

UNIWERSYTET IM. ADAMA MICKIEWICZA
W POZNANIU

Wpływ efektów interferencyjnych i korelacji kulombowskich na transport elektronowy przez układy kropek kwantowych

Piotr Trocha

Rozprawa doktorska

Promotor: prof. dr hab. Józef Barnaś

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

Poznań 2011

Spis treści

1	Kropki kwantowe – podstawowe własności	12
1.1	Transport elektronowy przez kropki kwantowe	12
1.1.1	Podstawowe własności kropek kwantowych	12
1.1.2	Rodzaje kropek kwantowych	13
1.1.3	Podstawy teorii transportu przez kropki kwantowe	14
1.1.4	Transport w zakresie nieliniowym	16
1.1.5	Modele transportu	16
I	Transport przez układy kropek kwantowych sprzężonych z ferromagnetycznymi elektrodami	18
2	Spinowo-spolaryzowany transport przez układ dwóch równoległych kropek kwantowych	19
2.1	Model układu i jego Hamiltonian	20
2.2	Metoda wyznaczenia funkcji Greena	23
2.3	Wyniki numeryczne	26
2.3.1	Definicje i założenia	26
2.3.2	Wyniki numeryczne dla liniowej odpowiedzi w przypadku $q = 1$	26
2.3.3	Wyniki numeryczne dla liniowej odpowiedzi: $q_L = -q_R = 1$	29
2.3.4	Wyniki numeryczne dla nieliniowej odpowiedzi.	30
2.4	Podsumowanie	32
3	Spinowo-spolaryzowany transport przez układ trzech kropek kwantowych	33
3.1	Model układu i jego Hamiltonian	33
3.2	Obliczenia funkcji Greena	34
3.3	Wyniki numeryczne	35
3.3.1	Założenia	35
3.3.2	Przypadek braku korelacji kulombowskich	35
3.3.3	Przypadek skończonych korelacji kulombowskich	38
3.4	Podsumowanie	40
4	Spinowo-spolaryzowany transport przez układ dwóch kropek kwantowych – reżim słabego sprzężenia	41
4.1	Model układu i jego Hamiltonian	41
4.2	Metoda diagramów	42
4.3	Wyniki numeryczne	45
4.3.1	Założenia	45
4.3.2	Kropki kwantowe połączone w geometrii szeregowej ($\alpha = 0$)	45
4.3.3	Kropki kwantowe połączone w geometrii równoległej ($\alpha = 1$)	49
4.3.4	Kropki kwantowe połączone w geometrii pośredniej – $\alpha \in (0, 1)$	50
4.4	Podsumowanie	54

5	Efekty interferencji kwantowej i rezonans Kondo w transporcie przez układ dwóch kropek kwantowych	57
5.1	Odkrycie i fizyka efektu Kondo	57
5.2	Reprezentacja bozonów pomocniczych	59
5.2.1	Opis metody	59
5.2.2	Hamiltonian układu w reprezentacji SB	60
5.2.3	Wyznaczenie równań samozgodnych	61
5.3	Wyniki numeryczne	63
5.4	Podsumowanie	67
6	Rezonans Dicke - Kondo w transporcie przez układ trzech kropek kwantowych	68
6.1	Model	68
6.2	Wyniki numeryczne	69
6.2.1	Gęstość stanów	70
6.2.2	Konduktancja różniczkowa	72
6.2.3	Szum	75
6.3	Podsumowanie	77
7	Orbitalny efekt Kondo w układzie dwóch kropek kwantowych	78
7.1	Model układu	78
7.2	Renormalizacja poziomów energetycznych i temperatura Kondo	79
7.2.1	Renormalizacja poziomów energetycznych kropek kwantowych	79
7.2.2	Temperatura Kondo	80
7.3	Metoda bozonów pomocniczych	81
7.4	Metoda nierównowagowych funkcji Greena	83
7.4.1	Wyniki numeryczne dla $t = 0$	85
7.4.2	Wyniki numeryczne dla $t \neq 0$	87
7.5	Orbitalny efekt Kondo w obecności procesów niediagonalnych, $q \neq 0$	89
7.5.1	Efekt Dicke	89
7.5.2	Efekt Fano	91
7.5.3	Skalowanie poziomów energetycznych i temperatura Kondo	93
7.6	Podsumowanie	96

III Odbicie Andreeva, efekty termoelektryczne i dudnienia w układzie dwóch kropek kwantowych 97

8	Odbicie Andreeva w układzie dwóch kropek kwantowych	98
8.1	Odbicie Andreeva w układzie dwóch kropek kwantowych	98
8.2	Model układu i metoda	99
8.3	Wyniki numeryczne	102
8.4	Podsumowanie	106
9	Efekty termoelektryczne w transporcie przez układ dwóch kropek kwantowych	107
9.1	Model układu i metoda	108
9.2	Wyniki numeryczne	109
9.3	Podsumowanie	117

10 Dudnienia w charakterystykach transportowych układu dwóch kropek kwantowych	118
10.1 Wprowadzenie	118
10.2 Model i opis metody	119
10.3 Wyniki numeryczne	122
10.3.1 Niemagnetyczne elektrody	123
10.3.2 Ferromagnetyczne elektrody	125
10.3.3 Napięcie spinowe	126
10.4 Potencjalne zastosowania proponowanego urządzenia	129
10.5 Podsumowanie	129
A Diagonalizacja Hamiltonianu układu kropek kwantowych	130
A.1 Transformacja Hamiltonianu układu dwóch kropek kwantowych do postaci diagonalnej	130
A.2 Transformacja Hamiltonianu układu trzech kropek kwantowych do postaci diagonalnej	131
B Wyznaczenie fazy amplitudy transmisji dla układu dwóch kropek kwantowych	132
C Metoda diagramowa	134
C.1 Rozwinięcie perturbacyjne	134
C.2 Przykłady energii własnych pierwszego rzędu	134
D Procedura skalowania	136
D.1 Procedura skalowania dla modelu Andersona	136
D.2 Procedura skalowania dla modelu Kondo	140
E Funkcje Greena układu dwóch kropek kwantowych w reżimie Kondo	145
F Funkcja Greena w przestrzeni Nambu	148
F.1 Funkcja Greena układu dwóch kropek kwantowych	148
F.2 Funkcja Greena elektrody nadprzewodzącej	148

Spis rysunków

1.1	Schemat struktury energetycznej kropki kwantowej	14
1.2	Obwód zastępczy dla rozpatrywanego układu.	15
2.1	Schemat układu dwóch kropek kwantowych	21
2.2	Konduktancja liniowa w zależności od położenia poziomów kropek kwantowych dla $q = 1$	27
2.3	TMR w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczony w liniowej odpowiedzi dla $q = 1$	29
2.4	Konduktancja liniowa w zależności od położenia poziomów kropek kwantowych dla $q_L = -q_R = 1$	29
2.5	TMR w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczony w liniowej odpowiedzi dla $q_L = -q_R = 1$	30
2.6	Nieliniowa konduktancja w zależności od przyłożonego napięcia transportowego dla $q = 1$	31
2.7	TMR w zależności od napięcia transportowego dla $q = 1$	32
3.1	Schemat układu trzech kropek kwantowych. Tylko kropka kwantowa QD2 jest dołączona do elektrod. Strzałki wskazują możliwe konfiguracje magnetyczne elektrod: równoległą i antyrównoległą.	33
3.2	Konduktancja liniowa dla różnych wartości parametrów t_{21} , oraz t_{23}	36
3.3	Konduktancja liniowa dla różnych wartości parametrów h_1 , oraz h_2	37
3.4	Konduktancja liniowa w obecności oddziaływań kulombowskich	38
3.5	TMR w liniowej odpowiedzi	39
4.1	Kontur Keldysha z diagramami nieprzywiedlnymi	42
4.2	Prąd, konduktancja różniczkowa, oraz tunelowy magnetoopór wyznaczone dla $E = 10k_B T$	46
4.3	Prąd, konduktancja różniczkowa, oraz tunelowy magnetoopór wyznaczone dla $E = -10k_B T$	47
4.4	Separacja zrenormalizowanych poziomów energetycznych kropek kwantowych	48
4.5	TMR w funkcji napięcia transportowego i położenia średniego poziomu	49
4.6	Prąd, konduktancja różniczkowa, oraz tunelowy magnetoopór wyznaczone dla $\alpha = 1$, $q = 0.25$, $E = 10k_B T$	50
4.7	Prąd, konduktancja różniczkowa, oraz tunelowy magnetoopór wyznaczone dla $\alpha = 0.25$, $q = 0.25$, $E = 10k_B T$	51
4.8	TMR w funkcji napięcia transportowego i położenia średniego poziomu dla $\alpha = 0.25$, $q = 0.25$	51
4.9	TMR w funkcji przyłożonego napięcia transportowego wyznaczony dla różnych wartości parametru α , oraz dla $q = 0$ (a), $q = 0.25$ (b)	52
4.10	TMR w funkcji napięcia transportowego wyznaczony dla $\alpha = 0.25$ oraz dla różnych q	53
4.11	TMR w funkcji napięcia transportowego wyznaczony dla różnych α	54
5.1	Gęstość stanów wyznaczona dla $q_L = q_R = 1$ oraz dla różnych wartości parametru α	64
5.2	Transmisja wyznaczona dla różnych wartości parametru asymetrii α , oraz dla $q_L = q_R = 1$	65

5.3	Gęstość stanów wyznaczona dla $q_L = -q_R = q = -1$ oraz dla różnych wartości parametru α	66
5.4	Gęstość stanów i prawdopodobieństwo transmisji wyznaczone dla różnych wartości parametru q ($q_L = q_R = q$), oraz dla $\alpha = 0.9$	66
5.5	Nierównowagowa gęstość stanów kropki kwantowej QD1, oraz QD2	67
6.1	Schemat układu kropek kwantowych sprzężonych z niemagnetycznymi elektrodami	68
6.2	Gęstość stanów kropki kwantowej QD2 wyznaczona dla różnych wartości parametru tunelowego $t_{12} = t_{32} = t$	70
6.3	Gęstość stanów kropki kwantowej QD2 wyznaczona dla różnych wartości parametru tunelowego t_{32} , oraz dla $t_{12} = 0.03\Gamma$	71
6.4	Gęstość stanów kropki kwantowej QD2 wyznaczona dla różnych wartości położenia poziomów bocznych kropek kwantowych h ($h = \varepsilon_1 = -\varepsilon_3$)	72
6.5	Konduktancja różniczkowa w funkcji przyłożonego napięcia transportowego wyznaczona dla różnych wartości parametru tunelowego t_{32} przy ustalonej wartości parametru $t_{12} = 0.04\Gamma$	73
6.6	Zależność konduktancji różniczkowej od przyłożonego napięcia transportowego wyznaczona dla różnych wartości parametru tunelowego $t = t_{12} = t_{32}$	73
6.7	Konduktancja różniczkowa w funkcji przyłożonego napięcia transportowego wyznaczona dla różnych wartości położenia poziomów bocznych kropek kwantowych h	74
6.8	Współczynnik Fano w funkcji przyłożonego napięcia transportowego wyznaczony dla różnych wartości parametru tunelowego t_{32} przy ustalonej wartości parametru $t_{12} = 0.04\Gamma$	75
6.9	Zależność współczynnika Fano od przyłożonego napięcia transportowego wyznaczona dla różnych wartości parametru tunelowego $t = t_{12} = t_{32}$	76
6.10	Współczynnik Fano w funkcji przyłożonego napięcia transportowego wyznaczony dla różnych wartości położenia poziomów bocznych kropek kwantowych h , $\varepsilon_1 = -\varepsilon_3 = h$	76
6.11	Zależność współczynnika Fano od wielkości sprzężenia tunelowego między kropkami kwantowymi t wyznaczona dla sytuacji nierównowagowej, oraz dla różnych wartości parametru h	77
7.1	Schemat układu dwóch kropek kwantowych połączonych z zewnętrznymi elektrodami	79
7.2	Temperatura Kondo w funkcji parametru asymetrii sprzężeń α	81
7.3	Konduktancja liniowa w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych ε_0 , wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii α	83
7.4	Gęstość stanów kropki kwantowej QD1, oraz QD2 wyznaczona dla różnych wartości parametru asymetrii sprzężeń α	84
7.5	Schematyczny rysunek przedstawiający procesy wirtualne dające wkład do rezonansu Kondo	85
7.6	Konduktancja różniczkowa dla podanych wartości parametru asymetrii α	86
7.7	Konduktancja różniczkowa wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii α w sytuacji, gdy rozszczepienie poziomów związane z ich renormalizacją nie zostało skompensowane napięciami bramkującymi	87
7.8	Gęstość stanów kropki kwantowej QD1 i QD2 wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii sprzężeń α , oraz dla $t = -0.1\Gamma$	88
7.9	Konduktancja różniczkowa wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii α , oraz dla $t = -0.1\Gamma$	88
7.10	Gęstość stanów kropki kwantowej QD1, oraz QD2 wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii sprzężeń α , oraz dla $q = 0.99$ przy braku bezpośredniego tunelowania między kropkami kwantowymi ($t = 0$).	90

7.11	Transmisja wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii sprzężeń α , oraz dla $q = 0.99$ przy braku bezpośredniego tunelowania między kropkami kwantowymi ($t = 0$).	90
7.12	(a) Gęstość stanów obydwu kropek kwantowych, (b) transmisja wyznaczona dla podanych wartości parametru q , oraz dla $\alpha = 1$ przy braku bezpośredniego tunelowania między kropkami kwantowymi ($t = 0$).	91
7.13	Transmisja wyznaczona dla podanych wartości parametru α , oraz dla $q = 0, t = 0$	91
7.14	(a) Gęstość stanów obydwu kropek kwantowych, (b) transmisja wyznaczona dla $q = 1, \alpha = 0.8$, oraz $t = 0.8\Gamma$. Wstawka pokazuje transmisje otrzymaną dla $q = 1$, oraz $\alpha = 0.15$	92
7.15	Transmisja wyznaczona dla $\alpha = 0.$, $t = 0.8\Gamma$, oraz dla $q = 0.99$	93
7.16	Temperatura Kondo w obecności procesów tunelowania pośredniego, oraz przy ich braku	95
8.1	Schematyczne przedstawienie procesów tunelowania Andreeva w układzie dwóch kropek kwantowych	99
8.2	Schematy układów kropek kwantowych dołączonych do elektrod magnetycznych i elektrody nadprzewodzącej	100
8.3	Transmisja wyznaczona dla różnych wartości asymetrii sprzężeń, oraz różnych wartości parametru q_L	102
8.4	Transmisja wyznaczona dla skończonej wartości całki przeskoku między kropkami kwantowymi	103
8.5	Transmisja oraz konduktancja różniczkowa wyznaczone z uwzględnieniem oddziaływań kulombowskich	104
8.6	Zależność konduktancji liniowej od polaryzacji magnetycznej elektrod wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii r	105
8.7	Transmisja wyznaczona dla konfiguracji równoległej, oraz antyrównoległej	105
9.1	Współczynniki termoelektryczne w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczone dla podanych wartości parametru q	109
9.2	Konduktancja cieplna w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczone dla podanych wartości parametru q	110
9.3	Termosiła, (b) ZT w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczone przy uwzględnieniu oddziaływań kulombowskich, oraz dla $p = 0, q = 1$	111
9.4	Zależność współczynnika ZT od położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczona dla podanych wartości polaryzacji magnetycznej elektrod dla konfiguracji równoległej ich momentów magnetycznych	112
9.5	Współczynniki termoelektryczne dla równoległej i antyrównoległej konfiguracji magnetycznej elektrod wyznaczone dla polaryzacji $p = 0.4$	113
9.6	Współczynniki termoelektryczne dla obydwu konfiguracji magnetycznych wyznaczone dla polaryzacji elektrod $p = 0.95$	114
9.7	Współczynniki termoelektryczne wyznaczone dla równoległej konfiguracji magnetycznej, oraz dla różnych wartości polaryzacji magnetycznej elektrod p	115
9.8	Współczynnik Lorentza	116
9.9	Współczynniki termoelektryczne dla różnych polaryzacji magnetycznych i obydwu konfiguracji magnetycznych	116
9.10	Zależność temperaturowa współczynników termoelektrycznych	117
10.1	Schemat urządzenia pozwalającego wytworzyć dudnienia	119
10.2	Czasowa ewolucja prądu wyznaczona dla układu z niemagnetycznymi elektrodami	123
10.3	Zależność temperaturowa dudnień	124
10.4	Zależność dudnień od oddziaływań kulombowskich	124
10.5	Konfiguracje magnetyczne	125
10.6	Dudnienia dla układu magnetycznego I	126
10.7	Dudnienia dla układu magnetycznego II	126

10.8	Ewolucja czasowa prądu spinowego dla przypadku symetrycznej baterii spinowej	127
10.9	Prąd ładunkowy i spinowy dla przypadku asymetrycznej baterii spinowej	128
B.1	Przebieg zmienności fazy amplitudy transmisji od energii wyznaczony dla parametru asymetrii $\alpha = 0.15$, oraz dla $U = 0$, $p = 0$	133
C.1	Graficzne przedstawienie energii własnej $\Sigma_{ 0,\sigma\rangle 0,\sigma\rangle}^{ \sigma,0\rangle \sigma,0\rangle}$	135
C.2	Graficzna reprezentacja energii własnej $\Sigma_{ 0,\sigma\rangle \sigma,0\rangle}^{ \sigma,0\rangle \sigma,0\rangle}$	135
D.1	Idea skalowania. Stany wysokowzbudzeniowe z pobliża krawędzi pasma, zaznaczone kolorem zielonym, zostają usunięte, a ich wkład zostaje uwzględniony w zrenormalizowanych parametrach efektywnego Hamiltonianu mającego analogiczną postać jak wyjściowy Hamiltonian układu.	137
D.2	Diagramy odpowiadające procesom drugiego rzędu dla modelu Andersona	138
D.3	Diagramy odpowiadające procesom drugiego rzędu dla modelu Kondo	143

Wprowadzenie

Miniaturyzacja urządzeń elektronicznych postępuje zgodnie z prawem Moore'a i związany jest z nią ściśle postęp w technologiach informatycznych. Wiadomo, że poniżej pewnych rozmiarów nie da się zejść i prawo to przestanie obowiązywać. Z drugiej strony jednak postępująca miniaturyzacja prowadzi do nowych własności, które niosą nadzieję na efektywniejsze wykorzystanie urządzeń opartych na tych własnościach. Te nowe własności wynikają z mechaniki kwantowej i dotyczą np. skwantowania przestrzennego ruchu nośników, czy skwantowania ładunku. Efekty te niewątpliwie są istotne (i widoczne) w układach o rozmiarach atomowych, tj. układach, których rozmiary są porównywalne lub znacznie mniejsze od odpowiedniej drogi swobodnej elektronu. Struktury takie, w których elektron niejako "widzi" cały układ nazywa się układami mezoskopowymi. W konwencjonalnej elektronice efekty te traktowane są jak przeszkoda, bariera narzucona przez samą Naturę, utrudniająca dalszą miniaturyzację urządzeń elektronicznych, a więc i hamująca postęp.

Jednak czy nie lepiej byłoby przekroczyć tę granicę i zbudować urządzenia działające w oparciu o zupełnie nowe efekty. Kiedy Richard P. Feynmann zadawał sobie podobne pytanie podczas przemowy wygłoszonej w Caltech w 1959 raczej nikt wówczas jego słów nie brał poważnie pod uwagę. Dziś wizja Feynmana staje się rzeczywistością.

Weźmy pod uwagę tranzystor polowy będący istotą konwencjonalnej elektroniki. Jeśli teraz przejdziemy z jego rozmiarami poniżej rozpatrywanej granicy to z pewnością istota działania tego urządzenia ulegnie zmianie i nie będzie to już tranzystor polowy. Okazuje się, że gdy rozmiary układu są wystarczająco małe to istotne stają się efekty związane ze skwantowaniem ładunku w jednostkach ładunku elementarnego e . Wówczas mamy do czynienia z tranzystorem jednoelektronowym (SET). Tranzystor ten zbudowany jest z trzech elektrod: dwóch masywnych (źródło i dren) oraz centralnej elektrody na tyle małej, iż energia elektrostatycznego ładowania jest dużo większa od energii termicznej, co powoduje zablokowanie przepływu prądu. Przykładając pewne napięcie do elektrody bramkowej można odblokować układ i wówczas prąd płynie na zasadzie sekwencyjnego przepuszczania pojedynczych elektronów.

Ważną własnością elektronu jest nie tylko jego ładunek, ale i spin. Ta druga własność jest ignorowana w konwencjonalnych urządzeniach elektronicznych. A przecież można by i ten stopień swobody elektronu wykorzystać uwzględniając fakt, że spin elektronu jest naturalnym kandydatem na *kubit*. W związku z tym interesujące jest badanie układów, w których zarówno ładunek, jak i spin odgrywają istotną rolę w przenoszeniu informacji. Ta własność elektronu stwarza zupełnie nowe możliwości dla nowej generacji urządzeń łączących standardową elektronikę półprzewodnikową wraz z efektami zależnymi od spinu, (wynikające z oddziaływania spinu elektronu z magnetyzmem materiałów). Uwzględnienie dodatkowego stopnia swobody, jakim jest spin elektronu, w urządzeniach elektronicznych zapewne przyniesie znacznie większe możliwości w technologiach informatycznych. Zaletami tych nowoczesnych przyrządów będzie z pewnością ich duża niezawodność, zwiększenie szybkości przetwarzania danych, zmniejszenie poboru energii elektrycznej, czy zwiększenie gęstości integracji w porównaniu z urządzeniami elektroniki konwencjonalnej.

Nowoczesne techniki wytwarzania struktur półprzewodnikowych pozwalają nam kreować układy mezoskopowe, w których istotne są wyżej wymienione efekty (efekty kwantowe). Do takich struktur należą m. in. kropki kwantowe, które ze względu na swoje własności zwane są też sztucznymi atomami. Ze względu na fakt, iż ich parametry można w łatwy i kontrolowalny sposób zmieniać stają się one doskonałym narzędziem zarówno do badania zjawisk transportowych, jak i testowania podstawowych problemów mechaniki kwantowej.

Rozprawa doktorska opisuje pewne aspekty zjawisk transportowych w układach kropek kwantowych, a dokładniej, poświęcona jest efektom interferencji kwantowej i oddziaływań kulombowskich w transporcie przez kropki kwantowe. Praca złożona jest z dziesięciu rozdziałów, z których pierwszy jest rodzajem wprowadzenia do transportu przez kropki kwantowe. W rozdziale tym opisane zostały rodzaje i podstawowe własności kropek kwantowych oraz wybrane modele transportu. Kolejne rozdziały stanowią główny trzon pracy, który można podzielić na trzy główne części.

Część pierwsza, zawierająca rozdziały 2 - 4, dotyczy zjawisk transportu w układach dwóch i trzech kropek kwantowych dołączonych do ferromagnetycznych elektrod. W rozdziale 2 opisane zostały rezonanse Fano i wpływ oddziaływań kulombowskich na transport przez układ dwóch kropek kwantowych. Prezentowane wyniki dotyczą zarówno odpowiedzi liniowej, jak i sytuacji nierównowagowej. Przeanalizowano również wpływ konfiguracji magnetycznej elektrod na transport przez rozpatrywany układ. Wyniki prezentowane w rozdziałach 2 i 3 uzyskano przy użyciu metody nierównowagowych funkcji Greena. Metoda ta została dokładnie opisana w części 2.2. W rozdziale 3 opisano spinowo-spolaryzowany transport przez układ trzech kropek kwantowych, z których tylko jedna kropka jest dołączona do zewnętrznych elektrod przy czym ograniczono się tam do liniowej odpowiedzi. Prezentowane wyniki pozwalają zauważyć efekt analogiczny do obserwowanego w fizyce atomowej - efektu Dicke. Rozdział 4 dotyczy spinowo-zależnego transportu przez układ dwóch kropek kwantowych w zakresie słabego sprzężenia z elektrodami. Prezentowane wyniki zostały otrzymane przy użyciu *metody diagramów* przedstawionej w pierwszej części rozdziału 4. Prezentowane wyniki dotyczą układu dwóch kropek w różnych geometriach – od szeregowej do równoległej. W obliczeniach uwzględnione zostały również efekty pośredniego sprzężenia kropek poprzez elektrody. Prezentowane wyniki pokazują, że renormalizacja poziomów kropek kwantowych związana z sprzężeniem kropek z elektrodami oraz pośrednie oddziaływanie kropek kwantowych odgrywają dużą rolę w transporcie przez układ dwóch kropek kwantowych.

Kolejna część rozprawy, składająca się z rozdziałów 5 - 7, dotyczy spinowego i orbitalnego efektu Kondo w układzie dwóch i/lub trzech kropek kwantowych sprzężonych z metalicznymi elektrodami. Do opisu tego efektu w rozpatrywanych układach kropek kwantowych użyto różnych metod: metoda skalowania, metoda *bozonów pomocniczych*, metoda nierównowagowych funkcji Greena. W rozdziale 5 opisano spinowy efekt Kondo w układzie dwóch kropek kwantowych połączonych w konfiguracji równoległej. W pierwszej części tego rozdziału przedstawiono istotę efektu Kondo i podano najważniejsze odkrycia dotyczące transportu w reżimie Kondo przez kropkę kwantową. Przedstawione w tym rozdziale wyniki otrzymano stosując metodę *bozonów pomocniczych*, która jest dokładnie opisana w części 5.2. Otrzymane rezultaty pokazują, że w powstawaniu rezonansu Dicke-Kondo kluczową rolę odgrywa pośrednie oddziaływanie kropek kwantowych poprzez elektrody. Rozdział 6 jest poświęcony efektowi Dicke-Kondo w układzie trzech kropek kwantowych, z których tylko jedna z kropek jest dołączona do metalicznych elektrod i tylko na tej kropce występują oddziaływania kulombowskie. Wyniki numeryczne prezentowane w 6.2 dotyczą zarówno liniowej, jak i nieliniowej odpowiedzi. Rozdział 7 dotyczy orbitalnego efektu Kondo w układzie dwóch kropek kwantowych dołączonych do zewnętrznych elektrod. W pierwszej części tego rozdziału analizowany jest transport w reżimie Kondo przez układ dwóch kropek kwantowych, z których każda posiada własną parę elektrod transportowych. W części 7.2 opisano skalowanie poziomów energetycznych kropek kwantowych oraz wyznaczono temperaturę Kondo dla rozważanego modelu. Konduktancja liniowa została wyznaczona przy użyciu metody *bozonów pomocniczych*. Do opisu sytuacji nierównowagowej użyto natomiast metody nierównowagowych funkcji Greena, a otrzymane wyniki przedstawiono w części 7.4. Pokazano, że asymetria sprzężenia układu kropek z elektrodami prowadzi do rozszczepienia zero-napięciowej anomalii Kondo. W kolejnej części rozdziału 7 opisano wpływ procesów niediagonalnych na orbitalny efekt Kondo. Przedstawione wyniki sugerują możliwość obserwacji efektu Dicke-Kondo i efektu Fano-Kondo w układzie dwóch kropek kwantowych dołączonych do wspólnych elektrod. Również dla tego przypadku zostało przeprowadzone skalowanie poziomów energetycznych, oraz wyznaczono temperaturę Kondo.

Rozdziały 8 - 10 tworzą trzecią część rozprawy. W rozdziale 8 opisany jest transport przez

układ dwóch kropek kwantowych dołączonych do elektrod ferromagnetycznych (bądź niemagnetycznych) i jednej elektrody nadprzewodzącej. Przedstawione wyniki zostały otrzymane za pomocą metody nierównowagowych funkcji Greena. Analiza transportu została ograniczona do tzw. *reżimu Andreeva*, w którym "zwykłe" procesy tunelowe nie występują. Zbadany został wpływ asymetrii sprzężenia układu kropek do elektrod(y) normalnej i nadprzewodzącej, oddziaływań kulombowskich i magnetyzmu elektrod normalnych na *tunelowanie Andreeva* w rozważanym układzie, który można nazwać generatorem par Coopera. Kolejny rozdział poświęcony jest efektom termoelektrycznym w układzie, którego model został przedstawiony w rozdziale 2. W szczególności, został tam zbadany wpływ interferencji typu Fano, korelacji kulombowskich oraz ferromagnetyzmu elektrod na efektywność termoelektryczną rozważanego układu. W rozdziale 10 opisane zostały dudnienia w charakterystykach transportowych układu dwóch kropek sprzężonych do zewnętrznych elektrod wykonanych z metalu niemagnetycznego lub ferromagnetycznego, do których przyłożone jest napięcie ładunkowe lub spinowe. Metoda użyta do opisu zależnego od czasu transportu przez rozważany układ włącza do równania ruchu dla macierzy gęstości technikę nierównowagowych funkcji Greena oraz metodę *bozonów pomocniczych*. Prezentowane wyniki zostały otrzymane w przybliżeniu słabego sprzężenia kropek z elektrodami i wykorzystaniu rozwinięcia gradientowego. Na końcu rozdziału 10 przedstawiono również potencjalne zastosowania opisywanego układu.

Rozdział 1

Kropki kwantowe – podstawowe własności

Niskowymiarowe układy mezoskopowe zapoczątkowały nową dziedzinę badań w fizyce ciała stałego. Nowoczesne technologie wytwarzania struktur półprzewodnikowych umożliwiły stworzenie układów zawierających kilka elektronów. Takie układy są podobne do atomów, ale zrobione przez człowieka – zaprojektowane i wytworzone przez niego. Stąd też często zwane są sztucznymi atomami lub kropkami kwantowymi. W kropkach kwantowych mamy do czynienia z kwantowym ograniczeniem elektronów we wszystkich trzech wymiarach przestrzennych. Jednym ze sposobów otrzymania kropek kwantowych jest ograniczenie dwuwymiarowego gazu elektronowego w heterostrukturze półprzewodnikowej poprzez przyłożenie potencjału bocznego tzn. umieszczamy elektrodę-bramkę wokół kropki [2]. Inny sposób wytwarzania kropek kwantowych wykorzystuje techniki wytrawiania [2].

Ze względu na uderzające podobieństwo kropek kwantowych do atomów czy molekuł stały się one idealnymi strukturami do testowania podstaw fizyki kwantowej, a także niosą wielką nadzieję na potencjalne zastosowania w elektronice nowej generacji. Ogromną zaletą kropek kwantowych, w porównaniu ze strukturami występującymi w Naturze, jest łatwa i kontrolowalna zmiana charakteryzujących je parametrów. Zmieniając napięcie na elektrodzie bramki można zmieniać rozmiar kropki, a co za tym idzie odległość poziomów energetycznych. Ponadto, przy odpowiedniej kombinacji elektrod można zmieniać kształt kropki oraz liczbę znajdujących się na niej elektronów. Również sprzężenia tunelowe między kropkami kwantowymi oraz między kropkami kwantowymi i zewnętrznymi elektrodami mogą być kontrolowane eksperymentalnie poprzez przyłożenie odpowiednich napięć do elektrod bramkujących.

1.1 Transport elektronowy przez kropki kwantowe

1.1.1 Podstawowe własności kropek kwantowych

W punkcie tym zostaną omówione podstawowe własności kropek kwantowych, takie jak dyskretyzacja poziomów energetycznych oraz skwantowanie ładunku w jednostkach ładunku elementarnego e . Efekty takie są jedynie ważne w układach o rozmiarach atomowych. Dzięki tym zjawiskom przyrządy wykonane w oparciu o kropki kwantowe wykazują nowe własności, niespotykane w konwencjonalnej elektronice.

Półprzewodnikowa kropka kwantowa składa się z około miliona atomów i odpowiedniej liczby elektronów. Jednak większość elektronów jest ciasno związana z jądrami atomowymi, stąd liczba elektronów swobodnych w kropce może być bardzo mała – od jednego do kilkuset elektronów. Długość fali de Broglie’a tych elektronów jest porównywalna z rozmiarami kropki. Wobec tego elektron taki niejako ”widzi” cały układ co prowadzi do dyskretyzacji poziomów energetycznych kropki. Drugą ważną własnością kropki kwantowej jest energia ładowania, będąca analogiem energii jonizacji w atomach. Energia ładowania to taka energia, która jest potrzebna aby dodać lub usunąć pojedynczy elektron z kropki. Te dwie cechy kropek kwantowych przypominają nam rzeczywiste atomy, stąd też kropki kwantowe niekiedy zwane są sztucznymi atomami.

Skwantowanie ładunku na kropce kwantowej objawia się w eksperymencie w postaci schodkowej zależności prądu płynącego przez układ od napięcia [3]. Każdy nowy schodek pojawia

się dla napięcia, dla którego dodatkowy elektron może przetunelować na kropkę lub z kropki do elektrody. Aby efekty związane z dyskretyzacją ładunku były dobrze obserwowalne muszą być spełnione następujące warunki: dostatecznie słabe sprzężenie kropki z elektrodą źródłową i elektrodą drenu oraz wystarczająco małe rozmiary przestrzenne kropki [3].

Elektrony znajdujące się na kropce kwantowej obsadzają dyskretne poziomy energetyczne. Jednak aby było możliwe rozróżnienie tych poziomów, odstęp między nimi (ΔE) musi być znacznie większy od energii termicznej, co implikuje relację: $\Delta E \gg k_B T$. Odstęp ΔE na poziomie Fermiego E_F dla pudła o objętości L^D zawierającego N elektronów zależy od jego wymiarowości (D). Uwzględniając degenerację spinową mamy:

$$\Delta E = (N/4)\hbar^2\pi^2/mL^2 \quad D = 1, \quad (1.1)$$

$$\Delta E = (1/\pi)\hbar^2\pi^2/mL^2 \quad D = 2, \quad (1.2)$$

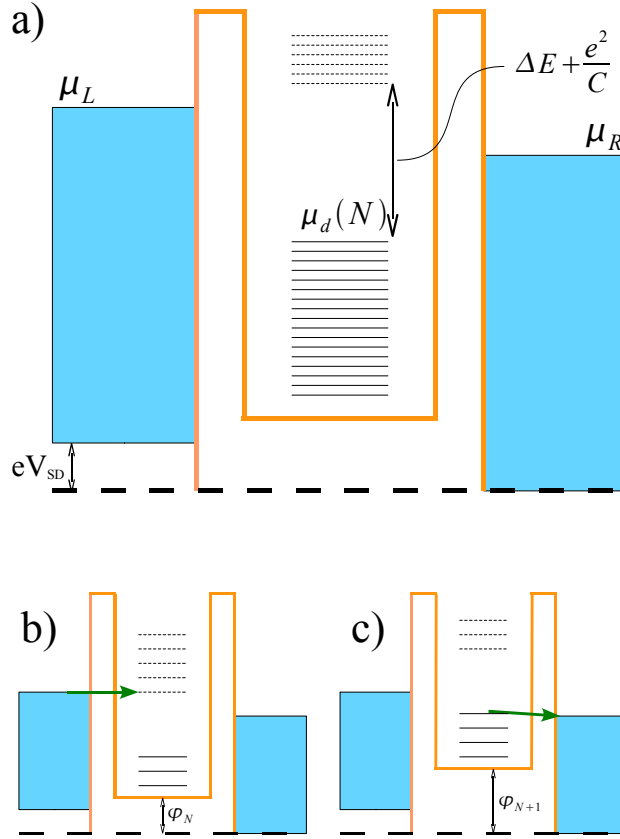
$$\Delta E = (1/3\pi^2 N)^{1/3}\hbar^2\pi^2/mL^2 \quad D = 3. \quad (1.3)$$

Z powyższych wyrażeń widać, że odstęp między poziomami dla jednowymiarowego pudła rośnie wraz ze wzrostem N , dla pudła o wymiarze $D = 2$ jest stały, a dla $D = 3$ maleje gdy N rośnie. Odstęp ΔE dwuwymiarowej kropki o rozmiarach 100 nm wynosi około 0.03 meV, co jest wystarczająco duże, aby mogło być obserwowane w temperaturze rzędu 100 mK [3]. Elektrony uwięzione między warstwami heterostruktur półprzewodnikowych mogą efektywnie tworzyć gaz dwuwymiarowy. Dodatkowo takie elektrony mają małą masę efektywną co jeszcze przyczynia się do zwiększenia odstępów między poziomami. A więc kropki kwantowe wykonane na bazie heterostruktur półprzewodnikowych mają obserwowalne zarówno skwantowane stany ładunkowe, jak i dyskretne poziomy energetyczne. Używając 3D metalu również można wykonać kropkę kwantową, jednak kropka taka musi być bardzo mała (~ 5 nm [3]), aby można było obserwować w niej obydwie omawiane własności. Energia ładowania metalicznego ziarna o rozmiarach ~ 10 nm może być bardzo duża i osiągać 100 meV [3], tak że efekty jednoelektronowe są tu zauważalne w temperaturach pokojowych (a nawet wyższych). Jednak wytworzenie takich metalicznych ziaren wyposażonych w odpowiednie elektrody i bariery o zmiennych parametrach jest bardzo trudne.

1.1.2 Rodzaje kropek kwantowych

Rozróżniamy dwa typy kropek kwantowych tzw. boczne (lateralne) kropki kwantowe i pionowe (wertykalne) kropki kwantowe [2, 4]. Pierwsze z nich otrzymuje się przy użyciu heterozłącza półprzewodnikowego. Trójkątna studnia potencjału istniejąca przy takim złączu ogranicza ruch elektronów w jednym z trzech kierunków, np. wzdłuż kierunku z , a ruch elektronów w płaszczyźnie $x - y$ jest swobodny. Elektrony te tworzą więc gaz dwuwymiarowy. Na powierzchnię heterozłącza nanosi się litograficznie zespół metalicznych elektrod o odpowiednim kształcie. Napięcie przyłożone do tych elektrod wypycha elektrony z obszarów pod elektrodami, zamykając je w ograniczonym przez to napięcie obszarze. W ten sposób zostaje wytworzony 2D potencjał boczny, który prowadzi do kwantowania ruchu elektronów w pozostałych dwóch kierunkach, tj. w kierunku x i y . Zmieniając wartość napięcia można regulować średnicę kropki, a także liczbę obsadzających ją elektronów. Jednak w kropkach kwantowych tego typu nie można uzyskać konfiguracji z niewielką liczbą elektronów, ponieważ bariery tunelowe wytworzone są tutaj przez spadek potencjału. Potencjał ten jest w znacznym stopniu czuły na potencjał metalicznych bramek, którym regulujemy liczbę elektronów w kropce. W praktyce, gdy $N \sim 25$ to bariery tunelowe stają się zbyt duże aby można było obserwować prąd – nawet w rezonansie. Problem ten został wyeliminowany w pionowych kropkach kwantowych, gdzie bariery zostały wytworzone dzięki użyciu heterostruktur półprzewodnikowych [3]. Początkowo wadą takich kropek było to, iż występowały tutaj problemy techniczne w zmienianiu liczby elektronów znajdujących się na kropce. Problem ten udało się jednak rozwiązać poprzez zastosowanie okrągłej bramki Schottky'ego położonej blisko obszaru kropki [5]. W kropkach tego typu można zejść z liczbą elektronów do zera [4, 5].

Kropki kwantowe można również podzielić na tzw. małe i duże kropki. Małe kropki kwantowe to takie, w których liczba elektronów $N \leq 20$. W przeciwieństwie do dużych kropek kwantowych tutaj oscylacje kulombowskie stają się nieregularne, co jest efektem wystarczająco silnych oddziaływań kulombowskich i dużego ograniczenia przestrzennego.

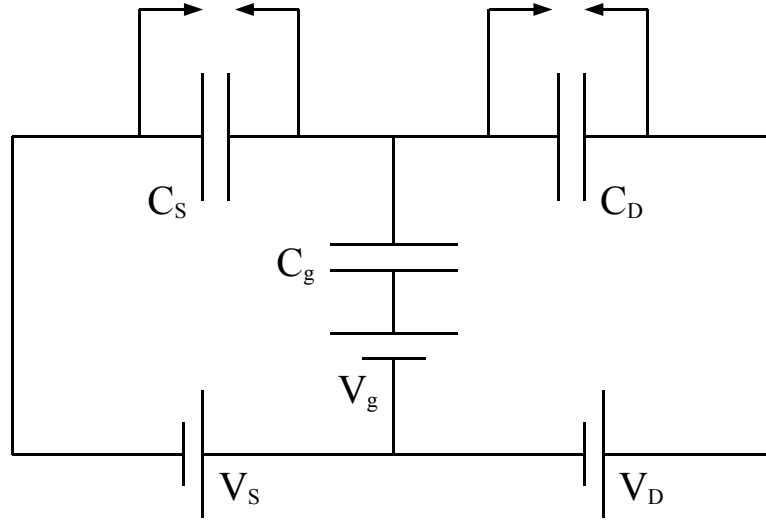


Rysunek 1.1: Schemat struktury energetycznej kropki kwantowej.

1.1.3 Podstawy teorii transportu przez kropki kwantowe

Na Rys. 1.1 przedstawiono schematycznie wielopoziomową kropkę kwantową osadzoną między elektrodami źródła (S) i drenu (D). Stany w lewej (prawej) elektrodzie są wypełnione aż do poziomu Fermiego lewej (prawej) elektrody. Przyłożenie zewnętrznego napięcia V_{SD} , spowoduje rozsuniecie poziomów Fermiego elektrod $V_{SD} = (\mu_L - \mu_R)/e$. Zakładamy, iż nasz układ znajduje się w temperaturze $T = 0K$ i nie bierzemy pod uwagę procesów tunelowych wyższych rzędów (*współtunelowanie*). Wówczas można stwierdzić, iż prąd jest (nie-) zerowy, kiedy liczba dostępnych stanów na kropce w oknie transportowym między μ_L a μ_R jest (nie-) zerowa. Szerokość tego okna dana jest przez różnicę $\mu_L - \mu_R$. Liczbę dostępnych stanów otrzymuje się obliczając potencjał elektrochemiczny kropki $\mu_d(N)$. Z definicji jest to minimum energii potrzebnej, aby dodać N -ty elektron na kropkę: $\mu_d \equiv U(N) - U(N - 1)$, gdzie $U(N)$ jest całkowitą energią stanu podstawowego N elektronów na kropce kwantowej w $T = 0K$.

