jak i wówczas $\downarrow$.

Na rys. 7.3(b) przedstawiono wpływ energii Zeemana $g\mu_B B$ na prąd spinowy w funkcji różnicy temperatur ΔT pomiędzy elektrodami dla niemagnetycznej elektrody metalicznej ($p = 0$). Podobnie do przypadku omówionego w poprzednim podrozdziale, selekcja magnonów o niższych energiach prowadzi do wzrostu maksymalnej wartości prądu spinowego.

W obydwu przypadkach zauważalna jest asymetria przebiegu prądu względem $\Delta T = 0$, co wskazuje na możliwość uzyskania termicznej diody spinowej w rozpatrywanym układzie.

7.2.3 Przypadek ogólny: kropka połączona z czterema elektrodami

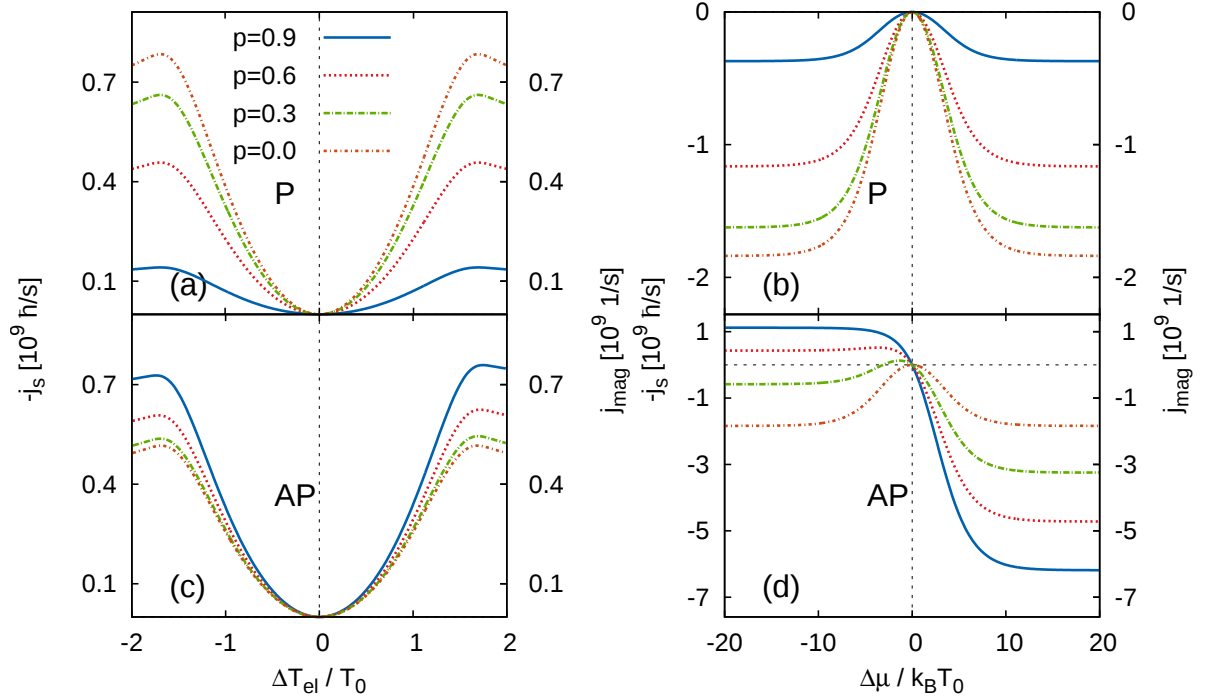
Po rozpatrzeniu powyższych przypadków szczególnych badanego układu, możliwe jest przejście do przypadku bardziej złożonego, w którym procesy omówione powyżej będą odgrywały ważną rolę. Poniżej rozpatrzony zostanie jednoczesny transport elektronów i magnonów, wynikający z połączenia kropki z dwiema elektrodami metalicznymi i dwiema wykonanymi z izolatora magnetycznego. Ponadto niniejszy podrozdział zostanie podzielony na dwie sekcje: dotyczącą przypadku z zabronionym obsadzeniem kropki przez dwa elektrony ($U \rightarrow \infty$) oraz przypadku, w którym pokazany został wpływ oddziaływania Coulomba na badane zjawiska.

Przypadek $U \rightarrow \infty$

Macierze $\mathbf{P}$ i $\mathbf{W}$ wchodzące w skład równania master (7.9) przyjmują dla rozpatrywanego poniżej przypadku podobną postać jak w poprzednim podrozdziale z tą różnicą, że człony występujące w wyrażeniach na elementy macierzy $\mathbf{W}$ zostały wysumowane po indeksach odpowiadających elektrodom: $\beta = L, R$ dla elektrod metalicznych, a $\alpha = U, D$ dla elektrod dielektrycznych.

Rys. 7.4 przedstawia zależność prądu magnonowego od różnicy temperatur ΔT_{el} pomiędzy elektrodami metalicznymi [(a) i (c)] oraz od napięcia transportowego $\Delta\mu/e$ [(b) i (d)] dla wyróżnionych wartości współczynnika polaryzacji magnetycznej p i dla dwóch możliwych konfiguracji magnetycznych elektrod metalicznych: równoległej (P) i antyrównoległej (AP).

Prąd spinowy w funkcji różnicy temperatur ΔT_{el} dla konfiguracji równoległej przedstawiony na rys. 7.4(a) wykazuje podobne zachowanie, w związku ze zmianą wartości parametru p , do opisanego w poprzednim podrozdziale i przedstawionego na rys. (7.3). Mniejsza liczba dostępnych stanów dla elektronów o spinie $\downarrow$ w elektrodach metalicznych dla przypadku



Rysunek 7.4: Prąd magnonowy w funkcji różnicy temperatur ΔT_{el} pomiędzy elektrodami metalicznymi oraz potencjału elektrochemicznego $\Delta\mu$ elektrod dla równoległej (P) i antyrównoległej (AP) konfiguracji i wyróżnionych wartości polaryzacji $p_L = p_R = p$. Pozostałe parametry: dla (a) i (d) $p = 0.9$, dla (a) – (c) $\Delta\mu = 0$, (d) – (f) $\Delta T_{\text{el}} = 0$. Dla wszystkich: $\varepsilon_d = 0$, $J_U = J_D = \Gamma_L = \Gamma_R = 0.1T_0$, $T_{\text{mag}}^0 = T_{\text{el}}^0 = T_0$, $\Delta T_{\text{mag}} = 0$, $B = 2T_0$.

skończonej polaryzacji magnetycznej, $p > 0$, objawia się mniejszą wartością prądu spinowego niż dla przypadku niemagnetycznego, $p = 0$. Przeciwnie zachowanie można zaobserwować dla konfiguracji antyrównoległej, przedstawionej na rys. 7.4(c), dla której wzrost polaryzacji wiąże się ze wzrostem wartości prądu spinowego. W przypadku konfiguracji antyrównoległej jedna z elektrod metalicznych jest spolaryzowana dodatnio, co zgodnie z definicją współczynnika polaryzacji p wprowadzoną w rozdziale 2 w postaci wzoru (2.37), oznacza, że gęstość stanów nośników o spinie $\uparrow$ jest większa niż nośników o spinie przeciwnym, podczas gdy druga elektroda przyjmuje taką samą, co do wartości bezwzględnej, wartość współczynnika p , ale z przeciwnym znakiem. W związku z tym elektron po obrocie spinu σ , związanym z oddziaływaniem z magnonem (jego absorpcją lub emisją), ma taką samą liczbę stanów $\bar{\sigma}$ do obsadzenia jak w przypadku elektronu o spinie σ w elektrodzie pierwszej. W przypadku, gdy $p \rightarrow 1$, liczba dostępnych stanów w elektrodzie z ujemną wartością współczynnika p zwiększa się dla elektronu o spinie przeciwnym do spinu elektronu tunelującego z elektrody o dodatnim współczynniku p , co prowadzi do wzrostu wartości parametru sprzężenia i ostatecznie wzrastającej wartości prądu spinowego. Warto zauważyć, że w obydwu konfiguracjach elektrod, równoległej i antyrównoległej, prąd magnonowy jest dodatni, co wskazuje na dominację procesów absorpcji magnonów na kropce.

W przypadku przyłożenia napięcia transportowego $V_b \equiv \Delta\mu/e$ pomiędzy elektrodami metalicznymi również możliwe jest wywołanie przepływu prądu magnonowego w układzie, czyli

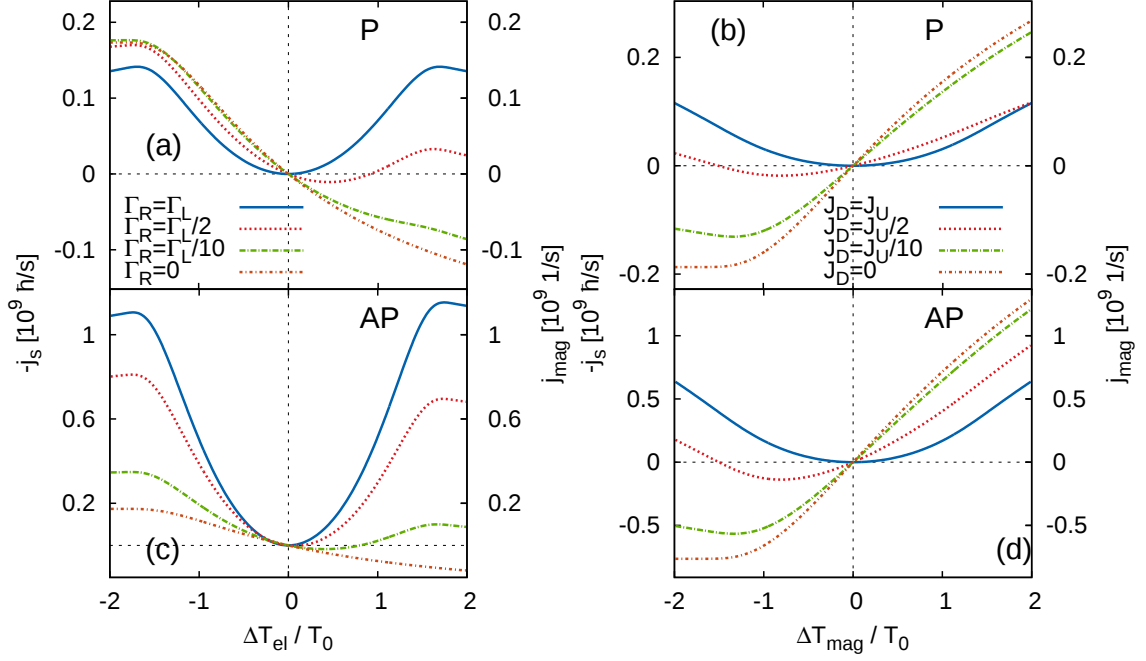
uzyskanie konwersji prądu ładunkowego na spinowy. Prąd magnonowy w zależności od napięcia eV_b i dla przypadku konfiguracji równoległej elektrod metalicznych, pokazany na rys. 7.4(b), wykazuje symetrię względem odwrócenia znaku napięcia $\Delta\mu/e = 0$ i zachowuje się podobnie ze zmianą polaryzacji p do przypadku opisanego powyżej. W przeciwieństwie do poprzedniego przypadku, prąd magnonowy przyjmuje znak ujemny, co oznacza, że procesy emisji magnonów z kropki dominują nad procesami absorpcji.