Obliczenie $U(N)$ z pierwszych zasad jest trudną sztuką. Aby to uczynić w prosty sposób należy wprowadzić pewne założenia. Pierwszym założeniem jest to, że poziomy energetyczne kropki mogą być wyznaczone niezależnie od liczby elektronów N na kropce. Po drugie, oddziaływania kulombowskie między elektronami w kropce i między elektronami w kropce a tymi z otoczenia (np. w elektrodach) parametryzujemy wprowadzając pojemność C . Dalej zakładamy, że pojemność C jest niezależna od liczby elektronów w kropce. Założenie to jest słuszne jeśli kropka jest dużo większa od długości ekranowania, tzn. gdy pole elektryczne nie wnika do wnętrza kropki. Wprowadziwszy powyższe założenia można rozpatrywany układ zastąpić obwodem elektrycznym przedstawionym na rysunku 1.2. Całkowita pojemność C jest sumą pojemności barier C_S i C_D i pojemności między kropką a bramką, C_g , co można zapisać jako $C = C_S + C_D + C_g$.



Rysunek 1.2: Obwód zastępczy dla rozpatrywanego układu.

Model ten, w zakresie liniowej odpowiedzi, tj. gdy $V_{SD} \ll \Delta E/e, e/C$, prowadzi do następującego potencjału elektrochemicznego $\mu_d(N)$ dla N elektronów na kropce [3]:

$$\mu_d(N) = E_N + \frac{(N - N_0 - \frac{1}{2})e^2}{C} - e \frac{C_g}{C} V_{SD}. \quad (1.4)$$

Jak widać powyższe wyrażenie ma postać ogólnej formuły na potencjał elektrochemiczny $\mu_d(N) = \mu_{ch}(N) + e\varphi_N$, czyli jest sumą potencjału chemicznego $\mu_{ch}(N) = E_N$ i potencjału elektrostatycznego $e\varphi_N$. Energia stanu jednocząstkowego E_N dla N -tego elektronu jest mierzona od dna pasma przewodnictwa. Potencjał elektrostatyczny składa się z dwóch członów: jeden ma charakter ciągły, a drugi dyskretny. Ciągła część potencjału φ_N jest proporcjonalna do przyłożonego napięcia bramkowego. Dla ustalonego V_g liczba elektronów na kropce N jest największą liczbą całkowitą, dla której zachodzi $\mu_d(N) < \mu_L \cong \mu_R$. Zmiana potencjału elektrochemicznego kropki, wywołana zmianą liczby elektronów na kropce o jeden przy ustalonym napięciu bramki wynosi [3, 6]:

$$\mu_d(N+1) - \mu_d(N) = \Delta E + \frac{e^2}{C}, \quad (1.5)$$

gdzie $\Delta E = E_{N+1} - E_N$. Aby zwiększyć liczbę elektronów kropki o jeden wymagana jest energia równa $\Delta E + \frac{e^2}{C}$. Energia ta jest duża dla małych wartości pojemności C i/lub dla dużych odstępów między poziomami ΔE .

W sytuacji, gdy $\mu_d(N) < \mu_L, \mu_R < \mu_d(N+1)$ transport jest zablokowany. Powyższy reżim zwany jest blokadą kulombowską. W zakresie blokady kulombowskiej $(N+1)$ -y elektron nie może tunelować na kropkę, gdyż potencjał elektrochemiczny $\mu_d(N+1)$ jest większy od potencjałów elektrochemicznych rezerwuarów elektronowych. Oczywiście elektrony nie mogą też tunelować z kropki na elektrody. Chociaż procesy tunelowe pierwszego rzędu w reżimie blokady kulombowskiej są niemożliwe, to mogą występować procesy wyższych rzędów, takie jak *współtunelowanie*. Zagadnienie *współtunelowania* zostanie omówione w dalszej części.

W celu zniesienia blokady kulombowskiej należy przyłożyć takie napięcie bramkowe, aby $\mu_d(N+1)$ znalazło się w oknie transportowym $\mu_L - \mu_R$. Wówczas elektron może tunelować z lewej elektrody na kropkę jeśli $\mu_L > \mu_d(N+1)$. Wzrost energii elektrostatycznej kropki powstały w wyniku tunelowania na nią elektronu wynosi $e\varphi(N+1) - e\varphi(N) = e^2/C$ i jest zaznaczony na rysunku 1.1 (b) i (c) jako zmiana położenia dna pasma przewodnictwa. Jeśli teraz $\mu_d(N+1) > \mu_R$ to elektron może tunelować z kropki do prawej elektrody. Proces ten spowoduje powrotny spadek potencjału elektrochemicznego kropki do wartości $\mu_d(N)$. Inny elektron może teraz znowu tunelować na kropkę, a następnie z niej i kolejny elektron może znowu powtórzyć cykl $N \rightarrow N+1 \rightarrow N$. Wiele takich procesów razem wziętych prowadzi do utworzenia pików w konduktancji. Pik ten posiada pewną szerokość związaną z kwantowomechanicznym poszerzeniem poziomu energetycznego kropki dzięki sprzężeniu jej z elektrodami.

Przemiatając napięciem V_g konduktancja oscyluje w charakterystyczny sposób: w obszarach blokady kulombowskiej konduktancja jest zerowa, natomiast dla rezonansowych wartości napięciach V_g , gdy transport elektronów jest możliwy, pojawiają się piki. W przypadku zerowej konduktancji, liczba elektronów na kropce N jest stała. Przechodząc przez maksimum konduktancji, liczba elektronów na kropce wzrasta o jeden, potencjał elektrochemiczny kropki μ_d przesuwają się o $\Delta E + e^2/C$, a potencjał elektrostatyczny $e\varphi$ wzrasta o e^2/C . Odstęp między oscylacjami w konduktancji mierzony w napięciu V_g otrzymujemy z równania (1.4) i warunku równowagi $\mu_d(N, V_g) = \mu_d(N + 1, V_g + \Delta V_g)$:

$$\Delta V_g = \frac{C}{eC_g} \left(\Delta E + \frac{e^2}{C} \right). \quad (1.6)$$

Można również uzyskać położenie N -ego piku w konduktancji:

$$V_g = \frac{C}{eC_g} \left[E_N + \left(N - \frac{1}{2} \right) \frac{e^2}{C} \right]. \quad (1.7)$$

Dla $\Delta E \cong 0$ oscylacje są periodyczne.

1.1.4 Transport w zakresie nieliniowym

Przyłożenie napięcia V_{SD} do źródła i drenu powoduje powstanie okna energetycznego $eV_{sd} = \mu_L - \mu_R$. Wyróżnić można trzy reżimy temperatur, dla których transport zachodzi w inny sposób:

- $e^2/C \ll k_B T$, wówczas dyskretyzacja ładunku przestaje odgrywać jakąkolwiek rolę,
- $\Delta E \ll k_B T \ll e^2/C$, tzw. reżim klasycznej lub metalicznej blokady kulombowskiej, gdzie wiele poziomów jest wzbudzonych termicznie,
- $k_B T \ll \Delta E \ll e^2/C$, reżim kwantowej blokady kulombowskiej, gdzie tylko jeden lub kilka poziomów uczestniczy w transporcie.

Przedyskutujemy nieliniowy transport w reżimie klasycznej oraz kwantowej blokady. W reżimie klasycznym prąd jest zerowy, jeśli w oknie między μ_L a μ_R nie znajduje się żaden stan ładunkowy, czyli gdy zachodzi $\mu_d(N) < \mu_R$, $\mu_L < \mu_d(N + 1)$. Wzrost napięcia transportowego V_{SD} powoduje zwiększenie okna energetycznego i jeśli teraz stan ładunkowy kropki znajdzie się w tym oknie to prąd zaczyna płynąć. Dzieje się to, gdy $\mu_L > \mu_d(N + 1)$ lub $\mu_d(N) > \mu_R$. Wówczas to otwiera się pojedynczy kanał przewodnictwa. Dalsze zwiększanie napięcia V_{SD} spowoduje otwarcie następnego kanału, kiedy to dwa stany ładunkowe znajdują się w oknie transportowym i nastąpi kolejny wzrost prądu.

W reżimie kwantowej blokady, zwiększając napięcie V_{sd} można otrzymać dwa rodzaje zmian prądu. Jedna z nich odpowiada zmianie w liczbie stanów ładunkowych znajdujących się w oknie transportowym, a więc taka która pojawiła się w reżimie klasycznym. Natomiast druga odpowiada zmianie liczby poziomów energetycznych kropki, na które lub z których elektrony mogą tunelować.

1.1.5 Modele transportu

Na transport sekwencyjny składają się procesy tunelowe pierwszego rzędu w rachunku zaburzeń ze względu na parametr sprzężenia kropki z elektrodami. Jak już sama nazwa wskazuje, elektrony tunelują przez dyskretny poziom kropki jeden po drugim. Aby procesy tego typu mogły zachodzić, poziom kropki musi znajdować się w oknie transportowym, tj. $\mu_L \geq \varepsilon \geq \mu_R$, gdzie ε oznacza położenie dyskretnego poziomu kropki kwantowej.

W reżimie blokady kulombowskiej ($\varepsilon \ll \mu_\beta$ i $\varepsilon + U \gg \mu_\beta$) tunelowanie sekwencyjne jest zabronione ze względu na energię ładowania, ale mogą zachodzić procesy wyższego rzędu. *Współtunelowanie* jest jednym z takich procesów – jest procesem drugiego rzędu [7]. W procesie

takim wykorzystywane są pewne pośredniczące stany wirtualne. Energia takiego stanu wirtualnego może być większa od energii stanu podstawowego, ale jego obsadzenie jest ograniczone przez zasadę nieoznaczoności Heisenberga.

W przypadku silnego sprzężenia kropki kwantowej z elektrodami nie można stosować rozwinięcia perturbacyjnego ze względu na parametr sprzężenia z elektrodami. Wówczas należy uwzględniać wszystkie procesy w sposób nieperturbacyjny. W odpowiednio niskich temperaturach reżim ten prowadzi do pojawienia się efektu Kondo, który będzie szerzej omówiony w rozdziałach 5–7.

Część I

Transport przez układy kropek kwantowych sprzężonych z ferromagnetycznymi elektrodami

Rozdział 2

Spinowo-spolaryzowany transport przez układ dwóch równoległych kropek kwantowych

W rozdziale tym przedstawione zostaną rozważania teoretyczne dotyczące spolaryzowanego spinowo transportu przez układ dwóch kropek kwantowych połączonych ze sobą w geometrii równoległej przedstawionej na Rys. 2.1. Prezentowane wyniki obliczeń numerycznych zostały otrzymane przy wykorzystaniu metody nierównowagowych funkcji Greena. Głównym celem jest pokazanie wpływu korelacji elektronowych oraz efektów interferencyjnych na charakterystyki transportowe, takie jak liniową oraz nieliniową konduktancję, czy też tunelowy magnetoopór (TMR).

W ostatniej dekadzie zjawisko interferencji kwantowej zachodzące w układach mezoskopowych przyciągnęło dużą uwagę. W szczególności układy złożone z kropek kwantowych, umożliwiające obserwacje takich efektów, były intensywnie badane. Układy te pozwalają na obserwację efektów kwantowych, które dotychczas były znane z fizyki atomowej. Poza tym, kropki kwantowe dają tę przewagę, iż ich parametry mogą być stosunkowo łatwo zmieniane [8], co jest atutem jeśli chciałoby się wykorzystać takie efekty do praktycznych zastosowań. Jednym z takich zjawisk interferencyjnych jest efekt Fano [9].

Efekt Fano w fizyce atomowej objawia się w postaci asymetrycznej linii wyłaniającej się w widmie emisyjnym [9]. Jego źródłem jest kwantowa interferencja fal propagujących przez pojedynczy, dyskretny poziom energetyczny oraz fal propagujących przez kontinuum stanów. Transmisja fal przez poziom dyskretny zachodzi w sposób rezonansowy, natomiast w przypadku transmisji przez kontinuum stanów jest inaczej - zachodzi ona nierezonansowo.

W przypadku transportu elektronowego przez układ złożony z kropki kwantowej sprzężonej do metalicznych elektrod efekt ten związany jest z interferencją fal elektronowych propagujących koherentnie przez kropkę kwantową z tymi przesyłanymi bezpośrednio między elektrodami [10]. W celu dokładniejszego wyjaśnienia tego efektu zwiążmy kanał rezonansowy z dyskretnym poziomem energetycznym kropki kwantowej (ε_0), natomiast kanał nierezonansowy z kontinuum stanów. W wyniku sprzężenia kropki kwantowej z elektrodami jej poziom energetyczny ulega poszerzeniu. Wielkość tego poszerzenia jest równa sprzężeniu kropki kwantowej z elektrodami i wynosi Γ . Faza fali elektronowej propagującej poprzez kanał rezonansowy zmienia się o π w obrębie Γ , $\varepsilon_0 \in (-\Gamma/2, \Gamma/2)$. Z drugiej strony faza funkcji elektronowej w kanale nierezonansowym zmienia się nieznacznie w przedziale energii $[-\Gamma/2, \Gamma/2]$ centrowanym w punkcie ε_0 . W konsekwencji tego, po jednej stronie dyskretnego poziomu kropki kwantowej funkcje fal elektronowych propagujące dwoma różnymi kanałami interferują ze sobą w sposób konstruktywny dając wzmocnienie sygnału wyjściowego. Natomiast po drugiej stronie poziomu kropki kwantowej zachodzi interferencja destruktywna, prowadząca do osłabienia sygnału wyjściowego. W szczególności jeśli różnica faz dwóch interferujących ze sobą fal elektronowych wynosi π^1 , obserwujemy całkowite wygaszenie sygnału wyjściowego jeśli amplitudy fal są równe. Rezultatem

¹Zostało to szczegółowo przedstawione w Dodatku B dla układu dwóch kropek kwantowych sprzężonych z zewnętrznymi elektrodami

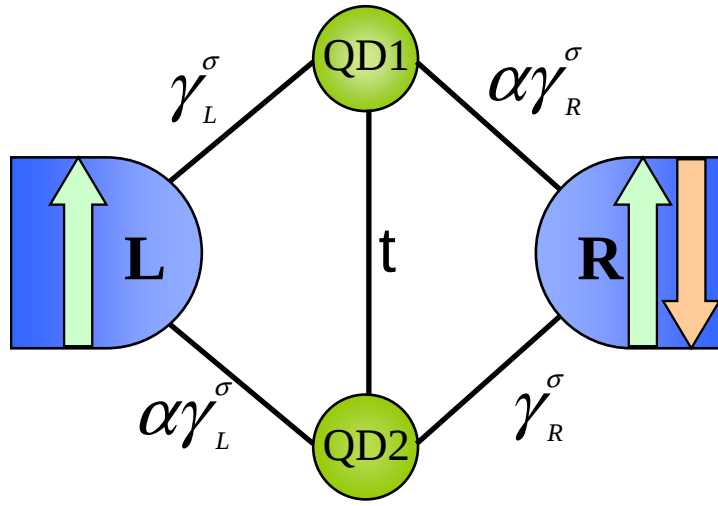
tego zjawiska jest asymetryczna linia sygnału wyjściowego (tutaj konduktancji) w otoczeniu dyskretnego poziomu kropki kwantowej.

Efekt Fano może też być obserwowany w układach posiadających dwa dyskretnie poziomy energetyczne sprzężone z elektrodami zewnętrznymi z różną siłą. Różne sprzężenia prowadzą do różnych wielkości poszerzeń dyskretnych poziomów energetycznych. W rezultacie jeden z poziomów jest wąski a drugi szeroki, przy czym wąski poziom musi leżeć w obrębie poziomu szerokiego, aby efekt Fano mógł być zaobserwowany. Wówczas wąski poziom energetyczny spełnia rolę kanału rezonansowego, podczas gdy szeroki poziom odpowiada kanałowi nierezonansowemu. Należy jednak podkreślić, iż kropki kwantowe muszą oddziaływać ze sobą pośrednio poprzez elektrody, aby efekt ten miał miejsce. O rodzaju tego oddziaływania zostanie powiedziane więcej w głównej części tego rozdziału. Opisana sytuacja może wystąpić w układzie złożonym z dwóch kropek kwantowych dołączonych do zewnętrznych elektrod w konfiguracji równoległej. Wówczas to pośrednie sprzężenie dwóch kropek kwantowych poprzez elektrodę prowadzi do powstania stanu wiążącego i antywiążącego, którym odpowiadają poziomy energetyczne o różnych szerokościach. Taki układ jest przedmiotem rozważań zawartych w tym rozdziale.

Efekt Fano w układach nanoskopowych zbudowanych z kropek kwantowych został już zaobserwowany w kilku eksperymentach. Grupa Göresa [11] wykorzystała w tym celu tranzystor jednoelektronowy (SET). Również własności transportowe układów kropek kwantowych umieszczonych w pierścieniu Aharonova – Bohma zostały ostatnio przebadane eksperymentalnie, gdzie efekt Fano był modulowany zarówno polem magnetycznym jak i elektrycznym [12, 13]. W innym doświadczeniu rozpatrywano natomiast modulowany interferometr Fano złożony z kropki kwantowej sprzężonej tunelowo z jednowymiarowym kanałem przewodnictwa (drutem kwantowym) i obserwowano efekt Fano modyfikowany oddziaływaniami kulombowskimi [14]. Linia Fano w konduktancji została niedawno zaobserwowana w układzie złożonym z dwóch kropek kwantowych, z których tylko jedna była dołączona do elektrod [15]. Eksperymenty te zainicjowały również intensywne prace teoretyczne nad koherentnym transportem przez sprzężone kropki kwantowe [16, 17, 18, 19, 20, 21]. Jednak w większości prac jakie ukazały się do tej pory oddziaływania kulombowskie były zaniechane. Poza tym rozpatrywano sytuacje, gdzie transport odbywał się przez dwie kropki kwantowe znajdujące się w geometrii szeregowej bądź równoległej, sprzężone z niemagnetycznymi elektrodami. Transport elektronowy przez układy dwóch kropek kwantowych sprzężonych z magnetycznymi elektrodami rozważało niewielu badaczy [22, 23]. W szczególności układ taki nie został dokładnie zbadany z punktu widzenia wpływu magnetyzmu elektrod na efekty interferencyjne.

2.1 Model układu i jego Hamiltonian

Rozważamy układ złożony z dwóch, jednoziumowych kropek kwantowych sprzężonych z ferromagnetycznymi elektrodami w geometrii pokazanej na Rys. 2.1. Do niedawna układy kropek kwantowych dołączonych do magnetycznych elektrod były badane tylko teoretycznie. Ostatnio problemy technologiczne związane z dołączeniem półprzewodnikowych kropek kwantowych do elektrod ferromagnetycznych zostały przełamane i wykonano pierwsze eksperymenty dotyczące spinowo-spolaryzowanego transportu przez pojedynczą kropkę kwantową [24]. Wobec tego, przeprowadzenie eksperymentów z układami wielu kropek kwantowych dołączonych do ferromagnetycznych elektrod wydaje się być tylko kwestią czasu. W ogólności oddziaływania kulombowskie istnieją na kropkach kwantowych ($U_{intradot}$) oraz między nimi ($U_{interdot}$). W poniższych rozważaniach oddziaływanie kulombowskie między kropkami kwantowymi zostało zaniechane, co jest usprawiedliwione faktem, iż w rzeczywistych układach jest ono dużo mniejsze od oddziaływania kulombowskiego obecnego na kropce kwantowej [25]. W rozpatrywanym przypadku momenty magnetyczne elektrod mogą znajdować się w jednej z dwóch konfiguracji magnetycznych: równoległej bądź antyrównoległej, co schematycznie jest zaznaczone strzałkami na rysunku 2.1. Przełączenie między konfiguracjami magnetycznymi można zrealizować eksperymentalnie przykładając słabe pole magnetyczne przemiatające krzywą histerezy.



Rysunek 2.1: Schemat układu dwóch sprzężonych kropek kwantowych dołączonych do magnetycznych elektrod. Parametr γ_β^σ dla ($\beta = L, R$ i $\sigma = \uparrow, \downarrow$) opisuje spinowo-zależne sprzężenie kropki z elektrodą.

Hamiltonian opisujący rozważany układ składa się z trzech zasadniczych członów:

$$\hat{H} = \hat{H}_{leads} + \hat{H}_{DQD} + \hat{H}_T, \quad (2.1)$$

gdzie:

- $\hat{H}_{leads}$ – Hamiltonian opisujący lewą (L) i prawą (R) elektrodę. Z założenia elektrody te są metaliczne, w których elektrony są traktowane jako nieoddziaływujące, ale znajdujące się w pewnym polu średnim. Również oddziaływania kulombowskie między elektronami w elektrodach a elektronami na kropkach są silnie ekranowane, a więc zaniedbywalnie małe. Wobec powyższego Hamiltonian elektrod można zapisać w następującej postaci:

$$\hat{H}_{leads} = \sum_{\mathbf{k}\beta} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma}. \quad (2.2)$$

W Hamiltonianie (2.2), $c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger$ ($c_{\mathbf{k}\beta\sigma}$) oznacza operator kreacji (anihilacji) elektronu o wektorze falowym $\mathbf{k}$ i spinie σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) w elektrodzie β ($\beta = L, R$); $\varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma}$ oznacza odpowiadającą stanowi $|\mathbf{k}, \beta, \sigma\rangle$ energię jednocząstkową.

- $\hat{H}_{DQD}$ – Hamiltonian opisujący układ sprzężonych ze sobą tunelowo kropek kwantowych,

$$\hat{H}_{DQD} = \sum_{i\sigma} \varepsilon_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} - \sum_{\sigma} (t_\sigma d_{1\sigma}^\dagger d_{2\sigma} + H.c.) + \sum_i U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \quad (2.3)$$

Pierwszy człon po prawej stronie w Hamiltonianie (2.3) opisuje swobodne, nieoddziaływujące kropki kwantowe z poziomami energetycznymi $\varepsilon_{i\sigma}$ ($i = 1, 2$; $\sigma = \uparrow, \downarrow$); drugi człon przedstawia tunelowanie elektronów między kropkami, a parametr t_σ wyraża energię sprzężenia między kropkami. W ogólności parametr ten, jak i poziomy kropek $\varepsilon_{i\sigma}$ są zależne od kierunku spinu. Trzeci człon opisuje oddziaływanie kulombowskie elektronów znajdujących się na i -tej kropce kwantowej, gdzie U_i to parametr Hubbarda opisujący energię tego oddziaływania. Operator $d_{i\sigma}^\dagger$ ($d_{i\sigma}$) kreuje (anihiluje) elektron o spinie σ w i -tej kropce kwantowej, natomiast $n_{i\sigma} = d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}$ jest operatorem liczby obsadzeń i -tej kropki kwantowej.

- $\hat{H}_T$ – opisuje tunelowanie elektronów z elektrod na kropki oraz procesy odwrotne i przyjmuje postać:

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

gdzie $V_{i\mathbf{k}\beta}^\sigma$ – oznacza stałą sprzężenia. Zakładamy, iż są one dla nas znane.

Sprężenie tunelowe kropek kwantowych z zewnętrznymi elektrodami prowadzi do poszerzenia dyskretnych poziomów energetycznych. Im większa wartość energii sprzężenia, tym większe poszerzenie poziomu. Wówczas czas życia elektronu τ na poziomie kropki kwantowej ulega skróceniu i zgodnie z zasadą nieoznaczoności Heisenberga nieokreśloność energii wzrasta według wzoru $\Gamma \sim \hbar/\tau$. W realnych układach wartość tego sprzężenia może zawierać się w przedziale od kilku μeV do nawet kilku meV [25]. W ogólności sprzężenie kropki kwantowej z elektrodą może zależeć od energii. Jednak w przybliżeniu szerokiego pasma sprzężenie to można uznać za stałe. Formalnie zakłada się, iż $\Gamma(\varepsilon)$ jest stała wewnątrz pasma elektronowego, $\Gamma(\varepsilon) = \Gamma$ dla $\varepsilon \in \langle -D/2, D/2 \rangle$ oraz $\Gamma(\varepsilon) = 0$ w pozostałych przypadkach. D oznacza szerokość pasma elektronowego w elektrodzie. Dla rozpatrywanego układu sprzężenie to można wyrazić następująco $\Gamma_{\beta ij}^\sigma = 2\pi \sum_{\mathbf{k}} V_{i\mathbf{k}\beta}^\sigma (V_{j\mathbf{k}\beta}^\sigma)^* \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma}) \approx 2\pi V_{i\beta} V_{j\beta}^* \rho_\beta^\sigma$, gdzie ρ_β^σ to zależna od spinu gęstość stanów w elektrodzie β .

W rozważanym układzie sprzężenie kropek kwantowych z daną elektrodą może być zapisane w postaci następującej macierzy:

$$\mathbf{\Gamma}_\beta^\sigma = \begin{pmatrix} \Gamma_{\beta 11}^\sigma & \Gamma_{\beta 12}^\sigma \\ \Gamma_{\beta 21}^\sigma & \Gamma_{\beta 22}^\sigma \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Elementy pozadiagonalne można wyrazić poprzez elementy diagonalne w następujący sposób, $\Gamma_{\beta 12}^\sigma = \Gamma_{\beta 21}^\sigma = q_\beta \sqrt{\Gamma_{\beta 11}^\sigma \Gamma_{\beta 22}^\sigma}$ [26]. Nediagonalne elementy macierzy $\mathbf{\Gamma}_\beta^\sigma$ uwzględniają różne efekty interferencyjne i wynikają z możliwości pośredniego tunelowania elektronów między kropkami kwantowymi poprzez stany w elektrodach. W rzeczywistych układach elementy pozadiagonalne mogą być znacznie zredukowane w porównaniu z elementami diagonalnymi $\Gamma_{\beta ii}^\sigma$ lub nawet całkowicie wygaszone w związku z możliwością wystąpienia destruktywnej interferencji kwantowej. Parametr q_β został wprowadzony, aby uwzględnić wszystkie te efekty. W ogólności q_β może być liczbą zespoloną, jednak w naszych rozważaniach zakładamy, iż q_β jest wielkością rzeczywistą spełniającą warunek $|q_\beta| \leq 1$. Definiując spinową polaryzację elektrody β poprzez gęstości stanów nośników większościowych, ρ_β^+ , oraz nośników mniejszościowych, ρ_β^- , tr jako:

$$p_\beta = \frac{\rho_\beta^+ - \rho_\beta^-}{\rho_\beta^+ + \rho_\beta^-}, \quad (2.6)$$

macierz sprzężenia dla konfiguracji równoległej można zapisać w następującej postaci:

$$\mathbf{\Gamma}_L^\sigma = \gamma_L^\sigma \begin{pmatrix} 1 & q_L \sqrt{\alpha} \\ q_L \sqrt{\alpha} & \alpha \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

dla sprzężenia z lewą elektrodą, oraz

$$\mathbf{\Gamma}_R^\sigma = \gamma_R^\sigma \begin{pmatrix} \alpha & q_R \sqrt{\alpha} \\ q_R \sqrt{\alpha} & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

dla sprzężenia z prawą elektrodą. W powyższych wyrażeniach $\gamma_L^\sigma = (1 \pm p_L) \Gamma_L$ i $\gamma_R^\sigma = (1 \pm p_R) \Gamma_R$. W równoległej konfiguracji magnetycznej elektrony ze spinem- $\uparrow$ (spinem- $\downarrow$) są nośnikami większościowymi (mniejszościowymi) w obydwu elektrodach. Natomiast w konfiguracji antyrównoległej sprzężenia dane są wzorami (2.7) oraz (2.8) z podstawieniem $p_R \leftrightarrow -p_R$. Parametr α w równaniach (2.7) oraz (2.8) wprowadza różnicę w sprzężeniach danej elektrody z obydwiema kropkami kwantowymi i zakładamy, że może przyjmować wartości z przedziału $\alpha \in \langle 0, 1 \rangle$. Zmieniając wartość tego parametru, można zmieniać w płynny sposób geometrię układu. W szczególności dla $\alpha = 0$ układ znajduje się w geometrii szeregowej, natomiast gdy $\alpha = 1$ to

sprężenie danej elektrody do obydwu kropek kwantowych jest takie samo. Warto również dodać, iż w przypadku gdy $\Gamma_L = \Gamma_R \equiv \Gamma$ i $\alpha = 1$, mamy do czynienia z układem równoległym w pełni symetrycznym, bowiem wówczas wszystkie sprzężenia są takie same tzn. $\mathbf{\Gamma}_L^\sigma = \mathbf{\Gamma}_R^\sigma$.

W celu wyznaczenia prądu płynącego przez układ stosujemy formułę Meira-Wingreen'a [27, 28]:

$$J = \frac{ie}{2\hbar} \sum_{\sigma} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \text{Tr}\{[\mathbf{\Gamma}_L^\sigma - \mathbf{\Gamma}_R^\sigma] \mathbf{G}_\sigma^<(\epsilon) + [f_L(\epsilon) \mathbf{\Gamma}_L^\sigma - f_R(\epsilon) \mathbf{\Gamma}_R^\sigma][\mathbf{G}_\sigma^r(\epsilon) - \mathbf{G}_\sigma^a(\epsilon)]\}, \quad (2.9)$$

gdzie: $f_\beta(\epsilon) = [e^{(\epsilon - \mu_\beta)/k_B T} + 1]^{-1}$ jest funkcją rozkładu dla Fermiego - Diraca β -ej elektrody. W równaniu (2.9) $\mathbf{G}_\sigma^r(\epsilon)$, $\mathbf{G}_\sigma^a(\epsilon)$, $\mathbf{G}_\sigma^<(\epsilon)$ są macierzami przedstawiającymi transformaty Fouriera nierównowagowej opóźnionej, przedwczesnej i korelacyjnej funkcji Greena. Elementy macierzowe funkcji Greena $\mathbf{G}_\sigma^r$, $\mathbf{G}_\sigma^<$ w domenie czasowej są zdefiniowane w następujący sposób [29]:

$$G_{ij\sigma}^r(t, t') = -i\Theta(t - t') \langle \{d_{i\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(t')\} \rangle, \quad (2.10)$$

$$G_{ij\sigma}^<(t, t') = i \langle d_{j\sigma}^\dagger(t') d_{i\sigma}(t) \rangle. \quad (2.11)$$

W powyższych równaniach, $\Theta(\tau)$ jest funkcją schodkową przyjmującą wartość 1 gdy $\tau \geq 0$ i 0 w przeciwnym przypadku. Nawias klamrowy $\{..., \dots\}$ oznacza antykomutator, a nawias trójkątny $\langle \dots \rangle$ odnosi się do średniej termodynamicznej. Dla dowolnego operatora $\hat{A}$ można zapisać $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A})$, gdzie $\hat{\rho}$ to operator macierzy gęstości. Argumenty czasowe wskazują, iż operatory te przedstawione są w obrazie Heisenberga [30]:

$$\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{A}(0) e^{-i\hat{H}t}.$$

W stanie stacjonarnym, a taki jest tutaj rozważany, funkcje Greena zależą jedynie od różnicy czasów $t - t'$. W takim przypadku wygodniej jest przejść do przestrzeni Fouriera używając transformat Fouriera funkcji Greena $G_{ij\sigma}^{r, <}(t - t')$. Przedwczesna funkcja Greena jest sprzężeniem hermitowskim opóźnionej funkcji Greena, $\mathbf{G}^a(\epsilon) = [\mathbf{G}^r(\epsilon)]^\dagger$.

2.2 Metoda wyznaczenia funkcji Greena

W celu wyznaczenia opóźnionej funkcji Greena $G_{ij\sigma}^r(\epsilon)$ stosujemy metodę równania ruchu dla funkcji Greena. Wpierw zapisujemy równanie ruchu dla funkcji czasowo-uporządkowanej $G_{ij\sigma}(\epsilon) \equiv \langle \langle d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle$ (notację stosowaną zamiennie) zdefiniowanej na konturze zespolonym:

$$\epsilon \langle \langle d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle = \langle \{d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^\dagger\} \rangle + \langle \langle d_{i\sigma}, \hat{H} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle. \quad (2.12)$$

W równaniu (2.12) $\hat{H}$ jest pełnym hamiltonianem układu (2.1), natomiast nawias kwadratowy oznacza komutator: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Powyższe równanie można otrzymać wychodząc z równania ruchu dla funkcji $G_{ij\sigma}(t - t') = -i \langle T \{d_{i\sigma} d_{j\sigma}^\dagger\} \rangle$. Tutaj, T jest operatorem chronologicznego uporządkowania operatorów. Transformując otrzymane równanie do przestrzeni Fouriera otrzymujemy równanie (2.12).

Wstawiając jawną postać Hamiltonianu układu do równania (2.12), po wykonaniu prostych obliczeń algebraicznych otrzymujemy następujące równanie ruchu:

$$(\epsilon - \epsilon_{i\sigma}) \langle \langle d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle = \delta_{ij} + t \langle \langle d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle + \sum_{\mathbf{k}\alpha} V_{i\mathbf{k}\beta}^* \langle \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle + U_i \langle \langle n_{i\bar{\sigma}} d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle, \quad (2.13)$$

gdzie $\bar{i} = 1$ dla $i = 2$, oraz $\bar{i} = 2$ dla $i = 1$. Podczas wykonywania obliczeń założono, iż parametr przeskoiku między kropkami kwantowymi nie zależy od orientacji spinu, $t_\sigma \equiv t$. W równaniu (2.13) pojawiły się dwie nowe funkcje Greena: jedna jednocząstkowa, $\langle \langle c_{\mathbf{k}\alpha\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle$, i druga dwucząstkowa, $\langle \langle n_{i\bar{\sigma}} d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle$. Należy teraz wypisać równania ruchu dla tych nowych funkcji Greena.

Równanie ruchu dla funkcji Greena $\langle\langle c_{k\beta\sigma}|d_{j\sigma}^\dagger\rangle\rangle$ daje:

$$\langle\langle c_{k\beta\sigma}|d_{j\sigma}^\dagger\rangle\rangle = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{k\beta\sigma}} \sum_{i'} V_{i'k\beta}^\sigma \langle\langle d_{i'\sigma}|d_{j\sigma}^\dagger\rangle\rangle. \quad (2.14)$$

Jak widać funkcję Greena $\langle\langle c_{k\beta\sigma}|d_{j\sigma}^\dagger\rangle\rangle$ udało się wyrazić poprzez jednocząstkową funkcję Greena kropki kwantowej. Następnie piszemy równanie ruchu dla dwucząstkowej funkcji Greena $\langle\langle n_{i\bar{\sigma}}d_{i\sigma}|d_{j\sigma}^\dagger\rangle\rangle$,

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \varepsilon_{i\sigma} - U_i) \langle\langle n_{i\bar{\sigma}}d_{i\sigma}|d_{j\sigma}^\dagger\rangle\rangle &= \delta_{ij} n_{i\bar{\sigma}} - \sum_{\mathbf{p}\gamma} V_{i\mathbf{p}\gamma}^{\bar{\sigma}} \langle\langle c_{\mathbf{p}\gamma\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}} d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle + \sum_{\mathbf{p}\gamma} V_{i\mathbf{p}\gamma}^{\sigma*} \langle\langle c_{\mathbf{p}\gamma\sigma} n_{i\bar{\sigma}} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle \\ &+ t \left[\langle\langle d_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}} d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle n_{i\bar{\sigma}} d_{i\bar{\sigma}} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle - \langle\langle d_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}} d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle \right] \\ &- \sum_{\mathbf{p}\gamma} V_{i\mathbf{p}\gamma}^{\bar{\sigma}*} \langle\langle c_{\mathbf{p}\gamma\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}} d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (2.15)$$

W otrzymanym równaniu pojawiły się funkcje Greena wyższego rzędu. Okazuje się, że gdy napiszemy równania ruchu dla tych nowych funkcji Greena to w otrzymanych równaniach wyłonią się kolejne nieznane funkcje Greena. Ponadto, przy kolejnych iteracjach będą wyłaniać się funkcje Greena coraz wyższego rzędu. Wynika stąd wniosek, że nie da się tego problemu rozwiązać w ścisły sposób i trzeba uciec się do zastosowania pewnych przybliżeń, aby zamknąć układ równań i móc go rozwiązać. Przybliżenie to polega na rozczepieniu funkcji Greena występujących w równaniu (2.15) w następujący sposób:

$$\begin{aligned} \langle\langle d_{i\bar{\sigma}} n_{i\bar{\sigma}} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle &\approx \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle \langle\langle d_{i\bar{\sigma}} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle, \\ \langle\langle d_{i\sigma} d_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle &\approx \langle d_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}} \rangle \langle\langle d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle, \\ \langle\langle c_{k\alpha\sigma} n_{i\bar{\sigma}} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle &\approx \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle \langle\langle c_{k\alpha\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle, \\ \langle\langle c_{k\alpha\sigma} d_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle &\approx - \langle d_{i\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\alpha\bar{\sigma}} \rangle \langle\langle d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle, \\ \langle\langle c_{k\alpha\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}} d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle &\approx \langle c_{k\alpha\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}} \rangle \langle\langle d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Powyższe przybliżenie zaniedbuje człony z funkcjami Greena typu $\langle\langle d_{i\bar{\sigma}} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle$, bowiem w rozważanym przypadku nie są brane pod uwagę procesy z odwróceniem spinu elektronu (tzw. *spin-flip*). W takim przypadku funkcja Greena nie zawiera składowych typu $G_{\sigma\bar{\sigma}}$. Wówczas też nie występują korelacje postaci $\langle c_{p\gamma\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\sigma}^\dagger \rangle$. Podstawiając przybliżenie (2.16) do równania (2.15) otrzymujemy następujące równanie ruchu dla dwucząstkowej funkcji Greena $\langle\langle n_{i\bar{\sigma}}d_{i\sigma}|d_{j\sigma}^\dagger\rangle\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle\langle n_{i\bar{\sigma}}d_{i\sigma}|d_{j\sigma}^\dagger\rangle\rangle &= (\varepsilon - \varepsilon_{i\sigma} - U_i)^{-1} \{ (\delta_{ij} n_{i\bar{\sigma}} + [C_{i\bar{\sigma}} + n_{i\bar{\sigma}} \Sigma_{ii\sigma} \\ &+ t(n_{i\bar{\sigma}} - n_{ii\bar{\sigma}})] G_{ij\sigma}(\varepsilon) + n_{i\bar{\sigma}}(t + \Sigma_{ii\sigma}) G_{i\bar{j}\sigma}(\varepsilon) \}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

W powyższym równaniu wprowadzono następującą notację: $n_{i\sigma} \equiv \langle n_{i\sigma} \rangle$, $n_{i\bar{\sigma}} \equiv \langle d_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}} \rangle$, oraz $C_{i\sigma} \equiv \sum_{\mathbf{k}\beta} \left(V_{i\mathbf{k}\beta}^\sigma \langle d_{i\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma} \rangle - V_{i\mathbf{k}\beta}^{\sigma*} \langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger d_{i\sigma} \rangle \right)$. Ponadto zostały wprowadzone energie własne:

$$\Sigma_{ij\sigma} = \Sigma_{Li\sigma}^\sigma + \Sigma_{Ri\sigma}^\sigma, \quad (2.18)$$

gdzie

$$\Sigma_{\beta ij}^\sigma = \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{i\mathbf{k}\beta}^\sigma V_{j\mathbf{k}\beta}^{\sigma*}}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma}}. \quad (2.19)$$

Podstawiając równanie (2.14) i (2.17) do równania (2.13) otrzymujemy zamknięty układ równań dla funkcji Greena $G_{ij\sigma}(\varepsilon)$. W celu wyznaczenia opóźnionej (przedwczesnej) funkcji Greena należy dokonać podstawienia $G_{ij\sigma}^{r(a)}(\varepsilon) = G_{ij\sigma}(\varepsilon \pm i0^+)$.

W celu wykonania dalszych obliczeń należy znaleźć jeszcze korelacyjną funkcję Greena $G_{ij\sigma}^<(\varepsilon)$. Równanie ruchu dla tej funkcji Greena przyjmuje postać:

$$(\varepsilon - \varepsilon_{i\sigma}) G_{ij\sigma}^<(\varepsilon) = t G_{i\bar{j}\sigma}^<(\varepsilon) + \sum_{\mathbf{k}\alpha} V_{i\mathbf{k}\beta}^\sigma \langle\langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle^< + U_i \langle\langle n_{i\bar{\sigma}} d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle^<. \quad (2.20)$$

Funkcję Greena $\langle\langle c_{\mathbf{k}\alpha\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle^<$ wyznaczamy stosując twierdzenie Langreth'a [29] do równania (2.14) ($[\widehat{A}\widehat{B}]^< = \widehat{A}^r \widehat{B}^< + \widehat{A}^< \widehat{B}^a$ dla dowolnych operatorów $\widehat{A}, \widehat{B}$). W rezultacie otrzymujemy równanie:

$$\langle\langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle^< = \sum_{i'} V_{i'\mathbf{k}\beta}^\sigma [g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^r(\varepsilon) G_{i'j\sigma}^<(\varepsilon) + g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^<(\varepsilon) G_{i'j\sigma}^a(\varepsilon)], \quad (2.21)$$

gdzie

$$g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^r(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma} + i0^+} \quad (2.22)$$

oraz

$$g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^<(\varepsilon) = i f_\beta(\varepsilon) 2\pi \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma}) \quad (2.23)$$

to opóźniona i korelacyjna funkcja Greena nieoddziaływujących elektronów w elektrodach o danym wektorze falowym $\mathbf{k}$. Następnie piszemy równanie ruchu dla funkcji Greena $\langle\langle n_{i\bar{\sigma}} d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle^<$ występującej w równaniu (2.20). To równanie generuje nowe funkcje Greena, podobnie jak w przypadku równania (2.15), które rozszczepiamy stosując przybliżenie (2.16). W rezultacie otrzymuje się funkcję Greena $\langle\langle n_{i\bar{\sigma}} d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle^<$ w następującej postaci:

$$\begin{aligned} \langle\langle n_{i\bar{\sigma}} d_{i\sigma} | d_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle^< &= (\varepsilon - \varepsilon_{i\sigma} - U_i)^{-1} \{ t n_{i\bar{\sigma}} G_{ij\sigma}^<(\varepsilon) + [t(n_{i\bar{\sigma}} - n_{i\bar{\sigma}}) + C_{i\bar{\sigma}}] G_{ij\sigma}^<(\varepsilon) \\ &+ n_{i\bar{\sigma}} \sum_{i'} [\Sigma_{i'i\sigma}^r G_{i'j\sigma}^<(\varepsilon) + i \sum_{\beta=L,R} \Gamma_{\beta i' i}^\sigma f_\beta(\varepsilon) G_{i'j\sigma}^a(\varepsilon)] \}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

W powyższym równaniu $\Sigma_{ij\sigma}^{r(a)}$ jest opóźnioną (przedwczesną) energią własną wyrażoną poprzez równania (2.18) i (2.19) po zastosowaniu przedłużenia analitycznego. Stosując definicję $\Gamma_{\beta ij}^\sigma$ oraz tożsamość (słuszną w sensie całkowania):

$$\frac{1}{x - x' \pm i\eta} = P \left(\frac{1}{x - x'} \right) \mp i\pi \delta(x - x'), \quad (2.25)$$

energii własne $\Sigma_{ij\sigma}^{r(a)}$ można wyrazić w następującej postaci:

$$\Sigma_{ij\sigma}^{r(a)} = \sum_{\beta=L,R} \left(\Lambda_{\beta ij}^\sigma \mp \frac{i}{2} \Gamma_{\beta ij}^\sigma \right), \quad (2.26)$$

gdzie

$$\Lambda_{\beta ij}^\sigma = -\frac{\Gamma_{\beta ij}^\sigma}{2\pi} \ln \left(\frac{D/2 + \mu_\beta - \varepsilon}{D/2 - \mu_\beta + \varepsilon} \right) \quad (2.27)$$

jest częścią rzeczywistą energii własnej. Część rzeczywista energii własnej zależy od potencjału elektrochemicznego β -ej elektrody μ_β . Człon $\Lambda_{\beta ij}^\sigma$ wprowadza renormalizację poziomów kropek kwantowych. Podstawiając równania (2.21) i (2.24) do równania (2.20) łatwo wyznaczyć formułę na funkcję Greena $\mathbf{G}_\sigma^<(\varepsilon)$.