Zupełnie inne zachowanie wykazuje prąd magnonowy przedstawiony na rys. 7.4(d) dla antyrównoległej konfiguracji elektrod metalicznych. Przede wszystkim, widoczna jest silna asymetria w przebiegu prądu względem wartości $\Delta\mu = 0$. Dla zakresu dodatnich napięć, $\Delta\mu/e > 0$, i dla wyróżnionych wartości polaryzacji p elektrod, prąd magnonowy jest ujemny. Ponadto wartość bezwzględna prądu magnonowego wzrasta ze wzrostem wartości parametru p . Dla polaryzacji p bliskiej 1 i dużych wartości $\Delta\mu > 0$ na kropkę mogą tunelować głównie elektrony o spinie $\downarrow$ co prowadzi do zwiększonej emisji magnonów. Gdy $p = 1$ (nie pokazano na rysunku), konwersja jest maksymalna — elektron o spinie $\downarrow$, który tuneluje na kropkę, emituje jeden magnon. Po obrocie spinu, wywołanym emisją magnonu, elektron może przetunelować do drugiej elektrody z prawdopodobieństwem równym 1. Dla mniejszych wartości polaryzacji magnetycznej p na kropkę mogą również tunelować elektrony o spinie $\uparrow$, który to proces wiąże się z absorpcją magnonów i w rezultacie zmniejszeniem wartości bezwzględnej prądu magnonowego. Dla przeciwnej polaryzacji napięcia transportowego i polaryzacji $p \approx 1$ na kropkę tunelują głównie elektrony o spinie $\uparrow$ umożliwiając absorpcję magnonów, co objawia się dodatnim znakiem prądu magnonowego. Zmniejszanie polaryzacji prowadzi do dominacji wkładu pochodzącego od procesów emisji magnonów z kropki, objawiających się ujemnym znakiem prądu magnonowego. Należy zauważyć, że dla przypadku $p = 1$ prąd magnonowy nie jest symetryczny względem $\Delta\mu = 0$, ponieważ układ znajduje się w stosunkowo silnym polu magnetycznym, które faworyzuje elektrony o spinie $\downarrow$, a więc i procesy emisji magnonów.

Asymetria w przebiegu prądu magnonowego indukowanego różnicami temperatur może zostać wprowadzona przez przyjęcie różnych sprzężeń kropki z elektrodami, która to sytuacja została zaprezentowana na rys. 7.5.

Rysunki 7.5 (a) i (c) przedstawiają prąd magnonowy w funkcji różnicy temperatur pomiędzy elektrodami metalicznymi dla przedstawionych wartości sprzężenia prawej elektrody metalicznej i dwóch konfiguracji magnetycznych elektrod metalicznych. W przypadku symetrycznego sprzężenia elektrod, zarówno w przypadku równoległym (P) jak i antyrównoległym (AP), prąd magnonowy jest symetryczny względem $\Delta T_{el} = 0$. W przypadku $\Delta T_{el} > 0$ i wzrastającej asymetrii sprzężeń prąd magnonowy w obydwu przypadkach maleje aż do momentu zmiany znaku, po czym wzrasta (rozpatrując jego wartość bezwzględną). Dla wartości parametru $\Gamma_R = \Gamma_L/2$ i równoległej konfiguracji elektrod obserwowany jest wzrost ujemnej wartości prądu magnonowego a następnie ponowna zmiana znaku. Dla przeciwnego znaku różnicy temperatur ΔT_{el} prąd magnonowy jest dodatni dla wszystkich rozpatrywanych wartości parametru Γ_R . Ponadto, wartość prądu rośnie ze wzrostem asymetrii. Największa wartość pojawia się dla $\Gamma_R = 0$, czyli dla przypadku trójterminalowego.

W przypadku antyrównoległym wartość prądu magnonowego jest większa niż w przypadku równoległym. Silna asymetria prądu pojawia się, gdy tunelowanie elektronów przez jedno ze

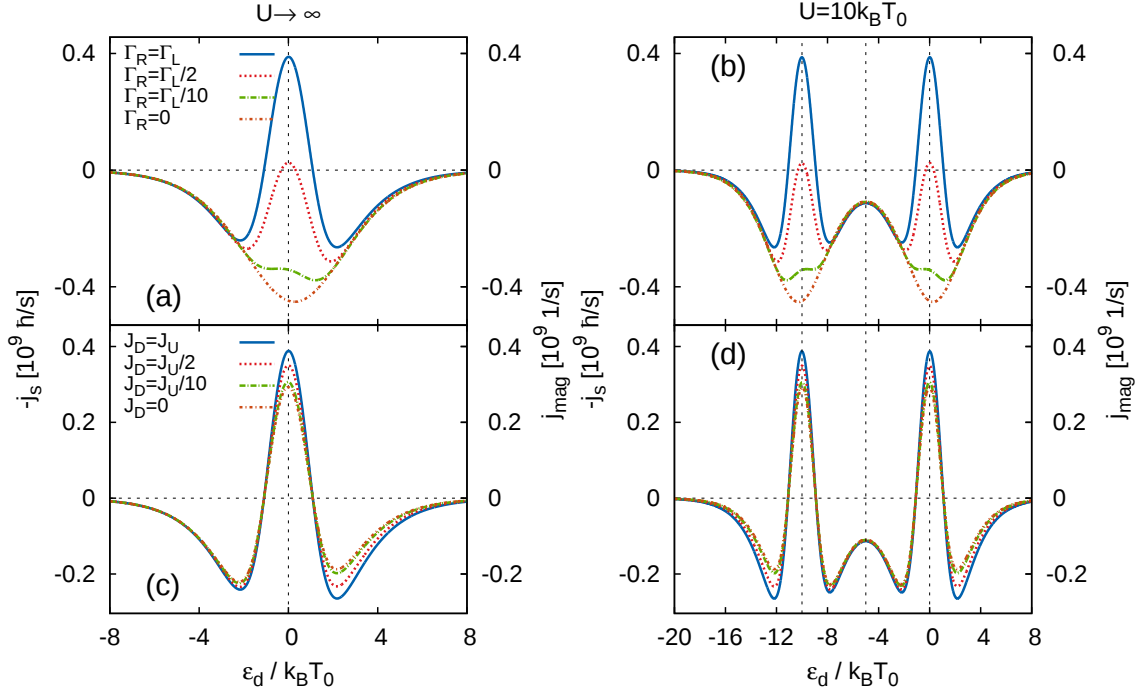


Rysunek 7.5: Prąd magnonowy w funkcji różnicy temperatur ΔT_{el} dla wyróżnionych wartości parametru Γ_R oraz w funkcji różnicy temperatur ΔT_{mag} dla wyróżnionych wartości parametru J_D oraz równoległej (P) i antyrównoległej (AP) konfiguracji elektrod metalicznych. Pozostałe parametry: dla (a), (c) $\Delta T_{\text{mag}} = 0$, $\Delta\mu = 0$, $J_U = J_D = 0.1T_0$, (b), (d) $\Delta T_{\text{el}} = 0$, $\Delta\mu = 0$, $\Gamma_L = \Gamma_R = 0.1T_0$. Dla wszystkich: $\varepsilon_d = 0$, $B = 2T_0$, $T_{\text{mag}}^0 = T_{\text{el}}^0 = T_0$, $p = 0.9$.

złącz z elektrodą metaliczną zostanie zablokowane, np. dla złącza z elektrodą prawą, $\Gamma_R = 0$. Wówczas, dla $\Delta T_{\text{el}} > 0$, prąd jest ujemny, a dodatni dla przeciwnego znaku różnicy temperatur.

W przypadku asymetrii sprzężenia elektrod magnonowych z kropką, której wpływ na prąd magnonowy w zależności od różnicy temperatur pomiędzy rezerwuarami magnonów został przedstawiony na rys. 7.5 (b) i (d), zarówno dla przypadku równoległej jak i antyrównoległej konfiguracji elektrod metalicznych, przebieg prądu magnonowego jest jakościowo taki sam, przy czym w przypadku konfiguracji antyrównoległej prąd magnonowy osiąga większe wartości niż w przypadku równoległym.

Gdy obydwa rezerwuary magnonów są jednakowo sprzężone z kropką, prąd magnonowy jest dodatni i symetryczny względem $\Delta T_{\text{mag}} = 0$. Wzrost tego sprzężenia prowadzi, dla $\Delta T_{\text{mag}} > 0$, do wzrostu maksymalnej wartości prądu, podczas gdy dla $\Delta T_{\text{mag}} < 0$, początkowo, do spadku prądu, a następnie do wzrostu wartości prądu magnonowego ze znakiem ujemnym. Różnica temperatur pomiędzy rezerwuarami magnonów oznacza również różnicę pomiędzy rezerwuarem magnonowym o wyższej temperaturze, a elektrodami metalicznymi, co wiąże się z przepływem energii również do elektrod metalicznych i, w rezultacie, z dodatnim znakiem prądu magnonowego. Dla $\Delta T_{\text{mag}} < 0$ i wzrastającej asymetrii sprzężenia, energia przepływa również od elektrod metalicznych do rezerwuaru magnonów, co wiąże się z emisją magnonów z kropki kwantowej i z ujemnym znakiem prądu.



Rysunek 7.6: Prąd magnonowy w funkcji położenia poziomu ε_d kropki oraz wyróżnionych wartości parametrów Γ_R i J_D dla nieskończonej ($U \rightarrow \infty$) oraz skończonej wartości parametru korelacji kulombowskich. ($U = 10T_0$). Pozostałe parametry: dla (a), (b) $J_U = J_D = \Gamma_L = 0.1T_0$, (c), (d) $\Gamma_L = \Gamma_R = J_U = 0.1T_0$. Dla wszystkich rysunków: $B = 2T_0$, $T_{\text{mag}}^0 = T_{\text{el}}^0 = T_0$, $\Delta T_{\text{el}} = T_0$, $\Delta T_{\text{mag}} = 0$, $\Delta\mu = 0$, $p = 0$.

7.2.4 Przypadek skończonej wartości U

W poprzednich podrozdziałach rozważany był przypadek, w którym kropka kwantowa mogła być obsadzona co najwyżej jednym elektronem, ze względu na dużą wartość parametru oddziaływania kulombowskiego U . W niniejszym podrozdziale rozpatrzony zostanie wpływ skończonej wartości parametru U na prąd magnonowy.

Zgodnie z powyżej opisanymi warunkami składowe macierze w równaniu master (7.9) ulegają modyfikacji. Wektor prawdopodobieństw przyjmuje postać $\mathbf{P} = (P_0, P_{\uparrow}, P_{\downarrow}, P_2)^T$, podczas gdy macierz $\mathbf{W}$ można zapisać w następującej postaci:

$$\mathbf{W} = \frac{1}{\hbar} \begin{bmatrix} W_{00} & W_{0\uparrow} & W_{0\downarrow} & 0 \\ W_{\uparrow 0} & W_{\uparrow\uparrow} & W_{\uparrow\downarrow} & W_{\uparrow 2} \\ W_{\downarrow 0} & W_{\downarrow\uparrow} & W_{\downarrow\downarrow} & W_{\downarrow 2} \\ 0 & W_{2\uparrow} & W_{2\downarrow} & W_{22} \end{bmatrix}. \quad (7.37)$$

W rozpatrywanym układzie nie występują procesy prowadzące do bezpośredniego przejścia ze stanu $|0\rangle(|2\rangle)$ do stanu $|2\rangle(|0\rangle)$, więc elementy macierzowe odpowiadające temu przejściu są

równe 0. Pozostałe elementy macierzowe wyrażają się następującymi wzorami:

$$W_{00} = - \sum_{\beta, \sigma} \Gamma_{\beta\sigma} f_{\beta\sigma}^+, \quad (7.38a)$$

$$W_{0\sigma} = \sum_{\beta} \Gamma_{\beta\sigma} f_{\beta\sigma}^-, \quad (7.38b)$$

$$W_{\sigma 0} = \sum_{\beta} \Gamma_{\beta\sigma} f_{\beta\sigma}^+, \quad (7.38c)$$

$$W_{\sigma\bar{\sigma}} = \sum_{\alpha} J_{\alpha} n_{\alpha}^{-(+)}, \quad (7.38d)$$

$$W_{\sigma\sigma} = - \sum_{\beta} \Gamma_{\beta\sigma} f_{\beta\sigma}^-(\varepsilon_{\downarrow}) - \sum_{\alpha} J_{\alpha} n_{\alpha}^+(B), \quad (7.38e)$$

$$W_{\sigma 2} = \sum_{\beta} \Gamma_{\beta\bar{\sigma}} f_{\beta\bar{\sigma}}^{U+}, \quad (7.38f)$$

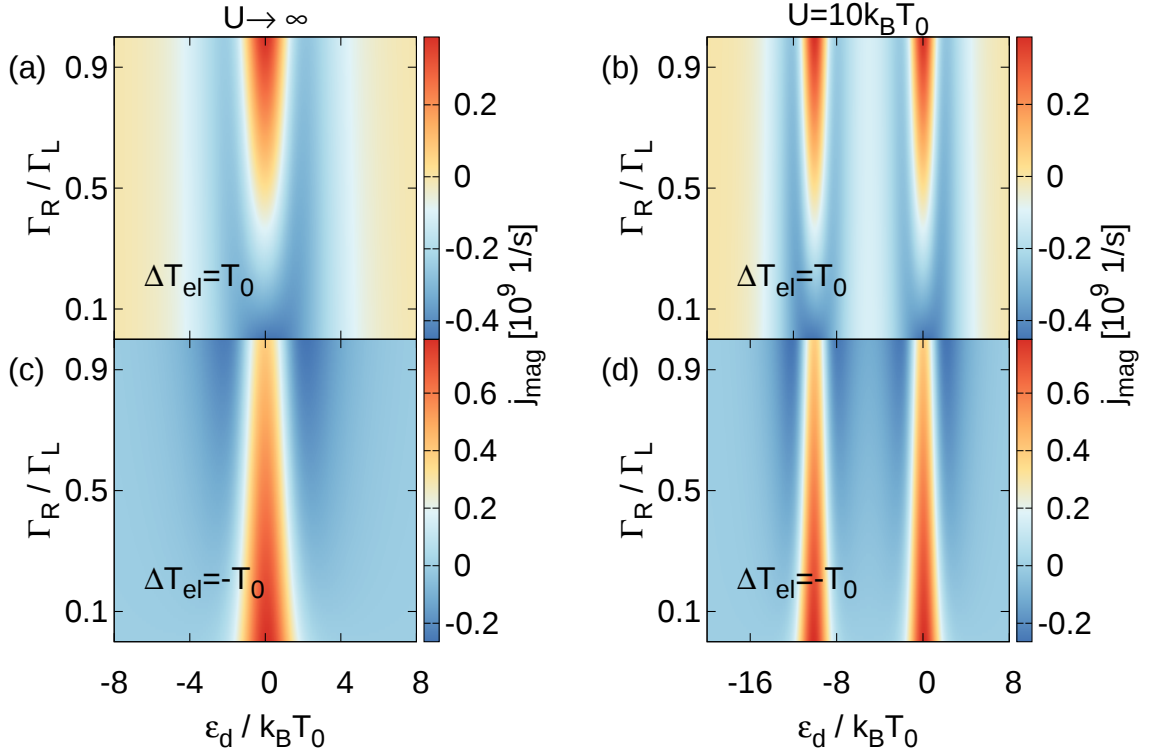
$$W_{2\sigma} = \sum_{\beta} \Gamma_{\beta\sigma} f_{\beta\sigma}^{U+}, \quad (7.38g)$$

$$W_{22} = - \sum_{\beta, \sigma} \Gamma_{\beta\sigma} f_{\beta\sigma}^{U-}. \quad (7.38h)$$

Rys. 7.6 (a) i (b) przedstawiają zależność prądu magnonowego od położenia poziomu kropki względem poziomu Fermiego elektrod metalicznych dla wybranych wartości parametru Γ_R i parametru oddziaływania kulombowskiego U : dużego (nieskończonego) i skończonego. Ponadto przyjęto w tym przypadku, że elektrody metaliczne są niemagnetyczne, $p = 0$, oraz założono skończoną, dodatnią, różnicę temperatur pomiędzy rezerwuarami elektronów.

W przypadku symetrycznego sprzężenia elektrod z kropką i możliwości co najwyżej pojedynczego obsadzenia, dla energii kropki odpowiadającej poziomowi Fermiego elektrod metalicznych pojawia się maksymalna, dodatnia wartość prądu magnonowego. Przesunięcie poziomu kropki powyżej lub poniżej poziomu Fermiego prowadzi do zaniku prądu magnonowego, a następnie wzrostu wartości prądu ze znakiem przeciwnym. Dla przypadku dozwolonego podwójnego obsadzenia kropki zwiększenie asymetrii sprzężenia elektrod metalicznych i kropki, przez zmniejszenie o połowę wartości parametru Γ_R , prowadzi, w obszarze energii $\varepsilon_d = 0$ i $\varepsilon_d = -U$, do zmniejszenia intensywności pików odpowiadających tym energiom oraz zwiększenia ujemnej wartości pików bocznych. Dalsze zmniejszenie sprzężenia Γ_R prowadzi do wzrostu ujemnej wartości pików odpowiadających energiom rezonansowym kropki i jednocześnie przekryciem się tego pików z pikami bocznymi. Ostatecznie, w przypadku sprzężenia tylko jednej elektrody metalicznej, prąd magnonowy przyjmuje maksymalną wartość ujemną dla energii rezonansowych, wskazując tym samym na przewagę procesów emisji magnonów z kropki. W przypadku skończonej wartości parametru korelacji kulombowskich U , zmiana wartości sprzężenia nie wpływa na prąd magnonowy w obszarze energii w pobliżu punktu symetrii $\varepsilon_d = -U/2$. W tym przypadku, niezależnie od sprzężenia, kropka jest obsadzona jednym elektronem o spinie $\uparrow$, co skutkuje stałą i ujemną wartością prądu.

Gdy zmieniane jest sprzężenie jednego z rezerwuarów magnonowych z kropką, prąd magnonowy wykazuje inne zachowanie. W tym przypadku, przedstawionym na rys. 7.6 (c) i (d), ogólne postaci krzywych są jakościowo podobne do krzywych dla przypadku $\Gamma_R = \Gamma_L$ opisanego powyżej. Zmniejszenie sprzężenia jednej z elektrod magnonowych prowadzi do

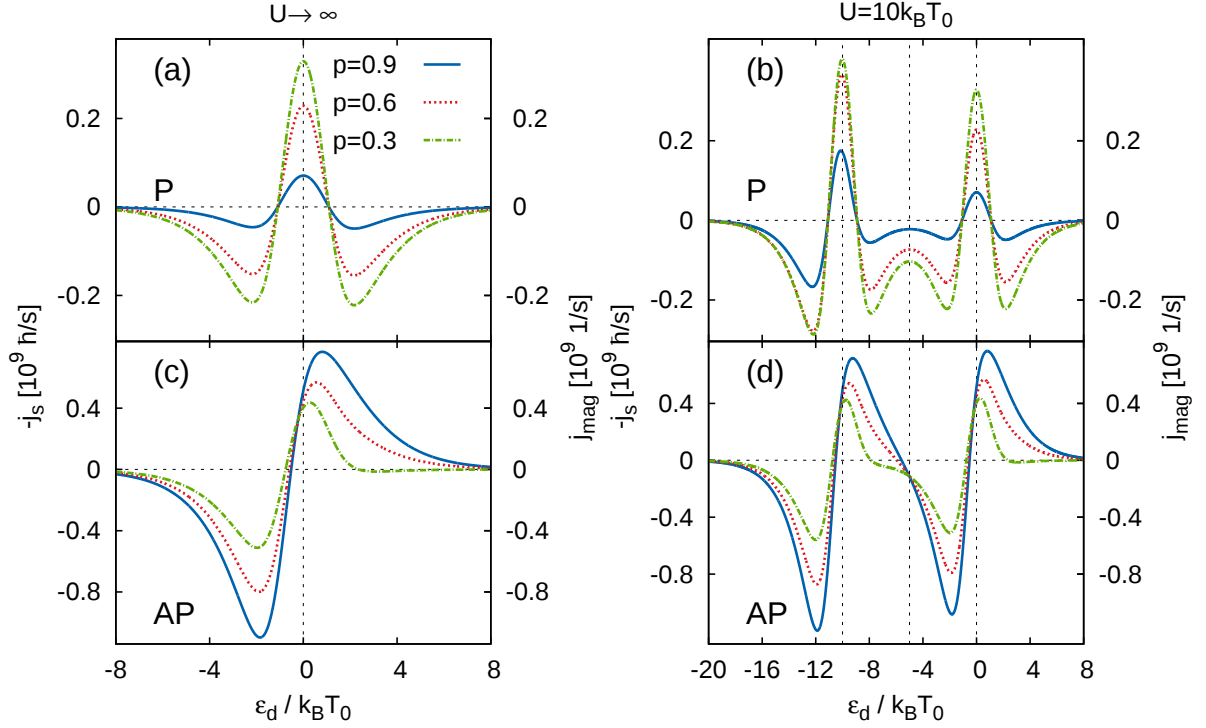


Rysunek 7.7: Prąd magnonowy w funkcji położenia poziomu ε_d kropki oraz wyróżnionych wartości parametru Γ_R dla dodatniej i ujemnej różnicy temperatur $\Delta T_{\text{el}} = \pm T_0$ oraz wskazanych wartości parametru korelacji kulombowskich U . Pozostałe parametry: $J_U = J_D = \Gamma_L = 0.1T_0$, $g\mu_B B = 2T_0$, $T_{\text{mag}}^0 = T_{\text{el}}^0 = T_0$, $\Delta T_{\text{mag}} = 0$, $\Delta\mu = 0$, $p = 0$.

niewielkiego obniżenia intensywności pików odpowiadających energiom rezonansowym kropki oraz zmniejszeniu ujemnej wartości pików bocznego. Natomiast dla energii poziomu kropki $\varepsilon_d = -U/2$ prąd magnonowy nie zmienia się, niezależnie od wartości sprzężenia Γ_R .

Opisana powyżej zmiana znaku prądu magnonowego w obszarze energii rezonansowych kropki zależy również od kierunku gradientu temperatur elektrod metalicznych. W przypadku prądu magnonowego, przedstawionego na rys. 7.7 (a) i (b), zgodnie z dyskusją przeprowadzoną powyżej, istnieje pewna wartość Γ_R , dla której procesy emisji i absorpcji magnonów kompensują się. Dla większej asymetrii sprzężenia prąd magnonowy w obszarze energii rezonansowych zmienia znak i obserwowane są jeden pik, w przypadku $U \rightarrow \infty$, lub dwa piki, w przypadku $U = 10k_B T_0$. Gdy różnica temperatur zostanie ustalona z przeciwnym znakiem, która to sytuacja została przedstawiona na rys. 7.7 (c) i (d), znak prądu w obszarze energii rezonansowych nie ulega zmianie.

W przypadku symetrycznego sprzężenia metalicznych elektrod ferromagnetycznych, przedstawionego na rys. 7.8, widoczny jest silny wpływ polaryzacji magnetycznej na prąd magnonowy. W przypadku równoległej konfiguracji elektrod metalicznych, przedstawionym na rys. 7.8 (a) i (b), intensywności pików odpowiadających energiom rezonansowym kropki ulegają zmniejszeniu wraz ze wzrostem polaryzacji. Jest to związane z faktem, że dla $p > 0$ zmienia się liczba stanów dostępnych dla elektronów o spinie mniejszościowym, w tym przypadku $\downarrow$, w związku z czym spin $\uparrow$ elektronu, który tuneluje przez kropkę w obszarze energii $\varepsilon_d = 0$ ulega obróceniu na spin $\downarrow$, dla którego prawdopodobieństwo przejścia do elektrody jest mniejsze. W przypadku



Rysunek 7.8: Prąd magnonowy w funkcji położenia poziomu ε_d kropki oraz wskazanych wartości polaryzacji p dla równoległej (P) i antyrównoległej (AP) konfiguracji elektrod metalicznych oraz wskazanych wartości parametru korelacji kulombowskich U . Pozostałe parametry: $J_U = J_D = \Gamma_L = \Gamma_R = 0.1T_0$, $B = 2T_0$, $T_{\text{mag}}^0 = T_{\text{el}}^0 = T_0$, $\Delta T_{\text{mag}} = 0$, $\Delta T_{\text{el}} = T_0$, $\Delta\mu = 0$.

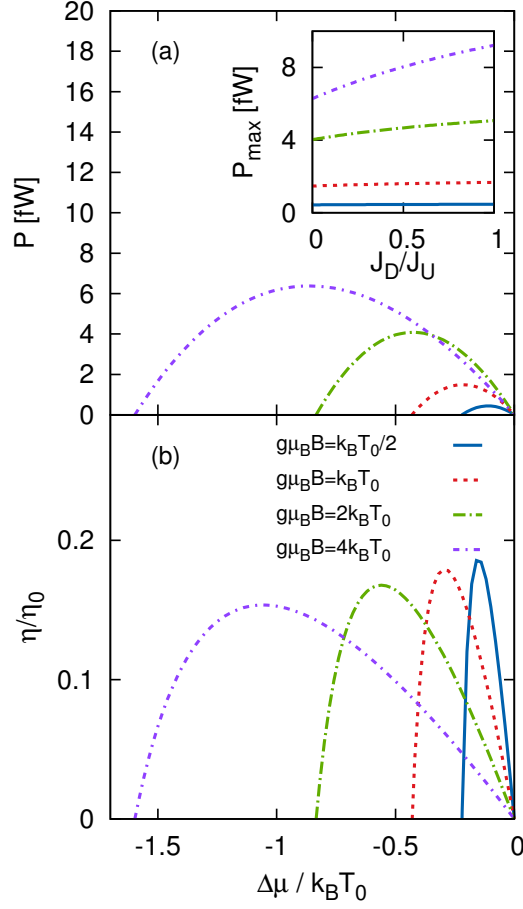
drugiej energii rezonansowej, $\varepsilon_d = -U$, przez kropkę już obsadzoną elektronem o spinie $\uparrow$ może przetunelować elektron o spinie $\downarrow$, który po obrocie może z większym prawdopodobieństwem przejść do elektrod.