Obliczenia nie są jeszcze kompletne, bowiem nieznane są wartości średnie występujące w otrzymanych wyrażeniach na funkcje Greena. Wartości średnie $n_{i\sigma}$, $n_{i\bar{\sigma}}$, $\langle d_{i\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \rangle$ i $\langle c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger d_{i\sigma} \rangle$, jak i funkcje Greena, muszą być wyznaczone w sposób samozgodny. W tym celu stosujemy następujące tożsamości:

$$n_{i\sigma} = -i \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_{ii\sigma}^<(\varepsilon), \quad (2.28)$$

$$n_{i\bar{\sigma}} = -i \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_{ii\bar{\sigma}}^<(\varepsilon), \quad (2.29)$$

$$\langle d_{i\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \rangle = -i \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \langle\langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma} | d_{i\sigma}^\dagger \rangle\rangle^<, \quad (2.30)$$

i analogiczną dla $\langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger d_{i\sigma} \rangle$. Zauważając, iż w liniowej odpowiedzi zachodzi równość $\langle c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger d_{i\sigma} \rangle = \langle d_{i\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma} \rangle^*$ można zredukować liczbę równań samozgodnych, które należy rozwiązać. W ogólności należy wyznaczyć wszystkie wymienione średnie.

2.3 Wyniki numeryczne

2.3.1 Definicje i założenia

Równania wyznaczone powyżej pozwalają obliczyć numerycznie podstawowe charakterystyki transportowe, w szczególności liniową i nieliniową konduktancję oraz tunelowy magnetoopór. Liniowa konduktancja jest zdefiniowana jako pochodna prądu J płynącego przez układ względem napięcia V przyłożonego do zewnętrznych elektrod, wzięta w granicy $V \rightarrow 0$:

$$G = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{dJ}{dV}. \quad (2.31)$$

Natomiast różniczkowa konduktancja nieliniowa jest wyznaczana w przypadku, gdy potencjały elektrochemiczne lewej (L) i prawej (R) elektrody są różne i zdefiniowana jest następującym wyrażeniem:

$$G_{diff} = \frac{dJ}{dV}. \quad (2.32)$$

Magnetoopór tunelowy (TMR) opisuje zmianę oporności układu wraz ze zmianą konfiguracji magnetycznej elektrod z antyrównoległej na równoległą i opisany jest wzorem:

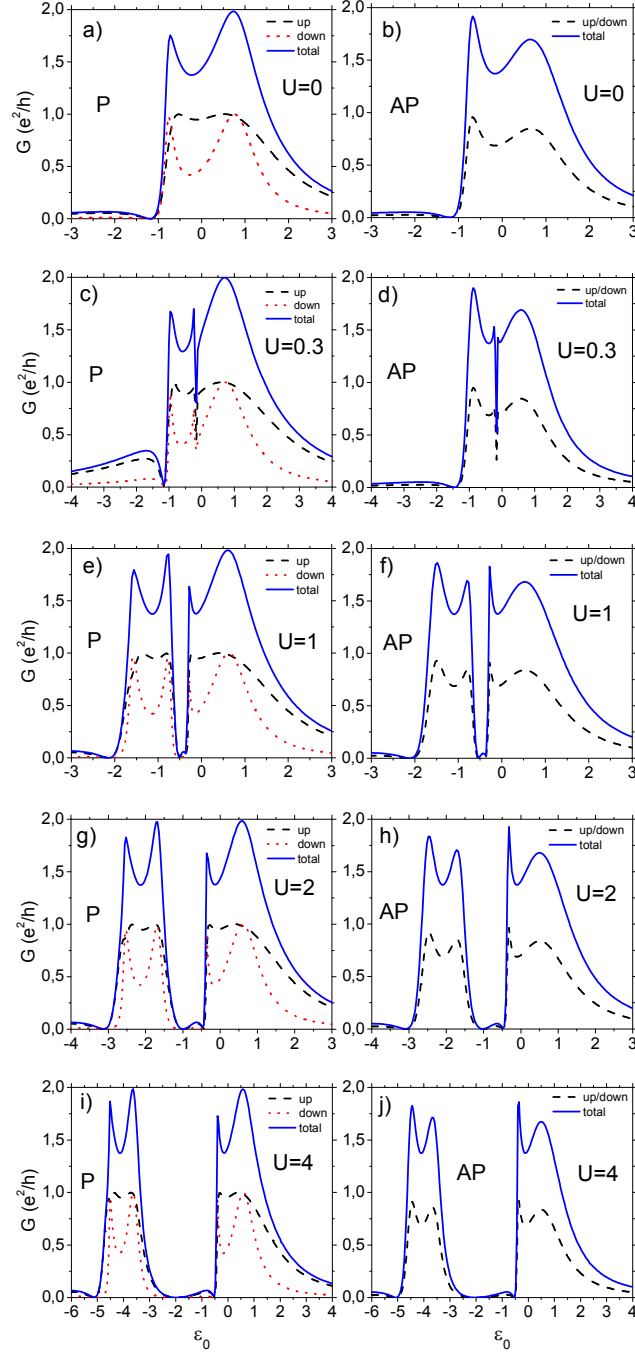
$$\text{TMR} = \frac{J_P - J_{AP}}{J_{AP}}, \quad (2.33)$$

gdzie J_P (J_{AP}) oznacza prąd w konfiguracji równoległej (antyrównoległej). TMR po raz pierwszy został zaobserwowany w płaskich złączach magnetycznych przez Jullierea [31] i wyjaśniony za pomocą prostego modelu zakładającego stałe sprzężenia tunelowe oraz gęstości stanów w elektrodach [31, 32]. Otrzymana przy pomocy takiego modelu formuła na tunelowy magnetoopór ma następującą postać: $\text{TMR} = 2p_L p_R / (1 - p_L p_R)$ i jest znana pod nazwą formuły Julliera. Przedstawiane tutaj wyniki numeryczne zostały otrzymane dla przypadku symetrycznego sprzężenia kropek z lewą i prawą elektrodą, $\Gamma_L = \Gamma_R \equiv \Gamma$, oraz elektrod wykonanych z jednakowych ferromagnetyków, $p_L = p_R \equiv p = 0.4$. Wartość $p = 0.4$ odpowiada polaryzacji magnetycznej typowych ferromagnetycznych metali 3d. Ponadto założono spinowo zdegenerowane i jednakowe poziomy obydwu kropek kwantowych, $\varepsilon_{i\sigma} = \varepsilon_0$ (dla $i = 1, 2$, i $\sigma = \uparrow, \downarrow$). Dla prostoty przyjęto jednakowe wartości parametrów Hubbarda charakteryzujących oddziaływania kulombowskie na kropkach kwantowych, $U_1 = U_2 = U$. W ogólności parametry q_L oraz q_R mogą różnić się od siebie. Tutaj założono, iż ich wartości bezwzględne są równe $|q_L| = |q_R| \equiv q$ i na potrzeby tego rozdziału rozważono tylko dwie sytuacje odpowiadające przypadkowi $q_L = q_R \equiv q = 1$, oraz $q_L = -q_R = 1$. Ponadto, założono dosyć dużą asymetrię sprzężenia danej elektrody z obydwoma kropkami kwantowymi, $\alpha = 0.15$. Sprzężenie tunelowe między kropkami kwantowymi założono równe $t = 0.8\Gamma$, natomiast temperaturę ustalono na $k_B T = 0.01\Gamma$. Zważywszy na fakt, iż sprzężenie kropki kwantowej z elektrodami, Γ , może być kontrolowane eksperymentalnie i przyjmuje wartości rzędu kilku μeV [33] a nawet 1 – 3 rzędy wielkości większe w reżimie silnego sprzężenia, przyjęta temperatura jest wyższa od temperatury Kondo. Wobec tego zastosowane rozszczepienie, nie uwzględniające korelacji typu Kondo, są usprawiedliwione dla rozważanego przypadku.

2.3.2 Wyniki numeryczne dla liniowej odpowiedzi w przypadku $q = 1$

Na początku zostaną omówione wyniki otrzymane przy pominięciu oddziaływań kulombowskich na kropkach kwantowych, tzn. gdy $U = 0$. Sprzężenie kropek kwantowych poprzez stany w elektrodzie prowadzi do powstania stanu wiążącego i antywiążącego. Odpowiadające tym stanom poziomy energetyczne mają na ogół różne szerokości. Różnica w szerokościach bierze się z istnienia pośredniego sprzężenia kropek kwantowych poprzez elektrodę. Wkład do szerokości tych poziomów, jaki wnosi sprzężenie kropek z elektrodą β wynosi $\Gamma_{\pm}^{\beta} = (\Gamma_{11}^{\beta} + \Gamma_{22}^{\beta})/2 \pm q\sqrt{\Gamma_{11}^{\beta}\Gamma_{22}^{\beta}}$, skąd jasno wynika pochodzenie różnicy w szerokościach poziomu wiążącego i antywiążącego.

W przypadku $|q| = 1$ różnica ta jest największa dla ustalonych wartości pozostałych parametrów charakteryzujących sprzężenie układu kropek kwantowych z elektrodami (w szczególności dla ustalonego parametru α). Wobec tego szerszy pik w gęstości stanów odpowiadał będzie poziomowi wiążącemu, a węższy poziomowi antywiązącemu. Bezpośrednie sprzężenie tunelowe kropek kwantowych prowadzi do zniesienia degeneracji wyjściowych poziomów kropek kwantowych. W konsekwencji tego sprzężenia, stanowi wiążącemu (antywiązącemu) odpowiada wartość własna $\varepsilon_+ \approx \varepsilon_0 - t$ ($\varepsilon_- \approx \varepsilon_0 + t$). Kiedy asymetria sprzężeń kropek kwantowych z elektrodą jest redukowana, wówczas szerokość poziomu wiążącego (antywiąźącego) wzrasta (maleje). W szczególności, gdy $\beta = 1$ rezonans odpowiadający stanowi antywiązącemu przybiera kształt funkcji δ -Diraca, a ten związany ze stanem wiążącym uzyskuje szerokość rzędu 4Γ . Stan antywiązący staje się wówczas całkowicie zlokalizowany i nazywany jest *stanem związanym w kontinuum* [34, 35, 36, 91].



Rysunek 2.2: Konduktancja liniowa w zależności od położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczona dla równoległej (P) i antyrównoległej (AP) konfiguracji magnetycznej elektrod, oraz dla podanych wartości parametru U . Pozostałe parametry: $p = 0.4$, $t = 0.8\Gamma$, $k_B T = 0.01\Gamma$, $q = 1$. Wszystkie wielkości energetyczne podane na rysunku są wyrażone w jednostkach Γ .

Antyrezonansowa linia Fano może być zaobserwowana eksperymentalnie poprzez zmianę potencjału na elektrodach bramkujących kropki kwantowe. Ciągła zmiana napięcia elektrod bramkujących kropki kwantowe umożliwia przesuwanie ich poziomów energetycznych. Natomiast zmiana położenia poziomów kropek kwantowych powoduje adekwatną zmianę położenia poziomu wiążącego i antywiążącego, jako iż te są funkcją wyjściowych poziomów kropek kwantowych. Kiedy poziom wiążący ε_+ (antywiążący ε_-) osiąga poziom Fermiego elektrod $\mu_L = \mu_R \equiv \mu = 0$, wówczas w konduktancji liniowej pojawia się rezonans w kształcie linii Lorentza (Fano) [9, 17]. Na rysunku 2.2(a) [2.2(b)] wykreślono konduktancję całkowitą, oraz wkłady pochodzące od każdej orientacji spinowej, dla równoległej (P) oraz antyrównoległej (AP) konfiguracji magnetycznej w zależności od położenia poziomów kropek kwantowych. Konduktancja dla obydwu orientacji spinu, związana z poziomem antywiążącym ujawnia antyrezonansowy charakter typowy dla efektu Fano. Jak zostało wcześniej opisane, pojawienie się antyrezonansu w konduktancji jest związane z wystąpieniem destruktywnej interferencji kwantowej. Natomiast pik w konduktancji odpowiadający stanowi wiążącemu jest stosunkowo szeroki.

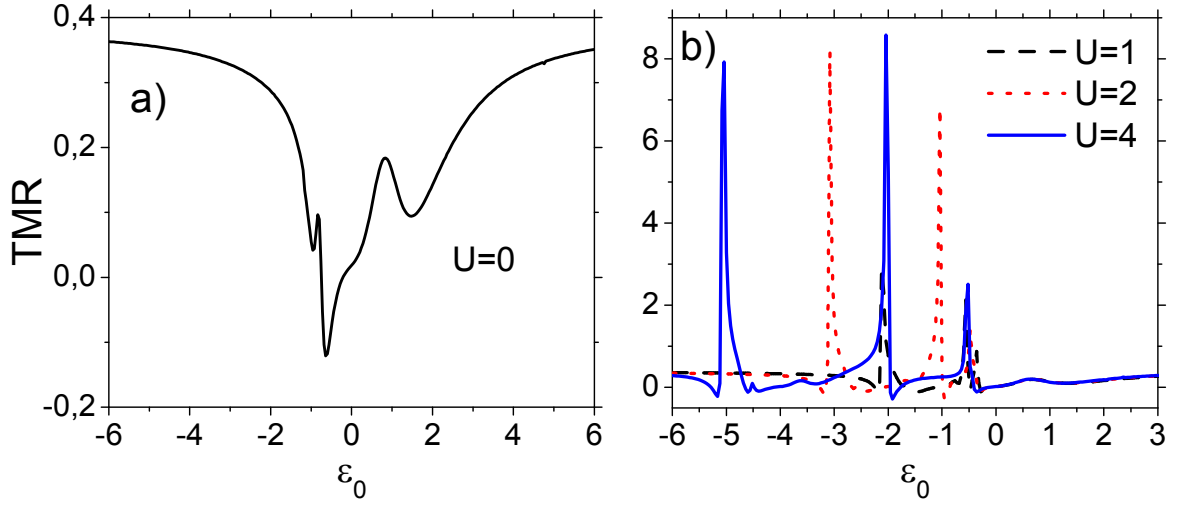
Sprzężenie kropek kwantowych z magnetycznymi elektrodami jest zależne od orientacji spinu, stąd też szerokość poziomu wiążącego i antywiążącego wykazuje spinową zależność. Konsekwencją spinowej zależności stałych sprzężeń jest dobrze widoczna na Rys. 2.2(a) separacja pików w konduktancji liniowej dla jednej orientacji spinów i praktycznie brak takiego rozszczepienia dla drugiej orientacji spinów. W przypadku konfiguracji antyrównoległej nośniki z obydwoma orientacjami spinu dają jednakowy wkład do konduktancji liniowej co wyraźnie widać na Rys. 2.2(b). Należy jednak podkreślić, iż wynik ten jest słuszny tylko dla symetrycznego sprzężenia układu kropek kwantowych z lewą i prawą elektrodą.

Zwężaniu (poszerzaniu) rezonansu antywiążącego (wiążącego) w konduktancji wraz z redukcją asymetrii sprzężenia kropek kwantowych z elektrodami odpowiada wzrost (redukcja) czasu życia $\tau = \hbar/\Gamma_{\mp}$ odpowiedniego stanu. Silne zwężenie pików Fano, gdy $\alpha \rightarrow 1$ sugeruje więc małą częstość przejść przez stan antywiążący. Warto dodać, iż w przypadku $\alpha = 0$, tj. gdy układ złożony jest z kropek kwantowych sprzężonych szeregowo, w konduktancji pojawiają się dwa symetryczne piki, bowiem wówczas pozadiagonalne (interferencyjne) człony macierzy sprzężenia znikają.

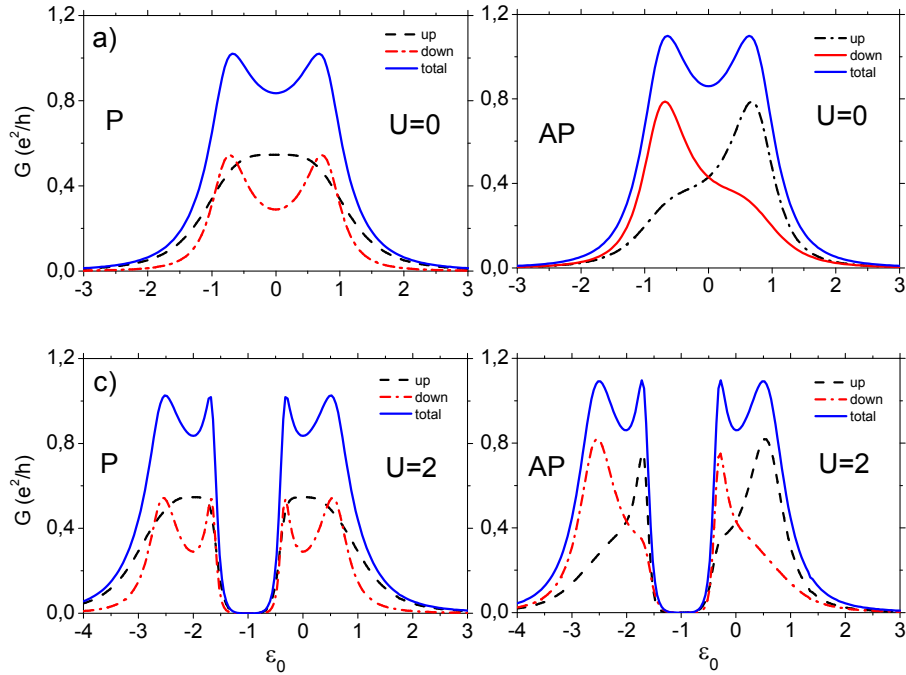
Teraz zostanie przedyskutowany wpływ oddziaływań kulombowskich, występujących na kropkach kwantowych, na wyżej opisany obraz. Rysunki 2.2(c)-2.2(j) przedstawiają liniową konduktancję dla obydwu konfiguracji magnetycznych i dla różnych wartości parametru Hubbarda U . Po pierwsze, oddziaływania kulombowskie na kropkach kwantowych prowadzą do rozszczepienia struktury dwóch pików z Rys. 2.2(a) i 2.2(b). W konsekwencji tego wyłaniają się cztery piki w konduktancji dla skończonego U z charakterystyczną przerwą pomiędzy dwiema parami pików dla wystarczająco dużej wartości parametru U . Wraz ze wzrostem parametru U , szerokość przerwy również wzrasta. Jeśli oddziaływanie kulombowskie jest wystarczająco duże, piki w konduktancji pojawiają się dla położenia poziomów przyjmujących wartości $\pm t$, $-t - U$, oraz $t - U$. Po drugie, kształty głównych pików związanych ze stanem wiążącym i antywiążącym różnią się od tych jakie posiadają ich kulombowscy partnerzy.

Znając konduktancję (prąd) w konfiguracji równoległej i antyrównoległej można wyznaczyć przebieg tunelowego magnetooporu TMR korzystając ze wzoru (2.33). Zależność TMR-u od położenia poziomów kropek kwantowych ε_0 została wykreślona na rysunku 2.3 dla różnych wartości parametru U . Kiedy poziomy kropek kwantowych znajdują się daleko od poziomu Fermiego elektrod, wówczas TMR osiąga wartość magnetooporu Jullierea [31]. Jednak gdy, poziomy kropek kwantowych znajdują się w pobliżu poziomu Fermiego elektrod to sytuacja staje się bardziej skomplikowana. W przypadku kiedy oddziaływania kulombowskie są zaniedbane, $U = 0$, TMR przyjmuje wartości mniejsze od magnetooporu Julliera. Podobne zachowanie się TMR-u zostało przewidziane w układzie pojedynczej kropki kwantowej sprzężonej z ferromagnetycznymi elektrodami [7]. Jednak w obecnym przypadku redukcja TMR-u jest dużo większa. Ponadto, w rozpatrywanym tutaj układzie TMR może przyjąć ujemną wartość dla pewnego zakresu położenia poziomów energetycznych kropek kwantowych. Ujemna wartość TMR-u wskazuje, iż prąd płynący przez układ w konfiguracji antyrównoległej jest większy od prądu w konfiguracji równoległej. Poza tym można zauważyć, iż oddziaływania kulombowskie prowadzą

do wzmocnienia tunelowego magnetooporu w pobliżu wartości położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczony w liniowej odpowiedzi oraz dla wyróżnionych wartości parametru U (wyrażonych w jednostkach Γ). Pozostałe parametry jak na Rys. 2.2.



Rysunek 2.3: Tunelowy magnetoopór w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczony w liniowej odpowiedzi oraz dla wyróżnionych wartości parametru U (wyrażonych w jednostkach Γ). Pozostałe parametry jak na Rys. 2.2.



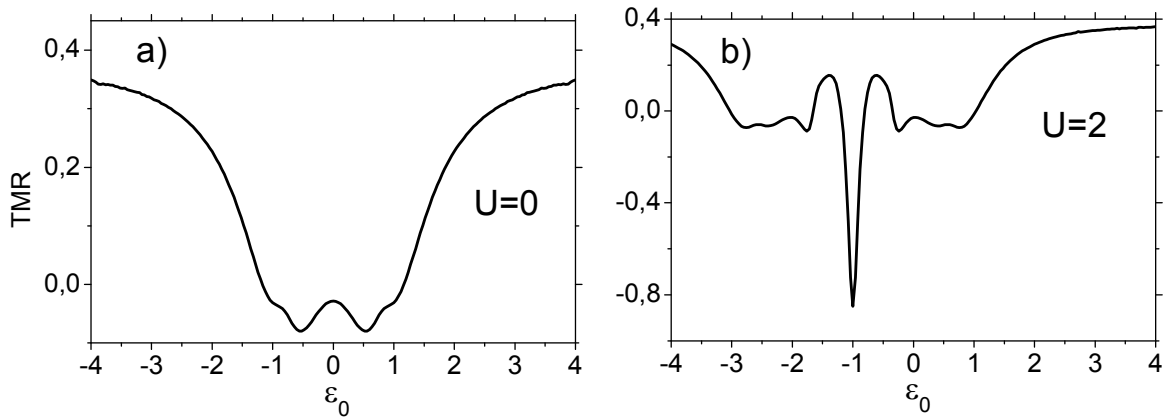
Rysunek 2.4: Konduktancja liniowa w zależności od położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczona dla równoległej (P) i antyrównoległej (AP) konfiguracji magnetycznej elektrod, oraz dla podanych wartości parametru U (wyrażonych w jednostkach Γ). Pozostałe parametry: $p = 0.4$, $t = 0.8\Gamma$, $k_B T = 0.01\Gamma$, oraz $q_L = -q_R = 1$.

2.3.3 Wyniki numeryczne dla liniowej odpowiedzi: $q_L = -q_R = 1$

Przeciwny znak parametrów q_L oraz q_R zmienia efektywnie oddziaływania kropek kwantowych poprzez elektrody, co skutkuje modyfikacją interferencji fal elektronowych. Wobec tego charakterystyki transportowe również powinny ulec zmianie, bowiem rozpatrujemy przypadek, gdzie

efekty sprzężenia pośredniego są maksymalne dla ustalonych wartości pozostałych parametrów. Z rysunku 2.4 (a) i 2.4 (b) wynika, że przeciwne wartości pozadiagonalnych elementów macierzy sprzężenia z lewą i prawą elektrodą prowadzą do zaniku antyrezonansów Fano w przypadku braku oddziaływań kulombowskich. Staje się to jasne jeśli się zauważy, iż człony interferencyjne efektywnych sprzężeń z obydwoma elektrodami znoszą się wówczas nawzajem. W przypadku równoległej konfiguracji magnetycznej efektywne poziomy układu kropek kwantowych są jednakowo sprzężone z elektrodami, co prowadzi do symetrycznego wykresu konduktancji. W przypadku konfiguracji antyrównoległej, taka symetria nie jest zachowana dla poszczególnych kanałów spinowych, ale jest obecna w całkowitej konduktancji, co widać na Rys. 2.4 (b). Poza tym, brak antyrezonansowego charakteru konduktancji jest obecny w przypadku skończonych oddziaływań kulombowskich występujących na kropkach kwantowych, [Rys. 2.4 (c,d)]. Oddziaływania kulombowskie, podobnie jak w przypadku $q = 1$, wprowadzają charakterystyczną przerwę między pikami głównymi i ich kulombowskimi odpowiednikami. Ponadto, nie jest zachowana symetria w obrębie każdej pary pików.

Podobnie jak w przypadku $q = 1$, została wyznaczona zależność TMR-u od położenia poziomów kropek kwantowych. Wyniki zamieszczono na Rys. 2.5. Podobnie jak w poprzednim przypadku, TMR dąży do wartości magnetooporu Jullierea, gdy poziomy kropek kwantowych znajdują się daleko od poziomu Fermiego elektrod. Natomiast gdy poziomy kropek kwantowych znajdują się blisko poziomu Fermiego elektrod, wówczas TMR ulega redukcji i nawet może zmienić znak, podobnie jak to było obserwowane w przypadku $q = 1$. W przeciwieństwie do sytuacji z $q = 1$, teraz oddziaływania kulombowskie nie prowadzą do wzmocnienia TMR-u, jednak w przerwie energetycznej pojawia się ostre minimum.



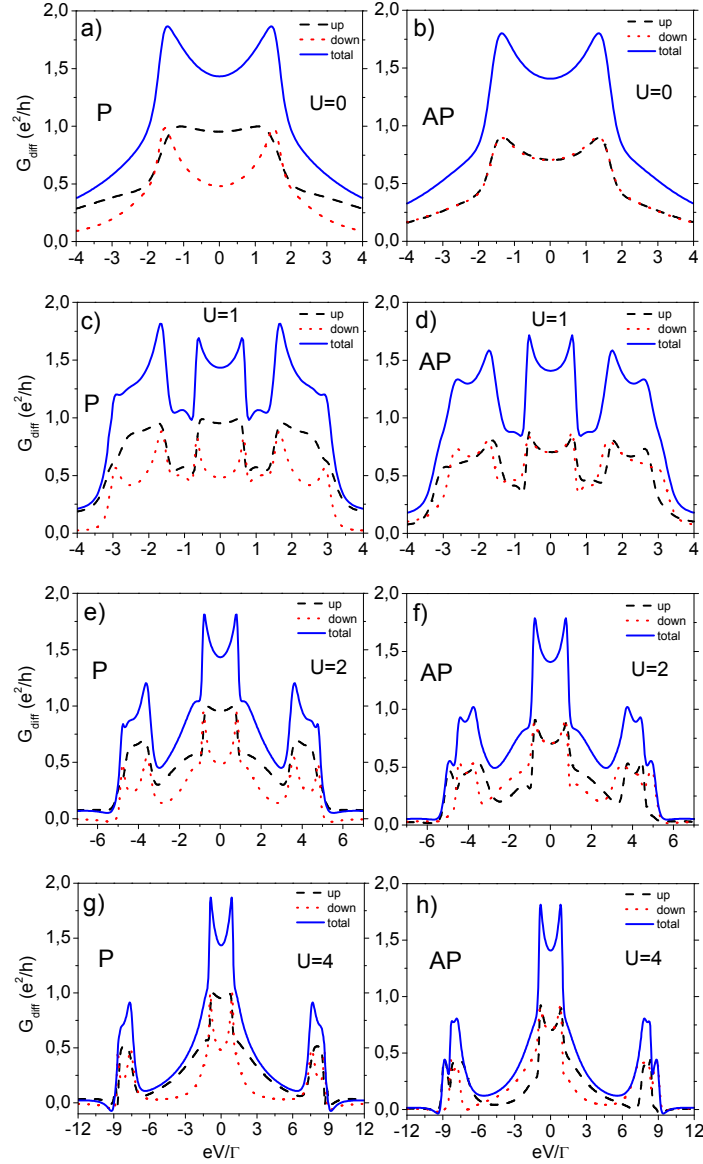
Rysunek 2.5: Tunelowy magnetoopór w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczony w liniowej odpowiedzi dla wyróżnionych wartości parametru U (wyrażonych w jednostkach Γ) oraz dla $q_L = -q_R = 1$. Pozostałe parametry jak na Rys. 2.2.

2.3.4 Wyniki numeryczne dla nieliniowej odpowiedzi.

W tej części ograniczymy się do przedstawienia wyników dla nieliniowej odpowiedzi i dla $q = 1$, ze względu na występowanie antyrezonansów Fano w tym przypadku. Potencjały elektrochemiczne lewej (L) i prawej (R) elektrody zapiszemy w następujący sposób: $\mu_L = eV/2$, oraz $\mu_R = -eV/2$, gdzie V to przyłożone napięcie. W celu wyznaczenia konduktancji różniczkowej założono, iż poziomy kropek kwantowych znajdują się na poziomie Fermiego elektrod w sytuacji równowagowej, $\varepsilon_0 = 0$. Na Rys. 2.6 przedstawiono zależność konduktancji różniczkowej od przyłożonego napięcia dla kilku wartości parametru U . Zauważamy, iż konduktancja różniczkowa jest symetryczna względem odwrócenia znaku przyłożonego napięcia w obydwu konfiguracjach magnetycznych. Symetria ta wynika wprost z przyjętej symetrii układu, tj. takie same poziomy energetyczne obydwu kropek kwantowych oraz jednakowe sprzężenia układu kropek kwantowych z lewą i prawą elektrodą. Ponadto w konfiguracji równoległej symetria względem zmiany znaku przyłożonego napięcia jest zachowana dla obydwu orientacji spinu, natomiast w konfiguracji antyrównoległej taka symetria jest złamana dla poszczególnych kanałów spinowych,

choć jest obecna w całkowitej konduktancji.

W przypadku braku oddziaływań kulombowskich $U = 0$, w konduktancji różniczkowej wyłaniają się dwa piki symetrycznie usytuowane względem zerowego napięcia. Wartość konduktancji

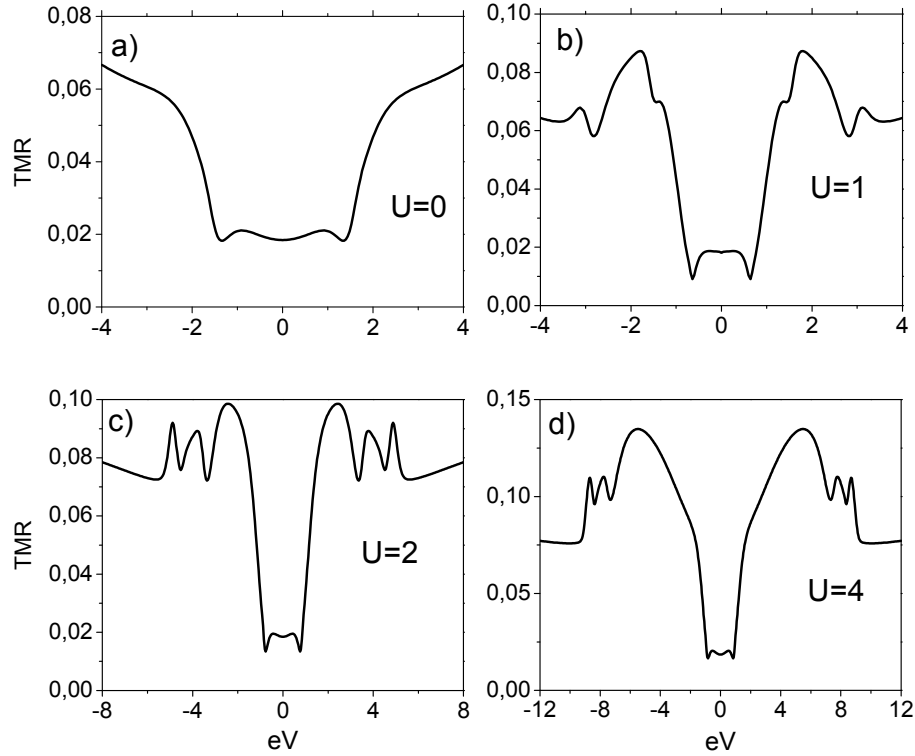


Rysunek 2.6: Nieliniowa konduktancja w zależności od przyłożonego napięcia transportowego wyznaczona dla równoległej (P) i antyrównoległej (AP) konfiguracji magnetycznej elektrod, oraz dla podanych wartości parametru U (wyrażonych w jednostkach Γ). Pozostałe parametry: polaryzacja elektrod $p = 0.4$, położenie poziomów kropek $\varepsilon_0 = 0$, parametr przeskoku między kropkami $t = 0.8\Gamma$, energia termiczna $k_B T = 0.01\Gamma$, $q = 1$.

dla zerowego napięcia ($eV = 0$) jest równa wartości konduktancji w punkcie $\varepsilon_0 = 0$ z Rys. 2.2. Kiedy napięcie transportowe wzrasta, wówczas obydwa piki z Rys. 2.2 (a) i 2.2 (b) (tudzież piki w gęstości stanów) wchodzi do okna transportowego i zaczynają uczestniczyć w transporcie mniej więcej dla tego samego napięcia. Konsekwencją tego są dwa piki w konduktancji różniczkowej: jeden dla dodatniego napięcia, a drugi dla ujemnego napięcia. Podobna sytuacja ma miejsce w konduktancji różniczkowej, gdy zostaną uwzględnione korelacje kulombowskie na kropkach, z tym że liczba maksimum w konduktancji ulega zwiększeniu. Przedyskutujmy to dokładniej dla wartości parametru $U = 2\Gamma$. Początkowy wzrost napięcia transportowego powoduje wyłonienie się dwóch pików w konduktancji różniczkowej [Rys. 2.6 (e) oraz 2.6 (f)]. Kiedy napięcie eV dalej rośnie, wówczas centralne minimum z Rys. 2.2 (g) i Rys. 2.2 (h) wchodzi do okna transportowego powodując nagły spadek w konduktancji różniczkowej. Kiedy do układu zostanie przyłożone odpowiednio duże napięcie, aby kulombowskie odpowiedniki pików głów-

nich mogły uczestniczyć w transporcie, to kolejne dwa układy podwójnych pików pojawiają się w konduktancji różniczkowej. Dla odpowiednio dużych wartości parametru U całkowita konduktancja wykazuje nawet bogatszą strukturę pików i jest spowodowana zależnością amplitudy tunelowania elektronów od orientacji spinu. Warto podkreślić, iż w przypadku niemagnetycznych elektrod te dodatkowe efekty się nie pojawiają.

Zależność TMR-u od przyłożonego napięcia transportowego pokazano na Rys. 2.7 dla parametrów z Rys. 2.6. Wartość TMR-u dla $eV = 0$ odpowiada wartości TMR z Rys. 2.3 w punkcie $\varepsilon_0 = 0$. Dla tak dobranych parametrów, TMR przyjmuje dodatnie wartości z charakterystycznym płaskim minimum wyłaniającym się w zakresie małych napięć. Szerokość tego minimum maleje wraz ze wzrostem wartości parametru U . Dla większych napięć i $U > 0$ pojawiają się słabe oscylacje TMR-u, co odzwierciedla zachowanie się konduktancji ze wzrostem napięcia transportowego widoczne na Rys. 2.6.



Rysunek 2.7: TMR w zależności od przyłożonego napięcia transportowego wyznaczony dla wyróżnionych wartości parametru U (wyrażonych w jednostkach Γ) opisującego oddziaływania kulombowskie na kropkach. Pozostałe parametry: jak na Rys. 2.6.

2.4 Podsumowanie

Rozważany układ pozwolił na zbadanie efektów interferencji kwantowej, a w szczególności antyrezonansów Fano w konduktancji liniowej przy zmianie położenia poziomów energetycznych kropek kwantowych. Jednak zmiana znaku pozadiagonalnych elementów macierzy sprzężenia jednej z elektrod prowadzi do zaniku efektu Fano. Ponadto zaobserwowano, iż takie zachowanie się konduktancji prowadzi do obniżenia TMR-u, gdy poziomy kropek kwantowych znajdują się w pobliżu poziomu Fermiego elektrod. W przypadku skończonych wartości oddziaływań kulombowskich na kropkach kwantowych w obszarach silnego wygaszenia konduktancji zaobserwowano drastyczny wzrost TMR-u. Antyrezonans Fano prowadzi również do ciekawego zachowania się konduktancji i TMR-u w nieliniowej odpowiedzi.

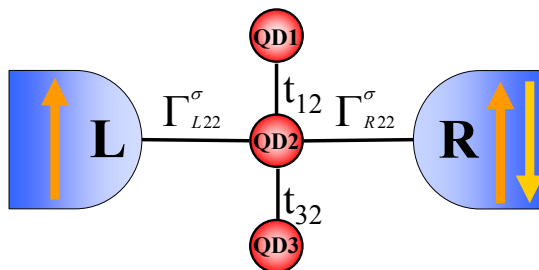
Rozdział 3

Spinowo-spolaryzowany transport przez układ trzech kropek kwantowych

Układy potrójnych kropek kwantowych sprzężonych do magnetycznych, bądź też niemagnetycznych elektrod dają możliwość zaobserwowania nowych zjawisk w transporcie elektronowym [37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48]. Efekty interferencji kwantowej, podobne do tych obserwowanych w układach podwójnych kropek kwantowych [49, 50, 51, 52, 53], powinny być również zauważone w układach potrójnych kropek kwantowych. Układ złożony z trzech kropek kwantowych pozwala m.in. na zbadanie zjawiska zaobserwowanego w fizyce atomowej i nazywanego efektem Dicke [54, 55, 56]. Oryginalny efekt Dicke polega na współlistnieniu bardzo silnego i wąskiego rezonansu oraz bardzo szerokiej linii w widmie emisyjnym układu atomów, których odległości od siebie są mniejsze niż długość fali emitowanej przez pojedynczy odizolowany atom [54, 55]. Szeroka linia w spektrum emisyjnym związana jest ze stanem silnie sprzężonym z polem elektromagnetycznym – nazywanym modem *supradiacyjnym*, natomiast wąska linia odpowiada stanowi słabo sprzężonemu z polem elektromagnetycznym – nazywanemu modem *subradiacyjnym*. W kolejnych rozdziałach zostanie również omówione współzawodnictwo rezonansów Fano, Dicke i Kondo.

3.1 Model układu i jego Hamiltonian

Rozważany układ składa się z trzech kropek kwantowych, z których jedna jest sprzężona z ferromagnetycznymi elektrodami, a dwie pozostałe są połączone tunelowo do tej pierwszej. Schematycznie zostało to pokazane na rysunku 3.1. Ponadto założono, iż momenty magnetyczne elektrod mogą znajdować się w konfiguracji równoległej bądź antyrównoległej. W rozważaniach wzięto pod uwagę korelacje kulombowskie występujące na kropkach kwantowych, podczas gdy oddziaływania kulombowskie między kropkami kwantowymi zostały zaniedbane. To założenie można usprawiedliwić w analogiczny sposób jak to poczyniono w poprzednim rozdziale.



Rysunek 3.1: Schemat układu trzech kropek kwantowych. Tylko kropka kwantowa QD2 jest dołączona do elektrod. Strzałki wskazują możliwe konfiguracje magnetyczne elektrod: równoległą i antyrównoległą.

Rozważany układ jest formalnie opisany następującym Hamiltonianem:

$$\hat{H} = \hat{H}_{leads} + \hat{H}_{QDs} + \hat{H}_T. \quad (3.1)$$

Pierwszy człon w Hamiltonianie (3.1) opisuje elektrony w ferromagnetycznych elektrodach w przybliżeniu pola średniego i dany jest w postaci (2.2). Kolejny człon w równaniu (3.1) to Hamiltonian układu trzech kropek kwantowych wyrażony w następującej postaci:

$$\hat{H}_{QDs} = \sum_{i\sigma} \varepsilon_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \sum_{i=1}^3 U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} - \sum_{j=(1,3)} \sum_{\sigma} (t_{j2\sigma} d_{2\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{H.c.}), \quad (3.2)$$

gdzie $\varepsilon_{i\sigma}$ to poziom energetyczny i -ej kropki kwantowej ($i = 1, 2, 3$), a $t_{j2\sigma}$ jest parametrem opisującym sprzężenie tunelowe między j -tą kropką kwantową ($j = 1, 3$), a kropką kwantową QD2. Drugi człon w Hamiltonianie (3.2) opisuje oddziaływania kulombowskie na kropkach kwantowych.

Ostatni człon Hamiltonianu układu, H_T , opisuje procesy tunelowe zachodzące między kropką kwantową QD2 a elektrodami i przyjmuje postać:

$$\hat{H}_T = \sum_{\mathbf{k}\beta} \sum_{\sigma} (V_{2\mathbf{k}\beta}^\sigma c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger d_{2\sigma} + \text{H.c.}) \quad (3.3)$$

gdzie $V_{2\mathbf{k}\beta}^\sigma$ jest odpowiednią amplitudą tunelowania. Sprzężenie centralnej kropki z elektrodami może być opisane podobnie jak w rozdziale 2 wzorem $\Gamma_{\beta 22}^\sigma(\varepsilon) = 2\pi \sum_{\mathbf{k}} V_{2\mathbf{k}\beta}^\sigma V_{2\mathbf{k}\beta}^{*\sigma} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma})$. Założenia dotyczące sprzężeń $\Gamma_{\beta 22}^\sigma(\varepsilon)$, oraz pasma elektronowego są analogiczne jak w rozdziale 2. Wobec powyższego sprzężenie centralnej kropki kwantowej z elektrodami można zapisać $\Gamma_{L22}^\sigma = \Gamma_L(1 \pm p_L)$, $\Gamma_{R22}^\sigma = \Gamma_R(1 \pm p_R)$ dla konfiguracji równoległej oraz stosując podstawienie $p_R \leftrightarrow -p_R$ dla konfiguracji antyrównoległej.