W przypadku antyrównoległej konfiguracji elektrod metalicznych, przedstawionym na rys. 7.8 (c) i (d), wzrost polaryzacji magnetycznej elektrod prowadzi do wzrostu maksymalnej wartości prądu magnonowego, czyli do zachowania przeciwnego niż w przypadku konfiguracji równoległej. Dla antyrównoległej konfiguracji elektrod metalicznych, w jednej z elektrod znajduje się więcej wolnych stanów dla elektronów o spinie $\downarrow$ niż w drugiej. W rezultacie, elektrony po obrocie spinu mogą łatwiej przetunelować przez kropkę.

7.2.5 Silnik cieplny

Układ rozpatrywany w niniejszym rozdziale może również działać jako nanoskopowy silnik cieplny, który, podobnie do przypadku opisanego w rozdziale 2, charakteryzuje się wyjściową mocą P i sprawnością η . W przypadku trójterminalowym pokazano wpływ polaryzacji magnetycznej na moc i sprawność układu [83]. Poniżej zostanie uwzględniony wpływ pola magnetycznego na moc i sprawność w przypadku czteroterminalowym. Temperatury rezerwuarów elektronowych i magnonowych są zdefiniowane tak, by dominowały procesy absorpcji magnonów na kropce, tzn. $T_{\text{mag}}^0 > T_{\text{el}}^0$ ($T_U = T_D = T_{\text{mag}}^0$ oraz $T_L = T_R = T_{\text{el}}^0$).

Moc silnika, przedstawiona na rys. 7.9(a), jest najmniejsza w przypadku małego rozszczepienia Zeemana, tzn. gdy $g\mu_B B = k_B T_0/2$. Dla tego przypadku prąd magnonowy przepływający



Rysunek 7.9: Moc i sprawność silnika cieplnego w funkcji różnicy potencjałów elektrochemicznych metalicznych elektrod dla wyróżnionych wartości rozszczepienia Zeemana. Pozostałe parametry: $p = 0.9$, $\varepsilon_d = 0$, $U \rightarrow \infty$, $J_U = J_D = \Gamma_L = \Gamma_R = 0.1k_B T_0$, $T_L = T_R = T_{\text{el}}^0 < T_{\text{mag}}^0 = T_U = T_D$.

przez układ jest mały, co również prowadzi do małego prądu ładunkowego (powstałego w wyniku konwersji). Biorąc również pod uwagę fakt, że elektrody znajdują się w konfiguracji antyrównoległej i są silnie spolaryzowane, $p = 0.9$, przepływ prądu jest ograniczony i w związku z tym użyteczna moc uzyskana z urządzenia jest niewielka. Powoduje to również niewielką wartość napięcia V_{th} (czyli takiego skończonego napięcia, dla którego moc znika), które jest równe napięciu Seebecka. Wzrost wartości pola magnetycznego prowadzi do lepszej separacji poziomów odpowiadających obydwu kierunkom spinu i umożliwia efektywny obrót spinu elektronu, co z kolei skutkuje większym prądem elektrycznym i, zarazem, większą mocą. Dalszy wzrost pola prowadzi do wzrostu maksymalnej wartości mocy i napięcia Seebecka, V_{th} . Zmniejszenie sprzężenia kropki z jednym z rezerwuarów magnonowych prowadzi do obniżenia maksymalnej mocy urządzenia dla wszystkich wartości pola magnetycznego, co zostało pokazane we wstawce na rys. 7.9(a).

Sprawność urządzenia w stosunku do odpowiedniej sprawności Carnot, zanika w przypadku nieobecności napięcia oraz dla napięcia odpowiadającego napięciu Seebecka, czyli największej kompensacji prądu wyindukowanego przez napięcie przez prąd termoelektryczny. Napięcie, dla którego sprawność przyjmuje wartość maksymalną nie odpowiada napięciu, dla którego

moc przyjmuje maksymalną wartość, czyli dla $V = V_{\text{th}}/2$. Można to wyjaśnić następująco: gdy moc urządzenia jest maksymalna, generowany jest znaczący prąd ciepła, który obniża sprawność urządzenia. Tłumaczy to również spadek maksymalnej sprawności ze wzrostem rozszczepienia Zeemana – zarówno prąd ładunkowy jak i prąd ciepła rosną wraz ze wzrostem pola magnetycznego.

7.3 Podsumowanie

W niniejszym rozdziale przeanalizowano transport kwantów fal spinowych (magnonów) przez kropkę kwantową, wywołany różnicą temperatur między elektrodami. Rozpatrzono dwa przypadki szczególne. W pierwszym przypadku kropka była połączona jedynie z dwiema elektrodami dielektrycznymi, gwarantując przepływ wyłącznie prądu magnonowego. Drugi przypadek odnosił się do kropki połączonej z jedną elektrodą metaliczną i jedną dielektryczną. Dla tego przypadku pokazano konwersję prądu spinowego przenoszonego przez elektrony na prąd spinowy przenoszony przez magnony. Obydwa te przypadki mogą posłużyć jako uproszczony model granic międzywarstwowych pomiędzy dwoma izolatorami magnetycznymi lub pomiędzy metalami a izolatorami magnetycznymi. Ostatecznie przeanalizowano przypadek ogólny kropki kwantowej połączonej z dwiema elektrodami metalicznymi i dwiema dielektrycznymi. W szczególności rozpatrzono wpływ symetrii połączenia kropki i elektrod, wskazując na możliwość stworzenia spinowej diody termicznej. Ponadto pokazano, że rozpatrywany układ może działać jako silnik cieplny o użytecznej mocy i stosunkowo wysokiej sprawności. Wyniki zostały zaprezentowane dla polaryzacji stosunkowo wysokiej polaryzacji magnetycznej elektrod metalicznych, $p = 0.9$. Dla przypadku $p = 1$, teoretycznie jest możliwa bezstratna konwersja prądu magnonowego absorbowanego na kropce na prąd elektryczny, czyli uzyskanie 100% sprawności Carnota.

Rozdział 8

Podsumowanie

Zaobserwowanie w 2008 roku spinowego efektu Seebecka w metalicznych magnetykach spowodowało wzrost zainteresowania spinowymi zjawiskami termoelektrycznymi jako efektami umożliwiającymi uzyskanie czystego prądu spinowego do zastosowań w spintronice. Przedmiotem niniejszej rozprawy jest analiza zjawisk termoelektrycznych zależnych od spinu w układach kropek kwantowych, które pozwalają na obserwację i kontrolę zjawisk trudno dostępnych dla innych układów, jak np. zjawisko Kondo lub zjawiska interferencyjne. Badanie efektów termoelektrycznych w układach kropek kwantowych umożliwia dokładną analizę przepływu ładunku oraz spinu. Niniejszy rozdział zawiera podsumowanie najważniejszych rezultatów rozprawy.

W rozdziale 1 przedstawiono krótkie wprowadzenie do tematyki kropek kwantowych, efektów termoelektrycznych: ładunkowych i spinowych oraz zjawisk interferencyjnych występujących w układach kropek kwantowych. Dokonano wyprowadzenia wyrażeń na współczynniki termoelektryczne, takie jak: konduktancja elektryczna G , wkład elektronowy do konduktancji cieplnej κ , współczynnik Seebecka: spinowy S_s oraz ładunkowy S , a także współczynniki efektywności termoelektrycznej ZT i $Z_s T$. Następnie rozprawa została podzielona na trzy części dotyczące trzech reżimów transportowych w układach kropek kwantowych: blokady kulombowskiej, silnych korelacji oraz słabego sprzężenia.

W rozdziale 2 rozważono wpływ oddziaływania spinowo-orbitalnego typu Rashby na efekty termoelektryczne w układzie jednopoziomowej kropki kwantowej połączonej z dwiema ferromagnetycznymi elektrodami. Przyjęto, że procesy tunelowe pomiędzy elektrodami a kropką mogą odbywać się z zachowaniem spinu oraz bez zachowania spinu elektronu tunelującego. Ten drugi proces jest wywołany silnym oddziaływaniem Rashby, które może zostać zrealizowane eksperymentalnie w układzie bardzo wąskich drutów kwantowych połączonych z kropką. W rozdziale pokazano metodę nierównowagowych funkcji Greena zastosowanych do wyznaczenia współczynnika transmisji elektronu o spinie $\sigma = \uparrow, \downarrow$ przez kropkę. Część dotyczącą wyników analizy podzielono na podrozdziały dotyczące przypadku, w którym w elektrodach nie występuje spinowa akumulacja, oraz przypadku, w którym uwzględniono spinową akumulację. W przypadku nieobecności spinowej akumulacji pokazano zależności ładunkowych współczynników termoelektrycznych od parametrów układu, takich jak: energia poziomu kropki, parametr q związany ze sprzężeniem spinowo-orbitalnym oraz pole magnetyczne. Pokazano, że sprzężenie spinowo-orbitalne powoduje zmniejszenie degeneracji spinowej i spadek współczynnika Seebecka

oraz współczynnika efektywności termoelektrycznej. W kolejnej części rozważono przypadek szczególny półmetalicznych elektrod, dla którego wzrost wartości sprzężenia spinowo-orbitalnego wiąże się z zającem efektu interferencyjnego typu Fano. W tym przypadku kanałem tła jest kanał nośników o spinie $\uparrow$, a kanałem rozprzęgniętym od elektrod, kanał nośników o spinie $\downarrow$. Ponadto wzrost wartości parametru q prowadzi do wzrostu wartości współczynników termoelektrycznych. Pokazano również możliwość działania rozpatrywanego układu jako silnika cieplnego o ok. 20-procentowej sprawności (względem sprawności Carnota), kontrolowanego parametrem q , a więc i sprzężeniem Rashby.

W rozdziale 3 przedstawiono wyniki analizy układu dwóch kropek kwantowych połączonych z niemagnetycznymi elektrodami. Ponadto obydwie kropki znajdują się w ramionach pierścienia Aharonova-Bohma z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym typu Rashby. Pokazano wpływ oddziaływania kulombowskiego na ładunkowe i spinowe efekty termoelektryczne, w szczególności wyodrębnienie dodatkowych stanów: wiążącego i antywiążącego. Następnie przeanalizowano wpływ fazy Rashby na współczynniki termoelektryczne, wskazując na możliwość elektrycznej kontroli spinowych efektów termoelektrycznych.

W rozdziale 4 przeanalizowano układ jednopoziomowej kropki kwantowej połączonej z dwiema ferromagnetycznymi elektrodami ze sprzężeniem spinowo-orbitalnym Rashby, wprowadzony w rozdziale 2, w reżimie Kondo lub, równoważnie, reżimie silnych korelacji. W pierwszej części rozdziału opisano metodę bozonów pomocniczych, która pozwala na analizę zjawiska Kondo w kropkach kwantowych z uwzględnieniem skończonej wartości oddziaływania kulombowskiego. Następnie przeanalizowano zachowanie się temperatury Kondo oraz pola wymiany pochodzącego od sprzężenia kropki z ferromagnetycznymi elektrodami. Pokazano, że wzrost wartości sprzężenia spinowo-orbitalnego prowadzi do wzrostu temperatury Kondo. W kolejnej części pokazano wpływ parametru q , związanego z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym typu Rashby, pola magnetycznego i polaryzacji magnetycznej elektrod na współczynniki transmisji oraz gęstość stanów kropki kwantowej. Pokazano, że zniesienie degeneracji spinowej poprzez wzrost polaryzacji magnetycznej lub pola magnetycznego prowadzi do efektu Fano, podczas gdy przywrócenie degeneracji, przez wzrost wartości parametru q , prowadzi do efektu Dicke. Następnie przeanalizowano wpływ tych zjawisk na współczynniki termoelektryczne. Między innymi pokazano, że analiza termosyły w zależności od temperatury pozwala na wykrycie momentu wygaszenia stanu Kondo.

Rozdział 5 dotyczy transportu termoelektrycznego przez układ dwóch silnie skorelowanych kropek kwantowych połączonych, z dwiema, w ogólnym przypadku, ferromagnetycznymi elektrodami. W części pierwszej rozdziału przedstawiono zastosowanie metody bozonów pomocniczych do badanego modelu. Następnie przeanalizowano zachowanie obsadzenia stanów: wiążącego i antywiążącego, pojawiających się w rozpatrywanym układzie, od zadanych wartości parametrów. Następnie rozważono efekty termoelektryczne w przypadkach: niemagnetycznych elektrod, elektrod magnetycznych bez akumulacji spinowej oraz elektrod magnetycznych z akumulacją spinową.

Rozdział 6 dotyczy transportu termoelektrycznego przez układ wprowadzony w rozdziale 3, uwzględniając silne korelacje pomiędzy kropkami a elektrodami. W przypadku reżimu Kondo poziomy kropek ulegają efektywnemu rozszczepieniu związanemu z fazą Rashby. Pokazano

możliwość uzyskania większej wartości spinowego współczynnika Seebecka niż jego ładunkowego odpowiednika.

W rozdziale 7 przeanalizowano transport magnonów, czyli kwantów fal spinowych, przez układ kropki kwantowej połączonej, w ogólnym przypadku, z dwiema elektrodami ferromagnetycznymi oraz dwiema wykonanymi z magnetycznego izolatora, który jest źródłem fal spinowych. Pokazano przypadki szczególne, gdy kropka jest połączona z dwiema elektrodami dielektrycznymi lub jedną dielektryczną i jedną metaliczną. W szczególności przeanalizowano wpływ sprzężenia elektrod oraz temperatury na prąd magnonowy płynący przez układ. Pokazano możliwość konwersji prądów: magnonowego na elektronowy prąd spinowy i *vice versa*. Pokazano również wpływ korelacji kulombowskich na kropce na prąd magnonowy i ostatecznie przedstawiono propozycję działania rozpatrywanego układu jako silnika cieplnego.

Dodatek

Dodatek A

Podstawowe transformacje

A.1 Transformacja unitarna hamiltonianu kropki kwantowej z oddziaływaniem Rashby

Model wprowadzony w rozdziale 2, wyrażony hamiltonianem (2.1), jest równoważny modelowi bezspinowej dwupoziomowej kropki kwantowej znajdującej się w efektywnym polu magnetycznym [118, 119].

Zakładając dla uproszczenia, że amplitudy tunelowe są niezależne od wektora falowego $\mathbf{k}$ oraz, że są jednakowe dla obydwu elektrod ($V_{\mathbf{k}\beta\sigma} = V_\sigma$, $V_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{so} = V_\sigma^{so} = \sqrt{q}V_\sigma$), można wprowadzić transformację w postaci:

$$\begin{pmatrix} d_1^{(\dagger)} \\ d_2^{(\dagger)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1+q}} \begin{pmatrix} 1 & -i\sqrt{q} \\ -i\sqrt{q} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_\uparrow^{(\dagger)} \\ d_\downarrow^{(\dagger)} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

gdzie nowe operatory również podlegają fermionowym regułom antykomutacyjnym:

$$\begin{aligned} \{d_i, d_j^\dagger\} &= \delta_{ij}, \\ \{d_i^{(\dagger)}, d_j^{(\dagger)}\} &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

dla $i, j = 1, 2$.

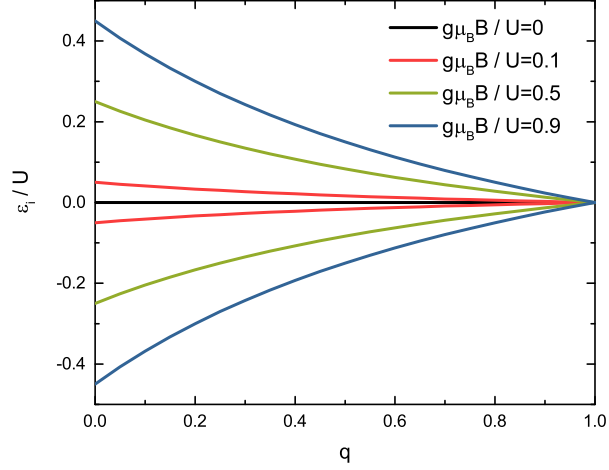
Przetransformowany Hamiltonian układu można zapisać następująco:

$$H' = H_e + H'_d + H'_t, \quad (\text{A.3})$$

gdzie H_e pozostaje niezmienny w stosunku do hamiltonianu (2.2), podczas gdy hamiltonian kropki, H'_d , oraz hamiltonian opisujący tunelowanie, H'_t , przyjmują następujące postaci:

$$H'_d = \sum_{i=1,2} \varepsilon_i d_i^\dagger d_i - g\mu_B B_y \hat{S}_y + U d_1^\dagger d_1 d_2^\dagger d_2, \quad (\text{A.4})$$

$$H'_t = \sum_{\mathbf{k}\beta} \left(V'_\uparrow c_{\mathbf{k}\beta\uparrow}^\dagger d_1 + V'_\downarrow c_{\mathbf{k}\beta\downarrow}^\dagger d_2 \right) + \text{H.c.}, \quad (\text{A.5})$$



Rysunek A.1: Energia ε_i poziomów $i = 1, 2$ w zależności od parametru q dla wyróżnionych wartości pola magnetycznego $g\mu_B B$. Przyjęto $\varepsilon_d = 0$.

gdzie

$$\begin{aligned}\varepsilon_i &= \varepsilon_d \mp \frac{g\mu_B B(1-q)}{2(1+q)}, \\ g\mu_B B_y &= \frac{2g\mu_B B\sqrt{q}}{1+q}, \\ V'_\sigma &= \sqrt{1+q}V_\sigma.\end{aligned}\tag{A.6}$$

W równaniu (A.4), $\hat{S}_y = (1/2)\sum_{ij}(\sigma_y)_{ij}d_i^\dagger d_j$ jest składową operatora pseudospinu w kierunku y . Renormalizacja bezspinowych poziomów ε_i zależy od pola efektywnego wynikającego ze współoddziaływania członu odpowiadającego za sprzężenie spinowo-orbitalne typu Rashby i zewnętrznego pola magnetycznego.

Na rys. A.1 przedstawiono energię ε_i poziomów 1 i 2 w zależności od parametru q dla wyróżnionych wartości pola $g\mu_B B$. W przypadku $q = 1$ zależność od pola magnetycznego znika, więc stany odpowiadające energiom ε_i są zdegenerowane. Podobne zachowanie występuje dla przypadku $B = 0$.

W wyniku zastosowania transformacji (A.1) hamiltonian opisujący tunelowanie elektronu pomiędzy kropką a elektrodami staje się diagonalny w przestrzeni spinowej. W rezultacie macierz sprzężenia stanów spinowych pomiędzy kropką a elektrodami może zostać wyrażona następująco:

$$\mathbf{\Gamma}' = \begin{bmatrix} \Gamma'_\uparrow & 0 \\ 0 & \Gamma'_\downarrow \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1+p)(1+q)\Gamma & 0 \\ 0 & (1-p)(1+q)\Gamma \end{bmatrix}.\tag{A.7}$$

W przypadku półmetalicznych elektrod, $p = 1$, stan $\downarrow$ ulega rozprzęgnięciu.

A.2 Wyprowadzenie hamiltonianu kropki kwantowej z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym Rashby w obszarze kropki kwantowej w reprezentacji drugiej kwantyzacji

W przypadku omawianym w rozdziale 2 i rozdziale 4 oddziaływanie spinowo-orbitalne Rashby (RSO) znajdowało się w drucie kwantowym, który łączył ze sobą kropkę kwantową i elektrody [101,103,104]. W przypadkach rozważanych w rozdziałach 3 i 6, oddziaływanie Rashby znajduje się w obszarze dwuwymiarowego gazu elektronowego (2DEG), w którym wyodrębniono układ kropek kwantowych.

Podążając za rozumowaniem przedstawionym w pracy [100] hamiltonian dla układu kropek z oddziaływaniem spinowo orbitalnym Rashby w kierunku $\mathbf{y}$, przy czym spin elektronów jest spolaryzowany w kierunku $\mathbf{z}$, a elektrony poruszają się wzdłuż osi $\mathbf{x}$, można zapisać w postaci [100]

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_z^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) + \frac{\alpha}{\hbar} (\hat{\sigma}_z \hat{p}_x - \hat{p}_z \hat{\sigma}_x) + \hat{\sigma}_z (M_{L,z} + M_{R,z}), \quad (\text{A.8})$$

gdzie α jest stałą sprzężenia RSO, $\hat{p}_{x,z}$ jest operatorem pędu elektronu w kierunku x lub z , m^* jest masą efektywną elektronu w 2DEG, $U(\mathbf{r})$ jest oddziaływaniem kulombowskim na kropce, $V(\mathbf{r})$ jest potencjałem bariery tunelowej, $\hat{\sigma}_{x,z}$ jest odpowiednią macierzą Pauliego, a $M_{L,z}$ ($M_{R,z}$) jest namagnesowaniem elektrody L (R) w kierunku z . W hamiltonianie (A.8) założono, że stała sprzężenia RSO, α , jest izotropowa.

Aby hamiltonian (A.8) móc zapisać w reprezentacji drugiej kwantyzacji, konieczne jest w pierwszej kolejności zastosowanie transformacji kanonicznej, która spowoduje, że oddziaływanie RSO będzie brane pod uwagę wyłącznie w obrębie układu kropek kwantowych. Transformacja ta zostanie wyrażona następującym wzorem [100]:

$$\hat{U} = \begin{cases} \exp(-i\sigma_z k_R \Delta x), & \text{dla } x_L < x < x_R, \\ 0, & \text{w p.p.} \end{cases}, \quad (\text{A.9})$$

gdzie $x_{L,R}$ oznaczają położenie odpowiedniej bariery tunelowej, oddzielającej układ kropek od elektrod. Ponadto $k_R = \alpha m^* / \hbar^2$, a Δx jest długością obszaru zajmowanego przez układ kropek kwantowych, w którym istnieje niezerowe sprzężenie RSO. Ponadto można wprowadzić oznaczenie: $\phi_R \equiv k_R \Delta x$.

Stany własne układu kropek kwantowych ulegają przekształceniu w wyniku zastosowania transformacji (A.9) następująco [100]:

$$|n \uparrow\rangle' \equiv U |n \uparrow\rangle = e^{-i\phi_R} |n\rangle |\uparrow\rangle, \quad (\text{A.10a})$$

$$|n \downarrow\rangle' \equiv U |n \downarrow\rangle = e^{i\phi_R} |n\rangle |\downarrow\rangle, \quad (\text{A.10b})$$

gdzie $|n\rangle$ jest n -tym stanem orbitalnym układu, $|\sigma\rangle$ dla $\sigma = \uparrow, \downarrow$ jest stanem spinowym układu kropek.

Stosując transformację (A.9) do wyjściowego hamiltonianu (A.8) otrzymany zostaje hamiltonian

$$\hat{H}' = \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_z^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_R^2}{m^*} - \frac{\hbar k_R \hat{p}_z}{m^*} \left(\sigma_+ e^{i2\phi_R} + \sigma_- e^{-i2\phi_R} \right) + V(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) + \hat{\sigma}_z (M_{L,z} + M_{R,z}), \quad (\text{A.11})$$

gdzie $\hat{\sigma}_\pm = (\hat{\sigma}_x \pm i\hat{\sigma}_y)/2$ jest operatorem podwyższenia lub obniżenia spinu. Ponadto do otrzymania hamiltonianu (A.11) zastosowano formułę Bakera-Campbella-Hausdorffa:

$$e^{\hat{S}} \hat{H} e^{-\hat{S}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\hat{S}, \hat{H}]_n = \hat{H} + [\hat{S}, \hat{H}] + \frac{1}{2} [\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]] + \dots \quad (\text{A.12})$$

Ostatecznie hamiltonian (A.11) można przekształcić do reprezentacji drugiej kwantyzacji. Dla elektrod hamiltonian można zapisać wzorem

$$\begin{aligned} H_e &= \sum_{ij\sigma\sigma'} \langle i\sigma | \hat{H}' | j\sigma' \rangle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\beta\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Dla układu kropek kwantowych hamiltonian wyrażony jest następująco:

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{mn} \sum_{\sigma\sigma'} \langle m\sigma | \hat{H}' | n\sigma' \rangle d_{m\sigma}^\dagger d_{n\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_{klmn} \sum_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} \langle kl\sigma_1\sigma_2 | \hat{H}' | mn\sigma_3\sigma_4 \rangle d_{k\sigma_1}^\dagger d_{m\sigma_3}^\dagger d_{l\sigma_2} d_{n\sigma_4} \\ &= \sum_m \varepsilon_m d_{m\sigma}^\dagger d_{m\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{mn\sigma\sigma'} U_{nm} n_{m\sigma} n_{n\sigma'} + \sum_{mn\sigma} t_{mn\sigma} \left(d_{m\sigma}^\dagger d_{n\sigma} + d_{n\sigma}^\dagger d_{m\sigma} \right) \\ &\quad + \sum_{mn} t_{mn}^{so} \left(d_{m\downarrow}^\dagger d_{n\uparrow} - d_{m\downarrow}^\dagger d_{n\uparrow} \right), \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

gdzie t_{mn}^{so} jest sprzężeniem pomiędzy kropkami (poziomami), w wyniku którego elektron zmienia spin podczas przeskoku. W niniejszej rozprawie, w hamiltonianie (3.3) czynnik ten został zaniedbany.