W celu wyznaczenia konduktancji oraz tunelowego magnetooporu należy wpierw znaleźć prąd płynący przez układ. Tak jak w rozdziale 2 zostanie on wyznaczony przy pomocy formuły Meira-Wingreen'a (2.19). Obecnie jednak transformaty Fouriera odpowiednich funkcji Greena $\mathbf{G}^<(\varepsilon)$, $\mathbf{G}^{r(a)}(\varepsilon)$ jak i sprzężenie układu kropek kwantowych z elektrodami $\mathbf{\Gamma}_\beta^\sigma(\varepsilon)$ są macierzami kwadratowymi o wymiarze $\dim = 3$. W rozpatrywanym przypadku macierz sprzężenia przyjmuje szczególnie prostą postać, tylko z jednym niezerowym elementem macierzowym:

$$\mathbf{\Gamma}_\beta^\sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_{\beta 22}^\sigma & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

3.2 Obliczenia funkcji Greena

Funkcje Greena $G_{ij\sigma}^{r(a)}(\varepsilon)$ zostały wyznaczone przy pomocy techniki równań ruchu. Podobnie jak w poprzednim rozdziale, tak i teraz, równania ruchu dla funkcji Greena $G_{ij\sigma}$ generują kolejne funkcje Greena, w tym wyższego rzędu. Równanie ruchu dla funkcji Greena wyższego rzędu wprowadza kolejne funkcje Greena wyższego rzędu, dla których zastosowano rozszczepienie (2.16) [19, 22] pozwalające wyrazić funkcje Greena wyższego rzędu za pomocą funkcji Greena niższego rzędu. Taki zabieg umożliwia zamknięcie układu równań ruchu dla funkcji Greena $G_{ij\sigma}(\varepsilon)$ i zapisanie go w postaci:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon - \varepsilon_{1\sigma} - A_1 & t_{12\sigma} B_1 & 0 \\ t_{12\sigma} B_2 & \varepsilon - \varepsilon_{2\sigma} - \Sigma_\sigma - A_2 & t_{32\sigma} B_2 \\ 0 & t_{32\sigma} B_3 & \varepsilon - \varepsilon_{3\sigma} - A_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{1j\sigma}(\varepsilon) \\ G_{2j\sigma}(\varepsilon) \\ G_{3j\sigma}(\varepsilon) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_{1j} B_1 \\ \delta_{2j} B_2 \\ \delta_{3j} B_3 \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

gdzie wprowadzono notację:

$$A_i = \frac{U_i(n_{i2\bar{\sigma}} - n_{2i\bar{\sigma}})}{\varepsilon - \varepsilon_{i\sigma} - U_i} \quad (3.6)$$

dla $i = 1, 3$,

$$A_2 = U_2(\varepsilon - \varepsilon_{2\sigma} - U_2)^{-1}[t_{12\sigma}(n_{12\bar{\sigma}} - n_{21\bar{\sigma}}) + t_{32\sigma}(n_{32\bar{\sigma}} - n_{23\bar{\sigma}}) + (C_{2\bar{\sigma}}^\dagger - C_{2\bar{\sigma}})n_{2\bar{\sigma}}\Sigma_\sigma], \quad (3.7)$$

oraz

$$B_i = 1 + \frac{U_i n_{2\bar{\sigma}}}{\varepsilon - \varepsilon_{i\sigma} - U_i} \quad (3.8)$$

dla $i = 1, 2, 3$. W powyższych równaniach wprowadzono również oznaczenia: $\langle n_{ij\sigma} \rangle = \langle d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \rangle = n_{ij\sigma}$, $\langle n_{i\sigma} \rangle = \langle d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} \rangle = n_{i\sigma}$, oraz $C_{2\bar{\sigma}} \equiv \sum_{k\alpha} V_{2k\bar{\sigma}}^\alpha \langle c_{k\alpha\bar{\sigma}}^\dagger d_{2\bar{\sigma}} \rangle$. Energie własne Σ_σ są zdefiniowane w standardowy sposób [zob. równanie 2.18 oraz 2.18].

Znajdując czasowo-uporządkowaną funkcję Greena poprzez rozwiązanie równania (3.5) można następnie wyznaczyć opóźnioną (przedwczesną) funkcję Greena: $G_{ij\sigma}^{r(a)}(\varepsilon) = G_{ij\sigma}(\varepsilon \pm i0^+)$. Obliczenia korelacyjnej funkcji Greena $G_{ij\sigma}^<(\varepsilon)$ przebiegają analogicznie jak w rozdziale 2, toteż nie będą tutaj przedstawiane.

3.3 Wyniki numeryczne

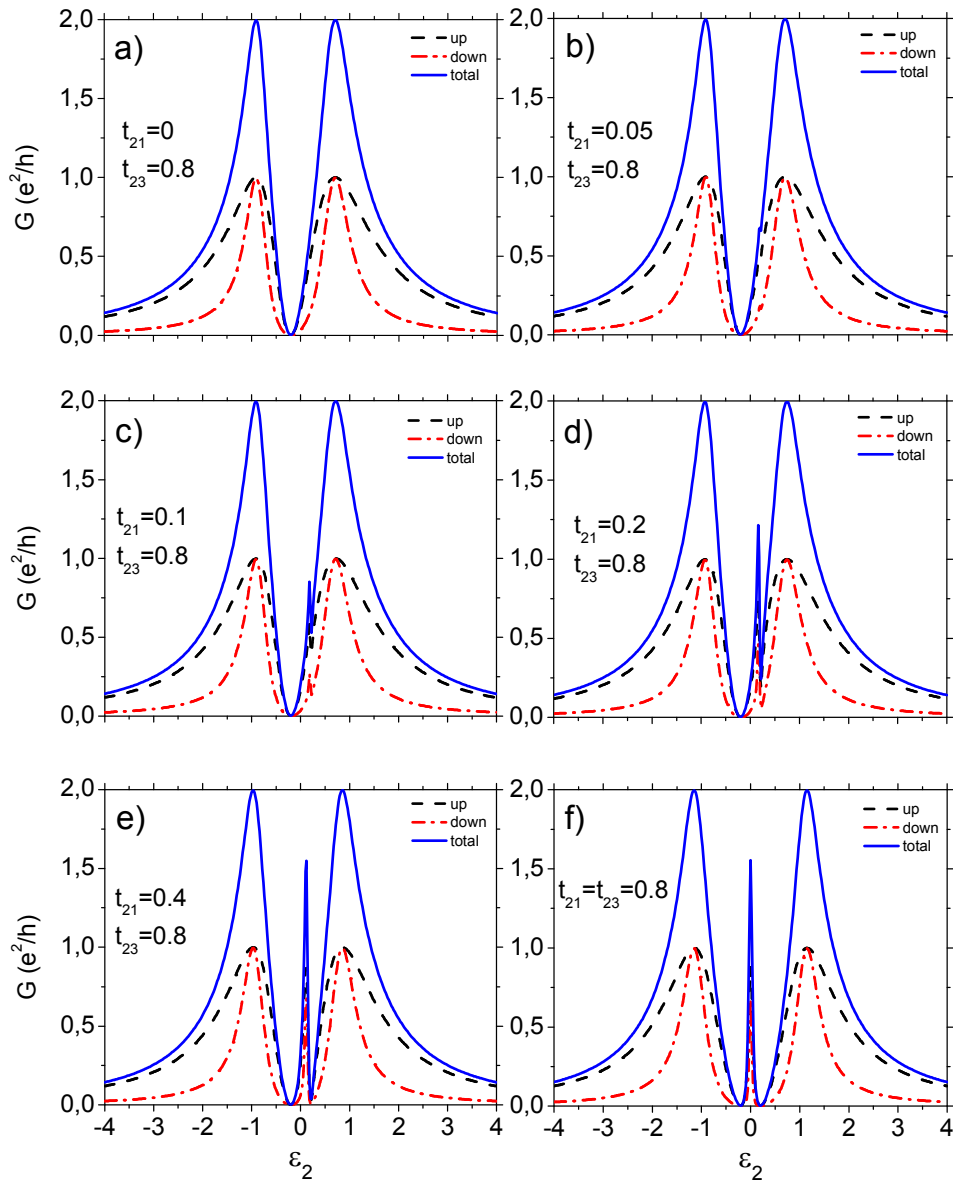
3.3.1 Założenia

Otrzymane równania wraz z odpowiednimi definicjami pozwalają na wyznaczenie podstawowych charakterystyk transportowych, takich jak konduktancja liniowa (2.31) i różniczkowa (2.32), czy TMR (2.33). Jednak dalsze rozważania zostaną ograniczone do liniowej odpowiedzi. W obliczeniach numerycznych założono spinowo zdegenerowane poziomy energetyczne $\varepsilon_{i\sigma} = \varepsilon_i$ ($i = 1, 2, 3$), gdzie wprowadzono oznaczenia h_1 oraz h_2 , opisujące separację poziomu ε_1 i poziomu ε_3 od poziomu ε_2 , tzn., $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 - h_1$, oraz $\varepsilon_3 = \varepsilon_2 + h_2$. W obliczeniach założono również niezależne od spinu parametry tunelowania między kropkami kwantowymi. Ponadto przyjęto, iż elektrody są wykonane z tego samego metalu ferromagnetycznego $p_L = p_R \equiv p$, oraz jednakowo sprzężone z kropką kwantową QD2, $\Gamma_L = \Gamma_R = \Gamma$.

3.3.2 Przypadek braku korelacji kulombowskich

Na początku zostanie przedyskutowany przypadek bez uwzględniania oddziaływań kulombowskich na kropkach kwantowych, $U_1 = U_2 = U_3 = 0$. Wyznaczona została zależność konduktancji liniowej od położenia poziomu energetycznego centralnej kropki kwantowej ε_2 dla równoległej konfiguracji magnetycznej elektrod i pokazana na Rys. 3.2. Rysunek ten przedstawia zarówno całkowitą konduktancję jak i wkłady pochodzące od poszczególnych kanałów spinowych. Poziom ε_2 jest mierzony względem poziomu Fermiego elektrod. Poziom energetyczny kropki kwantowej QD1 jest przesunięty w "dół" o wartość $h_1 = 0.2\Gamma$ podczas gdy poziom kropki kwantowej QD3 jest przesunięty w "górze" o tę samą wartość $h_3 = 0.2\Gamma$. Parametr tunelowania między kropkami QD2 i QD3 jest stały t_{23} , podczas gdy parametr t_{21} wzrasta od zera [Rys. 3.2(a)] do wartości $t_{21} = t_{23}$ [Rys. 3.2(f)]. Rys. 3.2(a) odpowiada więc sytuacji, w której kropka kwantowa QD1 jest całkowicie odizolowana od centralnej kropki kwantowej, nie mając żadnego wpływu na transport elektronowy przez dany układ. Pozostałe poziomy energetyczne oddziałują poprzez sprzężenie t_{23} i tworzą analogon stanu wiążącego i antywiążącego. Niezerowa wartość separacji h_2 sprawia, iż te nowe stany są sprzężone do elektrod z różną siłą. W związku z tym, w konduktancji liniowej wyłaniają się dwa, stosunkowo szerokie piki odpowiadające stanowi "wiążącemu" i "antywiążącemu". Pomiedzy pikami pojawia się głębokie minimum, w którym konduktancja spada do zera, w związku z zaistnieniem całkowicie destruktywnej

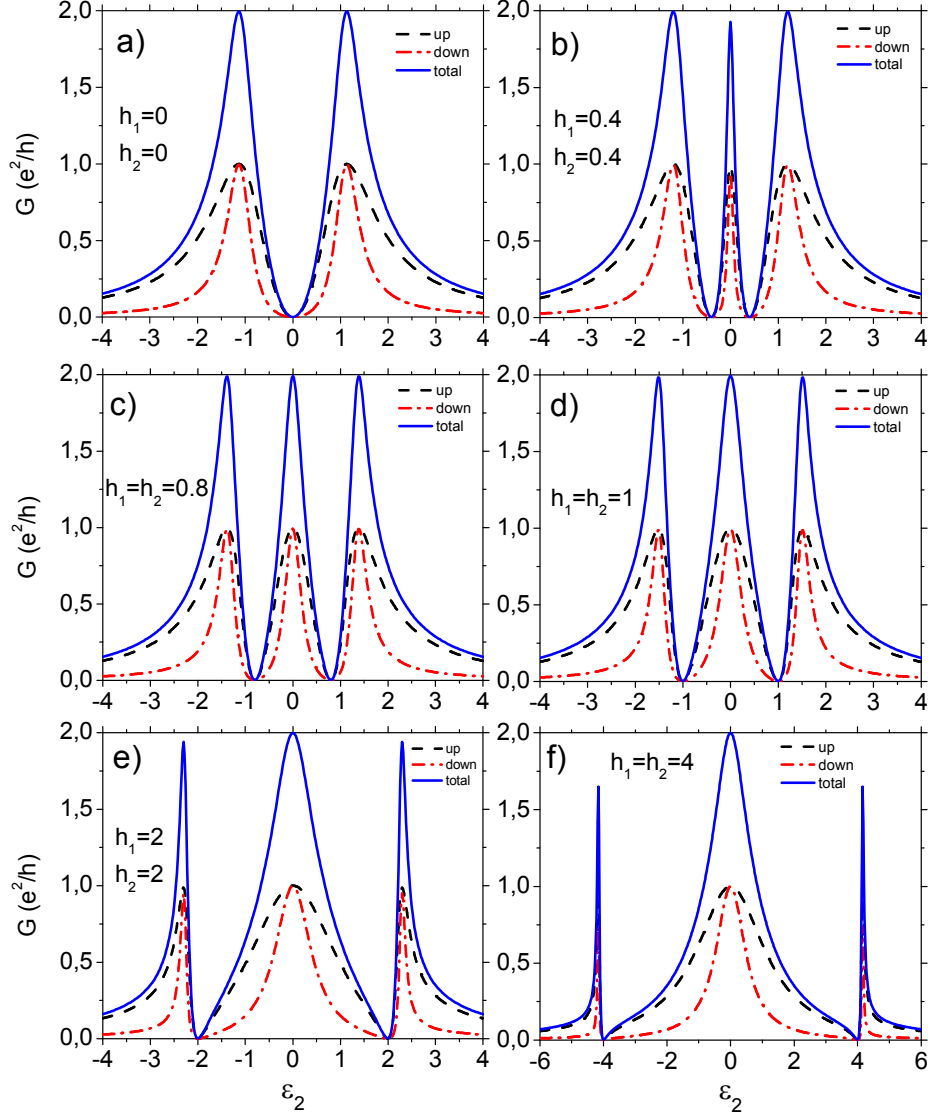
interferencji kwantowej fal elektronowych propagujących poprzez te dwa stany. Następnie, gdy kropka kwantowa QD1 zostaje słabo dołączona do kropki QD2 zauważamy pojawienie się bardzo wąskiego piku w konduktancji, którego pozycja odpowiada położeniu poziomu energetycznego kropki kwantowej QD1. [Rys. 3.2(b-d)]. Włączeniu sprzężenia między kropkami QD2 i QD1 towarzyszy pojawienie się nowego stanu. Poziom energetyczny odpowiadający nowemu pikowi w konduktancji jest jednak słabo sprzężony z elektrodami.



Rysunek 3.2: Konduktancja liniowa w funkcji położenia poziom ε_2 wyznaczona dla równoległej konfiguracji magnetycznej, oraz dla podanych wartości parametrów t_{21} , oraz t_{23} . Pozostałe parametry: $p = 0.4$, $U_1 = U_2 = U_3 = 0$, $h_1 = h_2 = 0.2\Gamma$, oraz $k_B T = 0.01\Gamma$. Wielkości energetyczne zostały wyrażone w jednostkach Γ .

Dalszy wzrost t_{21} powoduje przesunięcie nowego pik w kierunku $\varepsilon_2 = 0$, aż w końcu dla $t_{21} = t_{23}$ pik ten jest centrowany dokładnie w położeniu $\varepsilon_2 = 0$. Wówczas konduktancja liniowa jest symetryczna względem punktu $\varepsilon_2 = 0$. Ponadto centralny pik jest nadal dużo węższy od dwóch pozostałych rezonansów. Warto wspomnieć, iż podobny obraz powstanie dla ustalonego parametru t_{21} , a parametru t_{23} wzrastającego od zera do $t_{23} = t_{21}$. Jednak w tym przypadku, nowy pik pojawi się po lewej stronie minimum i będzie się przesunął w kierunku energii $\varepsilon_2 = 0$ wraz ze wzrostem t_{23} . Ponadto analogiczne zachowanie cechuje wkłady do konduktancji pochodzące od poszczególnych kanałów spinowych. Warto też zauważyć, iż wysokość bocznych pików jest równa dwóm kwantom konduktancji ($2e^2/h$) niezależnie od wielkości sprzężenia między kropkami kwantowymi, podczas gdy wysokość centralnego pik jest mniejsza i zależy od wielkości tych sprzężeń. Wąski, centralny pik w konduktancji przypomina rezonans Dicke znany z fizyki atomowej, gdzie silna i wąska linia emisyjna pojawia się kiedy odległość między atomami jest mniejsza od długości fali emitowanej przez pojedynczy atom. W rozważanym tutaj przypadku odpowiednikiem odległości między atomami jest separacja poziomów energetycznych h_1 oraz h_2 . Wraz ze wzrostem h_1 i h_2 , zwiększa się szerokość centralnego rezonansu, jednocześnie piki boczne ulegają zwężeniu. Opisana sytuacja jest wyraźnie pokazana na Rys. 3.3 przedstawiającą konduktancję liniową dla wzrastających wartości h_1 oraz h_2 . Wraz ze wzrostem h_1

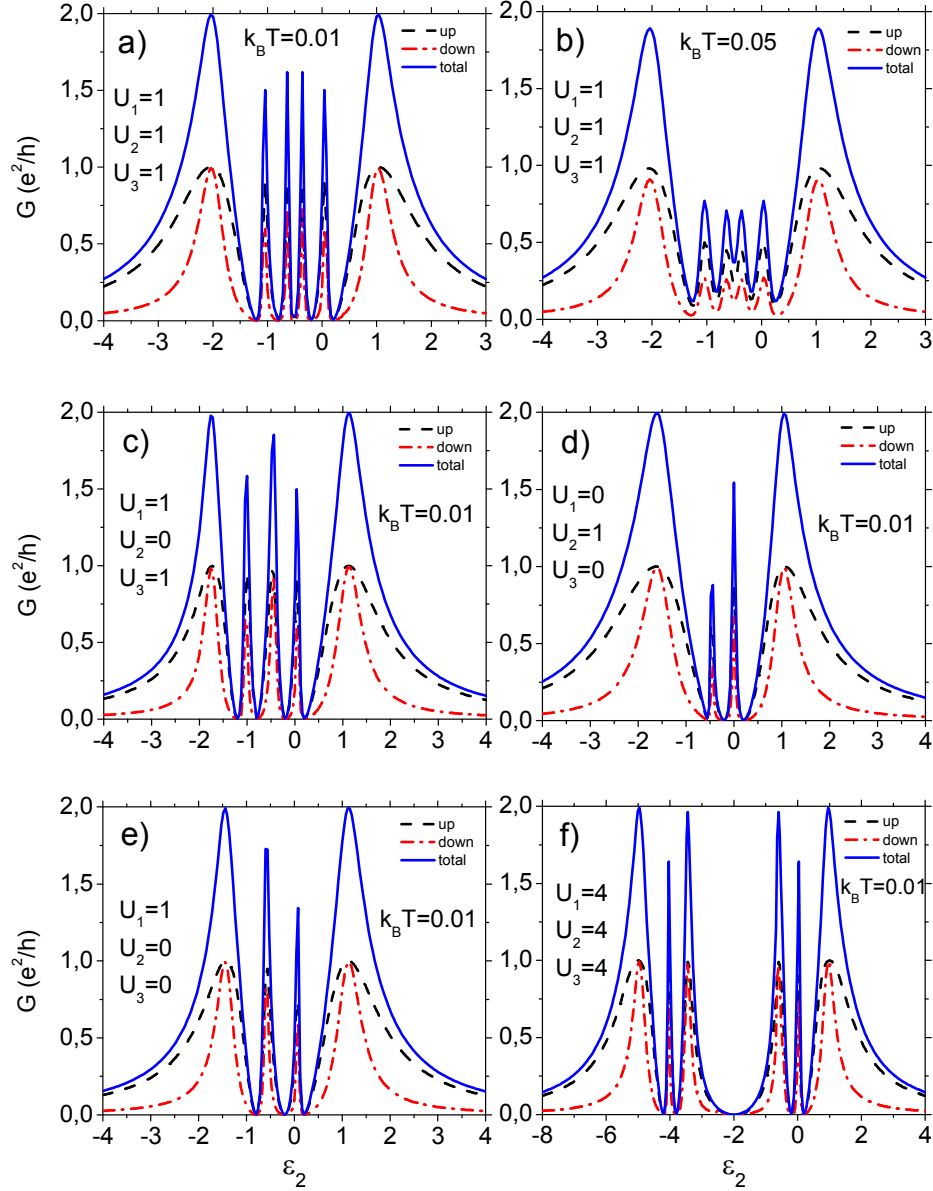
oraz h_2 stany własne układu kropek kwantowych stają się coraz bardziej zlokalizowane na odpowiednich, pojedynczych kropkach kwantowych. Jednak ze wzrostem parametrów h_1 oraz h_2 piki boczne w konduktancji stają się coraz to węższe, bowiem kropki kwantowe QD1 i QD3 nie są bezpośrednio sprzężone z elektrodami. Wówczas stan, któremu odpowiada wartość własna równa zero staje się zlokalizowany na kropce QD2, a odpowiadający mu pik w konduktancji ulega poszerzeniu. Również wysokość centralnego piku w konduktancji wzrasta osiągając wartość dwóch kwantów konduktancji, a intensywności pików bocznych maleją ze wzrostem wartości parametrów h_1 oraz h_2 .



Rysunek 3.3: Konduktancja liniowa w funkcji położenia poziomu ε_2 wyznaczona dla równoległej konfiguracji magnetycznej, oraz dla podanych wartości parametrów h_1 oraz h_2 . Pozostałe parametry: $p = 0.4$, $U_1 = U_2 = U_3 = 0$, $t_{21} = t_{23} = 0.8\Gamma$, oraz $k_B T = 0.01\Gamma$. Wielkości energetyczne zostały wyrażone w jednostkach Γ .

W przypadku, gdy $h_1 = h_2 = h \neq 0$ oraz $t_{12} = t_{23} = t \neq 0$ piki boczne w konduktancji pojawiają się w położeniach $\pm\sqrt{h^2 + 2t^2}$. Natomiast centralny pik jest usytuowany w $\varepsilon_2 = 0$, a konduktancja znika w punktach $\pm h$. Ze szczególną sytuacją mamy do czynienia, gdy poziomy kropek kwantowych QD1 i QD3 są zdegenerowane, czyli gdy $h_1 = h_2 = 0$. Centralne maksimum wyraźnie widoczne na Rys. 3.3 dla $h_1, h_2 \neq 0$ przestaje wówczas istnieć jeśli zachodzi warunek $h_1 = h_2 = 0$. Opisany tutaj układ złożony z trzech jednopoziomowych kropek kwantowych posiada trzy stany własne (stany molekularne: $|\tilde{1}\rangle, |\tilde{2}\rangle, |\tilde{3}\rangle$ ponumerowane indeksami 1, 2, 3 zgodnie ze wzrostem energii), więc można oczekiwać trzech pików w konduktancji. Okazuje się jednak, że sprzężenie między stanem molekularnym $|\tilde{2}\rangle$ i elektrodami zanika i stan $|\tilde{2}\rangle$ przestaje

być sprzężony z elektrodami gdy $h_1 = h_2 = 0$. W rezultacie prowadzi to do nieobecności centralnego maksimum w konduktancji liniowej [Rys. 3.3(a)]. Ostatecznie więc, w przypadku gdy $h_1 = h_2 = 0$, w konduktancji liniowej pojawiają się tylko dwa piki dla $\varepsilon_2 = \pm\sqrt{2}t$, a znikanie konduktancji następuje w punkcie $\varepsilon_2 = 0$ (będącym wartością własną stanu $|\tilde{2}\rangle$). W formalny sposób zostało to przedstawione w Dodatku A.

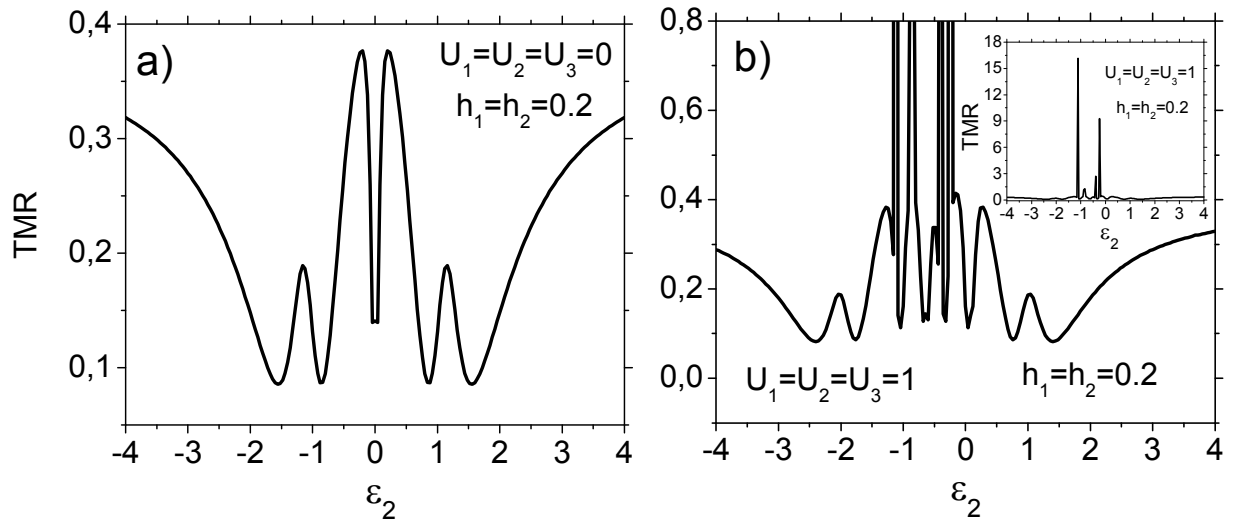


Rysunek 3.4: Zależność konduktancji liniowej od położenia poziomu ε_2 wyznaczona dla równoległej konfiguracji magnetycznej, oraz dla podanych wartości parametrów oddziaływania kulombowskiego na poszczególnych kropkach kwantowych U_1, U_2, U_3 , oraz dla różnych wartości temperatury. Pozostałe parametry: $p = 0.4$, $t_{21} = t_{23} = 0.8\Gamma$, $h_1 = h_2 = 0.2\Gamma$. Wielkości energetyczne zostały wyrażone w jednostkach Γ .

3.3.3 Przypadek skończonych korelacji kulombowskich

Dotychczasowa analiza była przeprowadzona przy zaniechaniu oddziaływań kulombowskich istniejących w realnych kropkach kwantowych. W tym punkcie zostanie omówiony wpływ tego typu oddziaływań, oraz efektów temperaturowych na konduktancję i tunelowy magnetoopór. Na Rys. 3.4 przedstawiono konduktancję liniową dla różnych wielkości i konfiguracji oddziaływań kulombowskich, oraz różnych temperatur. W przypadku, gdy na wszystkich trzech kropkach kwantowych występują takie same i niezerowe korelacje kulombowskie, $U_1 = U_2 = U_3 = 1$, to

liczba pików w konduktancji zostaje podwojona [Rys.3.4(a)] w porównaniu do analogicznego przypadku bez oddziaływań kulombowskich [Rys.3.2(f)]. Piki boczne są stosunkowo szerokie, podczas gdy pozostałe cztery maksima są bardzo wąskie. Wraz ze wzrostem temperatury szerokości pików również wzrastają, a ich intensywności maleją co zostało uwidocznione na rysunkach 3.4(a-b). Kiedy parametr Hubbarda dla jednej lub dwóch kropek kwantowych wynosi zero, wówczas liczba pików w konduktancji maleje o jeden [Rys.3.4(c)], bądź dwa [Rys.3.4(d-e)]. Jednak we wszystkich tych przypadkach pozostają szerokie piki boczne. Wzrost oddziaływań kulombowskich prowadzi do podziału spektrum konduktancji na dwie wyraźne części: jedna część złożona z pików głównych, a druga z ich kulombowskich odpowiedników [Rys.3.4(f)]. Dalsze wzmocnienie tych oddziaływań przyczyni się do powstania charakterystycznej przerwy, podobnie jak to miało miejsce w układzie dwóch kropek kwantowych analizowanym w rozdziale 2. Jednak teraz układy pików wykazują większą symetrię, bowiem układ kulombowskich partnerów jest po prostu odbiciem lustrzanym układu pików głównych względem punktu $\varepsilon_0 = -U/2$.



Rysunek 3.5: Tunelowy magnetoopór w funkcji położenia poziomu ε_2 wyznaczony w liniowej odpowiedzi dla podanych wartości parametrów U_1, U_2, U_3 . Pozostałe parametry: $t_{21} = t_{23} = 0.8\Gamma$, $h_1 = h_2 = 0.2\Gamma$, $p = 0.4$, oraz $k_B T = 0.01\Gamma$. Wielkości energetyczne zostały wyrażone w jednostkach Γ .

Mimo, iż dotychczasowe wyniki zostały otrzymane dla konfiguracji równoległej momentów magnetycznych elektrod, to podobne jakościowo wyniki są słuszne dla konfiguracji antyrównoległej. W celu uwidocznienia ilościowych różnic między obydwoma konfiguracjami został policzony tunelowy magnetoopór i przedstawiony na Rys.3.5. Kiedy poziom kropki kwantowej QD2 znajduje się daleko od poziomu Fermiego elektrod, to TMR przyjmuje wartość magnetooporu Julliere'a. Sytuacja staje się bardziej złożona, w pobliżu rezonansów. Poza tym, TMR w znaczący sposób zależy od obecności oddziaływań kulombowskich. W przypadku braku korelacji kulombowskich, co odpowiada sytuacji $U_i = 0$ dla $i = 1, 2, 3$ na Rys. 3.5, TMR wykazuje oscylacyjny charakter. Warto wspomnieć, iż podobne jakościowo zachowanie się TMR-u zostało znalezione w transporcie przez pojedynczą kropkę kwantową [7]. Natomiast w przypadku niezerowych oddziaływań kulombowskich obraz TMR-u staje się dużo bardziej skomplikowany. Oprócz charakterystycznych oscylacji TMR-u pojawiają się ostre piki rezonansowe występujące dla wartości położenia poziomu, w których konduktancja jest silnie wygaszona poprzez efekty interferencyjne. Warunki na całkowicie destruktywną interferencję w przypadku niezerowych wartości parametrów U_i zależą od konfiguracji magnetycznej elektrod, czego konsekwencją jest pojawienie się ostrych pików w TMRze.

3.4 Podsumowanie

Otrzymane wyniki pokazały, że elektronowy odpowiednik efektu Dicke można zaobserwować w rozpatrywanym układzie trzech kropek kwantowych, z których tylko jedna jest dołączona do zewnętrznych elektrod. W rozważanym układzie rolę odległości między atomami spełnia odległość między poziomami energetycznymi bocznych kropek kwantowych. Uwzględnienie oddziaływań kulombowskich na kropkach kwantowych prowadzi do ciekawego zachowania TMRu, który wykazuje wąskie piki o względnie dużej intensywności dla pewnych wartości położeń poziomów kropek.

Rozdział 4

Spinowo-spolaryzowany transport przez układ dwóch kropek kwantowych – reżim słabego sprzężenia

Rozdział ten będzie zarówno uzupełnieniem jak i rozszerzeniem rozważań dotyczących spinowo-spolaryzowanego transportu przez układ dwóch kropek kwantowych, zapoczątkowanych w rozdziale 2. Tutaj jednak analiza zjawisk transportowych zostanie przeprowadzona w reżimie słabego sprzężenia, tj. gdy sprzężenie kropki kwantowej z elektrodami jest dużo mniejsze od fluktuacji termicznych, $\Gamma \ll k_B T$. W takim przypadku prąd płynący przez układ jest zdeterminowany głównie poprzez dyskretyzację poziomów energetycznych kropki kwantowej oraz przez korelacje kulombowskie. Te ostatnie mogą prowadzić do efektu blokady kulombowskiej i schodkowej zależności prądu od przyłożonego napięcia.

W celu wyznaczenia charakterystyk transportowych, zarówno w liniowej jak i nieliniowej odpowiedzi, została zastosowana metoda diagramów [57]. Technika ta pozwala na uwzględnienie renormalizacji poziomów kropek kwantowych, jak i niektórych efektów interferencyjnych.

4.1 Model układu i jego Hamiltonian

Jak już wspomniano na początku tego rozdziału rozpatrywany tutaj układ jest analogiczny do układu rozważanego w rozdziale 2, który został schematycznie przedstawiony na Rys. 2.1. Wobec tego zostaną przedstawione tylko różnice między tymi modelami wynikające z wprowadzenia dodatkowego członu do Hamiltonianu układu. Podobnie jak poprzednio założono, iż kierunki namagnesowań elektrod mogą znajdować się tylko w dwóch konfiguracjach, równoległej i antyrównoległej.

Hamiltonian układu dany jest wzorem (2.1) z tym, że teraz człon (2.2) jest bogatszy o międzywęzłowe oddziaływanie kulombowskie. Uwzględniając człon zaniedbany w rozdziale 2, Hamiltonian układu kropek kwantowych przyjmuje następującą postać:

$$\begin{aligned} H_{\text{DQD}} = & \sum_{i\sigma} \varepsilon_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} - t \sum_{\sigma} \left(d_{1\sigma}^\dagger d_{2\sigma} + d_{2\sigma}^\dagger d_{1\sigma} \right) + \sum_i U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \\ & + U_0 (n_{1\uparrow} + n_{1\downarrow})(n_{2\uparrow} + n_{2\downarrow}). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Podwójne obsadzenie i -tej kropki kwantowej związane jest z energią kulombowską U_i , podczas gdy jednoczesne obsadzenie każdej z kropek przez jeden elektron związane jest z energią kulombowską U_0 . Dla typowych układów podwójnych kropek kwantowych zachodzi $U_0 < U$ [25]. Poziomy energetyczne kropek kwantowych parametryzujemy wprowadzając ich średnią wartość $E_\sigma = (\varepsilon_{1\sigma} + \varepsilon_{2\sigma})/2$ oraz różnicę, $\Delta E = \varepsilon_{1\sigma} - \varepsilon_{2\sigma}$. Wówczas, $\varepsilon_{1\sigma} = E_\sigma + \Delta E/2$ i $\varepsilon_{2\sigma} = E_\sigma - \Delta E/2$. Założenie o jednakowych czynnikach Landego g dla obydwu kropek kwantowych uniezależnia ΔE od orientacji spinu nawet w obecności zewnętrznego pola magnetycznego. W dalszych obliczeniach założono również, iż $E_\uparrow = E_\downarrow \equiv E$. Zależność położeń poziomów energetycznych od napięcia transportowego może zostać zniesiona poprzez przyłożenie odpowiedniej kombinacji napięć bramkowych, toteż nie jest ona tutaj uwzględniana.

4.2 Metoda diagramów

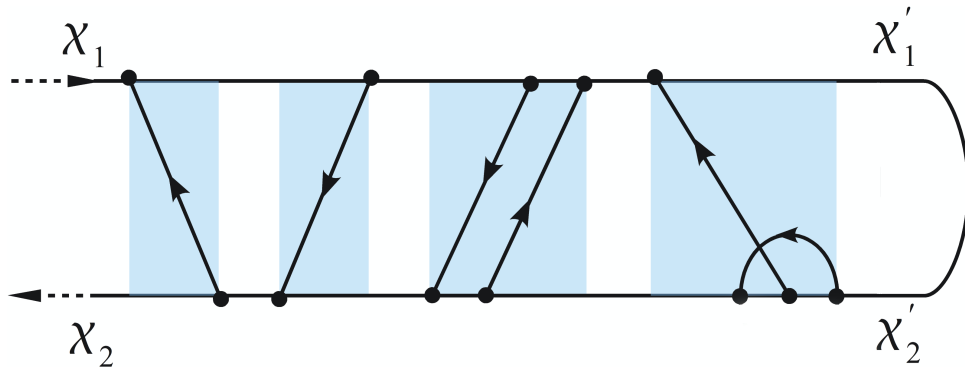
Zanim zostaną przedstawione szczegółowe równania determinujące charakterystyki transportowe dla rozważanego układu, w pierwszej kolejności przedstawiona zostanie metoda dla bardziej ogólnego przypadku [57, 58, 59, 60]. Metoda ta opiera się na rozwinięciu wartości oczekiwanej dowolnego operatora A danego w czasie t względem Hamiltonianu tunelowego. W rozważanym tu przypadku będzie to Hamiltonian (2.4). W ogólności po dokonaniu takiego rozwinięcia otrzymujemy [57]:

$$\langle A(t) \rangle = \text{Tr} \left\{ \rho_0 \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_K d\tau_1 \int_K d\tau_2 \dots \int_K d\tau_n T_K [H_T(\tau_1)_I H_T(\tau_2)_I \dots H_T(\tau_n)_I A(t)_I] \right\}. \quad (4.2)$$

W równaniu (4.2) całkowanie jest wzięte po konturze Keldysh'a, a operatory są wyrażone w obrazie oddziaływania co zostało zaznaczone poprzez dodanie indeksu I. Natomiast T_K jest operatorem chronologicznego uporządkowania, który porządkuje operatory wzdłuż konturu Keldysh'a w następujący sposób [29]:

$$T_K [H_T(\tau_1)_I H_T(\tau_2)_I] = \begin{cases} H_T(\tau_1)_I H_T(\tau_2)_I, & \text{dla } \tau_1 > \tau_2 \\ H_T(\tau_2)_I H_T(\tau_1)_I, & \text{dla } \tau_1 < \tau_2. \end{cases} \quad (4.3)$$

W kolejnym kroku zakłada się, że operator gęstości całego układu (w stanie początkowym)² daje się wyrazić jako iloczyn prosty macierzy gęstości opisujących układ kropek kwantowych (QDs) i lewej (L) oraz prawej (R) elektrody, $\rho_0 = \rho_0^L \rho_0^R \rho_0^{QDs}$. Elektrony w metalicznych elektrodach mogą być w dobrym przybliżeniu opisane przez rozkład Fermiego-Dirac'a, podczas gdy odpowiednia macierz gęstości elektrody dana jest wielkim rozkładem kanonicznym. Wobec tego, możliwe jest wykorzystanie twierdzenia Wick'a do uporządkowania operatorów elektrod, a następnie wykonanie całek po wszystkich stopniach swobody związanych z elektronami w elektrodach. Jednak, twierdzenia Wick'a nie można zastosować dla operatorów związanych z układem kropek kwantowych, ponieważ odpowiadający mu Hamiltonian (2.3) zawiera człon bikwadratowy. Rezultatem tych obliczeń jest zredukowana macierz gęstości obejmująca jedynie stopnie swobody układu kropek kwantowych.



Rysunek 4.1: Ewolucja zredukowanej macierzy gęstości na konturze Keldysza. Obszary zaznaczone kolorem odpowiadają nieprzywiedlnym diagramom pierwszego i drugiego rzędu. Dla przejrzystości nie podano pośrednich stanów układu kropek.

Czasowa ewolucja zredukowanego układu może być przedstawiona graficznie przy pomocy nieredukowalnych diagramów na konturze Keldysh'a. Przykład takiej czasowej ewolucji jest zamieszczony na Rys. 4.1. Górna i dolna gałąź konturu odpowiadają odpowiednio propagatorom "do przodu" i "do tyłu". Odpowiednie stany układu kropek kwantowych są przypisane tym propagatorom. Wierzchołki na propagatorach odpowiadają iloczynowi operatora elektrody i operatora kropki kwantowej. W ogólności wierzchołki dzielą się na wewnętrzne i zewnętrzne.

²W stanie początkowym układ kropek kwantowych jest całkowicie odłączony od elektrod.

Wierzchołki wewnętrzne to takie, które pochodzą z rozwinięcia względem Hamiltonianu tunelowego, natomiast wierzchołki zewnętrzne związane są z operatorem, którego wartość oczekiwana jest obliczana. Dwa wierzchołki połączone są linią tunelową, która odpowiada zwięźeniu operatorów elektrody. Strzałka przypisana każdej linii tunelowej wskazuje czy elektron o danej orientacji spinu tuneluje z kropki na daną elektrodę czy też zachodzi proces odwrotny. Kolory obszary na Rys. 4.1 zawierają nieredukowalne diagramy pierwszego rzędu (z jedną linią tunelową) oraz drugiego rzędu (z dwiema przekrywającymi się liniami tunelowymi) ze względu na sprzężenie kropki kwantowej z elektrodą. Jeśli dowolna linia pionowa narysowana pomiędzy dwoma sąsiadującymi wierzchołkami przecina choćby jedną linię tunelową to taki diagram nazywamy nieredukowalnym (nieprzywiedlnym).

Jak już wcześniej wspomniano, ewolucja czasowa zredukowanego układu jest w pełni zadana przez ewolucję zredukowanej macierzy gęstości. Czasowa ewolucja macierzy gęstości $\hat{\rho}$ jest zdefiniowana poprzez równanie Louville'a, które dla rozważanego przypadku można zapisać w postaci [57, 61]:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} = [H_{\text{DQD}} + H_t, \hat{\rho}] + \Sigma \hat{\rho}. \quad (4.4)$$

W powyższym równaniu komutator reprezentuje wewnętrzną dynamikę układu kropek kwantowych, która zależy głównie od separacji między poziomami energetycznymi ΔE oraz od sprzężenia tunelowego t między kropkami kwantowymi. Drugi człon w równaniu (4.4) uwzględnia procesy tunelowe zachodzące między układem kropek kwantowych a zewnętrznymi elektrodami. Σ jest tensorem zawierającym zespolone elementy, związanym z procesami tunelowymi oraz wyindukowaną renormalizacją poziomów energetycznych kropek kwantowych poprzez efekty tunelowe. Elementy zredukowanej macierzy gęstości są zdefiniowane jako $P_{\chi_2}^{\chi_1} \equiv \langle \chi_1 | \hat{\rho} | \chi_2 \rangle$, gdzie χ_1 oraz χ_2 oznaczają stany własne układu dwóch kropek kwantowych. Wykorzystując definicję elementów zredukowanej macierzy gęstości równanie (4.4) dla stanu stacjonarnego³ można zapisać w następujący sposób [62]:

$$0 = \langle \chi_1 | [H_{\text{DQD}} + H_t, \hat{\rho}] | \chi_2 \rangle + \sum_{\chi'_1 \chi'_2} \Sigma_{\chi_2 \chi'_2}^{\chi_1 \chi'_1} P_{\chi'_2}^{\chi'_1}. \quad (4.5)$$

W powyższym równaniu $\Sigma_{\chi_2 \chi'_2}^{\chi_1 \chi'_1}$ oznacza energię własną odpowiadającą ewolucji "do przodu" w czasie ze stanu $|\chi'_1\rangle$ do stanu $|\chi_1\rangle$, a następnie "do tyłu" w czasie ze stanu $|\chi_2\rangle$ do stanu $|\chi'_2\rangle$. Diagonalne elementy zredukowanej macierzy gęstości P_{χ}^{χ} ($\chi_1 = \chi_2 = \chi$) oznaczają prawdopodobieństwo znalezienia układu kropek kwantowych w stanie $|\chi\rangle$.

W celu rozwiązania równania (4.5) zwykle wykonuje się rozwinięcie perturbacyjne względem sprzężenia Γ kropki kwantowej z elektrodą, co zostało pokazane w Dodatku C. Wówczas każdy człon tego rozwinięcia może zostać przedstawiony graficznie w postaci diagramu zdefiniowanego na konturze Keldysha, na którym wierzchołki są połączone liniami tunelowymi. W celu jawnego rozwiązania powyższego równania należy wpierw obliczyć odpowiednie energie własne Σ . Energie własne można wyznaczyć stosując odpowiednie reguły [57], które tutaj wymienimy w kilku punktach dla rozważanego układu.

Reguły obliczenia energii własnych:

1. Narysuj wszystkie topologicznie różne diagramy z ustalonym uporządkowaniem czasowym i położeniem wierzchołków. Następnie połącz wierzchołki liniami tunelowymi. Przypisz stany układu kropek kwantowych i odpowiadające im energie własne dla propagatorów znajdujących się na dolnej i górnej gałęzi konturu Keldysha "do przodu" oraz "do tyłu". Każdej linii tunelowej przypisz energię ω , spin σ tunelującego elektronu i oznaczenie odpowiedniej elektrody β ($\beta = L, R$).
2. Zaopatrz linie tunelowe w strzałki wskazujące czy elektron opuszcza kropkę kwantową czy też tuneluje do niej. Liniom tunelowym biegnącym zgodnie z kierunkiem konturu

³W stanie stacjonarnym wartości oczekiwane wielkości fizycznych nie ulegają zmianie w czasie, tzn. dla dowolnej obserwabli A zachodzi $\frac{d\langle A \rangle}{dt} = 0$

Keldysha ("do przodu") przypisz człon $\gamma_{\beta_{ij}}^{-,\sigma}(\omega)$, natomiast liniom tunelowym skierowanym przeciwnie do kierunku konturu Keldysha przypisz człon $\gamma_{\beta_{ij}}^{+,\sigma}(\omega)$ postaci:

$$\gamma_{\beta_{ij}}^{\pm,\sigma}(\omega) = \frac{\Gamma_{\beta_{ij}}^{\sigma}}{2\pi} f^{\pm}(\omega - \mu_{\beta}), \quad (4.6)$$

gdzie $f^{-}(\omega - \mu_{\beta}) = 1 - f(\omega - \mu_{\beta})$, oraz $f^{+}(\omega - \mu_{\beta}) = f(\omega - \mu_{\beta})$. Funkcja $f(x)$ oznacza rozkład Fermiego – Diraca.

3. Dla każdego przedziału czasu (na osi rzeczywistej) ograniczonego przez dwa sąsiednie wierzchołki narysuj linię pionową wewnątrz interwału i przypisz rezolwentę $1/(\Delta\Omega + i0^{+})$. $\Delta\Omega$ oznacza różnicę wszystkich energii przechodzących pionową linię z prawej strony minus wszystkie energie przecinające pionową linię z lewej strony. Innymi słowy $\Delta\Omega$ jest różnicą między energiami należącymi do linii skierowanych w lewą stronę i tymi należącymi do linii skierowanych w prawą stronę (zarówno linii tunelowych jak i linii propagatorów).
4. Każdemu diagramowi przypisz człon $(-1)^{b+c}$, gdzie b oznacza liczbę wierzchołków leżących na propagatorze z dolnej gałęzi konturu Keldysha, a c jest liczbą przecięć linii tunelowych. Dla diagramów pierwszego rzędu zawsze zachodzi $c = 0$.
5. Każdy wierzchołek wewnętrzny odpowiada elementowi macierzowemu $\langle\chi|d_{i\sigma}^{\dagger}|\chi'\rangle$ lub $\langle\chi|d_{i\sigma}|\chi'\rangle$. W rezultacie może pojawić się znak ujemny przed diagramem w związku z tymi elementami macierzowymi.
6. Wyciąkuj po energiach linii tunelowych ω i wysumuj po wskaźnikach elektrod oraz po wszystkich możliwych stanach pośrednich.

Przeprowadzane tutaj rozważania dotyczą reżimu słabego sprzężenia tunelowego kropek kwantowych z elektrodami, $\Gamma \ll k_B T$. Wówczas prąd elektryczny jest zdeterminowany głównie przez procesy tunelowe pierwszego rzędu, podczas gdy procesy koherentnego tunelowania wyższego rzędu dają tylko mały wkład i mogą być zanedbane [61, 63]. Wobec tego dalsze rozważania będą dotyczyć transportu sekwencyjnego, gdzie wystarczy wyznaczyć energie własne najniższego rzędu, tj., zawierające tylko jedną linię tunelową. W tym przypadku dany proces tunelowania nie zależy od innego. Układ dwóch kropek kwantowych sprzężonych ze sobą tunelowo posiada shybrydyzowane stany własne, którym odpowiadają energie własne $\varepsilon_{\pm} = E \pm \sqrt{\Delta E^2/4 + t^2}$. Jeśli więc sprzężenie między kropkami kwantowymi jest odpowiednio duże ($t \gg \Gamma$) to wówczas do obliczania energii własnych Σ należy wziąć stany molekularne (shybrydyzowane) układu kropek kwantowych. W przypadku słabego sprzężenia tunelowego między kropkami kwantowymi, tj. gdy $t < \Gamma$, wówczas wyjściowe stany układu kropek kwantowych są wystarczające do obliczenia energii własnych Σ . Prezentowane tutaj rozważania zostały poczynione dla przypadku słabego sprzężenia tunelowego między kropkami kwantowymi, co pozwoliło wyznaczyć energie własne Σ używając stanów własnych kropek kwantowych odizolowanych zarówno od elektrod jak i od siebie.

Przy obliczaniu energii własnych Σ założono również, że energia ładowania kropki kwantowej U jest dużo większa niż oddziaływanie kulombowskie między kropkami kwantowymi U_0 , czyli $U \gg U_0$. W takim przypadku tylko stany układu kropek kwantowych nieobsadzone przez elektrony $|0, 0\rangle$, z elektronem o spinie σ na pierwszej (lub drugiej) kropce $|\sigma, 0\rangle$ ($|0, \sigma\rangle$) i jednocześnie obsadzenie każdej z kropek przez jeden elektron $|\sigma, \sigma'\rangle$ mają znaczenie dla transportu. W sytuacji, gdy $U \gg U_0$, prawdopodobieństwo jednoczesnego obsadzenia danej kropki kwantowej przez dwa elektrony jest znikomo małe. Mimo tego, stany z podwójnym obsadzeniem pierwszej bądź drugiej kropki są uwzględniane jako stany wirtualne (pośredniczące) w obliczeniach energii własnych Σ , ze względu na wprowadzenie naturalnego obciążenia energii. Poza tym w obliczeniach uwzględnione zostały procesy tunelowe zachodzące pomiędzy kropkami kwantowymi za pośrednictwem stanów w elektrodach. Prowadzi to do obecności diagramów zawierających sprzężenia Γ_{12} i uwzględnienia procesów interferencyjnych w najniższym rzędzie. Przykłady energii własnych Σ i odpowiadających im diagramów zostały podane w Dodatku C.

W celu wyznaczenia prądu płynącego przez układ korzystamy z następującego wzoru [57]:

$$I = -\frac{ie}{2\hbar} \sum_{\substack{\chi_1\chi_2 \\ \chi'_1\chi'_2}} \Sigma_{\chi_2\chi'_2}^{I\chi_1\chi'_1} P_{\chi'_2}^{\chi'_1}, \quad (4.7)$$

gdzie $\Sigma_{\chi_2\chi'_2}^{I\chi_1\chi'_1}$ oznacza energie własną pierwszego rzędu, której odpowiada diagram z jednym wierzchołkiem zamienionym na wierzchołek reprezentujący operator prądu [57]: $\hat{I} = (\hat{I}_R - \hat{I}_L)/2$, w którym $\hat{I}_\beta = -i(e/\hbar) \sum_i \sum_{\mathbf{k}\sigma} (V_{\beta i} c_{\beta\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{i\sigma} - V_{\beta i}^* d_{i\sigma}^\dagger c_{\beta\mathbf{k}\sigma})$.

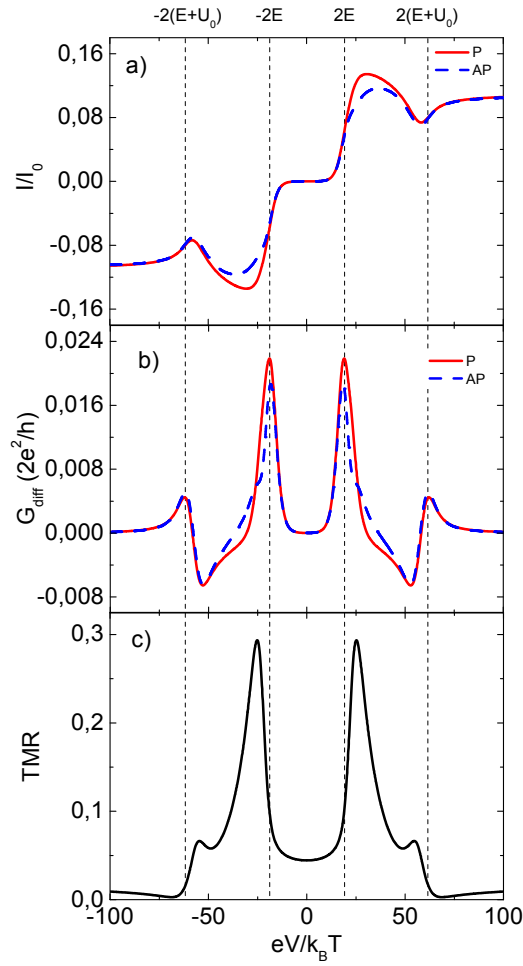
4.3 Wyniki numeryczne

4.3.1 Założenia

W obliczeniach numerycznych zostały założone zdegenerowane spinowo wyjściowe poziomy energetyczne kropek kwantowych, $\varepsilon_{i\sigma} = \varepsilon_i$ (dla $i = 1, 2$ oraz $\sigma = \uparrow, \downarrow$). Elektrody, do których sprzężony jest układ kropek kwantowych są wykonane z tego samego materiału ferromagnetycznego, $p_L = p_R \equiv p$. Przyjęto wartość polaryzacji typową dla metali 3d, $p = 0.4$ [64]. Ponadto wybrano symetryczne sprzężenie układu kropek kwantowych do elektrod, $\Gamma_L = \Gamma_R \equiv \Gamma/2$. Założono takie same wartości parametrów q_L i q_R ($q_L = q_R \equiv q$) i przyjęto następujące wartości energii kulombowskich U oraz U_0 : $U = 100k_B T$ i $U_0 = 20k_B T$. Parametr sprzężenia tunelowego między kropkami wybrano równym $t = 0.25\Gamma$. W reżimie słabego sprzężenia eksperymentalne wartości sprzężenia Γ w układzie podwójnych kropek kwantowych jest rzędu μeV , stąd przyjęto wartość $\Gamma = 5\mu eV$. Napięcia transportowe przykładane są symetrycznie do elektrod, tzn., $\mu_L = eV/2$, oraz $\mu_R = -eV/2$, gdzie $V = (\mu_L - \mu_R)/e$ jest przyłożonym napięciem.

4.3.2 Kropki kwantowe połączone w geometrii szeregowej ($\alpha = 0$)

Rozważania rozpoczniemy od sytuacji dla której $\alpha = 0$, co odpowiada szeregowej geometrii układu kropek kwantowych (Rys. 2.1). Na Rys. 4.2 zostały przedstawione podstawowe charakterystyki transportowe wyznaczone dla średniego położenia poziomu kropek kwantowych $E = 10k_B T$ i różnicy między wyjściowymi poziomami kropek $\Delta E = 0$. Jak już zostało wcześniej wspomniane, w reżimie słabego sprzężenia transport elektronowy jest głównie zdeterminowany przez dyskretyzację spektrum energetycznego kropek oraz oddziaływania kulombowskie, co prowadzi do schodkowej zależności prądu od przyłożonego napięcia. Schodkowy charakter prądu elektrycznego wyraźnie widać na Rys. 4.2(a). Dla założonych parametrów układ kropek kwantowych jest nieobsadzony przez elektrony dla małych napięć transportowych. Mamy wówczas do czynienia z zablokowaniem procesów tunelowych i w konsekwencji brakiem przepływu prądu elektrycznego dla napięć nie przekraczających pewnego napięcia progowego. W obszarze blokady transport sekwencyjny może mieć miejsce dzięki fluktuacjom termicznym. Poza tym w rozważanym tu przypadku, $\Gamma \ll k_B T$, wkład do prądu pochodzący od procesów tunelowych pierwszego rzędu jest dużo większy od wkładu związanego z kotunelowaniem. Jednak powinno się pamiętać, iż w przypadku głębokiej blokady kulombowskiej procesy tunelowe drugiego rzędu są dominujące i nie można ich zaniedbać, aby poprawnie opisać transport elektronowy przez dany układ. Taka sytuacja ma miejsce na przykład dla następujących parametrów układu: $E/k_B T \ll 0$ oraz $(E + U_0)/k_B T \gg 0$ [65]. Tutaj taki przypadek nie jest rozważany. Kiedy jednak napięcie progowe zostanie przekroczone, wówczas prąd zaczyna płynąć dzięki procesom sekwencyjnego (jeden po drugim) tunelowania elektronów przez układ kropek kwantowych. Prowadzi to do pojawienia się pików w konduktancji różniczkowej, co wyraźnie jest widoczne na Rys. 4.2(b). Przy dalszym wzroście napięcia transportowego prąd maleje co powoduje pojawienie się ujemnej konduktancji różniczkowej. Ta sytuacja ma miejsce zarówno w równoległej jak i antyrównoległej konfiguracji magnetycznej [Rys. 4.2(b)]. Kiedy eV osiąga wartość $2E + 2U_0$ kolejny elektron może tunelować do układu kropek i prąd elektryczny zaczyna wzrastać ponownie.



Rysunek 4.2: Prąd (a) i konduktancja różniczkowa (b) dla równoległej (P) i antyrównoległej (AP) konfiguracji magnetycznej oraz tunelowy magnetoopór (c) w zależności od przyłożonego napięcia transportowego, wyznaczone dla parametrów: $E = 10k_B T$, $\Delta E = 0$, $U_0 = 20k_B T$, $U = 100k_B T$, $p = 0.4$, $t = 0.25\Gamma$, $\Gamma = 5\mu\text{eV}$, $\alpha = 0$. I_0 jest tutaj zdefiniowane jako $I_0 = e\Gamma/\hbar \approx 1.215 \text{ nA}$.

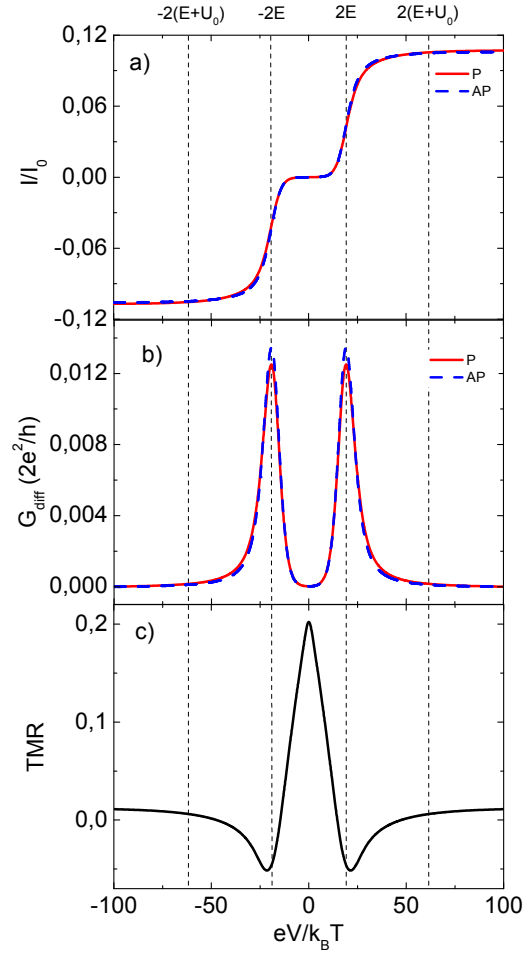
W tym miejscu zostanie wyjaśniony mechanizm fizyczny odpowiadający za pojawienie się ujemnych wartości konduktancji różniczkowej. Mechanizm ten związany jest z renormalizacją poziomów energetycznych kropek kwantowych, pochodzącej od sprzężenia między kropkami a elektrodami. Renormalizacja poziomów energetycznych pochodzi od niezerowych wartości części rzeczywistej pozadiagonalnych elementów tensora energii własnych Σ [zob. (C.5)]. W związku z tym, zrenormalizowany poziom $\varepsilon_i^{\text{ren},\sigma}$ i -tej kropki kwantowej dla orientacji spinu σ wyraża się następującym równaniem:

$$\varepsilon_i^{\text{ren},\sigma} = \varepsilon_i + \Omega_{\alpha i}^{\sigma}(E) + \Omega_{\alpha i}^{\sigma}(E + U) - \Omega_{\alpha i}^{\uparrow}(E + U_0) - \Omega_{\alpha i}^{\downarrow}(E + U_0), \quad (4.8)$$

gdzie $\Omega_{\beta i}^{\sigma}(x) = (\Gamma_{\beta ii}^{\sigma}/2\pi)\text{Re} \left[\Psi \left(\frac{1}{2} + i \frac{x - \mu_{\beta}}{2\pi k_B T} \right) \right]$, a $\Psi(x)$ oznacza funkcję digamma. Renormalizacja ta znosi początkowo założoną degenerację poziomów energetycznych obydwóch kropek kwantowych. Im większa separacja między tymi zrenormalizowanymi poziomami, tym mniejsze prawdopodobieństwo tunelowania elektronu z lewej kropki do prawej kropki. Obliczywszy separację poziomów kropek kwantowych w funkcji napięcia transportowego okazuje się, iż odległość między poziomami rośnie ze wzrostem napięcia w zakresie, w którym występuje ujemna konduktancja różniczkowa. Wobec tego prąd maleje ze wzrostem napięcia. Po osiągnięciu maksimum, separacja ta maleje z dalszym wzrostem napięcia, co w końcu prowadzi do zaniku ujemnej konduktancji różniczkowej. W przypadku spinowo-zależnego sprzężenia z elektrodami, renormalizacja poziomów zależy od orientacji spinu oraz od konfiguracji magnetycznej elektrod.

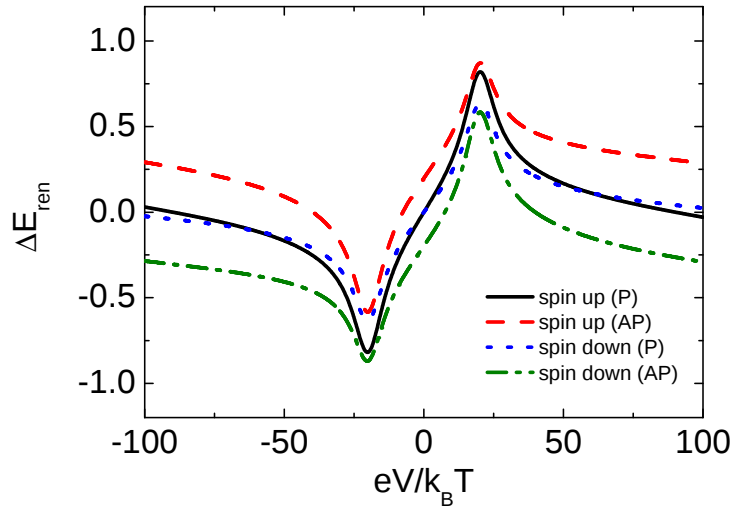
Na Rys. 4.2(c) została wykreślona zależność tunelowego magnetooporu od przyłożonego napięcia transportowego. TMR w całym zakresie napięć przyjmuje wartości nieujemne, czyli

konduktancja w konfiguracji równoległej jest większa od konduktancji w konfiguracji antyrównoległej. Jednak dla napięć, dla których podwójne obsadzenie jest dozwolone TMR przyjmuje bardzo małe wartości. Co więcej, w ogólności TMR jest mniejszy od wartości tunelowego magnetooporu Julliere'a [31], $\text{TMR}^{\text{Jull}} = 2p^2/(1-p^2) \approx 0.38$ dla $p = 0.4$. W przypadku z Rys. 4.2(c) TMR osiąga lokalne maksima dla napięć $|eV| = 2E$ oraz $|eV| = 2E + 2U_0$, ale jest szczególnie wzmocniony dla pierwszego stopnia kulombowskiego (w pobliżu $|eV| = 2E$).



Rysunek 4.3: Prąd (a) i konduktancja różniczkowa (b) dla równoległej (P) i antyrównoległej (AP) konfiguracji magnetycznej oraz tunelowy magnetoopór (c) w zależności od przyłożonego napięcia transportowego, wyznaczone dla $E = -10k_B T$. Pozostałe parametry jak na Rys. 4.2.

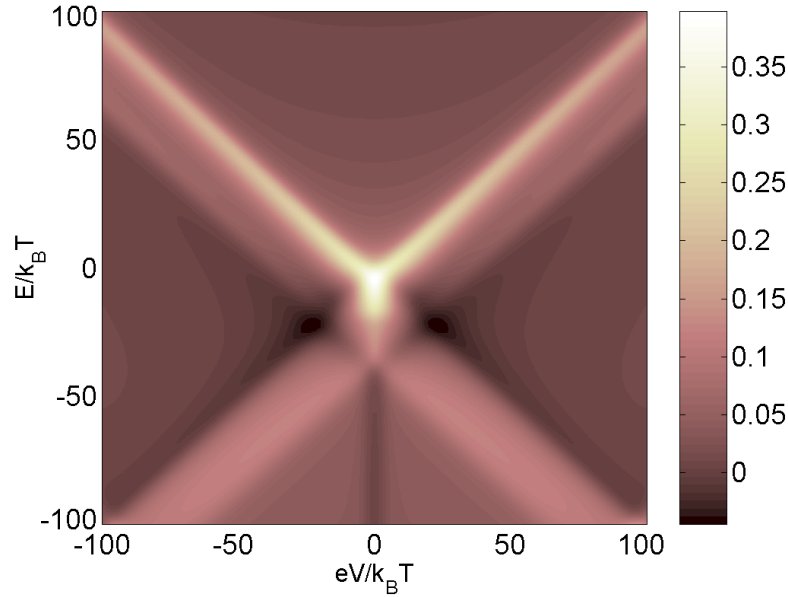
W przypadku, gdy średni poziom układu kropek kwantowych przyjmuje wartość ujemną $E = -10k_B T$, układ jest pojedynczo obsadzony w stanie równowagowym. Mamy wówczas do czynienia z blokadą kulombowską, bowiem dodanie kolejnego elektronu do układu kropek wymaga nakładu energii równej U_0 . Dla takiego poziomu średniego obserwuje się tylko jeden schodek w zależności prądu od napięcia transportowego, co zostało przedstawione na Rys. 4.3(a). Dzieje się tak ponieważ poziomy E oraz $E + U_0$ zaczynają uczestniczyć w transporcie przy tej samej wartości napięcia. Należy zwrócić uwagę, iż poziomy E oraz $E + U_0$ są symetrycznie położone względem poziomu Fermiego elektrod w stanie równowagowym. Ponadto w przeciwieństwie do przypadku z Rys. 4.2, teraz prąd jest monotoniczną funkcją napięcia [Rys. 4.3(a)] i ujemna konduktancja różniczkowa nie jest obserwowana [Rys. 4.3(b)]. Różnice pomiędzy dwiema konfiguracjami magnetycznymi są słabo widoczne w charakterystykach prądu i konduktancji. Więcej informacji o różnicach między obydwoma konfiguracjami dostarcza wykres TMR-u [Rys. 4.3(c)]. Powyżej progowej wartości napięcia TMR przyjmuje bardzo małe wartości, natomiast dla napięcia zerowego pojawia się wąskie maksimum TMR-u, który z dalszym wzrostem napięcia maleje. Dla napięć w okolicach rezonansu, $|eV| \approx 2E$ TMR, zmienia znak i staje się ujemny.



Rysunek 4.4: Renormalizacja separacji poziomów kropek kwantowych wyznaczona dla obydwu orientacji spinu w równoległej oraz antyrównoległej konfiguracji magnetycznej. Parametry takie jak na Rys. 4.3.

Efekt ten ma podobne pochodzenie jak ujemna konduktancja różniczkowa omawiana powyżej. Ujemna wartość TMR-u wywodzi się z renormalizacji poziomów energetycznych w związku ze sprzężeniem kropek kwantowych z elektrodami w obecności międzywęzłowych korelacji kulombowskich. Jak już wspomniano wcześniej renormalizacja ta jest zależna od orientacji spinu, co prowadzi do zniesienia degeneracji spinowej poziomów energetycznych kropek kwantowych. W ogólności jest ona różna dla każdej z kropek i prowadzi do modyfikacji zrenormalizowanej separacji poziomów kropek $\Delta E_{\text{ren},\sigma} = \varepsilon_1^{\text{ren},\sigma} - \varepsilon_2^{\text{ren},\sigma}$. Zrenormalizowana odległość między poziomami kropek kwantowych dla rozważanego układu została przedstawiona na Rys. 4.4. Dla założonych parametrów tunelowanie między kropkami kwantowymi ma charakter *wąskiego gardła* dla elektronów, które kontroluje przepływ prądu przez układ. Jak już wiadomo, częstość przeskoków między kropkami maleje ze wzrostem separacji poziomów (dla każdej orientacji spinu). Porównując Rys. 4.3(c) z Rys. 4.4 zauważamy, iż minimum ujemnego TMR-u pojawia się, gdy separacja poziomów przyjmuje wartość największą. W celu bardziej szczegółowego omówienia tego problemu rozważmy zakres dodatnich napięć, $eV > 0$. W obszarze napięć, dla których pojawia się ujemny TMR, odległość między poziomami prawej i lewej kropki dla dominującego kanału spinowego ($\uparrow$) w konfiguracji równoległej jest dużo większa aniżeli ta odpowiadająca nośnikom mniejszościowym ($\downarrow$) w konfiguracji równoległej i również znacznie większa niż separacja poziomów dla jednego z kanałów spinowych w konfiguracji antyrównoległej. Jednocześnie separacja poziomów odpowiadająca nośnikom większościowym dla konfiguracji równoległej jest porównywalna z separacją poziomów związaną z pozostałym kanałem spinowym dla konfiguracji antyrównoległej. Wobec tego, w konfiguracji równoległej kanał spinowy odpowiadający pasmom z nośnikami mniejszościowymi $\downarrow$ w obydwu elektrodach kontroluje przepływ prądu, podczas gdy dominujący kanał spinowy dla konfiguracji antyrównoległej zawiera jedno pasmo z nośnikami większościowymi i jedno pasmo z nośnikami mniejszościowymi. W rezultacie, większy prąd płynie w konfiguracji antyrównoległej, niż w konfiguracji równoległej, co prowadzi do ujemnych wartości TMR-u.

W celu poparcia powyższego rozumowania zostały policzone odpowiednie prawdopodobieństwa obsadzenia. Z obliczeń tych wynika, iż prawdopodobieństwo obsadzenia lewej kropki przez elektron o spinie $\uparrow$ dla konfiguracji równoległej jest większe od tego dla konfiguracji antyrównoległej $P_{L\uparrow}^P > P_{L\uparrow}^{AP}$, podczas gdy przeciwna relacja zachodzi dla elektronów o spinie $\downarrow$, $P_{L\downarrow}^P < P_{L\downarrow}^{AP}$. Jednocześnie zależność ta jest przeciwna do sytuacji, dla której pojawia się duża dodatnia wartość TMR-u. Ponadto, prawdopodobieństwa obsadzenia prawej kropki przez elektron o orientacji spinu $\uparrow$ lub $\downarrow$ w obydwu konfiguracjach magnetycznych są małe w porównaniu do tych znalezionych dla lewej kropki. Również prawdopodobieństwo podwójnego obsadzenia układu kropek kwantowych jest małe, co sprawia że takie stany nie dają tu znaczącego wkładu.



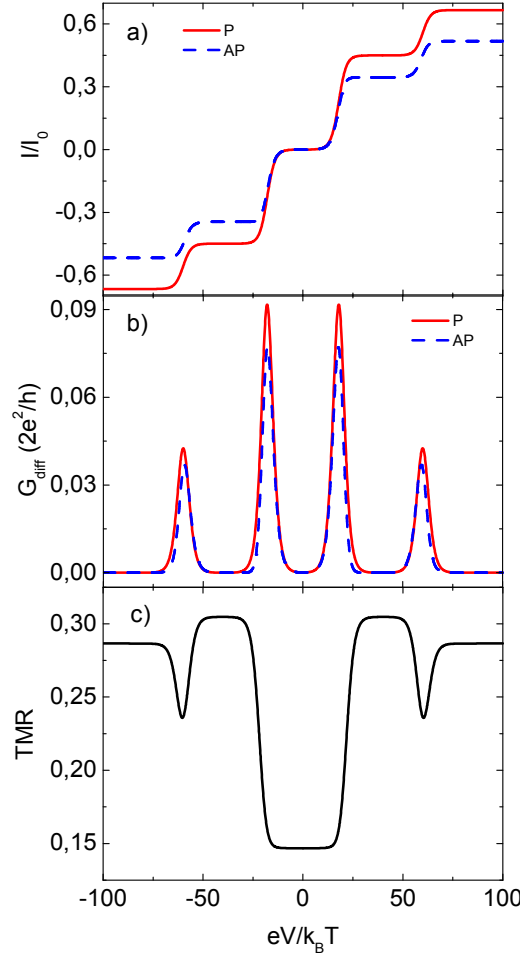
Rysunek 4.5: Tunelowy magnetoopór w funkcji przyłożonego napięcia transportowego i położenia średniego poziomu. Pozostałe parametry takie jak na Rys. 4.3.

W celu lepszego zobrazowania otrzymane rezultaty zostały wykreślone w formie wykresu gęstościowego [Rys. 4.5] przedstawiającego zależność TMR-u od położenia poziomu średniego E oraz od przyłożonego napięcia transportowego eV . W eksperymencie pozycja średniego poziomu może być zmieniana poprzez zmianę napięcia bramkującego, toteż Rys. 4.5 przedstawia efektywnie zależność TMR-u od napięcia bramkowego i transportowego. Zauważamy, że ze wzrostem absolutnej wartości uśrednionego poziomu centralne maksimum TMR-u ulega rozszczepieniu na dwie składowe, podczas gdy maksimum dla zerowego napięcia transportowego przechodzi w minimum. W przypadku ujemnych wartości E , minimum dla zerowego napięcia pojawia się dla $E \lesssim -U_0$. Na Rys. 4.5 znajdują się obszary, w których TMR zmienia znak i przyjmuje wartości ujemne. Ujemny TMR pojawia się głównie w pobliżu punktów ($E \approx -U_0/2$, $|eV| \approx 2E$). Również dla większych napięć transportowych TMR jest znacznie wygaszony. Wynika z tego, że wówczas polaryzacja spinowa tunelujących elektronów jest znacznie zredukowana. Warto wspomnieć, iż takie zachowanie TMR-u jest przeciwne do tego w przypadku silnie sprzężonych kropek kwantowych [65].

4.3.3 Kropki kwantowe połączone w geometrii równoległej ($\alpha = 1$)

W rozważanej obecnie geometrii układu kropki kwantowe połączone są równolegle ($\alpha = 1$). Dozwolone są wówczas procesy koherentnego tunelowania elektronów między kropkami kwantowymi, poprzez stany elektrody. Jak już zostało wspomniane wcześniej, procesy te są formalnie zawarte w pozadiagonalnych elementach macierzy sprzężenia $\mathbf{\Gamma}_\beta^\sigma$. W ogólności elementy te mogą być znacznie zredukowane, toteż przeprowadzone tu obliczenia zostały wykonane dla $q = 0.25$. Na Rys. 4.6 przedstawiono wykresy prądu, konduktancji różniczkowej i TMR-u dla $E > 0$. W rozważanym przypadku prąd posiada typową strukturę schodkową [Rys. 4.6(a)], co odzwierciedla się dobrze zdefiniowanymi pikami w konduktancji różniczkowej [Rys. 4.6(b)]. Maksima w konduktancji wyłaniają się w $|eV| = 2E$ oraz $|eV| = 2E + 2U_0$. Tunelowy magnetoopór jest dodatni w całym zakresie zmienności napięć [Rys. 4.6(c)] i przyjmuje dobrze zdefiniowane wartości odpowiadające poszczególnym schodkom w charakterystyce prądowo-napięciowej. W geometrii równoległej TMR jest w ogólności większy niż w geometrii szeregowej, co szczególnie jest widoczne dla dużych napięć. Takie zachowanie związane jest z różną rolą jaką odgrywa bezpośrednie sprzężenie tunelowe kropek kwantowych w tych dwóch geometriach. Sprzężenie

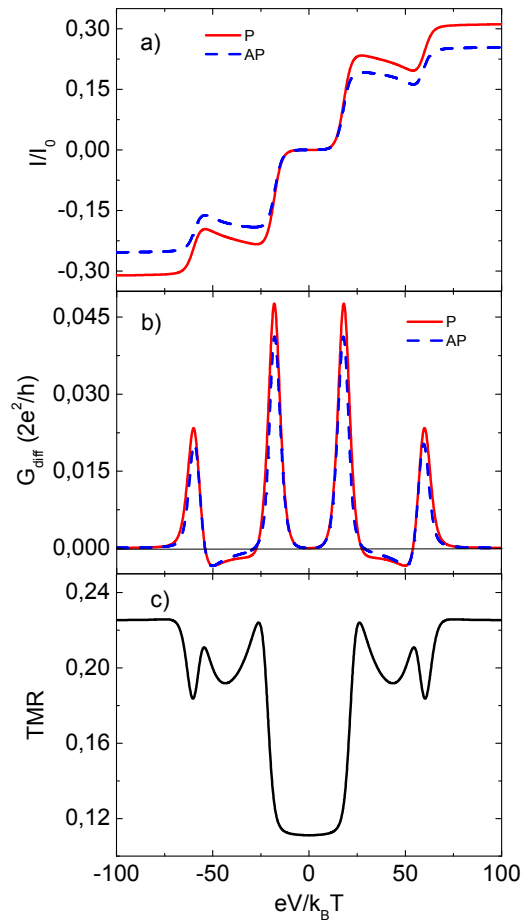
to ma duże znaczenie dla transportu w geometrii szeregowej, natomiast odgrywa mniejszą rolę w geometrii równoległej. Z założenia tunelowanie elektronów między kropkami jest niezależne od orientacji spinu i to prowadzi do redukcji TMR-u w geometrii szeregowej w porównaniu do TMR-u w geometrii równoległej.



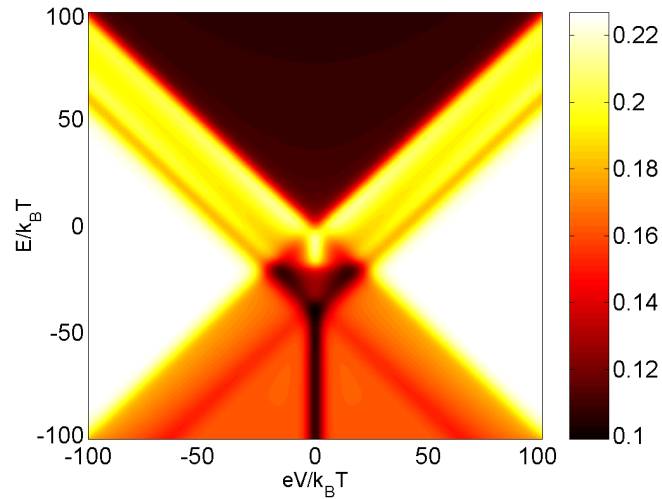
Rysunek 4.6: Prąd (a) i konduktancja różniczkowa (b) dla równoległej (P) i antyrównoległej (AP) konfiguracji magnetycznej oraz tunelowy magnetoopór (c) w zależności od przyłożonego napięcia transportowego, wyznaczone dla $\alpha = 1$, $q = 0.25$, $E = 10k_B T$. Pozostałe parametry jak na Rys. 4.2.

4.3.4 Kropki kwantowe połączone w geometrii pośredniej – $\alpha \in (0, 1)$

Opisana powyżej sytuacja zmienia się w znaczny sposób, jeśli sprzężenie kropek kwantowych z elektrodami jest różne ($\alpha \neq 1$). Podstawowe charakterystyki transportowe wyznaczone dla $\alpha = 0.25$ są pokazane na Rys. 4.7. Jak widać, kształt krzywej prądu i konduktancji różniczkowej ma cechy znalezione w przypadku kropek kwantowych połączonych szeregowo [porównaj z Rys. 4.2]. W szczególności obserwuje się ujemną konduktancję różniczkową oraz nietypowe schodki kulombowskie w prądzie. Pomimo tych podobieństw, TMR zachowuje się odmiennie. Jego zachowanie jest bardziej podobne do tego otrzymanego w geometrii równoległej, poza obszarami napięć $2E < |eV| < 2E + 2U_0$, tj. między rezonansami, gdzie zachowanie TMR-u jest bardziej złożone i gdzie TMR wykazuje pewne oscylacje.



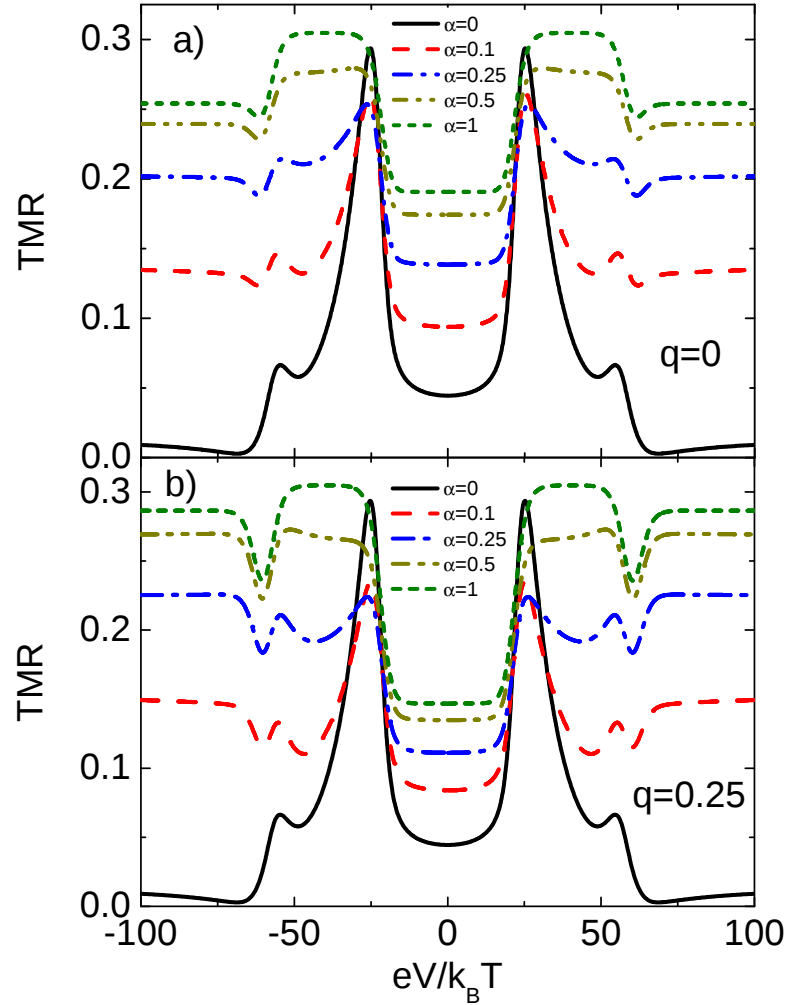
Rysunek 4.7: Prąd (a) i konduktancja różniczkowa (b) dla równoległej (P) i antyrównoległej (AP) konfiguracji magnetycznej oraz tunelowy magnetoopór (c) w zależności od przyłożonego napięcia transportowego, wyznaczone dla $\alpha = 0.25$. Pozostałe parametry jak na Rys. 4.6.



Rysunek 4.8: Tunelowy magnetoopór w funkcji przyłożonego napięcia transportowego i położenia średniego poziomu, wyznaczony dla $\alpha = 0.25$ i $q = 0.25$. Pozostałe parametry jak dla Rys. 4.7.

W celu uzupełnienia przeprowadzanych badań na Rys. 4.8 przedstawiona została zależność TMR-u od napięcia bramkowego i transportowego. TMR wykazuje dobrze zdefiniowaną strukturę składającą się z obszarów niemalże stałego TMR-u. W tych obszarach transportowych odpowiadające im krzywe prądowo-napięciowe są płaskie, podczas gdy w pobliżu rezonansów TMR zmienia się znacząco.