Hamiltonian tunelowania elektronów pomiędzy kropką a elektrodami jest dany wzorem

$$\begin{aligned} H_t &= \sum_{im\sigma\sigma'} \langle i\sigma | \hat{H}' | m\sigma' \rangle c_{i\sigma}^\dagger d_{m\sigma'} + \text{H.c.} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\beta m\sigma} V'_{\mathbf{k}\beta m\sigma} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger d_{m\sigma} + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

gdzie $V'_{\mathbf{k}\beta m\sigma} = V_{\mathbf{k}\beta m\sigma} \exp(-i\hat{\sigma}\phi_R)$.

A.3 Transformacja Holsteina-Primakoffa

W niniejszym dodatku opisana zostanie transformacja Holsteina-Primakoffa na przykładzie przejścia od hamiltonianu (7.3), opisującego oddziaływanie wymienne pomiędzy rezerwuarem magnonów a spinem na kropce kwantowej, do hamiltonianu w reprezentacji drugiej kwantyzacji [133].

Wyjściowy hamiltonian:

$$H_{t-m} = \sum_{\alpha,i} j_{ex}^{\alpha i} \mathbf{S}_{\alpha i} \cdot \mathbf{s}, \quad (A.16)$$

gdzie $\mathbf{S}$ jest spinem rezerwuaru magnonów, a $\mathbf{s}$ spinem elektronu na kropce kwantowej. Wprowadzając operatory podwyższające i obniżające spin, $S_{\alpha i}^{\pm} = S_{\alpha i}^x \pm iS_{\alpha i}^y$ oraz wykonując transformację Fouriera, hamiltonian (A.16) można zapisać następująco:

$$H_{t-m} = \sum_{\alpha \mathbf{q}} j_{\alpha \mathbf{q}} \left(S_{\alpha}^{+} s^{-} + S_{\alpha}^{-} s^{+} + S_{\alpha}^z s^z \right). \quad (A.17)$$

Transformacja Holsteina-Primakoffa polega na zastąpieniu powyższych operatorów podwyższających i obniżających spin oraz składowej z spinu, dotyczących rezerwuaru magnonowego, operatorami kreacji i anihilacji, spełniającymi bozonowe reguły komutacji:

$$S_{\alpha i}^{+} = \left(2S - a_{\alpha \mathbf{q}}^{\dagger} a_{\alpha \mathbf{q}} \right)^{1/2} a_{\alpha i} \approx a_{\alpha \mathbf{q}}, \quad (A.18)$$

$$S_{\alpha i}^{-} = a_{\alpha \mathbf{q}}^{\dagger} \left(2S - a_{\alpha \mathbf{q}}^{\dagger} a_{\alpha \mathbf{q}} \right)^{1/2} \approx a_{\alpha \mathbf{q}}^{\dagger}, \quad (A.19)$$

$$S_{\alpha}^z = S - a_{\alpha \mathbf{q}}^{\dagger} a_{\alpha \mathbf{q}}. \quad (A.20)$$

Przybliżenie, które zastosowano w powyższych wyrażeniach, wynika z założenia, że średni spin magnonów jest mniejszy niż $2S$ ze względu na niewielkie odchylenia spinu od równowagowej wartości S .

Operatory spinowe kropki natomiast zastąpione zostają następującymi wyrażeniami:

$$s^{+} = d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}, \quad (A.21)$$

$$s^{-} = d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow}, \quad (A.22)$$

$$s^z = \frac{1}{2} \left(d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \right) \quad (A.23)$$

Podstawiając wyrażenia (A.18)-(A.23) do hamiltonianu (A.17) uzyskana zostaje następująca postać:

$$H_{t-m} = \sum_{\alpha \mathbf{q}} j_{\alpha \mathbf{q}} \left(a_{\alpha \mathbf{q}} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + a_{\alpha \mathbf{q}}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \right) + H_{t-m}^z, \quad (A.24)$$

gdzie

$$H_{t-m}^z = \sum_{\alpha \mathbf{q}} j_{\alpha \mathbf{q}} \left[\frac{1}{2} (S - a_{\alpha i}^{\dagger} a_{\alpha i}) (d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}) \right]. \quad (A.25)$$

Powyższy człon może zostać włączony do hamiltonianu kropki kwantowej, powodując dodatkowe, oprócz pola magnetycznego, rozszczepienie jej poziomów. Jednakże ze względu na słabe sprzężenie rezerwuarów magnonów, wpływ zewnętrznego pola magnetycznego na rozszczepienie poziomu kropki jest silniejszy, co uzasadnia pominięcie powyższego członu. Ostatecznie hamiltonian opisujący oddziaływanie elektronów na kropce kwantowej z magnonami sprowadza się do postaci zapisanej wzorem (7.5).

Bibliografia

- [1] L. B. Kish, *End of Moore's law: thermal (noise) death of integration in micro and nano electronics*, Phys. Lett. A **305**, 144 (2002).
- [2] J. R. Powell, *The Quantum Limit to Moore's Law*, Proc. IEEE **96**, 1247 (2008).
- [3] M. M. Waldrop, *More than Moore*, Nature **530**, 144 (2006).
- [4] *Single Charge Tunneling*, (pod. red. H. Grabert, M. H. Devoret), (Plenum Press, 1991).
- [5] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, D. M. Treger, *Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future*, Science **294**, 1488 (2001).
- [6] I. Žutić, H. Dery, *Spintronics: Taming spin currents*, Nature Mater. **10**, 647 (2011).
- [7] I. Žutić, J. Fabian, S. Das Sarma, *Spintronics: Fundamentals and applications*, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
- [8] J. Barnaś, *Spin w elektronice*, Postępy Fizyki **53D**, 78 (2002).
- [9] C. J. Davisson, L. H. Germer, *Reflection of Electrons by a Crystal of Nickel*, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. **14**, 317 (1928).
- [10] M. Arndt, O. Nairz, J. Vos-Andreae, C. Keller, G. van der Zouw, A. Zeilinger, *Wave-particle duality of C60 molecules*, Nature **401**, 680 (1999).
- [11] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky, H. Sowers, *Layered Magnetic Structures: Evidence for Antiferromagnetic Coupling of Fe Layers across Cr Interlayers*, Phys. Rev. Lett **57**, 2442 (1986).
- [12] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, J. Chazelas, *Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988).
- [13] R. E. Camley, J. Barnaś, *Theory of giant magnetoresistance effects in magnetic layered structures with antiferromagnetic coupling*, Phys. Rev. Lett. **63**, 664 (1989).
- [14] T. Valet, A. Fert, *Theory of the perpendicular magnetoresistance in magnetic multilayers*, Phys. Rev. B **48**, 7099 (1993).
- [15] M. Julliere, *Tunneling between ferromagnetic films*, Phys. Lett. **54A**, 225 (1975).

- [16] J. S. Moodera, Lisa R. Kinder, Terrilyn M. Wong, R. Meservey, *Large Magnetoresistance at Room Temperature in Ferromagnetic Thin Film Tunnel Junctions*, Phys. Rev. Lett. **74**, 3273 (1995).
- [17] J. J. Urban, *Prospects for thermoelectricity in quantum dot hybrid arrays*, Nature Nano. **10**, 997 (2015).
- [18] C. R. Kagan, C. B. Murray, *Charge transport in strongly coupled quantum dot solids*, Nature Nano. **10**, 1013 (2015).
- [19] J. Fernández-Rossier, R. Aguado, *Mn-doped II-VI quantum dots: artificial molecular magnets*, Phys. Status Solidi (c) **3**, 3734 (2006).
- [20] D. L. Klein, R. Roth, A. K. L. Lim, A. P. Alivisatos, P. L. McEuen, *A single-electron transistor made from a cadmium selenide nanocrystal*, Nature **389**, 699 (1997).
- [21] P. Jarillo-Herrero, S. Sapmaz, C. Dekker, L. P. Kouwenhoven, H. S. J. van der Zant, *Electron-hole symmetry in a semiconducting carbon nanotube quantum dot*, Nature **429**, 389 (2004).
- [22] F. Kuemmeth, S. Ilani, D. C. Ralph, P. L. McEuen, *Coupling of spin and orbital motion of electrons in carbon nanotubes*, Nature **452**, 448 (2008).
- [23] J. Lu, P. S. E. Yeo, C. K. Gan, P. Wu, K. P. Loh, *Transforming C60 molecules into graphene quantum dots*, Nature Nano. **6**, 247 (2011).
- [24] L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, S. Tarucha, *Few-electron quantum dots*, Rep. Prog. Phys. **64**, 701 (2001).
- [25] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, L. M. K. Vandersypen, *Spins in few-electron quantum dots*, Rev. Mod. Phys. **79**, 1217 (2007).
- [26] W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, T. Fujisawa, S. Tarucha, L. P. Kouwenhoven, *Electron transport through double quantum dots*, Rev. Mod. Phys. **75**, 1 (2002).
- [27] D. K. Ferry, S. M. Goodnick, J. Bird, *Transport in Nanostructures*, (Cambridge University Press 2009).
- [28] T. Ihn, *Semiconductor Nanostructures, Quantum states and electronic transport*, (Oxford University Press 2011).
- [29] W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, S. Tarucha, L. P. Kouwenhoven, *The Kondo Effect in the Unitary Limit*, Science **289**, 2105 (2000).
- [30] S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp, L. P. Kouwenhoven, *A Tunable Kondo Effect in Quantum Dots*, Science **281**, 540 (1998).
- [31] H. Jeong, A. M. Chang, M. R. Melloch, *The Kondo Effect in an Artificial Quantum Dot Molecule*, Science **293**, 2221 (2001).

- [32] L. Kouwenhoven, L. Glazman, *Revival of the Kondo effect*, Phys. World **14**, 33 (2001).
- [33] J. Kondo, *Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys*, Prog. Theor. Phys. **32**, 37 (1964).
- [34] W. J. de Haas, J. H. de Boer, G. J. van den Berg, *The electrical resistance of gold, copper and lead at low temperatures*, Physica **1**, 7 (1934).
- [35] J. Sólyom, *Fundamentals of the Physics of Solids: Volume II*, (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009).
- [36] P. W. Anderson, *Localized Magnetic States in Metals*, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
- [37] J. R. Schrieffer, P. A. Wolff, *Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians*, Phys. Rev. **149**, 491 (1966).
- [38] P. W. Anderson, *A poor man's derivation of scaling laws for the Kondo problem*, J. Phys. C: Solid State Phys. **3**, 2436 (1970).
- [39] F. D. M. Haldane, *Scaling Theory of the Asymmetric Anderson Model*, Phys. Rev. Lett. **40**, 416 (1978).
- [40] A. N. Pasupathy, R. C. Bialczak, J. Martinek, J. E. Grose, L. A. K. Donev, P. L. McEuen, D. C. Ralph, *The Kondo Effect in the Presence of Ferromagnetism*, Science **306**, 86 (2004).
- [41] J. Martinek, Y. Utsumi, H. Imamura, J. Barnaś, S. Maekawa, J. König, G. Schön, *Kondo Effect in Quantum Dots Coupled to Ferromagnetic Leads*, Phys. Rev. Lett. **91**, 127203 (2003).
- [42] J. R. Hauptmann, J. Paaske, P. E. Lindelof, *Electric-field-controlled spin reversal in a quantum dot with ferromagnetic contacts*, Nature Phys. **4**, 373 (2008).
- [43] J. Martinek, M. Sindel, L. Borda, J. Barnaś, R. Bulla, J. König, G. Schön, S. Maekawa, J. von Delft, *Gate-controlled spin splitting in quantum dots with ferromagnetic leads in the Kondo regime*, Phys. Rev. B **72**, 121302(R) (2005).
- [44] J. Martinek, J. Barnaś, *Spin-dependent transport in single-electron devices [w:] Concepts in Spin Electronics*, (Oxford University Press 2006).
- [45] T. J. Seebeck, *Ueber die magnetische Polarisation der Metalle und Erze durch Temperatur-Differenz*, Ann. Phys. **82**, 133 (1826).
- [46] J. C. A. Peltier, *Nouvelles expériences sur la caloricité des courants électrique*, Annal. Chim. Phys. **56**, 371 (1834).
- [47] W. Thomson, *On the Dynamical Theory of Heat. Trans*, R. Soc. Edinburgh: Earth Sci. **3**, 91 (1851).
- [48] H. J. Goldsmid, *Introduction to Thermoelectricity*, (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010).
- [49] A. F. Ioffe, *Semiconductor Thermoelements and Thermoelectric Cooling*, (Infosearch Ltd. London, 1957).

- [50] A. Shakouri, *Recent Developments in Semiconductor Thermoelectric Physics and Materials*, Annu. Rev. Mater. Res. **41**, 399 (2011).
- [51] L. D. Hicks, M. S. Dresselhaus, *Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit*, Phys. Rev. B **47**, 12727 (1993).
- [52] M. S. Dresselhaus, G. Chen, M. Y. Tang, R. Yang, H. Lee, D. Wang, Z. Ren, J.-P. Fleurial, P. Gogna, *New Directions for Low-Dimensional Thermoelectric Materials*, Adv. Mater. **19**, 1043 (2007).
- [53] Y. Dubi, M. Di Ventra *Colloquium: Heat flow and thermoelectricity in atomic and molecular junctions*, Rev. Mod. Phys. **83**, 131 (2011).
- [54] L. D. Hicks, M. S. Dresselhaus, *Thermoelectric figure of merit of a one-dimensional conductor*, Phys. Rev. B **47**, 16631(R) (1993).
- [55] G. D. Mahan, J. O. Sofo, *The best thermoelectric*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **93**, 7436 (1996).
- [56] R. Scheibner, H. Buhmann, D. Reuter, M. N. Kiselev, L. W. Molenkamp, *Thermopower of a Kondo Spin-Correlated Quantum Dot*, Phys. Rev. Lett. **95**, 176602 (2005).
- [57] A. A. M. Staring, L. W. Molenkamp, B. W. Alphenaar, H. van Houten, O. J. A. Buyk, M. A. A. Mabeoone, C. W. J. Beenakker, C. T. Foxon, *Coulomb-Blockade Oscillations in the Thermopower of a Quantum Dot*, Eur. Phys. Lett. **22**, 57 (1993).
- [58] R. Scheibner, E. G. Novik, T. Borzenko, M. König, D. Reuter, A. D. Wieck, H. Buhmann, L. W. Molenkamp *Sequential and cotunneling behavior in the temperature-dependent thermopower of few-electron quantum dots*, Phys. Rev. B **75**, 041301(R) (2007).
- [59] S. Fahlvik Svensson, E. A. Hoffmann, N. Nakpathomkun, P. M. Wu, H. Q. Xu, H. A. Nilsson, D. Sanchez, V. Kashcheyevs, H. Linke, *Nonlinear thermovoltage and thermocurrent in quantum dots*, New J. Phys. **15**, 105011 (2013).
- [60] S. Fahlvik Svensson, A. I. Persson, E. A. Hoffmann, N. Nakpathomkun, H. A. Nilsson, H. Q. Xu, L. Samuelson, H. Linke, *Lineshape of the thermopower of quantum dots*, New J. Phys. **14**, 033041 (2012).
- [61] H. Thierschmann, M. Henke, J. Knorr, L. Maier, C. Heyn, W. Hansen, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, *Diffusion thermopower of a serial double quantum dot*, New J. Phys. **15**, 123010 (2013).
- [62] K. Uchida, S. Takahashi, K. Harii, J. Ieda, W. Koshibae, K. Ando, S. Maekawa, E. Saitoh, *Observation of the spin Seebeck effect*, Nature **455**, 778 (2008).
- [63] G. E. W. Bauer, E. Saitoh, B. J. van Wees, *Spin caloritronics*, Nat. Mater. **11**, 391 (2012).
- [64] S. R. Boona, R. C. Myers, J. P. Heremans, *Spin caloritronics*, Energy Environ. Sci., **7**, 885 (2014).

- [65] M. Johnson, R. H. Silsbee, *Thermodynamic analysis of interfacial transport and of the thermomagnetolectric system*, Phys. Rev. B **35**, 4959 (1987).
- [66] J. Flipse, F. L. Bakker, A. Slachter, F. K. Dejene, B. J. van Wees, *Direct observation of the spin-dependent Peltier effect*, Nature Nano. **7**, 166 (2012).
- [67] C. M. Jaworski, J. Yang, S. Mack, D. D. Awschalom, J. P. Heremans, R. C. Myers, *Observation of the spin-Seebeck effect in a ferromagnetic semiconductor*, Nature Mater. **9**, 898 (2010)
- [68] K. Uchida, J. Xiao, H. Adachi, J. Ohe, S. Takahashi, J. Ieda, T. Ota, Y. Kajiwara, H. Umezawa, H. Kawai, G. E. W. Bauer, S. Maekawa, E. Saitoh, *Spin Seebeck insulator*, Nature Mater. **9**, 894 (2010).
- [69] A. V. Chumak, V. I. Vasyuchka, A. A. Serga, B. Hillebrands, *Magnon spintronics*, Nature Phys. **11**, 453 (2015).
- [70] A.A. Serga, A. V. Chumak, B. Hillebrands, *YIG magnonics*, J. Phys. D: Appl. Phys. **43**, 264002 (2010).
- [71] K. Vogt, F.Y. Fradin, J.E. Pearson, T. Sebastian, S.D. Bader, B. Hillebrands, A. Hoffmann, H. Schultheiss, *Realization of a spin-wave multiplexer*, Nature Comm. **5**, 3727 (2014).
- [72] A. V. Chumak, A.A. Serga, B. Hillebrands, *Magnon transistor for all-magnon data processing*, Nature Comm. **5**, 4700 (2014).
- [73] S. Borlenghi, W. Wang, H. Fangohr, L. Bergvist, A. Delin, *Designing a Spin-Seebeck Diode*, Phys. Rev. Lett. **112**, 047203 (2014).
- [74] S. Borlenghi, S. Lepri, L. Bergvist, A. Delin, *Thermomagnonic diode: Rectification of energy and magnetization currents*, Phys. Rev. B **89**, 054428 (2014).
- [75] A. B. Cahaya, O. A. Tretiakov, G. E. W. Bauer, *Spin Seebeck power generators*, Appl. Phys. Lett. **104**, 042402 (2014).
- [76] J. Ren, J.-X. Zhu, *Theory of asymmetric and negative differential magnon tunneling under temperature bias: Towards a spin Seebeck diode and transistor*, Phys. Rev. B **88**, 094427 (2013).
- [77] L. Chotorlishvili, Z. Toklikishvili, V. K. Dugaev, J. Barnaś, S. Trimper, J. Berakdar, *Fokker-Planck approach to the theory of the magnon-driven spin Seebeck effect*, Phys. Rev. B **88**, 144429 (2013).
- [78] S. S.-L. Zhang, S. Zhang, *Spin convertance at magnetic interfaces*, Phys. Rev. B **86**, 214424 (2012).
- [79] Y. Kajiwara, K. Harii, S. Takahashi, J. Ohe, K. Uchida, M. Mizuguchi, H. Umezawa, H. Kawai, K. Ando, K. Takanashi, S. Maekawa, E. Saitoh, *Transmission of electrical signals by spin-wave interconversion in a magnetic insulator*, Nature **464**, 262 (2010).

- [80] J. C. Slonczewski, *Current-driven excitation of magnetic multilayers*, J. Magn. Magn. Mater. **159**, L1 (1996).
- [81] J. C. Slonczewski, *Excitation of spin waves by an electric current*, J. Magn. Magn. Mater. **195**, L261 (1999).
- [82] L. Berger, *Emission of spin waves by a magnetic multilayer traversed by a current*, Phys. Rev. B **54**, 9353 (1996).
- [83] B. Sothmann, M. Büttiker, *Magnon-driven quantum-dot heat engine*, Eur. Phys. Lett. **99**, 27001 (2012).
- [84] B. Sothmann, J. König, A. Kadigrobov, *Influence of spin waves on transport through a quantum-dot spin valve*, Phys. Rev. B **82**, 205314 (2010).
- [85] O. Strelcyk, T. Korb, H. Schoeller, *Magnon transport and spin current switching through quantum dots*, Phys. Rev. B **72**, 165343 (2005).
- [86] H. B. Callen, *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics, Second Edition*, (John Wiley and Sons, Inc., 1985).
- [87] H. Haug, A. P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*, (Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2008).
- [88] J. M. Ziman, *Wstęp do teorii ciała stałego*, (PWN, Warszawa 1997).
- [89] M. G. Vavilov, A. D. Stone, *Failure of the Wiedemann-Franz law in mesoscopic conductors*, Phys. Rev. B **72**, 205107 (2005).
- [90] M. Krawiec, K. I. Wysokiński, *Thermoelectric effects in strongly interacting quantum dot coupled to ferromagnetic leads*, Phys. Rev. B **73**, 075307 (2006).
- [91] M. Krawiec, K. I. Wysokiński, *Thermoelectric phenomena in a quantum dot asymmetrically coupled to external leads*, Phys. Rev. B **75**, 155330 (2007).
- [92] B. Kubala, J. König, J. Pekola, *Violation of the Wiedemann-Franz law in a single-electron transistor*, Phys. Rev. Lett. **100**, 066801 (2008).
- [93] R. Świrkowicz, M. Wierzbicki, J. Barnaś, *Thermoelectric effects in transport through quantum dots attached to ferromagnetic leads with noncollinear magnetic moments*, Phys. Rev. B **80**, 195409 (2009).
- [94] P. Trocha, J. Barnaś, *Large enhancement of thermoelectric effects in a double quantum dot system due to interference and Coulomb correlation phenomena*, Phys. Rev. B **85**, 085408 (2012).
- [95] S. Datta, B. Das, *Electronic analog of the electro-optic modulator*, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [96] H. C. Koo, J. H. Kwon, J. Eom, J. Chang, S. H. Han, M. Johnson, *Control of Spin Precession in a Spin-Injected Field Effect Transistor*, Science **325**, 1515 (2009).