Interesującym zadaniem jest zbadanie zależności TMR-u od parametru asymetrii sprzężenia danej elektrody z układem kropek kwantowych. Na Rys. 4.9 przedstawiono zależność TMR-u od napięcia transportowego dla różnych wartości parametru α i w przypadku braku ($q = 0$) lub obecności ($q = 0.25$) pozadiagonalnych elementów macierzy sprzężenia $\Gamma_{\beta 12}^{\sigma}$. Zmieniając parametr α od wartości zerowej do jedności geometria układu ulega zmianie z szeregowej do równoległej. Ponadto ze wzrostem α również wielkość pozadiagonalnych elementów macierzy sprzężenia wzrasta (dzięki zależności $\Gamma_{\sigma}^{\beta 12} \sim q\sqrt{\alpha}$).



Rysunek 4.9: Zależność tunelowego magnetooporu od napięcia transportowego wyznaczona dla wyróżnionych wartości parametru asymetrii α oraz dla $q = 0$ (a) i $q = 0.25$ (b). Pozostałe parametry jak dla Rys. 4.2.

Zauważamy, iż TMR generalnie rośnie ze wzrostem α . Związane jest to z tym, iż dla $\alpha \neq 0$ elektrony mogą tunelować między elektrodami przez jedną kropkę. Ponownie, rola niezależnego od spinu tunelowanie między kropkami, redukującego TMR, jest pomniejszana i TMR wzrasta. Przekształcając układ z geometrii szeregowej do równoległej, TMR dla zerowego napięcia wzrasta, podczas gdy TMR w pobliżu napięć rezonansowych przechodzi w *plateau*. Takie zachowanie może być obserwowane zarówno w przypadku $q = 0$ [Rys. 4.9(a)] jak i dla $q = 0.25$ [Rys. 4.9(b)]. Wirtualne procesy tunelowe między dwiema kropkami kwantowymi (tj. dla $q \neq 0$) wprowadzają pewne modyfikacje. W szczególności, obniżają wartość TMR-u dla zerowych napięć oraz podwyższają ją dla napięć $|eV| > 2E + 2U_0$ w porównaniu do przypadku z $q = 0$.

Kolejną cechą widoczną na Rys. 4.9 jest to, że TMR dla $\alpha = 1$ i dla napięć $2E + 2U_0 > |eV| > 2E$ przyjmuje tę samą wielkość dla obydwu wartości parametru q . Można to jawnie pokazać wyznaczając (przybliżony) analityczny wzór na TMR dla tego obszaru napięć. Dla bardzo niskich temperatur rozkład Fermiego – Diraca można przybliżyć funkcją schodkową i założyć, że elektrony tunelują tylko z jednej strony na drugą [66]. Wówczas, dla przypadku

$\alpha = 1$ następująca formuła opisuje TMR w rozważanym zakresie napięć transportowych:

$$\text{TMR} = \frac{8p^2}{5(1-p^2)}, \quad (4.9)$$

która jest ścisła dla temperatury $T = 0$ K. Z powyższego wzoru wynika, iż TMR w rozważanym zakresie napięć jest niezależny od wielkości pozadiagonalnych elementów macierzy sprzężenia. Nie jest to jednak prawdziwe w przypadku prądu, który dla $\alpha = 1$ przyjmuje następującą postać:

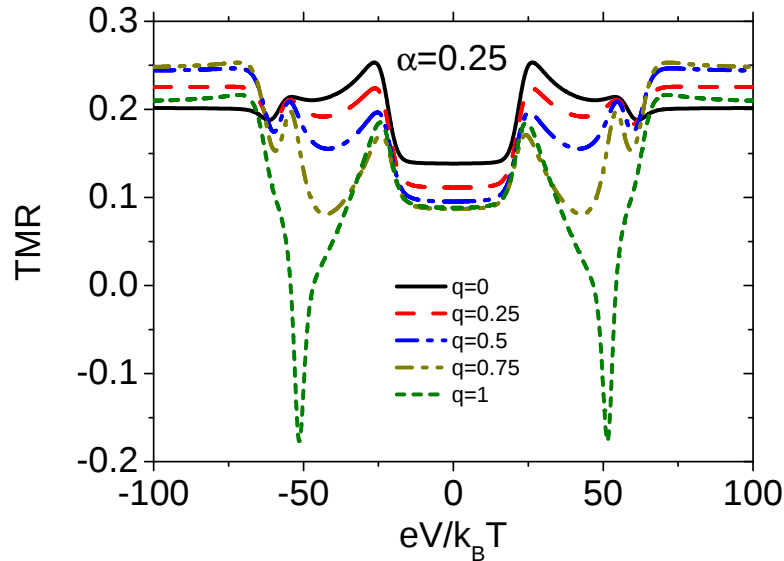
$$I^P = \frac{e\Gamma}{\hbar} \frac{2+q}{5}, \quad (4.10)$$

dla równoległej, oraz

$$I^{AP} = \frac{e\Gamma}{\hbar} \frac{(2+q)(1-p^2)}{5+3p^2}, \quad (4.11)$$

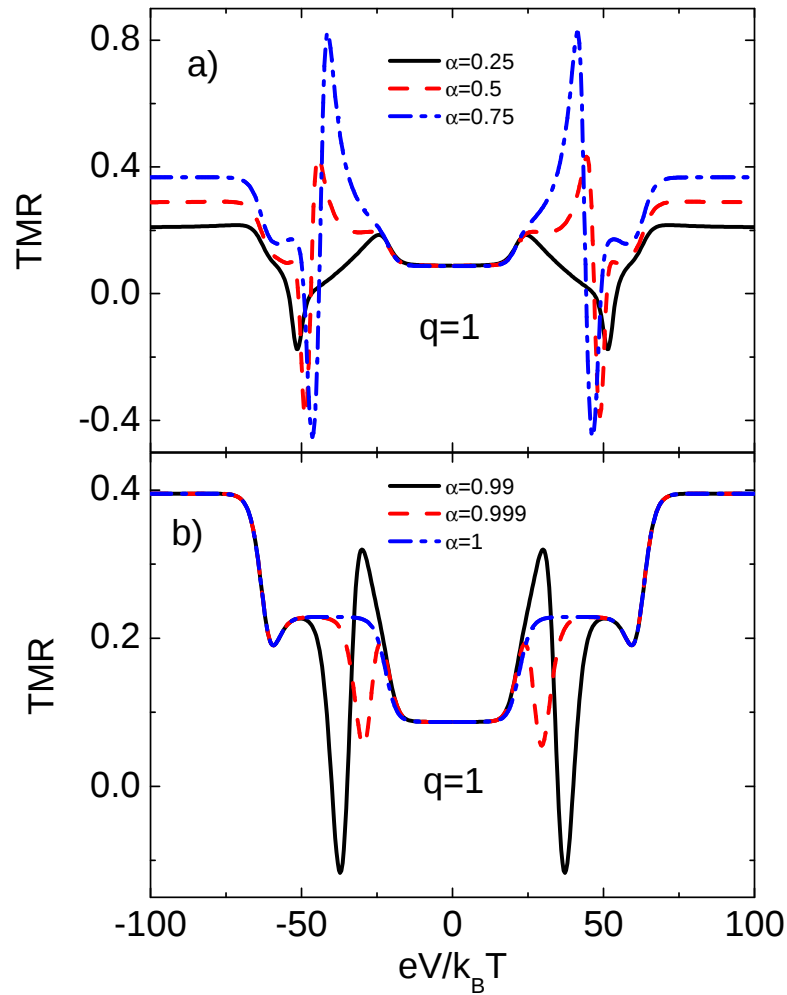
dla antyrównoległej konfiguracji magnetycznej elektrod.

Tunelowe procesy wirtualne pierwszego rzędu również mogą znacząco wpłynąć na charakterystykę TMR-u, w szczególności dla większych wartości parametru q . Rys. 4.10 obrazuje TMR w funkcji napięcia transportowego oraz podanych wartości parametru q . Zwiększając wielkość pozadiagonalnych elementów macierzy sprzężenia TMR również wzrasta w zakresie niskich napięć $|eV| < 2E$, oraz dla większych napięć $|eV| > 2E + 2U_0$, chociaż w tym drugim przypadku zależność ta nie jest monotoniczna. Natomiast w zakresie napięć $2E + 2U_0 > |eV| > 2E$ TMR jest wygaszany ze wzrostem parametru q i dla $q = 1$ pojawia się ujemny tunelowy magnetoopór. TMR przyjmuje ujemne wartości w pobliżu rezonansów $|eV| \approx 2E + 2U_0$, gdzie stany z podwójnym obsadzeniem układu kropek kwantowych zaczynają brać udział w transporcie.



Rysunek 4.10: Tunelowy magnetoopór w funkcji napięcia transportowego wyznaczony dla $\alpha = 0.25$ oraz dla podanych wartości parametru q . Pozostałe parametry jak na Rys. 4.6.

Okazuje się, że spinowo-zależny transport może być silnie uzależniony od geometrii układu, co jest szczególnie widoczne w zachowaniu się TMR-u obliczonego dla maksymalnej wartości parametru q , $q = 1$. Na Rys. 4.11 została wykreślona zależność TMR-u od napięcia transportowego dla różnych wartości parametru asymetrii α oraz dla $q = 1$. W zakresie niskich napięć TMR raczej nie zależy od parametru α , podczas gdy dla większych napięć, $|eV| > 2E + 2U_0$, TMR generalnie wzrasta rośnie ze wzrostem α . Jednak dla napięć pośrednich, $2E + 2U_0 > |eV| > 2E$, zachowanie się TMR-u jest dużo bardziej skomplikowane i silnie zależy od geometrii układu. Przy przejściu z geometrii szeregowej do równoległej, wielkość TMR-u wzrasta oraz dodatkowe maksimum wyłania się niedaleko rezonansu $|eV| \approx 2E + 2U_0$, które przechodzi w *plateau* dla $\alpha = 1$.



Rysunek 4.11: Zależność tunelowego magnetooporu od napięcia transportowego wyznaczona dla wyróżnionych wartości parametru asymetrii α oraz dla $q = 1$. Pozostałe parametry jak na Rys. 4.2.

Ponadto, TMR jest również bardzo wrażliwy na małe zmiany parametru α , gdy jest on bliski jedności. Aby to zrozumieć, należy przypomnieć sobie, iż wyjściowe stany kropek kwantowych połączonych bezpośrednio bądź pośrednio hybrydyzują tworząc analogony stanów molekularnych. Pojawia się stan wiążący i antywiążący, których szerokości silnie zależą od wielkości sprzężenia układu kropek kwantowych z elektrodami oraz od geometrii układu. Kiedy asymetria sprzężenia danej elektrody z dwiema kropkami maleje, wówczas szerokość poziomu wiążącego rośnie, podczas gdy szerokość poziomu antywiążącego maleje. W granicznym przypadku, $\alpha = 1$, stan antywiążący przestaje być sprzężony z elektrodami, natomiast szerokość poziomu wiążącego przyjmuje wartość 2Γ . W przypadku granicznym wszystkie powyżej omawiane cechy TMR-u zanikają i TMR jest stały w przedziale napięć $2E + 2U_0 > |eV| > 2E$. Innymi słowy silna zależność TMR-u od geometrii układu związana jest z modyfikacją warunków na interferencję fal elektronowych propagujących przez obydwie kropki kiedy α ulega zmianie.

4.4 Podsumowanie

W rozdziale tym został przeanalizowany transport przez układ dwóch kropek kwantowych dołączonych do ferromagnetycznych elektrod. Przedstawione rozważania ograniczono do reżimu słabego sprzężenia z elektrodami, ale przeanalizowano szczegółowo różne geometrie kropek kwantowych. W przypadku kropek kwantowych połączonych w szereg ($\alpha = 0$) znaleziono ujemny tunelowy magnetoopór oraz ujemną konduktancję różniczkową. Pokazano, że efekty te są silnie skorelowane z renormalizacją poziomów energetycznych kropek kwantowych wynikającą z tunelowego sprzężenia z elektrodami. Z drugiej strony ujemny TMR, jak i ujemna konduktancja

różniczkowa znikają w przypadku kropek połączonych w geometrii równoległej ($\alpha = 1$). Efekty te mogą zostać częściowo przywrócone w geometrii pośredniej ($\alpha \in (0, 1)$). Ponadto, pokazano, że wielkość sprzężenia pośredniego ma duży wpływ na charakterystyki transportowe, a w szczególności na TMR.

Część II

Spinowy i orbitalny efekt Kondo

Rozdział 5

Efekty interferencji kwantowej i rezonans Kondo w transporcie przez układ dwóch kropek kwantowych

5.1 Odkrycie i fizyka efektu Kondo

Effekt Kondo został po raz pierwszy zaobserwowany w układach metali niemagnetycznych (np. Cu, Au) zawierających domieszki magnetyczne (np. Co, Mn, Fe). W niskotemperaturowych doświadczeniach z takimi materiałami zaobserwowano, iż oporność ich zaczyna wzrastać poniżej pewnej temperatury, co prowadzi do charakterystycznego minimum oporności. Powodem wzrostu oporności okazało się być rozpraszanie elektronów przewodnictwa na domieszkach magnetycznych, pomimo iż koncentracja domieszek była bardzo mała. Zachowanie wysokorozcieńczonych stopów magnetycznych różniło się również od zachowania normalnych stopów magnetycznych. W tym pierwszym przypadku domieszka magnetyczna jest silnie skorelowana z elektronami przewodnictwa poprzez antyferomagnetyczne oddziaływanie wymienne, co prowadzi do całkowitego ekranowania momentu magnetycznego domieszki przez spiny elektronów przewodnictwa metalu. Wobec stosunkowo dużych średnich odległości poszczególnych domieszek magnetycznych można przyjąć, iż domieszki te ze sobą nie oddziałują, czego nie można założyć w drugim przypadku. Satisfakcjonujące (jakkolwiek niepełne) wyjaśnienie tego zjawiska zostało podane przez Juna Kondo, przeszło trzydzieści lat po jego odkryciu [67]. Na jego cześć temperaturę krytyczną poniżej której oporność zaczyna wzrastać nazwano temperaturą Kondo i oznaczono T_K . Teoria Kondo załamuje się w bardzo niskich temperaturach, tzn. $T \ll T_K$, prowadząc do znanej rozbieżności logarytmicznej. Zjawisko to było później badane w zakresie temperatur $T < T_K$ w celu jego poprawnego wyjaśnienia. Stosowano wynalezioną w latach siedemdziesiątych przez K. Wilsona numeryczną grupę renormalizacji [68], a także technikę skalowania Andersona [69].

Analogiczny efekt przewidziano teoretycznie [70, 71] i zaobserwowano eksperymentalnie [11, 72, 73, 74] w kropkach kwantowych, z tym, że tutaj mamy do czynienia z minimum w konduktancji w dostatecznie niskiej temperaturze, która z dalszym obniżaniem temperatury dąży do wartości $2e^2/h$. W przypadku, gdy na kropce kwantowej znajduje się nieparzysta liczba elektronów, wówczas zachowuje się ona jak domieszka magnetyczna o spinie $\hbar/2$, a jej oddziaływanie z elektronami z poziomu Fermiego elektrod można opisać Hamiltonianem Andersona [75]. Jeśli Hamiltonian nie zawiera członów, które w sposób jawny sprzęgają elektrony o jednej orientacji spinu z tymi o przeciwnej orientacji spinu, jak np. sprzężenie spin – orbita, a stan początkowy kropki jest spinowo zdegenerowany, wówczas jedynym sposobem na odwrócenie spinu kropki kwantowej są procesy *współtunelowania*. Procesy te kreują pewne sprzężenie między spinami o orientacji $\uparrow$ i $\downarrow$ istniejące dzięki obecności elektronów na poziomie Fermiego w elektrodach. W efekcie następuje hybrydyzacja stanów o spinie $\uparrow$ i $\downarrow$ i generacja ekranującej chmury spinowej w elektrodach. Innymi słowami sprzężenie wymienne elektronu na kropce z elektronami przewodnictwa w elektrodach daje wkład do ekranowania spinu kropki kwantowej, w konsekwencji czego pojawia się rezonans na poziomie Fermiego elektrod.

W reżimie blokady kulombowskiej tunelowanie sekwencyjne jest zabronione ze względu na energię ładowania, ale mogą zachodzić procesy wyższego rzędu, takie jak *współtunelowanie*⁴. *Współtunelowanie* jest procesem tunelowym drugiego rzędu w trakcie którego wykorzystywane są pewne pośredniczące stany wirtualne. Energia takiego stanu wirtualnego może być większa od energii stanu podstawowego, ale czas jego obsadzenia jest ograniczony przez zasadę nieoznaczoności Heisenberga. Mimo, iż zasadniczą rolę w efekcie Kondo pełnią procesy rzędu wyższego niż dwa, to rozpatrzenie *współtunelowania* jest dobrym punktem wyjścia do pogładowego wyjaśnienia tego zjawiska.

Minimalna realizacja efektu Kondo w transporcie przez kropkę kwantową dołączoną do zewnętrznych elektrod wymaga dwóch zdegenerowanych poziomów związanych z danym rodzajem stopnia swobody [76]. Wobec tego, efekt Kondo może być obserwowany biorąc pod uwagę spinowe bądź orbitalne stopnie swobody. W celu wyjaśnienia mechanizmu wytworzenia stanu Kondo zostanie rozpatrzona jednopoziomowa kropka kwantowa sprzężona tunelowo z metalicznymi elektrodami. Poziom energetyczny kropki kwantowej ε_0 , znajdujący się głęboko poniżej poziomu Fermiego elektrod (w równowadze) μ_F , jest obsadzony przez elektron o orientacji spinu "do góry" $\uparrow$ ("w dół" $\downarrow$). Uwzględniając dużą wartość energii kulombowskiej U i niską temperaturę, nałożone na układ warunki mogą zostać zapisane w następującej postaci $\varepsilon_0 < \mu_F < \varepsilon_0 + U$, ($U, |\varepsilon_0| \gg k_B T \sim k_B T_K$). Wobec tego tunelowanie kolejnego elektronu z elektrody do kropki jest zabronione ze względu na dużą wartość U , jednocześnie usunięcie elektronu obsadzającego kropkę wymagałoby dostarczenia energii rzędu $|\varepsilon_0|$ do układu. Z klasycznego punktu widzenia elektron nie może więc tunelować z kropki bez dostarczenia mu odpowiedniej energii. W takiej sytuacji procesy tunelowania pierwszego rzędu są zabronione. Jednak dzięki zasadzie nieoznaczoności Heisenberga mogą zachodzić procesy tunelowe wyższego rzędu. Zasada ta zezwala na przetunelowanie elektronu o spinie $\uparrow$ ($\downarrow$) z kropki na poziom Fermiego elektrody i istnienie takiej konfiguracji (stanu wirtualnego) w czasie rzędu $\hbar/|\varepsilon_0|$. Jednocześnie w interwale tego czasu musi zajść proces tunelowania elektronu o spinie $\downarrow$ ($\uparrow$) z poziomu Fermiego elektrody na kropkę kwantową. Superpozycja takich procesów (z odwróceniem spinu na kropce) generuje ostry rezonans w gęstości stanów centrowany na poziomie Fermiego elektrod. Pojawienie się rezonansu Kondo (zwanego też rezonansem Rado-Suhl'a) na poziomie Fermiego prowadzi do wzmocnienia transmisji przez kropkę kwantową. W rezultacie tego pojawia się anomalia (zeronapięciowa) w konduktancji, której intensywność rośnie z dalszym obniżaniem temperatury aż do osiągnięcia wartości $2e^2/h$ w temperaturze zera absolutnego.

Warto wspomnieć, iż takie zachowanie się przewodnictwa jest odwrotne do tego, jakie występuje w metalach niemagnetycznych zawierających domieszki magnetyczne. W tym pierwszym przypadku wszystkie elektrony dające wkład do transportu zmuszone są do propagacji przez kropkę kwantową. Wówczas taki rezonans Kondo stanowi niejako dodatkowy kanał przewodnictwa dla tych elektronów. Natomiast w przypadku metalu z domieszką magnetyczną rezonans Kondo przyczynia się do dużego rozpraszania elektronów z pobliża poziomu Fermiego. Jak wiadomo takie elektrony dają zasadniczy wkład do niskotemperaturowego przewodnictwa, a silne ich rozpraszanie prowadzi do wzrostu oporności.

Warto tutaj również przypomnieć kilka najważniejszych odkryć i przewidywań teoretycznych dotyczących transportu w reżimie Kondo przez kropkę kwantową sprzężoną do elektrod. Począwszy od końca lat 80-tych XX-ego wieku wiele aspektów zjawiska Kondo w kropce kwantowej sprzężonej z niemagnetycznymi elektrodami zostało przeanalizowanych teoretycznie [77, 78, 79, 80]. W sytuacji nierównowagowej przewidziano, iż pik Kondo w gęstości stanów zostaje rozszczepiony na dwa piki, które usytuowane są na poziomach Fermiego elektrod i których amplitudy są mniejsze od amplitudy piku równowagowego [78]. Badano również układ, w którym kropka kwantowa znajduje się w polu magnetycznym [77] i zaobserwowano, że pole to powoduje rozsuniecie się pików Kondo od poziomów Fermiego elektrod, co związane jest z rozszczepieniem Zeemana poziomu kropki kwantowej.

Efekt Kondo został również zaobserwowany w kropkach kwantowych z parzystą liczbą elektronów, umieszczonych w polu magnetycznym [81]. W tym przypadku efekt związany jest z przejściami singlet - triplet, które pojawia się w pewnym określonym polu magnetycznym (dla

⁴W języku angielskim mówimy *cotunneling*.

pewnego pola magnetycznego poziom(y) tripletowe są zdegenerowane z poziomem singletowym, a więc w obszarze przecięcia się tych poziomów może dochodzić do wyżej wspomnianych przejść).

Pokazano również, że ferromagnetyzm elektrod może prowadzić do rozszczepienia anomalii Kondo [82, 83, 84, 85], co jest konsekwencją efektywnego pola wymiany związanego ze sprzężeniem kropki z ferromagnetycznymi elektrodami. Pole to powoduje rozszczepienie równowagowego piku Kondo w gęstości stanów i rozsuniecie tych dwóch składowych od poziomu Fermiego elektrod, co w konsekwencji prowadzi do zmniejszenia intensywności pików Kondo w konduktancji, podobnie jak w przypadku pola magnetycznego w układach niemagnetycznych. Jednak w przypadku kropki kwantowej symetrycznie sprzężonej z ferromagnetycznymi elektrodami anomalia Kondo pozostaje nienaruszona w konfiguracji antyrównoległej momentów magnetycznych elektrod, co zostało również potwierdzone w doświadczeniu z molekułą C_{60} sprzężoną z niklowymi elektrodami [86].

W rozdziale tym zostanie omówiony rezonans Kondo-Dicke w transporcie elektronowym przez układ dwóch kropek kwantowych. Rozważany układ składa się z dwóch kropek kwantowych sprzężonych z niemagnetycznymi elektrodami w geometrii przedstawionej na Rys. 2.1. W ogólności kropki kwantowe mogą być ze sobą sprzężone tunelowo. W przeprowadzanych rozważaniach założono istnienie dużych korelacji kulombowskich na obydwu kropkach kwantowych i jednocześnie pominięto oddziaływania kulombowskie między kropkami kwantowymi. Rozpatrywany układ opisany jest wówczas Hamiltonianem (2.1), przy jednoczesnym uniezależnieniu elementów sprzężenia od wektora falowego $\mathbf{k}$, tzn. $V_{\beta i \mathbf{k}} \rightarrow V_{\beta i}$.

Dalsze rozważania ograniczone są do przypadku nieskończenie dużych oddziaływań kulombowskich na kropkach kwantowych, $U_i \rightarrow \infty$ (dla $i = 1, 2$). Wówczas podwójne obsadzenie każdej kropki jest zabronione. Założenie to pozwala na zastosowanie metody bozonów pomocniczych dla nieskończonego U [87] w przybliżeniu pola średniego w celu analizy własności transportowych rozważanego układu w reżimie Kondo. Należy jednak pamiętać, iż metoda ta w przybliżeniu pola średniego słuszna jest dla niskich wartości przyłożonego napięcia transportowego i bardzo niskich temperatur, $T \rightarrow 0$ K.

5.2 Reprezentacja bozonów pomocniczych

5.2.1 Opis metody

W metodzie *bozonów pomocniczych* (SB) wprowadza się układ operatorów pomocniczych kreujących trzy dozwolone stany każdej kropki kwantowej:

- $b_i^\dagger$ - operator pola bozonowego kreujący stan pusty na i -tej kropce,
- $f_{i\sigma}^\dagger$ - operator pseudofermionowy kreujący stan pojedynczo obsadzony przez elektron o spinie σ .

Operatory kreacji (anihilacji) dla i -tej kropki kwantowej są wówczas wyrażone poprzez następujące iloczyny operatora bozonowego i pseudofermionowego [87]:

- $d_{i\sigma} \rightarrow b_i^\dagger f_{i\sigma}$,
- $d_{i\sigma}^\dagger \rightarrow f_{i\sigma}^\dagger b_i$.

W powyższej transformacji operatory bozonowe zapobiegają podwójnemu obsadzeniu kropki. Kiedy operator kreacji $d^\dagger$ działa na obsadzony przez jeden elektron stan kropki kwantowej, to wówczas operator bozonowy (część bozonowa) anihiluje ten stan:

$$d_{i\sigma}^\dagger |1\rangle = d_{i\sigma}^\dagger (f_{i\bar{\sigma}} |v\rangle) = f_{i\sigma}^\dagger b_i f_{i\bar{\sigma}} |v\rangle = 0,$$

bowiem

$$b_i |v\rangle = 0,$$

gdzie: $|v\rangle$ - próżnia. Warto wspomnieć, iż podejście takie wprowadził jako pierwszy Abricosov [88] - przedstawiając lokalny spin poprzez pseudofermiony, a później rozszerzone zostało przez Barnes [89] i Coleman [87], którzy opisali każdy możliwy stan układu jako wykreowany z próżni po zadziałaniu odpowiedniego operatora kreacji.

W przypadku $U_i \rightarrow \infty$ podwójne obsadzenie każdej kropki jest zabronione, a więc możliwe stany kropki mają postać:

1. $|0\rangle_i \equiv b_i^\dagger |v\rangle$ - stan pusty i -tej kropki kwantowej,
2. $|\sigma\rangle_i \equiv f_{i\sigma}^\dagger |v\rangle$ - stan pojedynczo obsadzony i -tej kropki przez elektron o spinie σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$),

Stany układu dwóch (izolowanych) kropek kwantowych można zapisać za pomocą iloczynów prostych powyższych stanów. Wobec tego układ dwóch kropek kwantowych może znaleźć się w jednym z dziewięciu stanów: $|0\rangle_1|0\rangle_2$, $|\sigma\rangle_1|0\rangle_2$, $|0\rangle_1|\sigma\rangle_2$, $|\sigma\rangle_1|\sigma'\rangle_2$ ($\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow$). Należy zwrócić uwagę, iż w przypadku istnienia sprzężenia tunelowego między kropkami, $t \neq 0$, powyższe stany nie są stanami własnymi izolowanego układu dwóch kropek kwantowych.

5.2.2 Hamiltonian układu w reprezentacji SB

W związku z faktem, iż każda kropka może być obsadzona co najwyżej przez jeden elektron, co jest równoważne stwierdzeniu, że jedynymi dozwolonymi stanami każdej z kropek są stany: $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$ lub $|\downarrow\rangle$, należy wyeliminować niefizyczne stany poprzez nałożenie na układ następującego warunku:

$$\hat{Q}_i = b_i^\dagger b_i + \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} = 1, \quad i = 1, 2. \quad (5.1)$$

Powyższa relacja mówi nam, iż nie więcej, ani nie mniej niż jeden z trzech danych stanów każdej kropki musi być obsadzony przez cząstkę (bozon, pseudofermion o spinie $\uparrow$ lub pseudofermion o spinie $\downarrow$).

Hamiltonian w reprezentacji SB ma wówczas postać:

$$\begin{aligned} \tilde{H} = H_c + \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\beta} \sum_{i\sigma} (V_{i\beta}^\sigma c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger b_i^\dagger f_{i\sigma} + V_{i\beta}^{\sigma*} f_{i\sigma}^\dagger b_i c_{\mathbf{k}\beta\sigma}) \\ - \frac{t}{N} \sum_{\sigma} (f_{1\sigma}^\dagger b_1 b_2^\dagger f_{2\sigma} + H.c.) + \sum_i \lambda_i \left(\sum_{\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + b_i^\dagger b_i - 1 \right), \end{aligned} \quad (5.2)$$

gdzie N ($=2$) to degeneracja poziomu każdej kropki. Ostatni człon w Hamiltonianie (5.2) został wprowadzony w celu zapobieżenia podwójnemu obsadzeniu każdej kropki. Poprzez współczynniki Lagrange'a λ_i ($i=1,2$) wprowadzono warunek zachowania liczby cząstek (5.1). Informacja o korelacjach kulombowskich jest tu zawarta we współczynnikach λ_i . Warto jeszcze dodać, iż rzeczywiście operator $\hat{Q}$ komutuje z $\tilde{H}$, co mówi, że liczba cząstek jest zachowana (jest stałą ruchu).

W dalszym ciągu Hamiltonian układu jest raczej skomplikowany i niewygodny do obliczeń. W celu dalszego uproszczenia Hamiltonianu (5.2) dokonujemy przybliżenia pola średniego (MFA) w odniesieniu do pola bozonowego. Przybliżenie to polega na zastąpieniu operatorów bozonowych b_i przez odpowiadające im wartości oczekiwane. W najniższym rzędzie rachunku zaburzeń operator bozonowy jest zastąpiony przez liczbę rzeczywistą, niezależną od czasu [90]:

$$\frac{b_i(t)}{\sqrt{N}} \rightarrow \frac{\langle b_i(t) \rangle}{\sqrt{N}} \equiv \tilde{b}_i$$

Takie podejście zaniedbuje fluktuacje wokół wartości średniej $\langle b_i(t) \rangle$. Z drugiej strony przybliżenie to w temperaturze $T = 0$ K prawidłowo opisuje fluktuacje spinu (reżim Kondo). Należy też zaznaczyć, iż MFA ogranicza obliczenia nierównowagowe do małych napięć transportowych $eV \ll |\varepsilon_i|$, gdyż przybliżenie to nie może być stosowane przy dużych fluktuacjach ładunku.

Wprowadzając zrenormalizowane parametry $\tilde{t} = \tilde{t}_1 \tilde{b}_2$, $\tilde{V}_{i\beta}^\sigma = V_{i\beta}^\sigma \tilde{b}_2$ oraz $\tilde{\varepsilon}_{i\sigma} = \varepsilon_{i\sigma} + \lambda_i$, efektywny Hamiltonian może być zapisany następująco:

$$\begin{aligned} \tilde{H}^{MFA} = & \sum_{\mathbf{k}\beta\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma} + \sum_{i,\sigma} \tilde{\varepsilon}_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} - \tilde{t} \sum_{\sigma} (f_{1\sigma}^\dagger f_{2\sigma} + \text{H.c.}) \\ & + \sum_{\mathbf{k}\beta} \sum_{i,\sigma} (\tilde{V}_{i\beta}^\sigma c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_i \lambda_i (N \tilde{b}_i^2 - 1). \end{aligned} \quad (5.3)$$

Teraz Hamiltonian oddziaływującego układu ma analogiczną postać jak Hamiltonian układu nieoddziaływującego (występują w nim tylko człony kwadratowe). Jednak obecnie informacja o oddziaływaniach zawarta jest w zrenormalizowanych parametrach.

5.2.3 Wyznaczenie równań samozgodnych

Nieznane parametry $\tilde{b}_i$ oraz λ_i mogą zostać wyznaczone samozgodnie z równań otrzymanych z warunku zachowania liczby cząstek (5.1) oraz z równań ruchu dla operatorów bozonowych. Pierwsza para równań zostaje otrzymana poprzez uśrednienie równania (5.1) co w rezultacie prowadzi do wyrażenia:

$$\sum_{\sigma} \langle f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \rangle + \langle b_i^\dagger b_i \rangle = 1. \quad (5.4)$$

Założenie o zaniedbaniu fluktuacji wokół wartości średniej $\langle b_i(t) \rangle$ pozwala zapisać: $\langle b_i^\dagger b_i \rangle = \langle b_i^\dagger \rangle \langle b_i \rangle$. Po uwzględnieniu tego faktu równanie (5.4) przybiera postać:

$$\frac{1}{N} \sum_{\sigma} \langle f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \rangle + \tilde{b}_i^2 = \frac{1}{N}. \quad (5.5)$$

W celu uzyskania dwóch pozostałych równań należy zapisać równanie ruchu dla operatora pola bozonowego

$$i \frac{\partial b_i(t)}{\partial t} = [b_i(t), \tilde{H}]. \quad (5.6)$$

Po wyliczeniu komutatora $[b_i(t), \tilde{H}]$ równanie ruchu dla operatora $b_i(t)$ przyjmuje następującą postać:

$$i \frac{\partial b_i(t)}{\partial t} = \frac{t_c}{N} \sum_{i,\sigma} b_i(t) f_{i\sigma}^\dagger(t) f_{i\sigma}(t) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k\alpha} \sum_{\sigma} V_{i\beta}^\sigma c_{k\beta\sigma}^\dagger(t) f_{i\sigma}(t) + \lambda_i b_i(t). \quad (5.7)$$

Uśredniając równanie (5.7) oraz korzystając z niezależności czasowej średniej z pola bozonowego, oraz z pewnej niezależności operatorów bozonowych od fermionowych pod średnią (co pozwala na rozszczepienie $\langle BF \rangle = \langle B \rangle \langle F \rangle$), równanie to przyjmuje następującą postać:

$$\frac{1}{N} \sum_{k\beta\sigma} \tilde{V}_{i\beta}^\sigma \langle c_{k\alpha\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \rangle + \frac{\tilde{t}_c}{N} \sum_{\sigma} \langle f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \rangle + \lambda_i \tilde{b}_i^2 = 0, \quad (5.8)$$

W celu otrzymania powyższego równania skorzystano też z faktu, iż $\langle A(t)B(t) \rangle = \langle A(0)B(0) \rangle$ w stanie stacjonarnym.

W otrzymanym układzie równań (5.5,5.8) wciąż jest więcej niewiadomych niż równań. Należy dokonać dalszych przekształceń i obliczeń w taki sposób, aby jedynymi niewiadomymi były parametry λ_i oraz $\tilde{b}_i$.

Pierwszą parę równań można zapisać przy pomocy transformaty Fouriera funkcji Greena $G_{ii\sigma}^<(t-t') \equiv i \langle f_{i\sigma}^\dagger(t) f_{i\sigma}(t') \rangle$ wykorzystując równanie (2.28). Taki zabieg prowadzi do następującego wyniku:

$$\tilde{b}_i^2 - i \sum_{\sigma} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi N} G_{ii\sigma}^<(\varepsilon) = \frac{1}{N}. \quad (5.9)$$

W celu wyznaczenia drugiej pary równań samozgodnych należy wyrazić znajdujące się tam korelacje za pomocą odpowiednich funkcji Greena korzystając z relacji typu (2.28,2.30), co prowadzi do równania:

$$-\frac{i}{N} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \sum_{k\beta\sigma} \tilde{V}_{i\beta}^\sigma \langle \langle f_{i\sigma} | c_{k\beta\sigma}^\dagger \rangle \rangle^< - i \frac{\tilde{t}_c}{N} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \sum_{\sigma} \langle \langle f_{i\sigma} | f_{i\sigma}^\dagger \rangle \rangle^< + \lambda_i \tilde{b}_i^2 = 0. \quad (5.10)$$

W kolejnym kroku należy wyrazić funkcję Greena $\langle \langle f_{i\sigma} | c_{k\alpha\sigma}^\dagger \rangle \rangle^<$ za pomocą funkcji Greena $G_{ii\sigma}^<(\varepsilon)$. W tym celu zapisujemy równanie ruchu dla operatora $f_{i\sigma}(t)$:

$$i \frac{\partial f_{i\sigma}(t)}{\partial t} = [f_{i\sigma}(t), \tilde{H}(t)], \quad (5.11)$$

które po obliczeniu komutatora można zapisać w postaci

$$i \frac{\partial f_{i\sigma}(t)}{\partial t} = (\varepsilon_{i\sigma} + \lambda_i) f_{i\sigma}(t) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k\beta} V_{i\beta}^{\sigma*} b_i(t) c_{k\beta\sigma}(t) + \frac{\tilde{t}_c}{N} b_i(t) b_i^\dagger(t) f_{i\sigma}(t). \quad (5.12)$$

Mnożąc obustronnie równanie (5.12) z lewej strony przez $f_{i\sigma}^\dagger(t')$ a następnie je uśredniając otrzymuje się równanie:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \langle \langle f_{i\sigma}(t) | f_{i\sigma}^\dagger(t') \rangle \rangle^< &= \tilde{\varepsilon}_{i\sigma} \langle \langle f_{i\sigma}(t) | f_{i\sigma}^\dagger(t') \rangle \rangle^< + \tilde{t}_c \langle \langle f_{i\sigma}(t) | f_{i\sigma}^\dagger(t') \rangle \rangle^< \\ &+ \sum_{k\beta} \tilde{V}_{i\beta}^{\sigma*} \langle \langle c_{k\beta\sigma}(t) | f_{i\sigma}^\dagger(t') \rangle \rangle^< \end{aligned} \quad (5.13)$$

Powyższe równanie w przestrzeni Fouriera ma postać:

$$(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{i\sigma}) \langle \langle f_{i\sigma} | f_{i\sigma}^\dagger \rangle \rangle^< = \sum_{k\beta} \tilde{V}_{i\beta}^{\sigma*} \langle \langle c_{k\beta\sigma} | f_{i\sigma}^\dagger \rangle \rangle^< + \tilde{t}_c \langle \langle f_{i\sigma} | f_{i\sigma}^\dagger \rangle \rangle^<, \quad (5.14)$$

a równanie sprzężone do równania (5.14):

$$(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{i\sigma}) \langle \langle f_{i\sigma} | f_{i\sigma}^\dagger \rangle \rangle^< = \sum_{k\beta} \tilde{V}_{i\beta}^\sigma \langle \langle f_{i\sigma} | c_{k\alpha\sigma}^\dagger \rangle \rangle^< + \tilde{t}_c \langle \langle f_{i\sigma} | f_{i\sigma}^\dagger \rangle \rangle^<. \quad (5.15)$$

Połączenie równania (5.15) z równaniem (5.10) prowadzi do równania, które w jawny sposób zależy tylko od funkcji Greena $G_{ii\sigma}^<(\varepsilon)$ i szukanych parametrów:

$$(\tilde{\varepsilon}_{i\sigma} - \varepsilon_{i\sigma}) \tilde{b}_i^2 - i \sum_{\sigma} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi N} (\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{i\sigma}) G_{ii\sigma}^<(\varepsilon) = 0. \quad (5.16)$$

Aby rozwiązać układ równań (5.9, 5.16) należy znać jawną postać funkcji Greena $G_{ii\sigma}^<(\varepsilon)$. Funkcję tą wyznaczamy z odpowiedniego równania ruchu, podobnie jak było to zrobione w rozdziale 2. Obliczenia te prowadzą do następującego równania:

$$(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{i\sigma}) G_{ii\sigma}^<(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{k}\beta} \tilde{V}_{i\beta}^{\sigma*} \tilde{V}_{i'\beta}^\sigma [g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^r G_{i'\sigma}^<(\varepsilon) + g_{\mathbf{k}\beta\sigma}^< G_{i'\sigma}^a(\varepsilon)] + \tilde{t}_c G_{ii\sigma}^<(\varepsilon), \quad (5.17)$$

które po rozwiązaniu daje wyrażenie na funkcję Greena $G_{ii\sigma}^<(\varepsilon)$. Wprowadzając definicję zrenormalizowanych szerokości poziomów kropek:

$$\tilde{\Gamma}_{\beta i i'}^\sigma = \pi \sum_k \tilde{V}_{i\beta}^\sigma \tilde{V}_{i'\beta}^{\sigma*} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\sigma}) \quad (5.18)$$

otrzymuje się:

$$\begin{aligned} G_{ii\sigma}^<(\varepsilon) &= \frac{2i}{|\tilde{\Omega}_\sigma(\varepsilon)|^2} \{ [f_L(\varepsilon) \tilde{\Gamma}_{Lii}^\sigma + f_R(\varepsilon) \tilde{\Gamma}_{Rii}^\sigma] [\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{i\sigma} - i \tilde{\Gamma}_{ii}^\sigma] [\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{i\sigma} + i \tilde{\Gamma}_{ii}^\sigma] \\ &+ [f_L(\varepsilon) \tilde{\Gamma}_{Li\bar{i}}^\sigma + f_R(\varepsilon) \tilde{\Gamma}_{Ri\bar{i}}^\sigma] [\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{i\sigma} + i \tilde{\Gamma}_{ii}^\sigma] [\tilde{t}_c + i \tilde{\Gamma}_{ii}^\sigma] + [f_L(\varepsilon) \tilde{\Gamma}_{Li\sigma}^\sigma + f_R(\varepsilon) \tilde{\Gamma}_{Ri\sigma}^\sigma] \\ &\times [\tilde{t}_c - i \tilde{\Gamma}_{ii}^\sigma] [\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_i^\sigma + i \tilde{\Gamma}_{ii}^\sigma] + [f_L(\varepsilon) \tilde{\Gamma}_{L\bar{i}\bar{i}}^\sigma + f_R(\varepsilon) \tilde{\Gamma}_{R\bar{i}\bar{i}}^\sigma] [\tilde{t}_c - i \tilde{\Gamma}_{ii}^\sigma] [\tilde{t}_c + i \tilde{\Gamma}_{ii}^\sigma] \}, \end{aligned} \quad (5.19)$$

gdzie: $\tilde{\Gamma}_{ij}^\sigma = \tilde{\Gamma}_{Lij}^\sigma + \tilde{\Gamma}_{Rij}^\sigma$ dla $i, j = 1, 2$, oraz

$$\tilde{\Omega}_\sigma(\varepsilon) = (\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{1\sigma} + i\tilde{\Gamma}_{11}^\sigma)(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{2\sigma} + i\tilde{\Gamma}_{22}^\sigma) - (\tilde{t}_c - i\tilde{\Gamma}_{12}^\sigma)(\tilde{t}_c - i\tilde{\Gamma}_{21}^\sigma).$$

W powyższych obliczeniach zaniedbano część rzeczywistą energii własnych. Teraz łatwo jest zauważyć, iż funkcja Greena $G_{i\sigma}^<(\varepsilon)$ zależy od parametrów $\tilde{b}_i$ oraz $\tilde{\lambda}_i$ (tudzież $\tilde{\varepsilon}_{i\sigma}$), dlatego też muszą one być wyznaczone w sposób samozgodny za pomocą równań (5.9) i (5.16)

Warto dodać, iż wyznaczone równania samozgodne (5.9), (5.16) można otrzymać w inny sposób. Mianowicie, parametry $\tilde{b}_i$ oraz $\tilde{\varepsilon}_{i\sigma}$ mogą być określone poprzez minimalizację energii stanu podstawowego dla Hamiltonianu MFA (5.3) względem tych parametrów. W tym celu należy zastosować twierdzenie Hellmana-Feynmana w odniesieniu do Hamiltonianu (5.3), co razem z warunkiem koniecznym istnienia ekstremum energii daje następujące równanie, $(\partial\langle\tilde{H}^{MFA}\rangle/\partial\tilde{b}) = 0 = (\partial\langle\tilde{H}^{MFA}\rangle/\partial\tilde{\varepsilon}_{i\sigma})$, prowadzące do układu równań samozgodnych (5.9), (5.16).

Prąd elektryczny płynący przez układ może zostać wyznaczony za pomocą następującego wyrażenia:

$$J = \frac{e}{h} \sum_{\sigma} \int d\varepsilon [f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)] T_{\sigma}(\varepsilon), \quad (5.20)$$

gdzie $T_{\sigma}(\varepsilon) = 4\text{Tr}[\mathbf{G}_{\sigma}^a \tilde{\Gamma}_R^{\sigma} \mathbf{G}_{\sigma}^r \tilde{\Gamma}_L^{\sigma}]$ jest prawdopodobieństwem transmisji. Opóźnioną (przedwcześnie) funkcję Greena $\mathbf{G}_{\sigma}^r$ ($\mathbf{G}_{\sigma}^a$) wyznacza się z odpowiedniego równania ruchu. Warto zauważyć, iż powyższe wyrażenie na prąd wygląda analogicznie jak to dla układu kropek kwantowych bez uwzględnienia oddziaływań [27]. Jednak w obecnym przypadku oddziaływania te ukryte są w zrenormalizowanych parametrach $\tilde{\Gamma}_{\beta}^{\sigma}$, $\tilde{\varepsilon}_{i\sigma}$ oraz $\tilde{t}$, od których zależy prawdopodobieństwo transmisji $T_{\sigma}(\varepsilon)$ i które są funkcjami napięcia bramkowego i transportowego. To postać Hamiltonianu (5.3) pozwoliła na zastosowanie takiej formuły na prąd. W temperaturze $T = 0\text{K}$, wyrażenie na prąd oraz liniową konduktancję przyjmują następujące postacie:

$$J_0 = \frac{e}{h} \sum_{\sigma} \int_{-eV/2}^{eV/2} d\varepsilon T_{\sigma}(\varepsilon), \quad (5.21)$$

oraz

$$G_{V \rightarrow 0} = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{dJ}{dV} = \frac{e^2}{h} \sum_{\sigma} T_{\sigma}(\varepsilon = 0). \quad (5.22)$$

5.3 Wyniki numeryczne

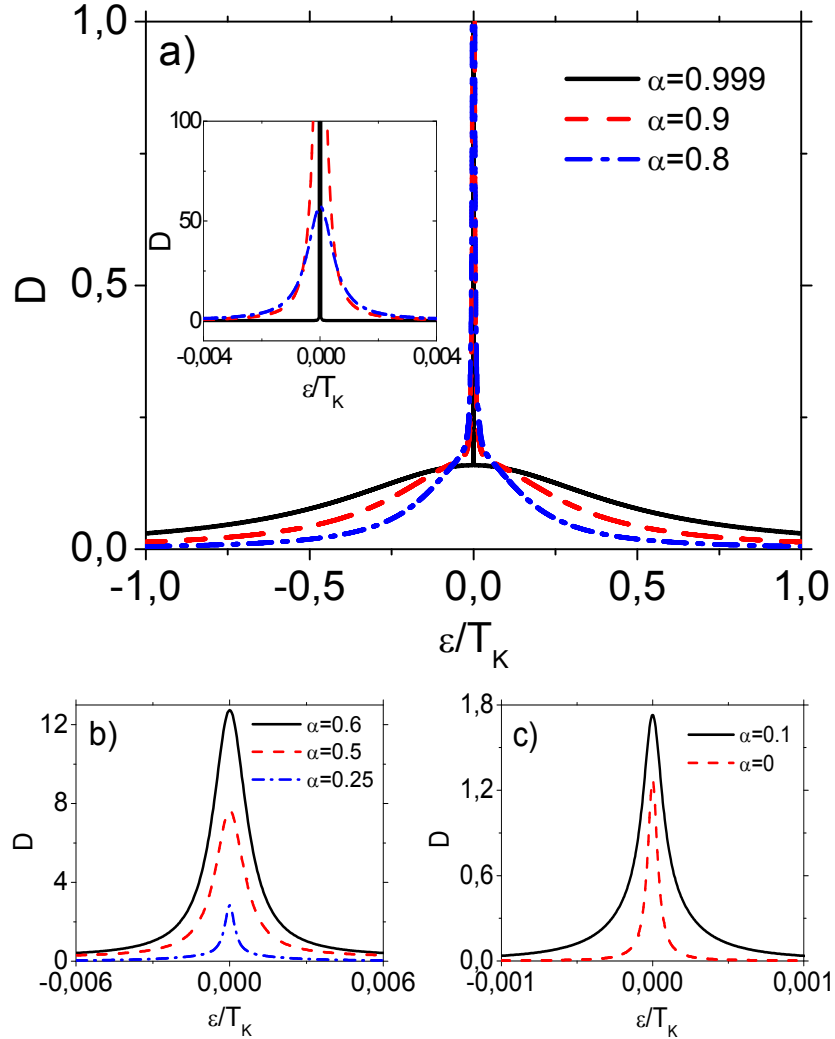
Chociaż powyższe wyprowadzenia były przeprowadzone dla układu, w którym istnieje możliwość przeskoków elektronów między kropkami kwantowymi, to dalsze rozważania będą dotyczyć przypadku $t = 0$. Założenie to jest kluczowe w celu zbadania rezonansów Dicke, gdzie obydwie rezonanse, odpowiadające stanowi wiążącemu i antywiązącemu, muszą nakładać się na siebie. Poza tym założono takie same i spinowo zdegenerowane poziomy energetyczne kropek kwantowych $\varepsilon_{1\sigma} = \varepsilon_{2\sigma} = \varepsilon_0 = -3\Gamma$, przy czym energia jest mierzona względem poziomu Fermiego w równowadze $\mu_L = \mu_R = 0$. Ponadto przyjęto szerokość pasma elektronowego równą $W = 124\Gamma$. Biorąc pod uwagę powyższe parametry można oszacować temperaturę Kondo T_K pojedynczej kropki kwantowej odłączonej od pozostałej ($t = 0$ oraz $\alpha = 0$), której wartość wynosi $T_K = 10^{-3}\Gamma$ ($k_B = 1$).

Rozważania zaczynamy od analizy lokalnej gęstości stanów D_i w stanie równowagi dla i -tej kropki kwantowej. Gęstość stanów wyrażona jest wzorem:

$$D_i = -\frac{\tilde{b}_i^2}{\pi} \sum_{\sigma} \Im[G_{i\sigma}^r(\varepsilon)], \quad (5.23)$$

gdzie $\Im[A]$ oznacza część urojoną z wielkości A . Ze względu na symetrię układu gęstości stanów w równowadze dla obydwu kropek są takie same, $D_1 = D_2 = D$. Należy jednak pamiętać, iż w ogólności $D_1 \neq D_2$.

Sprężenie kropek kwantowych poprzez elektrody prowadzi do powstania stanu wiążącego i antywiążącego, których poziomy energetyczne, dla przypadku $t = 0$, nakładają się na siebie. Różnica w szerokościach tych poziomów zależy od wielkości asymetrii sprzężeń kropek kwantowych z elektrodą (parametr α). W przypadku symetrycznym, $\alpha = 1$, stan antywiązący jest efektywnie "odłączony" od elektrod, podczas gdy stan wiążący ma szerokość rzędu 2Γ . Sytuacja jest podobna do tej z rozdziału 2 z tym, że obecnie obydwa rezonanse przyjmują maksimum dla tej samej energii.

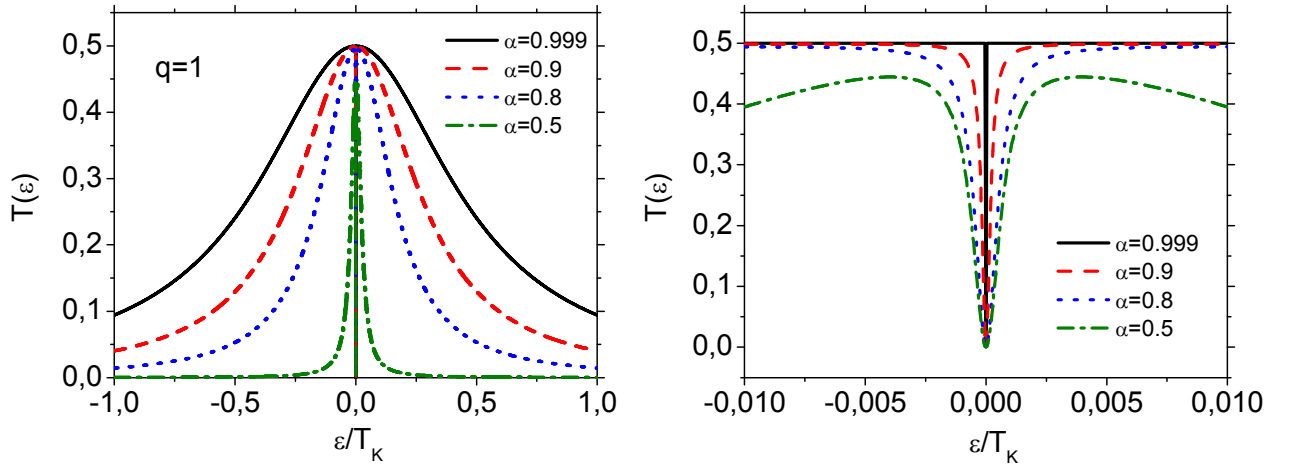


Rysunek 5.1: Gęstość stanów obydwu kropek kwantowych wyznaczona dla $q_L = q_R = 1$ oraz dla podanych wartości parametru α .

Podobną zależność wykazują rezonanse Kondo w gęstości stanów dla rozważanego przypadku. Na Rys. 5.1(a) pokazano, iż w przypadku małej asymetrii sprzężeń ($\alpha \approx 1$) szeroki oraz wąski pik Kondo w gęstości stanów nakładają się na siebie w punkcie $\varepsilon = 0$, będąc jednocześnie dobrze rozróżnialne. Taki kształt linii jest analogiczny do oryginalnej linii Dicke obserwowanej w układach atomów, których odległość była dużo mniejsza od długości fali emitowanej przez indywidualny atom. Wobec tego wąski pik Kondo w gęstości stanów może być powiązany ze stanem długożyjącym (*subtunelowym*), a szeroki pik Kondo ze stanem krótkożyjącym (*supertunelowym*). Stan Kondo odpowiadający wąskiemu rezonansowi staje się więc coraz to bardziej zlokalizowany na poziomie Fermiego jeśli $\alpha \rightarrow 1$. W przypadku granicznym ($\alpha = 1$) staje się *stanem związanym w kontinuum*. Warto również dodać, iż z obydwoma pikami Kondo można związać dwie różne temperatury Kondo: T_{K1} oraz T_{K2} . Kiedy asymetria sprzężenia danej elektrody z dwiema kropkami wzrasta, wówczas obydwa piki w gęstości stanów przestają być rozróżnialne. Wraz z obniżaniem wartości parametru α szerokość piku *subtunelowego* wzrasta, podczas gdy szerokość rezonansu *supertunelowego* maleje. W końcu, poniżej pewnej wartości

parametru asymetrii α , tylko jeden pik Kondo jest obserwowany w gęstości stanów [Rys. 5.1(b)], którego szerokość maleje z dalszym obniżaniem wartości parametru α [Rys. 5.1(c)].

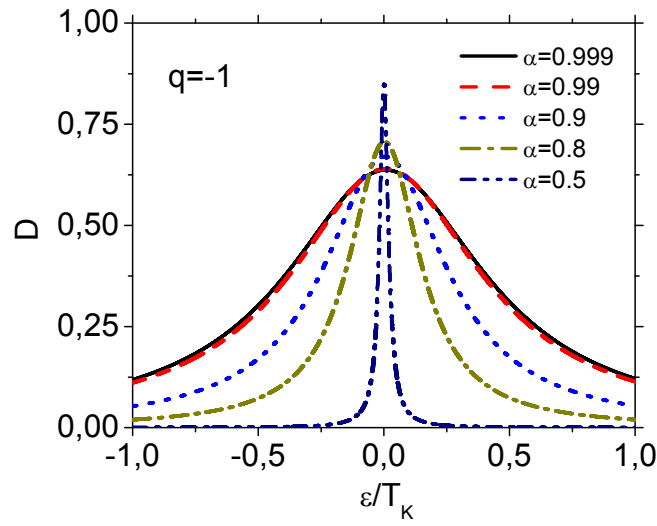
W celu analizy własności transportowych układu na Rys. 5.2 pokazano prawdopodobieństwo transmisji dla różnych wartości parametru asymetrii α . Charakterystyczną cechą prawdopodobieństwa transmisji jest pojawienie się minimum dla energii $\varepsilon = 0$, w którym transmisja zanika. Takie zachowanie się prawdopodobieństwa transmisji jest konsekwencją destruktywnej interferencji zachodzącej pomiędzy dwoma różnymi kanałami odpowiadającymi dwóm różnym rezansom Kondo. Ciekawy przypadek zachodzi dla symetrycznego układu ($\alpha = 1$), w którym minimum w transmisji znika, a $T(\varepsilon)$ przyjmuje kształt krzywej Lorentza. Znikanie minimum w prawdopodobieństwie transmisji dla $\alpha = 1$ może zostać wyjaśnione w bazie stanów wiążącego i antywiążącego. Transformacja Hamiltonianu (5.3) do tych stanów została przedstawiona w Dodatku A. Z wzoru (A.4) jasno wynika, iż w przypadku symetrycznym stan antywiązący jest całkowicie "odłączony" od elektrod. W rezultacie tego staje się *stanem związanym w kontinuum*, z którym nie można powiązać kanału transportowego. Wówczas jedyną możliwą drogą propagacji elektronów jest stan wiążący i interferencja kwantowa nie zachodzi.



Rysunek 5.2: Prawdopodobieństwo transmisji obliczone dla podanych wartości parametru asymetrii α , oraz dla $q_L = q_R = q = 1$. Rysunek na prawym panelu przedstawia transmisję w otoczeniu poziomu Fermiego.

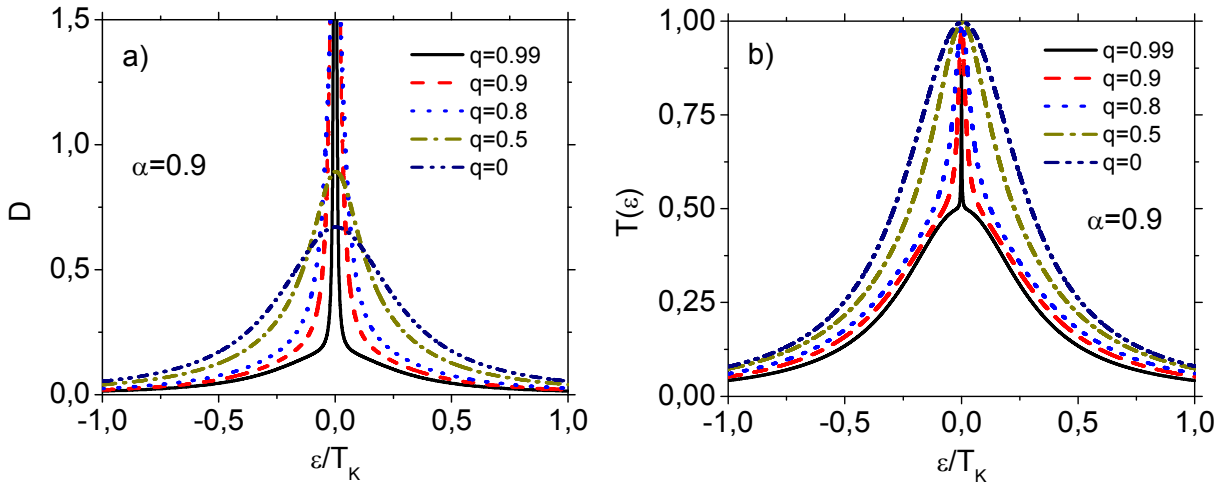
Jak już wspomniano wcześniej pozadiagonalne elementy macierzy sprzężenia układu kropek kwantowych z elektrodami mogą mieć ujemny znak. Obecnie zostanie przeanalizowana sytuacja, w której $q_L = -q_R = -1$. Ujemny znak parametru q_L ma dwie konsekwencje. Po pierwsze, efektywne oddziaływanie kropek kwantowych poprzez elektrody jest zmodyfikowane w porównaniu z przypadkiem gdy $q_L = q_R = 1$. Po drugie, warunki na interferencję kwantową fal elektronowych propagujących poprzez dwa różne kanały ulegają również zmianie. Wszystkie te zmiany warunków mają duży wpływ na własności transportowe układu. Na Rys. 5.3 została przedstawiona gęstość stanów dla różnych wartości parametru asymetrii α . W przeciwieństwie do przypadku $q_L = q_R = 1$, efekt Dicke nie wyłania się obecnie w gęstości stanów. W obecnym przypadku gęstość stanów posiada pojedyncze maksimum, którego szerokość maleje wraz ze wzrostem asymetrii sprzężeń, podczas gdy wysokość pik Kondo rośnie (gdy jego szerokość maleje). Jest to związane z faktem, iż sprzężenia stanu wiążącego i antywiążącego (Γ_+ oraz Γ_-) z elektrodami efektywnie nie zależą od elementów pozadiagonalnych macierzy sprzężenia, bowiem wkłady pozadiagonalne wchodzące do $\Gamma_{L\pm}$ oraz $\Gamma_{R\pm}$ nawzajem się kompensują.

W obecnym przypadku ($q_L = -q_R = -1$) transmisja jest całkowicie wygaszona w całym zakresie energii. Dzieje się tak bowiem kropki kwantowe są wówczas sprzężone z dwoma różnymi efektywnymi kanałami: jedna z kanałem związanym ze stanem symetrycznym w elektrodach $c_{\mathbf{k}\sigma+} = (c_{\mathbf{k}L\sigma} + c_{\mathbf{k}R\sigma})/\sqrt{2}$, a druga z kanałem odpowiadającym kanałowi antysymetrycznemu $c_{\mathbf{k}\sigma-} = (c_{\mathbf{k}L\sigma} - c_{\mathbf{k}R\sigma})/\sqrt{2}$. Brak bezpośredniego sprzężenia między kropkami (bowiem $t = 0$) sprawia, iż transport nie zachodzi.



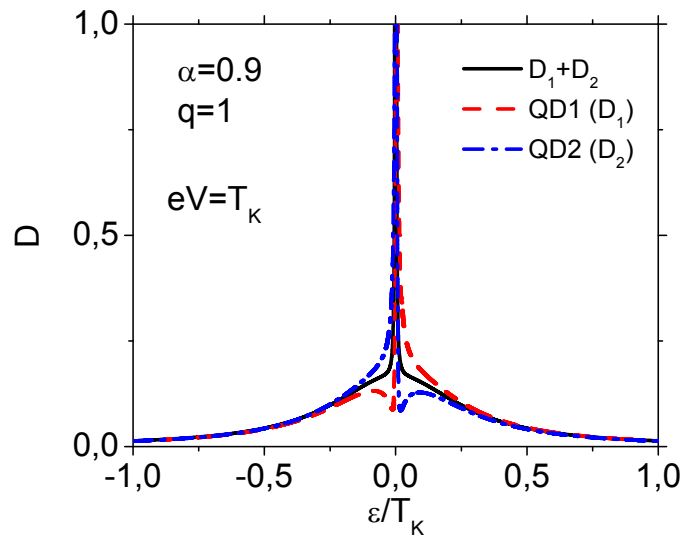
Rysunek 5.3: Gęstość stanów obydwu kropek kwantowych wyznaczona dla $q_L = -q_R = -1$, oraz dla różnych wartości parametru α .

Pozadiagonalne elementy macierzy sprzężenia mogą być również zredukowane w porównaniu z elementami diagonalnymi, a nawet całkowicie wygaszone. Wobec tego, interesujące jest zbadanie zachowania się własności transportowych układu dla różnych wartości parametru q z zakresu $0 \leq |q| < 1$. Na Rys. 5.4 przedstawiono gęstość stanów oraz prawdopodobieństwo transmisji dla coraz to mniejszych wartości parametru q ($q = q_L = q_R$). W obecnej sytuacji efekt Dicke jest wyraźny nie tylko w gęstości stanów, ale i w transmisji dla wartości $q \approx 1$ (ale nie $q = 1$). W przypadku, gdy $q < 1$ faza amplitudy transmisji w kanale antywiążącym nie zmienia się skokowo w $\varepsilon = 0$, jak to miało miejsce dla $q = 1$. Co więcej w punkcie $\varepsilon = 0$ faza funkcji elektronowej związanej z kanałem wiążącym i ta związana z kanałem antywiążącym są sobie równe. W związku z tym w obecnej sytuacji zachodzi interferencja konstruktywna i obserwuje się krzywą Dicke również w transmisji. Dla mniejszych wartości parametru q efekt Dicke zanika zarówno w gęstości stanów jak i w transmisji, gdzie tylko pojedyncze piki są obserwowane.



Rysunek 5.4: (a) Gęstość stanów obydwu kropek kwantowych, (b) prawdopodobieństwo transmisji wyznaczone dla różnych wartości parametru q ($q_L = q_R = q$), oraz dla $\alpha = 0.9$.

W zakresie nierównowagowym ($eV \neq 0$) sytuacja staje się bardziej skomplikowana, jako że tu gęstości stanów dla obydwu kropek są różne. Zostało to pokazane na Rys. 5.5 dla $q_L = q_R = 1$ i skończonej wartości napięcia transportowego. Jak widać całkowita gęstość stanów jest symetryczna, ale dla poszczególnych kropek symetria ta jest utracona i pik Kondo rozszczepia się na dwie składowe.



Rysunek 5.5: Nierównowagowa gęstość stanów kropki kwantowej QD1, oraz QD2 obliczona dla podanych wartości parametrów α , $q_L = q_R \equiv q$, oraz napięcia transportowego eV .

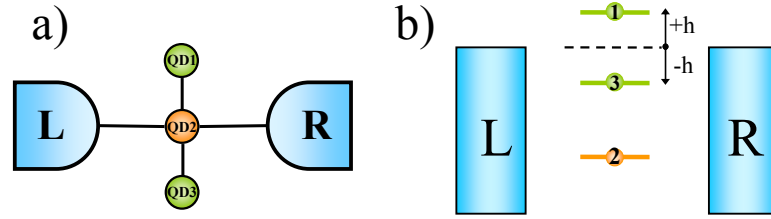
5.4 Podsumowanie

W rozdziale tym pokazano, że pośrednie oddziaływanie między kropkami kwantowymi odgrywa kluczową rolę w pojawieniu się efektu Dicke w rezonansie Kondo. W szczególności pokazano, że efekt Dicke w gęstości stanów i/lub transmisji jest widoczny tylko dla stosunkowo dużych wartości parametru $q_L = q_R = q$, tj. $q \approx 1$. Poza tym dla $q = 1$ transmisja przejawia antyrezonansowe zachowanie, które znika w przypadku symetrycznego układu ($\alpha = 1$) i co powiązane z pojawieniem się *stanu związanego w kontinuum*. Ponadto pokazano, że przeciwny znak parametrów q_L i q_R niszczy efekt Dicke.

Rozdział 6

Rezonans Dicke - Kondo w transporcie przez układ trzech kropek kwantowych

Rozdział ten będzie poświęcony rezonansom Dicke – Kondo, które mogą być zaobserwowane eksperymentalnie w układzie złożonym z trzech kropek kwantowych połączonych z niemagnetycznymi metalicznymi elektrodami, pokazanym na Rys. 6.1. Geometria rozpatrywanego tu układu jest więc analogiczna do tej rozważanej w rozdziale 3, z tym, że obecnie kropka kwantowa będąca bezpośrednio sprzężona z elektrodami znajduje się w reżimie Kondo, podczas gdy dla pozostałych dwóch kropek $U_1 = U_3 = 0$, dołączonych tunelowo do kropki centralnej.



Rysunek 6.1: (a) Schemat układu kropek kwantowych sprzężonych z niemagnetycznymi elektrodami. Tylko kropka kwantowa QD2 jest dołączona do elektrod poprzez sprzężenie Γ^α ($\alpha = L, R$), (b) Struktura poziomów energetycznych kropek kwantowych osadzonych między elektrodami (L, R).

6.1 Model

W takim przypadku układ jest opisany Hamiltonianem (3.1), gdzie podstawiono $U_1 = U_3 = 0$:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha\sigma} c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha\sigma} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + U n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} \\ & + \sum_{j(=1,3)} \sum_{\sigma} (t_{j2\sigma} d_{2\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{h.c.}) + \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sum_{\sigma} (V_{\mathbf{k}\sigma}^\alpha c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger d_{2\sigma} + \text{h.c.}). \end{aligned} \quad (6.1)$$

Podobnie jak w Rozdziale 5 obliczenia zostaną wykonane w przypadku silnych korelacji kulombowskich na kropce kwantowej QD2 ($U \rightarrow \infty$), co pozwoli na zastosowanie metody *bozonów pomocniczych* w tej granicy oddziaływań. W obecnym przypadku operatory pomocnicze wprowadza się tylko dla kropki kwantowej QD2, tzn., zastępuje się operator $d_{2\sigma}^\dagger$ ($d_{2\sigma}$) przez $f_{2\sigma}^\dagger b_2$ ($b_2^\dagger f_{2\sigma}$), gdzie $b_2^\dagger$ ($f_{2\sigma}^\dagger$) jest bozonowym (pseudofermionowym) operatorem kreującym stan pusty

(pojedynczo obsadzony elektronem o spinie σ) na kropce kwantowej QD2. Relacja zupełności dla centralnej kropki przybiera postać:

$$\hat{Q} = \sum_{\sigma} f_{2\sigma}^{\dagger} f_{2\sigma} + b_2^{\dagger} b_2 = 1. \quad (6.2)$$

Wyrażając Hamiltonian (6.1) poprzez nowe operatory, a następnie dokonując przybliżenia pola średniego dla pola bozonowego ($b_2(t)/\sqrt{N} \rightarrow \langle b_2(t) \rangle / \sqrt{N} \equiv \tilde{b}_2$) otrzymuje się Hamiltonian efektywny postaci:

$$\begin{aligned} \tilde{H}^{MFA} = & \sum_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha\sigma} c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\alpha\sigma} + \sum_{i=1,3} \sum_{\sigma} \varepsilon_{i\sigma} d_{i\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma} + \sum_{\sigma} \tilde{\varepsilon}_{2\sigma} f_{2\sigma}^{\dagger} f_{2\sigma} + \sum_{j=1,3} \sum_{\sigma} (\tilde{t}_{j2\sigma} f_{2\sigma}^{\dagger} d_{j\sigma} + \text{H.c.}) \\ & + \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sum_{\sigma} (\tilde{V}_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^{\dagger} f_{2\sigma} + \text{H.c.}) + \tilde{\lambda} (N\tilde{b}_2^2 - 1), \end{aligned} \quad (6.3)$$

gdzie wprowadzono oznaczenia $\tilde{t}_{j2\sigma} = \tilde{b}_2 t_{j2\sigma}$, $\tilde{V}_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha} = V_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha} \tilde{b}_2$ oraz $\tilde{\varepsilon}_{2\sigma} = \varepsilon_{2\sigma} + \tilde{\lambda}$.

W celu znalezienia nieznanymi parametrów $\tilde{b}_2$ oraz $\tilde{\lambda}$ należy skorzystać z równania (6.2) oraz zapisać równanie ruchu dla operatora bozonowego $b_2(t)$. Następnie postępując jak w poprzednim rozdziale otrzymuje się parę równań samozgodnych:

$$\tilde{b}_2^2 - i \sum_{\sigma} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi N} \langle \langle f_{2\sigma} | f_{2\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle_{\varepsilon}^{<} = \frac{1}{N}, \quad (6.4)$$

$$-i \sum_{\sigma} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} (\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{2\sigma}) \langle \langle f_{2\sigma} | f_{2\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle_{\varepsilon}^{<} + N\lambda \tilde{b}_2^2 = 0, \quad (6.5)$$

gdzie $\langle \langle f_{2\sigma} | d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle_{\varepsilon}^{<}$ jest korelacyjną funkcją Greena zdefiniowaną w następujący sposób $G_{2j}^{<}(t, t') \equiv \langle \langle f_{2\sigma}(t) | d_{j\sigma}^{\dagger}(t') \rangle \rangle^{<} = i \langle d_{j\sigma}^{\dagger}(t') f_{2\sigma}(t) \rangle$. Powyższe równania pozwalają wyznaczyć nieznanne parametry, przy czym aby z nich skorzystać należy znać jawną postać funkcji Greena $\langle \langle f_{2\sigma} | f_{2\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle_{\varepsilon}^{<}$. Funkcja ta, jak i opóźniona funkcja Greena mogą zostać otrzymane z odpowiednich równań ruchu. W wyniku odpowiednich obliczeń otrzymuje się opóźnioną ($G_{22\sigma}^r(\varepsilon)$) i korelacyjną ($G_{22\sigma}^{<}(\varepsilon)$) funkcję Greena:

$$G_{22\sigma}^r(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{2\sigma} + i\tilde{\Gamma}_{\sigma} - \frac{\tilde{t}_{32\sigma}^2}{\varepsilon - \varepsilon_{3\sigma}} - \frac{\tilde{t}_{12\sigma}^2}{\varepsilon - \varepsilon_{1\sigma}}}, \quad (6.6)$$

$$G_{22\sigma}^{<}(\varepsilon) = \frac{2i[f_L(\varepsilon)\tilde{\Gamma}_{\sigma}^L + f_R(\varepsilon)\tilde{\Gamma}_{\sigma}^R]}{\left| \varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{2\sigma} + i\tilde{\Gamma}_{\sigma} - \frac{\tilde{t}_{32\sigma}^2}{\varepsilon - \varepsilon_{3\sigma}} - \frac{\tilde{t}_{12\sigma}^2}{\varepsilon - \varepsilon_{1\sigma}} \right|^2}, \quad (6.7)$$

gdzie $f_{\alpha}(\varepsilon)$ oznacza rozkład Fermiego – Diraca dla elektrody α , $\tilde{\Gamma}_{\sigma}^{\alpha} = \tilde{b}_2^2 \Gamma_{\sigma}^{\alpha}$ oraz $\tilde{\Gamma}_{\sigma} = \tilde{\Gamma}_{\sigma}^L + \tilde{\Gamma}_{\sigma}^R$ są zrenormalizowanymi parametrami opisującymi efektywne sprzężenie kropki kwantowej QD2 z elektrodami.

Prąd oraz liniowa konduktancja otrzymane są z wzorów (5.21) oraz (5.22), a konduktancja różniczkowa jest zdefiniowana jako dJ/dV . Dla rozważanego obecnie układu prawdopodobieństwo transmisji dane jest wzorem $T_{\sigma}(\varepsilon) = 4G_{22\sigma}^a \tilde{\Gamma}_{\sigma}^R G_{22\sigma}^r \tilde{\Gamma}_{\sigma}^L$. Dla prostoty obliczenia zostały wykonane w temperaturze $T = 0$ K, gdzie prąd i liniowa konduktancja wyrażają się odpowiednio wzorami (5.21) i (5.22).

6.2 Wyniki numeryczne

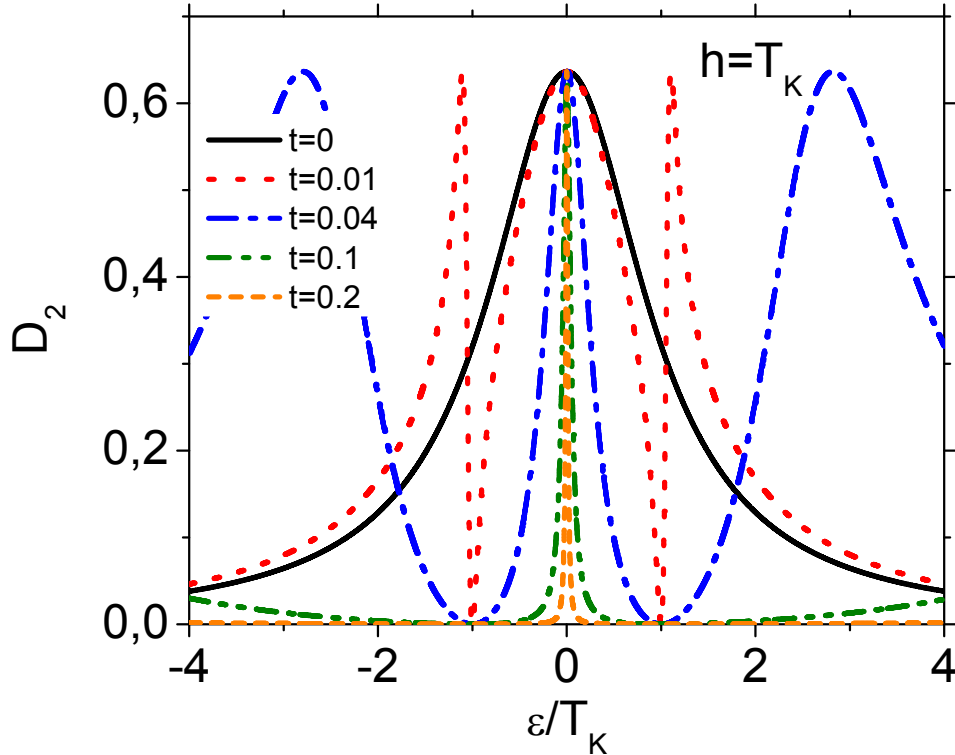
W obliczeniach numerycznych założono, iż poziomy energetyczne kropek kwantowych, całki przeskoków między nimi oraz sprzężenia z elektrodami są niezależne od orientacji spinu $\varepsilon_{i\sigma} = \varepsilon_i$ (dla $i = 1, 2, 3$), $t_{j2\sigma} = t_{j2}$ dla $j = 1, 3$, oraz $\Gamma_{\sigma}^{\alpha} = \Gamma^{\alpha}$ (dla $\alpha = L, R$). Ponieważ kropka kwantowa QD2 ma znajdować się w reżimie Kondo, to jej poziom usytuowany jest głęboko

poniżej energii Fermiego elektrod w stanie równowagowym ($\mu_L = \mu_R = 0$) i wybrano wartość $\varepsilon_2 = -3.5\Gamma$. Natomiast poziomy energetyczne pozostałych kropek, ε_1 oraz ε_3 , mogą być w ogólności dowolnie i niezależnie zmieniane poprzez przyłożenie odpowiednich potencjałów do elektrod bramkujących. W przypadku symetrycznego rozłożenia poziomów energetycznych tych kropek można wprowadzić następującą parametryzację: $\varepsilon_1 = -\varepsilon_3 \equiv h$. Dla szerokości pasma $D = 60\Gamma$ ($\Gamma = \Gamma^L + \Gamma^R$) oszacowana temperatura Kondo T_K centralnej kropki dla $t_{12} = t_{32} = 0$ wynosi $T_K = 10^{-3}\Gamma$ ($k_B \equiv 1$).

6.2.1 Gęstość stanów

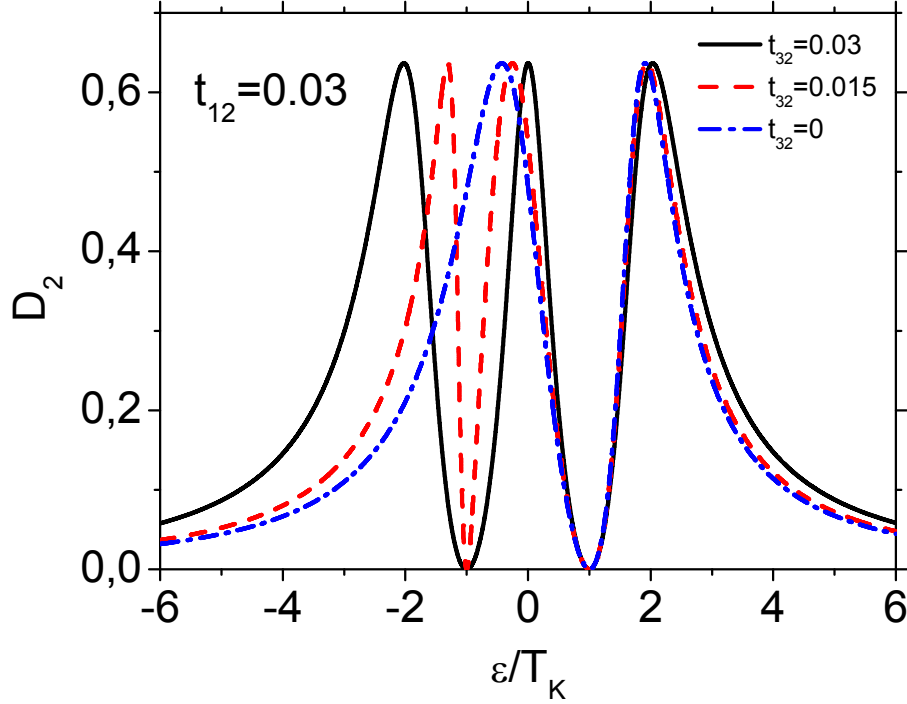
Analizę zjawisk transportowych w rozważanym układzie zaczniemy od analizy lokalnej gęstości stanów kropki kwantowej QD2 w stanie równowagowym. Gęstość stanów D_2 może być obliczona według wzoru (5.23) podstawiając $i = 2$.

Gęstość stanów D_2 niesie podstawowe informacje o rezonansie Kondo występującym w tym układzie i wpływie pozostałych kropek na ten rezonans. Początkowo rozpatrywana jest sytuacja, w której położenie poziomów energetycznych doczepionych bocznie kropek jest ustalone, a zmianie ulegają jedynie sprzężenia między centralną kropką a kropkami bocznymi. Na Rys. 6.2 przedstawiono gęstość stanów dla centralnej kropki dla kilku wartości sprzężeń $t_{12} = t_{32} \equiv t$ i dla ustalonych położenia poziomów kropek QD1 oraz QD3 ($h = T_K$). Gęstość stanów dla centralnej kropki odłączonej od pozostałych kropek ($t = 0$) charakteryzuje się pojedynczym pikiem usytuowanym na poziomie Fermiego. Jednak, gdy sprzężenie t staje się niezerowe, wówczas pojawiają się dwa dodatkowe asymetryczne piki boczne rozłożone symetrycznie względem centralnego maksimum Rado-Suhla. Ponadto, ze wzrostem wartości sprzężenia t piki satelitarne odsuwają się równomiernie od piku centralnego. W tym samym czasie szerokości rezonansów bocznych rosną, podczas gdy szerokość centralnego maksimum maleje. Dla energii odpowiadających położeniom poziomów kropek bocznych, $\varepsilon = \pm h$, gęstość stanów zanika. Zjawisko to jest rezultatem interferencji destruktywnej zachodzącej między stanem Kondo i stanami zlokalizowanymi na bocznych kropkach.



Rysunek 6.2: Gęstość stanów kropki kwantowej QD2 wyznaczona dla podanych wartości parametru $t_{12} = t_{32} = t$, oraz dla $\varepsilon_1 = -\varepsilon_3 \equiv h = T_K = 0.001\Gamma$. Parametr t wyrażony jest w jednostkach Γ .

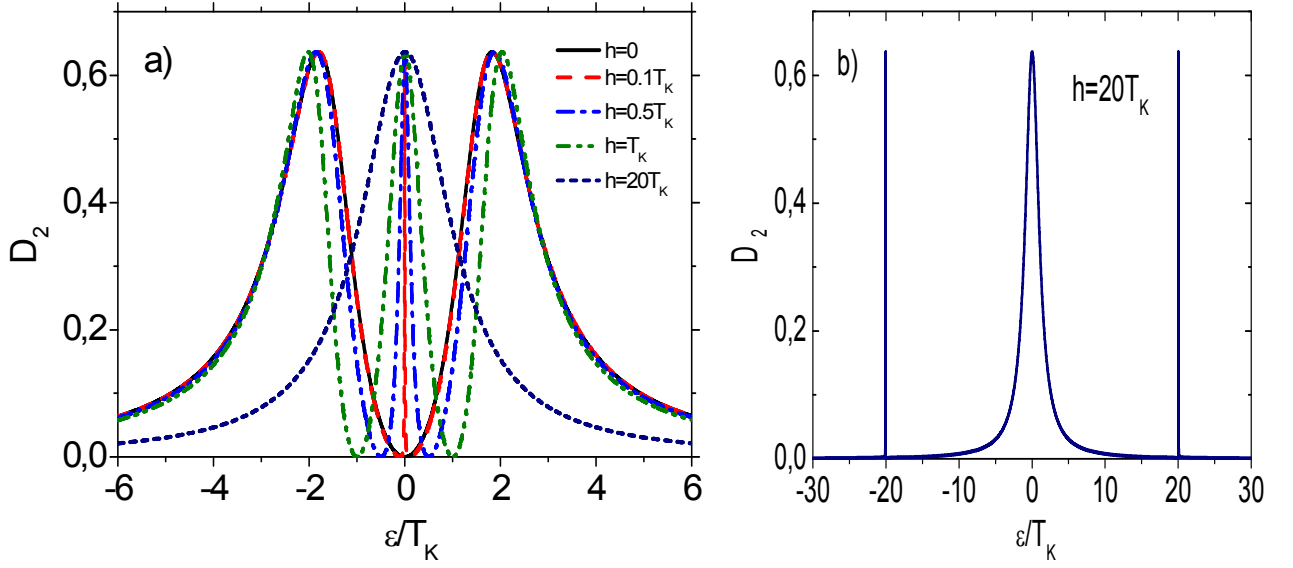
Na Rys. 6.3 przedstawiono gęstość stanów D_2 w sytuacji, gdy sprzężenie kropki QD1 z centralną kropką jest ustalone ($t_{12} = 0.03\Gamma$), natomiast sprzężenie między kropkami QD2 i QD3 może być płynnie zmieniane od wartości równej zero do $t_{32} = t_{12} = 0.03\Gamma$. W przypadku, gdy jedna z bocznych kropek jest odłączona od centralnej kropki ($t_{32} = 0$) to w gęstości stanów D_2 obserwuje się dwa piki. Obydwa piki wykazują asymetrię. Kiedy tylko jedna kropka boczna jest dołączona do kropki centralnej, gęstość stanów może zostać rozłożona na dwie składowe: jedna o kształcie linii Breit-Wignera, a druga o kształcie linii Fano. Dołączenie kolejnej kropki do kropki centralnej powoduje pojawienie się drugiego piku bocznego. W końcu, gdy sprzężenia są równe, $t_{32} = t_{12}$, gęstość stanów staje się symetryczna a centralny pik Kondo staje się węższy.