- [97] Y. A. Bychkov, E. I. Rashba, *Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy*, Sov. Phys. - JETP Lett. **39**, 78 (1984).
- [98] A. Manchon, H. C. Koo, J. Nitta, S. M. Frolov, R. A. Duine, *New perspectives for Rashba spin-orbit coupling*, Nature Mater. **14**, 871 (2015).
- [99] D. Bercioux, P. Lucignano, *Quantum transport in Rashba spin-orbit materials: A review*, Rep. Prog. Phys. **78**, 106001 (2015).
- [100] Q.-F. Sun, J. Wang, H. Guo, *Quantum transport theory for nanostructures with Rashba spin-orbital interaction*, Phys. Rev. B **71**, 165310 (2005).
- [101] F. Mireles, G. Kirczenow, *Ballistic spin-polarized transport and Rashba spin precession in semiconductor nanowires*, Phys. Rev. B **64**, 024426 (2001).
- [102] J. Nitta, F. E. Meijer, H. Takayanagi, *Spin-interference device*, Appl. Phys. Lett. **75**, 695 (1999).
- [103] P. A. Orellana, M. Amado, F. Domínguez-Adame, *Fano-Rashba effect in quantum dots*, Nanotechnology **19**, 195401 (2008).
- [104] P. Stefański, *Interplay between quantum interference and electron interactions in a Rashba system*, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 505303 (2010).
- [105] Y. Tanaka, N. Kawakami, *Interference effects on Kondo-assisted transport through double quantum dots*, Phys. Rev. B **72**, 085304 (2005).
- [106] M. Wierzbicki, R. Świrkowicz, *Influence of interference effects on thermoelectric properties of double quantum dots*, Phys. Rev. B **84**, 075410 (2011).
- [107] P. Trocha, J. Phys.: Cond. Matter, *The role of the indirect tunneling processes and asymmetry in couplings in orbital Kondo transport through double quantum dots*, **24**, 055303 (2012).
- [108] U. Fano, *Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts*, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
- [109] M. Guevara, F. Claro, P. A. Orellana, *Ghost Fano resonance in a double quantum dot molecule attached to leads*, Phys. Rev. B **67**, 195335 (2003).
- [110] P. Trocha, J. Barnaś, *Quantum interference and Coulomb correlation effects in spin-polarized transport through two coupled quantum dots*, Phys. Rev. B **76**, 165432 (2007).
- [111] V. M. García-Suárez, R. Ferradás, J. Ferrer, *Impact of Fano and Breit-Wigner resonances in the thermoelectric properties of nanoscale junctions*, Phys. Rev. B **88**, 235417 (2013).
- [112] R. H. Dicke, *The Effect of Collisions upon the Doppler Width of Spectral Lines*, Phys. Rev. **93**, 99 (1954).
- [113] R. G. DeVoe, R. G. Brewer, *Observation of Superradiant and Subradiant Spontaneous Emission of Two Trapped Ions*, Phys. Rev. Lett. **76**, 2049 (1996).

- [114] T. V. Shahbazyan, M. E. Raikh, *Two-channel resonant tunneling*, Phys. Rev. B **49**, 17123 (1994).
- [115] T. V. Shahbazyan, S. E. Ulloa, *Localized states in a strong magnetic field: Resonant scattering and the Dicke effect*, Phys. Rev. B **57**, 6642 (1998).
- [116] P. Trocha, J. Barnaś, *Kondo-Dicke resonances in electronic transport through triple quantum dots*, Phys. Rev. B **78**, 075424 (2008).
- [117] R. Jishi, *Feynman Diagram Techniques in Condensed Matter Physics*, (Cambridge University Press 2013).
- [118] V. Kascheyevs, A. Schiller, A. Aharony, O. Entin-Wohlman, *Unified description of phase lapses, population inversion, and correlation-induced resonances in double quantum dots*, Phys. Rev. B **75**, 115313 (2007).
- [119] P. G. Silvestrov, Y. Imry, *Minimal realization of the orbital Kondo effect in a quantum dot with two leads*, Phys. Rev. B **75**, 115335 (2007).
- [120] M. Esposito, R. Kawai, K. Lindenberg, C. Van den Broeck, *Quantum-dot Carnot engine at maximum power*, Phys. Rev. E **81**, 041106 (2010).
- [121] M. Esposito, K. Lindenberg, C. Van den Broeck, Euro. Phys. Lett. **85**, (2009).
- [122] G. Kotliar, A. E. Ruckenstein, *New Functional Integral Approach to Strongly Correlated Fermi Systems: The Gutzwiller Approximation as a Saddle Point* Phys. Rev. Lett. **57**, 1362 (1986).
- [123] R. Frésard, T. Kopp, *Exact results in a slave boson saddle point approach for a strongly correlated electron model*, Phys. Rev. B **78**, 073108 (2008)
- [124] F. Lechermann, A. Georges, G. Kotliar, O. Parcollet, *Rotationally invariant slave-boson formalism and momentum dependence of the quasiparticle weight*, Phys. Rev. B **76**, 155102 (2007).
- [125] S.E. Barnes, *New method for the Anderson model*, J. Phys. F **6**, 1375 (1976).
- [126] P. Coleman, *New approach to the mixed-valence problem*, Phys. Rev. B **29**, 3035 (1984).
- [127] P. Jarillo-Herrero, J. Kong, H. S. J. van der Zant, C. Dekker, L. P. Kouwenhoven, S. De Franceschi, *Orbital Kondo effect in carbon nanotubes*, Nature **434**, 484 (2005).
- [128] P. Trocha, *Orbital Kondo effect in double quantum dots*, Phys. Rev. B **82**, 125323 (2010).
- [129] L. Tosi, P. Roura-Bas, and A. A. Aligia, *Orbital Kondo spectroscopy in a double quantum dot system*, Phys. Rev. B **88**, 235427 (2013).
- [130] B. Dong, X.L. Lei, *Kondo-type transport through a quantum dot: a new finite-U slave-boson mean-field approach*, J. Phys.: Cond. Matter **13**, 9245 (2001);

- [131] B. Dong, X.L. Lei, *Kondo-type transport through a quantum dot under magnetic fields*, Phys. Rev. B **63**, 235306 (2001);
- [132] B. Dong, X.L. Lei, *Kondo effect and antiferromagnetic correlation in transport through tunneling-coupled double quantum dots*, Phys. Rev. B **65**, 241304(R) (2002).
- [133] T. Holstein, H. Primakoff, *Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferromagnet*, Phys. Rev. **58**, 1098 (1940).

Lista publikacji

- [1] Ł. Karwacki, P. Trocha, *Spin-dependent thermoelectric effects in a strongly correlated double quantum dot*, *Phys. Rev. B* **94**, 085418 (2016).
- [2] Ł. Karwacki, P. Trocha, J. Barnaś, *Magnon transport through a quantum dot: Conversion to electronic spin and charge currents*, *Phys. Rev. B* **92**, 235449 (2015).
- [3] Ł. Karwacki, P. Trocha, J. Barnaś, *Spin-dependent thermoelectric properties of a Kondo-correlated quantum dot with Rashba spin-orbit coupling*, *J. Phys.: Condens. Mat.* **25**, 505305 (2013).
- [4] Ł. Karwacki, *Spin Thermoelectric Effects in a Strongly Correlated Double Quantum Dot System*, *Acta Phys. Pol. A* **127**, 478 (2015).
- [5] Ł. Karwacki, P. Trocha, J. Barnaś, *Thermoelectric and Interference Effects in a Kondo-Correlated Quantum Dot with Rashba Spin Orbit Coupling*, *Acta Phys. Pol. A* **124**, 901 (2013).
- [6] Ł. Karwacki, *Magnon cotunneling through a quantum dot*, *J. Magn. Magn. Mater.* (w trakcie publikacji).
- [7] Ł. Karwacki, P. Trocha *Influence of Coulomb interactions on spin-dependent thermoelectric effects in a Rashba double quantum dot molecule*, w przygotowaniu.
- [8] Ł. Karwacki, P. Trocha *Spin-dependent thermoelectric effects in strongly-correlated Rashba double quantum dot molecule*, w przygotowaniu.
- [9] Ł. Karwacki, *Fano effect in spin-polarized thermoelectric transport through a quantum dot with Rashba spin-orbit coupling*, w przygotowaniu.

Abstract

This thesis concerns thermoelectric transport through systems of quantum dots with particular emphasis put on spin effects. Thermoelectric effects are known to be an effective concept of converting excessive heat into useful work. Additionally, taking into consideration spin degree of freedom and a nanoscopic system, such as a quantum dot, allows one to examine coupled heat, charge and spin transport on small scale.

First chapter of the thesis is an introductory one. It contains motivation behind the work being subject of this thesis and describes basic concepts of quantum dot systems and thermoelectric effects used throughout. It also contains a succinct review of current state of research on thermoelectric and spin thermoelectric effects. Finally, Onsager's non-equilibrium transport formalism has been used to derive expressions for thermoelectric parameters, such as electronic conductance, electronic contribution to heat conductance, thermopower (otherwise known as Seebeck coefficient) and figure of merit. The parameters have been introduced with distinction to charge (i.e., either the case of non-magnetic electrodes or magnetic electrodes without spin accumulation) and spin thermoelectric effects (magnetic electrodes with spin accumulation). The remainder of the thesis has been divided into three parts.

The first part contains two chapters on spin-dependent thermoelectric effects in quantum dot and double quantum dot systems with Rashba spin-orbit coupling in the so-called Coulomb blockade transport regime. Here, Green's function method has been introduced and applied in order to obtain transmission function necessary for further investigation of thermoelectric parameters. Furthermore, in chapter 2, a model of single-level quantum dot with spin-conserving and non-conserving (resulting from Rashba spin-orbit interaction) coupling parameters is introduced and investigated. In chapter 3 a model of double quantum dot embedded in an Aharonov-Bohm ring with Rashba spin-orbit coupling is analyzed. It is shown that, in both cases, strong interference between electron wavefunctions of different spin occurs and can manifest itself in the form of Fano effect as a characteristic dip in transmission function, where the majority carriers play the role of background channel, while the minority carriers play the role of narrow resonant channel. This effect leads to a significant increase in thermoelectric figure of merit. Furthermore, it is shown that a pure spin current can be driven for certain parameters through the double quantum dot system.

The second part of the thesis contains three chapters on spin-dependent thermoelectric transport through quantum dot and double quantum dot systems in a strongly correlated transport regime, also known as Kondo regime. In order to solve this problem, Slave Boson Mean Field method has been applied. Chapter 4 is devoted to analysing the model introduced in chapter 2 in this strongly correlated regime. In contrast to the aforementioned Coulomb blockade

transport regime, existence of Kondo effect alongside the interference effects manifests itself as a Dicke-like effect. The majority spins form now a so-called superradiant state, while the minority states form a subradiant state. Existence of those states is apparent in transport coefficients and at lower temperatures leads to an increase in thermoelectric efficiency of the system. In chapter 5, thermoelectric and spin thermoelectric transport through a double quantum dot is analysed. Both dots are coupled to electrodes and to each other. This configuration results in the appearance of the so-called bonding and antibonding states. Interference effects, which significantly influence transport properties of the system, can be either Dicke-like or Fano-like, depending on the configuration of the system. It is shown that in the case of symmetrical coupling of both dots to the leads and large indirect coupling between the dots a Dicke-like interference effect can be observed. This effect results in an increase in both charge and spin conductance and thermopower, decreasing, at the same time, electronic contribution to heat conductance. Consequently, increase in thermoelectric charge and spin figure of merit is observed. On the other hand, asymmetrical coupling of the dots and electrodes results in Fano-like asymmetry in transmission function, with a dip appearing at an energy level corresponding to antibonding state. Appearance of the dip in transmission function leads to significant increase in Seebeck coefficient. Chapter 6 is devoted to the study of model introduced in chapter 3 in Kondo regime. It is shown that the coexistence of Aharonov-Bohm, Rashba and Kondo effects results in significant changes in the exchange field between ferromagnetic electrodes. This field varies periodically with the Rashba spin-orbit phase, followed by similar response from thermoelectric coefficients.

The last part of the thesis contains one chapter pertaining to the transport of spin waves or spin wave quanta, otherwise known as magnons, through a single-level quantum dot weakly coupled to the reservoirs. A master equation method, appropriate for weak coupling regime, has been used to derive formulas for the occupation probabilities as well as charge, spin and heat currents. In general, it is assumed that the dot can be connected to two metallic (non-magnetic or ferromagnetic) electrodes and two insulating (magnetic) ones. Firstly, however, two simple cases are analysed: quantum dot coupled to two insulating electrodes only and, secondly, coupled to one insulating and one metallic electrode. These cases allow for better understanding of magnon interaction with localised spin and interaction of magnons with electrons. Particularly, in the latter case, an interconversion mechanism between thermally-induced spin currents of electronic and spin wave nature has been shown. Furthermore, in the general four-electrode case, it has been shown that the system can act as a heat engine with maximal power increasing with addition of the second insulating electrode

Oświadczenie

Ja, niżej podpisany Łukasz Karwacki, doktorant Wydziału Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu oświadczam, że przedkładaną rozprawę doktorską pt.:

„Spinowe efekty w transporcie termoelektrycznym przez układy kropek kwantowych“

napisałem samodzielnie. Oznacza to, że przy pisaniu pracy, poza niezbędnymi konsultacjami, nie korzystałem z pomocy innych osób, a w szczególności nie zlecałem opracowania rozprawy lub jej istotnych części innym osobom, ani nie odpisywałem tej rozprawy lub jej istotnych części od innych osób.

Równocześnie wyrażam zgodę na to, że gdyby powyższe oświadczenie okazało się nieprawdziwe, decyzja o nadaniu mi stopnia naukowego doktora zostanie cofnięta.

Łukasz Karwacki