Rysunek 6.3: Gęstość stanów kropki kwantowej QD2 wyznaczona dla podanych wartości parametru t_{32} przy ustalonej wartości parametru $t_{12} = 0.03\Gamma$, oraz dla $\varepsilon_1 = -\varepsilon_3 \equiv h = T_K = 0.001\Gamma$. Parametr t_{32} wyrażony jest w jednostkach Γ .

Na Rys. 6.4 została zaprezentowana gęstość stanów D_2 dla różnych położań poziomów energetycznych bocznych kropek, podczas gdy ich sprzężenia z centralną kropką zostały ustalone na $t_{12} = t_{32} = t = 0.03\Gamma$. Jak już wcześniej wspomniano, poziomy energetyczne bocznych kropek są symetrycznie rozmieszczone względem poziomu Fermiego elektrod w stanie równowagowym, a dokładnie w taki sposób, iż $\varepsilon_1 = h$ oraz $\varepsilon_3 = -h$. Dla niezerowej wartości parametru h w gęstości stanów D_2 można wyróżnić trzy dobrze zdefiniowane maksima, jakie również były widoczne na Rys. 6.2 dla $t \neq 0$. Główny pik Kondo jest ulokowany na poziomie Fermiego elektrod ($\varepsilon = 0$). Szerokość piku centralnego staje się coraz mniejsza wraz z obniżaniem separacji między poziomami bocznych kropek kwantowych, a dla bardzo małych wartości parametru h ($h \ll T_K$) przechodzi niemal w krzywą typu δ -Dirac'a. Takie zachowanie się centralnego rezonansu oznacza, iż stan Kondo związany z tym maksimum staje się coraz to bardziej zlokalizowany na poziomie Fermiego elektrod. W odniesieniu do efektu Dicke można powiązać centralny wąski rezonans w gęstości stanów ze stanem długożyjącym (*subtunelowym*), podczas gdy pozostałe dwa piki odnoszą się do krótkożyjących (*supertunelowych*) stanów. Interesujący jest fakt, iż można obserwować przejście z modu *subtunelowego* do modu *supertunelowego* poprzez zmianę odległości między poziomami energetycznymi bocznych kropek kwantowych a poziomem Fermiego. Przykładowo stan odpowiadający rezonansowi z poziomu Fermiego jest *subtunelowy* dla małych wartości parametru h ($h \ll T_K$), a staje się stanem *supertunelowym* dla większych wartości h ($h \gg T_K$). Zachowanie się pików bocznych jest odwrotne: dla małych wartości h stają się modami *supertunelowymi* podczas gdy dla większych wartości h *subtunelowymi*. W sytuacji,

gdy poziomy energetyczne bocznych kropek pokrywają się z poziomem Fermiego elektrod, tj., dla $h = 0$, centralny pik Kondo w gęstości stanów zupełnie zanika. Dzieje się tak, bowiem rezonans Kondo (zlokalizowany na centralnej kropce) interferuje destruktywnie z rezonansami związanymi z dyskretnymi stanami kropek bocznych (zhybrydyzowanych ze stanami elektrod poprzez centralną kropkę).



Rysunek 6.4: (a) Gęstość stanów kropki kwantowej QD2 wyznaczona dla podanych wartości parametru h ($h = \varepsilon_1 = -\varepsilon_3$), oraz dla $t_{12} = t_{32} = t = 0.03\Gamma$; (b) Gęstość stanów dla przypadku $h = 20T_K$ wykreślona dla większego zakresu energii niż na Rys 6.4 (a), tak aby widoczne były piki boczne.

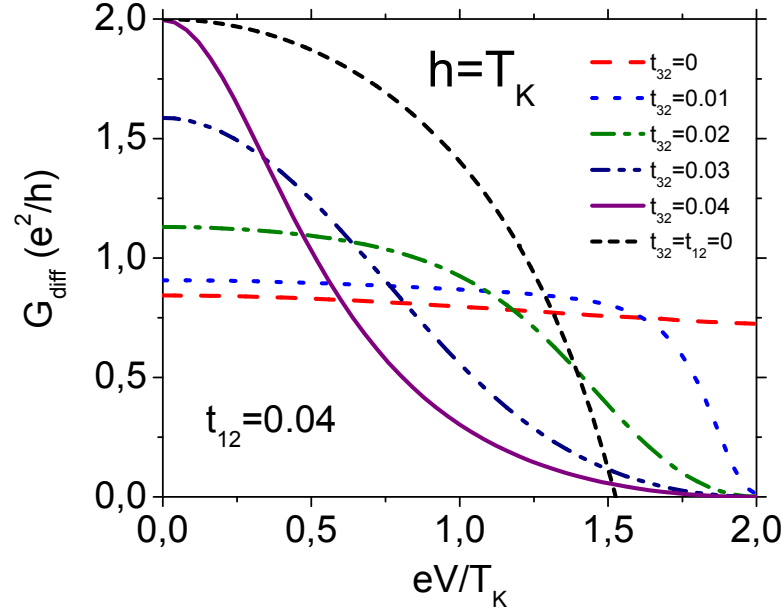
Jak widać na Rys. 6.4 pik centralny w gęstości stanów staje się coraz to węższy kiedy poziomy energetyczne bocznych kropek zbliżają się coraz bardziej do poziomu Fermiego elektrod. Można powiedzieć, iż pik Kondo jest "ściskany" przez boczne kropki kwantowe. Jak już wspomniano, zważanie się piku Kondo jest wynikiem wszystkich wirtualnych procesów prowadzących do rezonansu Kondo, zmodyfikowanymi przez sprzężenie z bocznymi kropkami. Takie zachowanie jest rezultatem interferencji pomiędzy członami związanymi z przejściami elektronowymi między centralną kropką a elektrodami, oraz między centralną kropką a kropkami bocznymi. Wówczas to, dla $h = 0$, wkłady pochodzące od stanów bocznych kropek mogą być niezerowe na poziomie Fermiego. Natomiast stan molekularny odpowiadający energii z poziomu Fermiego jest zlokalizowany wówczas na bocznych kropkach kwantowych będąc całkowicie "odłączony" od elektrod (*stan związany w kontinuum* [91]).

Z drugiej strony, dla większych wartości separacji między poziomami bocznych kropek ($h \gg T_K$), piki satelitarne stają się węższe, natomiast pik centralny jest wówczas stosunkowo szeroki. Przypomina to sytuację obserwowaną w rozdziale 3, choć obecnie szerokość centralnego piku jest niemonotoniczną funkcją separacji poziomów h , zależącą od parametrów samozgodnych $\tilde{b}_2$ oraz $\tilde{\lambda}$. Szerokość centralnego piku wzrasta ze wzrostem separacji poziomów h (dla małych wartości h) osiągając maksimum, a następnie powoli spada (nawet dla dużych wartości h). Fakt ten sugeruje, iż temperatura Kondo również wykazuje analogiczne, niestandardowe zachowanie. Ostatnio zostało to potwierdzone poprzez obliczenia wykorzystujące numeryczną grupę renormalizacji [92]. Poza tym, pojawia się charakterystyczny szeroki zakres prawie znikającej gęstości stanów pomiędzy centralnym maksimum a bocznymi rezonansami dla stosunkowo dużych wartości separacji poziomów.

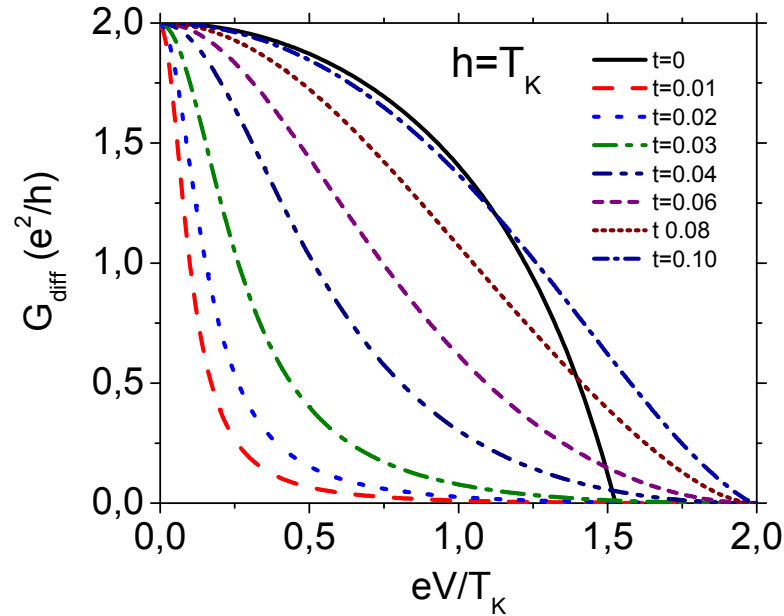
6.2.2 Konduktancja różniczkowa

Rozważania w tej części dotyczyć będą transportu w reżimie nierównowagowym. Na Rys.6.5 pokazano konduktancję różniczkową w zależności od przyłożonego napięcia transportowego w

sytuacji, gdy kropka kwantowa QD1 sprzężona jest z centralną kropką, $t_{12} = 0.04\Gamma$, podczas gdy sprzężenie kropki QD3 można stopniowo zmieniać. W związku z dodatkowym kanałem wytworzonym na poziomie Fermiego, powstałym dzięki istnieniu rezonansu Kondo, konduktancja różniczkowa osiąga wartość maksymalną, równą dwóm kwantom konduktancji $2e^2/h$ w granicy zerowego napięcia dla przypadku $t_{12} = t_{32} = 0$. Taka cecha konduktancji różniczkowej jest dobrze znana w transporcie przez pojedynczą kropkę w reżimie Kondo [80]. Jednak, gdy jedna z kropek bocznych zostanie dołączona (np. QD1), wówczas zeronapięciowa anomalia Kondo zostaje tłumiona w wyniku współzawodnictwa efektu Fano i zjawiska Kondo [93]. Dla wystarczająco dużej wartości sprzężenia t_{12} , zeronapięciowa anomalia znika. Dołączenie kolejnej kropki (QD3) sprawia, iż opisany obraz jeszcze bardziej się komplikuje.



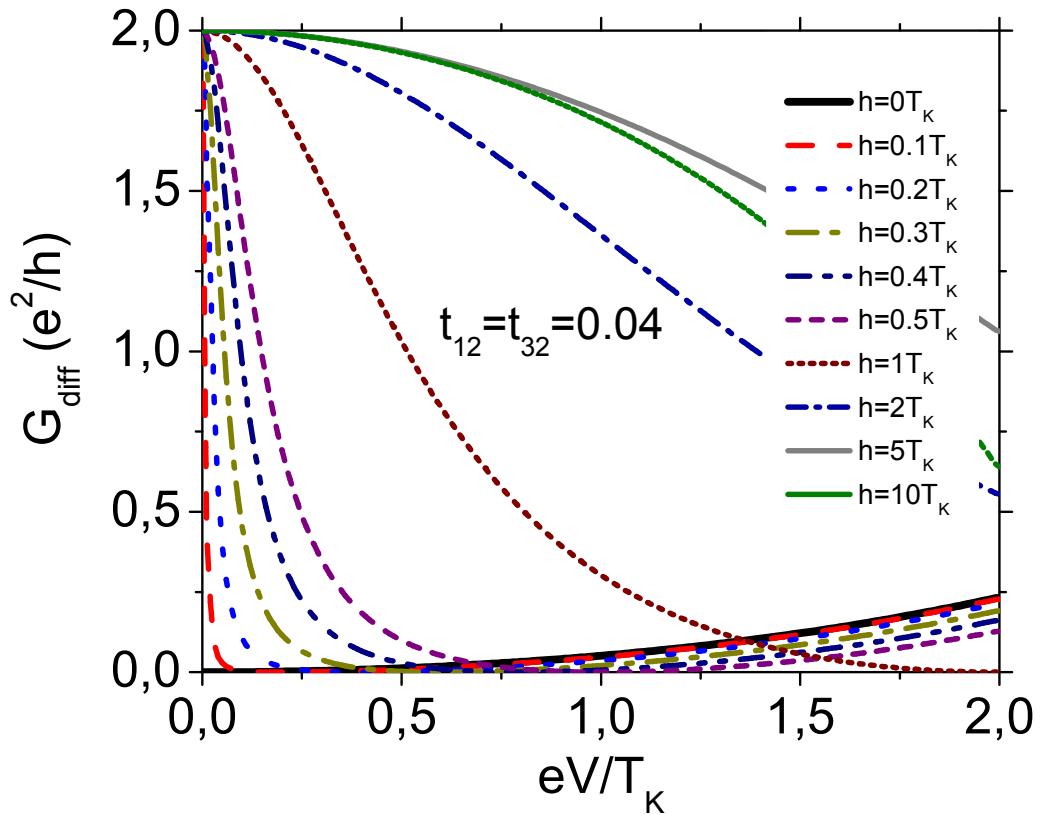
Rysunek 6.5: Konduktancja różniczkowa w funkcji przyłożonego napięcia transportowego wyznaczona dla podanych wartości parametru tunelowego t_{32} przy ustalonej wartości parametru $t_{12} = 0.04\Gamma$. Parametr t_{32} wyrażony jest w jednostkach Γ .



Rysunek 6.6: Zależność konduktancji różniczkowej od przyłożonego napięcia transportowego wyznaczona dla podanych wartości parametru tunelowego $t = t_{12} = t_{32}$. Parametr t wyrażony jest w jednostkach Γ .

Z Rys.6.5 wynika, iż ze wzrostem sprzężenia t_{32} kropki kwantowej QD3 do centralnej kropki, zeronapięciowa anomalia Kondo ulega niejako odrodzeniu i która dla $t_{32} = t_{12}$ ponownie osiąga wartość $2e^2/h$. Jednakże, rywalizacja między efektem Dicke i Kondo prowadzi do szybszego spadku konduktancji dla małych napięć i wolniejszego dla większych napięć. W rezultacie konduktancja jest niezerowa dla zakresu napięć, gdzie konduktancja pojedynczej kropki Kondo odizolowanej od pozostałych już znika. Takie zachowanie jest konsekwencją zwięźania się centralnego piku Kondo w gęstości stanów i pojawieniem się dwóch rezonansów satelitarnych. Widać to wyraźnie na Rys. 6.6, gdzie przedstawiono konduktancję różniczkową dla kilku wartości parametrów sprzężenia $t_{32} = t_{12} = t$ bocznych kropek z centralną. Warto wspomnieć, iż przy takim symetrycznym sprzężeniu intensywność zeronapięciowej anomalii Kondo nie zależy od wielkości sprzężenia t , co jest odzwierciedleniem zachowania się gęstości stanów z Rys. 6.2.

Podobne zachowanie obserwuje się w sytuacji gdy przy ustalonym sprzężeniu $t_{12} = t_{32} \equiv t$ zmienia się separacja między poziomami bocznych kropek kwantowych [Rys. 6.7]. Dla większych wartości h konduktancja różniczkowa maleje monotonicznie wraz ze wzrostem napięcia transportowego. Natomiast dla małych wartości parametru h konduktancja różniczkowa jest niemonotoniczną funkcją napięcia. W zakresie niskich napięć konduktancja maleje szybko osiągając minimum dla pewnej wartości napięcia, a następnie powoli wzrasta z dalszym wzrostem napięcia. Takie zachowanie wynika z faktu, iż piki satelitarne w gęstości stanów rozsuwają się od siebie wraz ze wzrostem parametru h . Dlatego też, dla większych wartości parametru h piki boczne w gęstości stanów nie uczestniczą w transporcie (w rozpatrywanym zakresie napięć). Natomiast dla małych h , boczne rezonanse wchodzą do okna transportowego prowadząc do wzrostu konduktancji powyżej pewnego napięcia ($eV \gtrsim 2h$). Poza tym dla $h = 0$ zeronapięciowa anomalia jest całkowicie wygaszona, a konduktancja rośnie bardzo wolno ze wzrostem napięcia transportowego. W tym przypadku wkład do transportu pochodzi tylko od rezonansów bocznych, a wygaszenie jest rezultatem zaniku piku Kondo w gęstości stanów w związku z rywalizacją między rezonansami Dicke i Kondo.



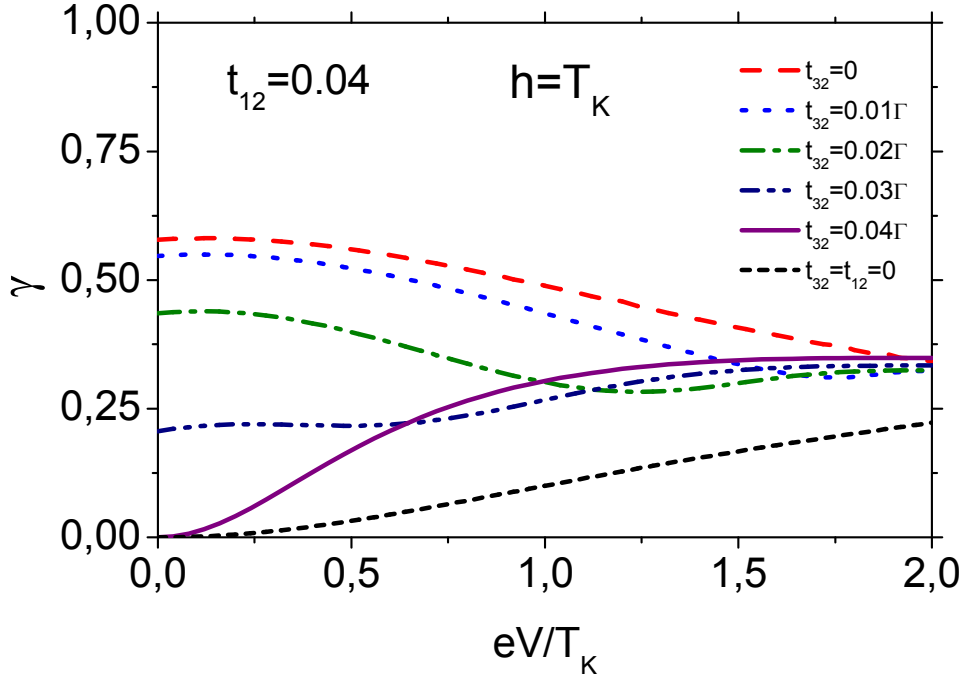
Rysunek 6.7: Konduktancja różniczkowa w funkcji przyłożonego napięcia transportowego wyznaczona dla podanych wartości położenia poziomów bocznych kropek kwantowych h , $\varepsilon_1 = -\varepsilon_3 = h$. Parametr $t_{12} = t_{32} = t$ wyrażony jest w jednostkach Γ .

6.2.3 Szum

Jedynym niezerowym wkładem do szumów w transporcie elektronowym w temperaturze $T = 0$ K jest szum śrutowy, podczas gdy szum termiczny jest całkowicie wytłumiony. W związku z postacią Hamiltonianu (6.3) szum śrutowy dla częstości $\omega = 0$ przyjmuje następującą postać [94]:

$$S = \frac{2e^2}{h} \int_{-eV/2}^{eV/2} d\varepsilon T_\sigma(\varepsilon) [1 - T_\sigma(\varepsilon)]. \quad (6.8)$$

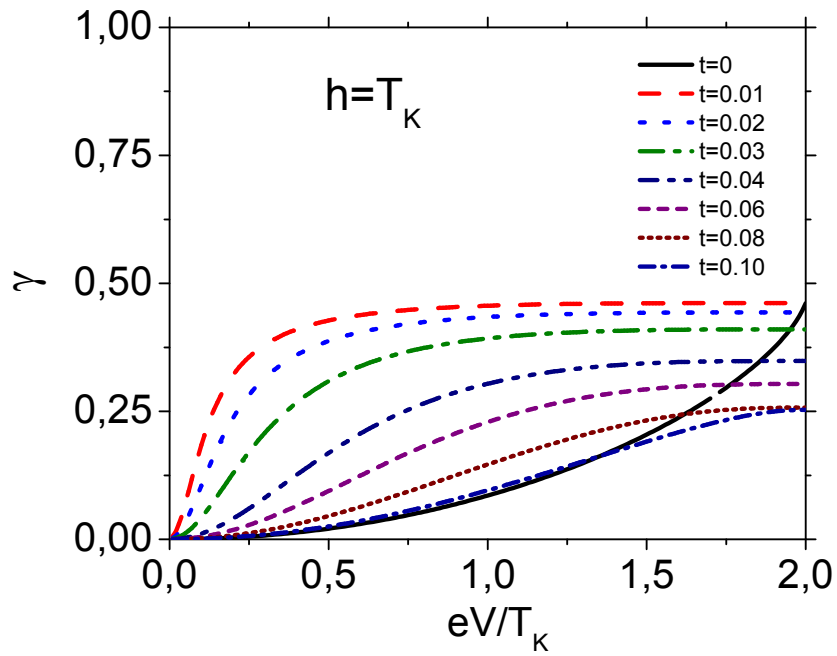
Odchylenia wartości szumu śrutowego S od wartości Poissona równej $S_P = 2eJ$ wyrażane są zwykle przez czynnik Fano $\gamma = S/2eJ$, który z definicji dla szumu poissonowskiego równa się jedności.



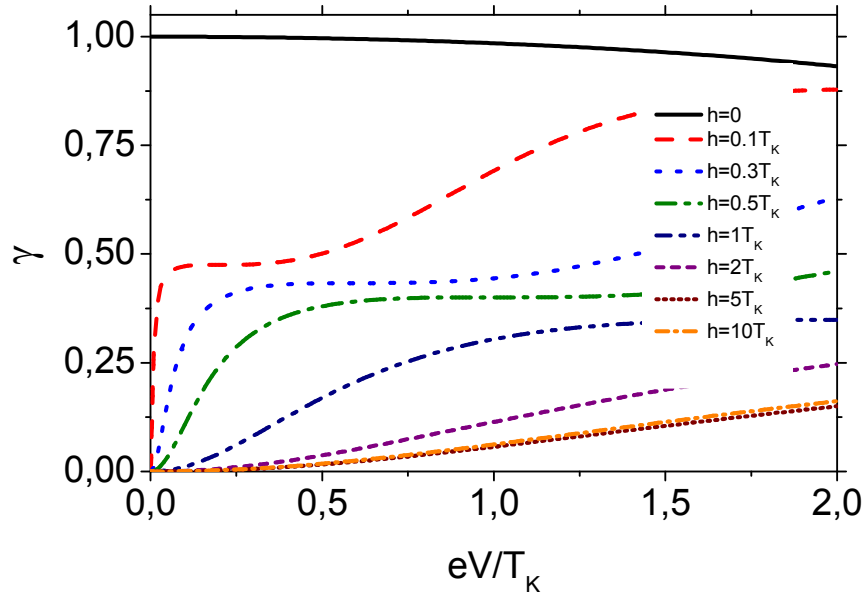
Rysunek 6.8: Współczynnik Fano w funkcji przyłożonego napięcia transportowego wyznaczony dla podanych wartości parametru tunelowego t_{32} przy ustalonej wartości parametru $t_{12} = 0.04\Gamma$. Parametr t_{32} wyrażony jest w jednostkach Γ .

Na Rys. 6.8 przedstawiono zależność czynnika Fano od przyłożonego napięcia transportowego dla różnych wartości parametru sprzężenia t_{32} , podczas gdy parametr t_{12} ma stałą wartość równą 0.04Γ . W przypadku geometrii typu T (gdy jedna kropka jest całkowicie odłączona od kropki centralnej, $t_{32} = 0$), procesy interferencji kwantowej odgrywają znaczącą rolę w transporcie prowadząc do wygaszania zeronapieciowej anomalii. Znajduje to również swoje odbicie w charakterystyce szumu. W granicy $V \rightarrow 0$ czynnik Fano jest większy od zera, co świadczy o osłabieniu rezonansu Kondo na poziomie Fermiego w związku z interferencją typu Fano. Wraz ze wzrostem wartości parametru t_{12} (ale wciąż dla $t_{32} = 0$), interferencja Fano "wygrywa" z efektem Kondo i wówczas czynnik Fano γ dąży do wartości jednostkowej. Natomiast gdy sprzężenie kropki kwantowej QD3 do kropki QD2 jest włączone, wówczas zeronapieciowa wartość czynnika Fano maleje, aby w końcu dla symetrycznego sprzężenia, $t_{12} = t_{32}$, osiągnąć wartość równą zero – jak dla pojedynczej kropki kwantowej. W takim przypadku $\gamma = 0$ i układ jest idealnie "przezroczysty" dla elektronów z poziomu Fermiego.

Rysunek 6.9 ukazuje czynnik Fano w funkcji napięcia transportowego dla różnych wartości sprzężeń $t_{32} = t_{12} = t$. Przyłożenie napięcia częściowo wytłumia efekt Kondo, co odzwierciedla się we wzroście czynnika Fano. Warto zauważyć, iż wzrost ten jest szybszy dla mniejszych wartości parametru t .

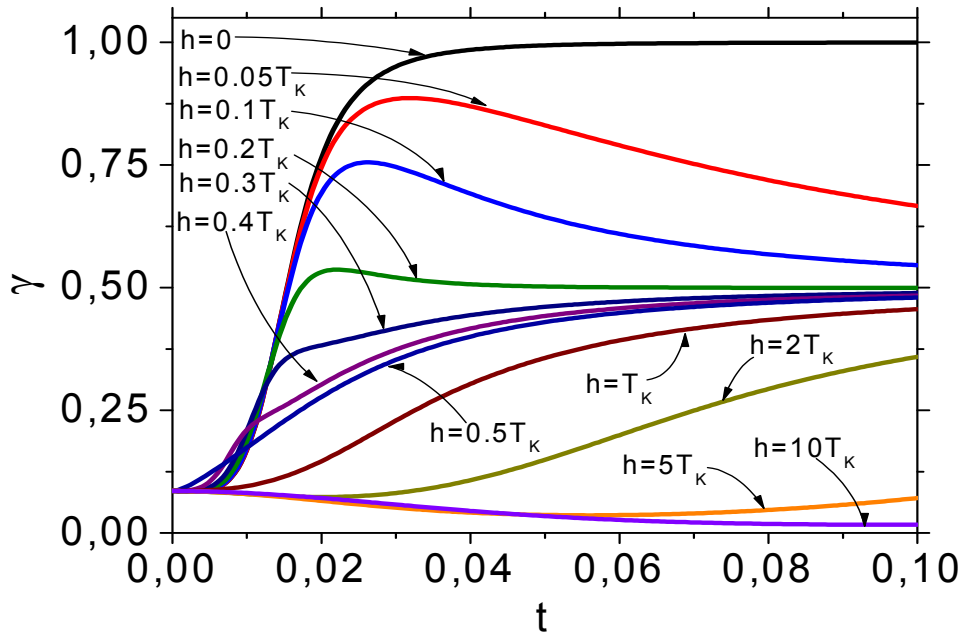


Rysunek 6.9: Zależność współczynnika Fano od przyłożonego napięcia transportowego wyznaczona dla podanych wartości parametru tunelowego $t = t_{12} = t_{32}$. Parametr t wyrażony jest w jednostkach Γ .



Rysunek 6.10: Współczynnik Fano w funkcji przyłożonego napięcia transportowego wyznaczony dla podanych wartości poziomów bocznych kropek kwantowych h , $\varepsilon_1 = -\varepsilon_3 = h$, oraz dla $t = t_{12} = t_{32} = 0.04\Gamma$.

Kiedy poziomy energetyczne bocznych kropek kwantowych leżą na poziomie Fermiego ($h = 0$), wówczas czynnik Fano w granicy zerowego napięcia osiąga wartość poissonowską a następnie powoli maleje ze wzrostem napięcia [Rys. 6.10]. Natomiast zeronapięciowa wartość czynnika Fano dla niezerowych wartości separacji między poziomami energetycznymi bocznych kropek wynosi zero, a następnie dąży do granicy poissonowskiej wraz ze wzrostem napięcia. Można również zauważyć, iż czynnik Fano bardzo szybko wzrasta dla małych wartości separacji poziomów $h < T_K$, podczas gdy dla $h > T_K$ czynnik Fano pozostaje mały w szerokim zakresie napięć zanim wzrośnie do wartości poissonowskiej.



Rysunek 6.11: Zależność współczynnika Fano od wielkości sprzężenia tunelowego między kropkami kwantowymi t wyznaczona dla sytuacji nierównowagowej ($eV = T_K$), oraz dla podanych wartości parametru h ($\varepsilon_1 = h$, $\varepsilon_3 = -h$). Parametr t wyrażono w jednostkach Γ .

Na Rys. 6.11 wykreślono czynnik Fano w zależności od sprzężenia t dla ustalonej wartości napięcia transportowego $eV = T_K$ oraz dla różnych położen poziomów energetycznych bocznych kropek ($\varepsilon_1 = h$, $\varepsilon_3 = -h$). Kiedy poziomy energetyczne bocznych kropek znajdują się w oknie transportowym, wówczas sprzężenie między kropkami silnie wpływa na czynnik Fano. Dla bardzo małych wartości h czynnik Fano szybko wzrasta od małej wartości dla zerowego sprzężenia ($t = 0$) do wartości maksymalnej, a następnie spada do połowy wartości poissonowskiej dla wystarczająco silnych sprzężeń. Jednak czynnik Fano nie osiąga wartości poissonowskiej dla żadnego h oprócz $h = 0$. Co więcej, w zakresie $h \gg T_K$ czynnik Fano jest mniej wrażliwy na zmiany w wielkości sprzężenia między kropkami. W takiej sytuacji centralny pik Kondo w gęstości stanów jest bardzo szeroki dając duży wkład do konduktancji różniczkowej. Poza tym dla większych wartości h czynnik γ pozostaje mały w szerszym zakresie sprzężenia t zanim wzrośnie do połowy wartości poissonowskiej. W przeciwieństwie do przypadku małych wartości h , obecnie można zaobserwować minimum w zależności czynnika Fano (dla skończonej wartości napięcia).

6.3 Podsumowanie

W rozdziale tym pokazano, że centralny pik Kondo w gęstości stanów ulega zwięźeniu w związku ze współzawodnictwem efektów interferencyjnych i efektu Kondo. Poza tym, sterując separacją poziomów energetycznych bocznych kropek lub wielkością sprzężenia między centralną kropką a kropkami bocznymi można przechodzić płynnie z modu *subtunelowego* do modu *supertunelowego*. Pokazano też, że pik Kondo znika, gdy poziomy bocznych kropek znajdują się na poziomie Fermiego elektrod (w równowadze). Takie zachowanie się gęstości stanów prowadzi do całkowitego wygaszenia zeronapięciowej anomalii Kondo w konduktancji różniczkowej. Pokazano również, że w przypadku dwóch kropek dołączonych do kropki centralnej z takim samym sprzężeniem, $t_{12} = t_{32}$, dla $h \neq 0$ zeronapięciowa anomalia Kondo ulega niejako odrodzeniu osiągając wartość $2e^2/h$ w porównaniu z przypadkiem, gdy tylko jedna z bocznych kropek jest dołączona do centralnej kropki. Opiswane efekty mają również wpływ na zachowanie się szumu, co również zostało przedstawione w tym rozdziale.

Rozdział 7

Orbitalny efekt Kondo w układzie dwóch kropek kwantowych

W rozdziale tym zostanie omówiony orbitalny efekt Kondo [95, 96] w transporcie elektronowym przez układ dwóch kropek kwantowych, w ogólności sprzężonych ze sobą zarówno tunelowo jak i poprzez człon kulombowski. Zostanie również rozważony wpływ pozadiagonalnych elementów macierzy sprzężenia na rezonans Kondo. W celu wyznaczenia różnych wielkości w reżimie Kondo zostały zastosowane różne metody. W szczególności, w celu wyznaczenia temperatury Kondo rozpatrywanego układu użyto *technik skalowania* [97] oraz metody *bozonów pomocniczych*. Druga z metod została również wykorzystana do obliczenia konduktancji liniowej. W celu wyznaczenia gęstości stanów oraz charakterystyk transportowych w reżimie nieliniowym wykorzystano metodę nierównowagowych funkcji Greena.

Chociaż ostatnio orbitalny efekt Kondo był badany w układach kropek kwantowych eksperymentalnie [98, 99] oraz teoretycznie [100, 101, 102, 103, 104] to nie przeanalizowano go w sposób całościowy. W szczególności zakładano układ symetryczny oraz brak lub maksymalną wartość sprzężenia pośredniego [105]. Warto wspomnieć, że badano również spinowo-orbitalny efekt Kondo [106, 107, 108].

7.1 Model układu

Rozważany układ składa się z dwóch jednopoziomowych kropek kwantowych dołączonych do zewnętrznych rezerwuarów elektronowych w sposób pokazany na Rys. 7.1. W modelu tym każda kropka sprzężona jest do własnej pary elektrod źródłowej i drenowej, tak że trajektorie tunelowe przez dwa orbitale mogą być rozważane oddzielnie. Warto dodać, iż układ taki został ostatnio przebadany eksperymentalnie [98, 99]. W rozważanym przypadku zakłada się, iż każda kropka jest symetrycznie sprzężona do elektrod, natomiast wielkość sprzężenia danej kropki może różnić się od sprzężenia pozostałej kropki kwantowej. Poza tym, przeprowadzane rozważania są ograniczone do przypadku elektronów bezspinowych⁵, co może być zrealizowane eksperymentalnie poprzez przyłożenie wystarczająco silnego pola magnetycznego znoszącego degenerację spinową.

Rozważany układ można opisać rozszerzonym Hamiltonianem Andersona postaci:

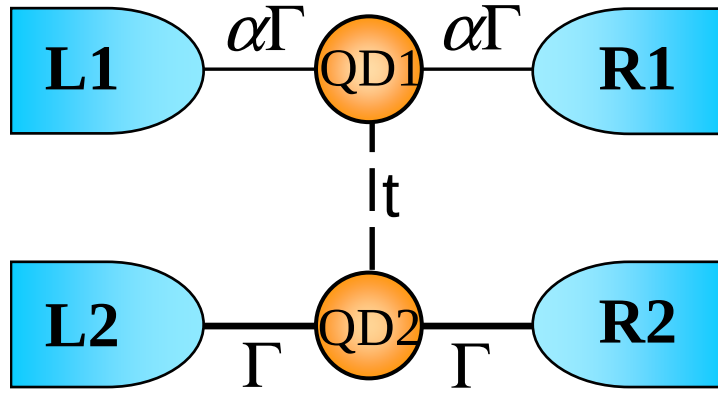
$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{leads}} + \hat{H}_{\text{DQD}} + \hat{H}_{\text{tunnel}}. \quad (7.1)$$

Pierwszy człon, $\hat{H}_{\text{leads}}$, opisuje cztery elektrody w przybliżeniu nieoddziaływujących kwazicząstek, $\hat{H}_{\text{leads}} = \hat{H}_{L1} + \hat{H}_{L2} + \hat{H}_{R1} + \hat{H}_{R2}$, z $\hat{H}_{\beta i}$ oznaczającym lewą ($\beta = L$) i prawą ($\beta = R$) elektrodę dołączoną do i -ej kropki ($i = 1, 2$), $\hat{H}_{\beta i} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}\beta i} c_{\mathbf{k}\beta i}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta i}$ (dla $\beta = L, R$ and $i = 1, 2$).

Drugi człon Hamiltonianu (7.1) opisuje układ dwóch kropek kwantowych:

$$\hat{H}_{\text{DQD}} = \sum_i \varepsilon_i d_i^\dagger d_i + t(d_1^\dagger d_2 + h.c.) + U n_1 n_2, \quad (7.2)$$

⁵Elektrony oczywiście posiadają spinowe stopnie swobody, ale w rozważanym przypadku nie odgrywają one żadnej roli.



Rysunek 7.1: Schemat układu dwóch kropek kwantowych połączonych z zewnętrznymi elektrodami.

gdzie $n_i = d_i^\dagger d_i$ oznacza operator liczby obsadzeń ($i = 1, 2$), ε_i jest dyskretnym poziomem i -tej kropki, t oznacza parametr tunelowy między kropkami, a U energię kulombowską.

Ostatni człon Hamiltonianu (7.1) opisuje procesy tunelowe pomiędzy elektrodami i kropkami i przybiera postać:

$$\hat{H}_T = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\beta i} (V_{i\mathbf{k}}^\beta c_{\mathbf{k}\beta i}^\dagger d_i + \text{h.c.}), \quad (7.3)$$

gdzie $V_{i\mathbf{k}}^\beta$ są odpowiednimi amplitudami procesów tunelowych. Sprzężenia kropek z elektrodami, podobnie jak w poprzednich rozdziałach, mogą być sparametryzowane w postaci $\Gamma_i^\beta(\varepsilon) = 2\pi \sum_{\mathbf{k}} V_{i\mathbf{k}}^\beta V_{i\mathbf{k}}^{\beta*} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta i})$.

Tutaj również zastosowano przybliżenie szerokiego pasma co można zapisać, $\Gamma_i^\beta(\varepsilon) = \Gamma_i^\beta = \text{const}$ for $\varepsilon \in \langle -D, D \rangle$, oraz $\Gamma_i^\beta(\varepsilon) = 0$ w przeciwnym wypadku. $2D$ oznacza szerokość pasma elektronowego. Poszczególne sprzężenia można zapisać w następującej postaci $\Gamma_1^L = \Gamma_1^R = \alpha\Gamma$ oraz $\Gamma_2^L = \Gamma_2^R = \Gamma$. Różnica w sprzężeniach dwóch kropek do elektrod jest wyrażona parametrem α , który może przyjmować wartości z przedziału $\alpha \in \langle 0, 1 \rangle$. Warto zauważyć, że przy takiej parametryzacji każda pojedyncza kropka jest sprzężona symetrycznie do swojej pary elektrod.

7.2 Renormalizacja poziomów energetycznych i temperatura Kondo

Sprzężenie kropek kwantowych z elektrodami wprowadza renormalizację poziomów energetycznych obydwu kropek. W sytuacji, gdy sprzężenia te są silne, efekt ten nie może być zaniedbany. Wobec tego w tej części zostaną przedstawione równania rządzące renormalizacją poziomów kropek dla przypadku równowagowego, wyprowadzone przy użyciu metody skalowania [69, 97]. Metoda ta została również wykorzystana do oszacowania temperatury Kondo dla rozpatrywanego układu. Otrzymane wyniki będą również pomocne w wyjaśnieniu pewnych wyników numerycznych dotyczących aspektów transportowych oraz gęstości stanów omawianych w dalszej części rozdziału.

7.2.1 Renormalizacja poziomów energetycznych kropek kwantowych

Na początku zostaną przedstawione wyprowadzenia zrenormalizowanych poziomów kropek kwantowych dla przypadku $t = 0$. W metodzie skalowania stany wysokoenergetyczne elektrod, z obszaru energii o szerokości δD licząc od krawędzi pasm, zostają usunięte, ale ich wpływ jest brany pod uwagę poprzez wprowadzenie zrenormalizowanych parametrów w Hamiltonianie układu. Tutaj rozważania ograniczone są do procesów drugiego rzędu, w których elektrony z elektrod są rozpraszane do krawędzi pasm i z powrotem (poprzez dyskretny poziom kropek kwantowych). Zakładając reżim Kondo, $\varepsilon_i + U \gg D \gg |\varepsilon_i|$, po wycalkowaniu po stanach z krawędzi pasm

otrzymuje się zrenormalizowane parametry:

$$\tilde{\varepsilon}_i = \varepsilon_i - E_0 + \frac{\Gamma_{\bar{i}}}{2\pi} \frac{\delta D}{D}, \quad (7.4)$$

gdzie E_0 oznacza energię stanu pustego układu (początkowo $E_0 = 0$), a indeks $\bar{i} = 1$ dla $i = 2$ oraz $\bar{i} = 2$ dla $i = 1$. Sprzężenie Γ_i zdefiniowane jest jako $\Gamma_i = \Gamma_i^L + \Gamma_i^R$. Teraz łatwo otrzymać równanie skalowania:

$$\frac{d\tilde{\varepsilon}_i}{d \ln D} = -\frac{\Gamma_{\bar{i}}}{2\pi}, \quad (7.5)$$

oraz równanie na separację poziomów energetycznych kropek kwantowych:

$$\Delta\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_2 = \varepsilon_1 - \varepsilon_2 + \frac{(\Gamma_2 - \Gamma_1)}{2\pi} \ln \left(\frac{D}{\tilde{D}} \right), \quad (7.6)$$

gdzie $\tilde{D}$ jest szerokością pasma pozostałą na końcu procedury skalowania. Z powyższego równania wyraźnie wynika, iż początkowa degeneracja ($\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_0$) zostaje zniesiona jeśli tylko $\Gamma_1 \neq \Gamma_2$. Warto dodać, iż jest to efekt wielociałowy.

Wykonano również skalowanie w obecności bezpośredniego sprzężenia tunelowego kropek kwantowych $t \neq 0$ ograniczając się jednak do dwóch granicznych przypadków: kiedy $|t|/\Gamma \ll 1$, oraz gdy $|t|/\Gamma \gg 1$. Jak już wcześniej wspomniano człon tunelowy między kropkami znosi (początkowo założoną) degenerację poziomów kropek. Nowymi stanami układu kropek kwantowych odizolowanych od elektrod są stany: wiążący i antywiążący, odpowiadające wartościom własnym $\varepsilon_{\pm} = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2 \pm \sqrt{\Delta\varepsilon^2 + t^2}$, gdzie $\Delta\varepsilon = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/2$. Kiedy człon tunelowy jest mały, $|t|/\Gamma \ll 1$, można wpierw wykonać skalowanie wyjściowych poziomów kropek kwantowych (ε_1 oraz ε_2), a następnie uwzględnić wkład od t podstawiając $\tilde{\varepsilon}_{1(2)}$ zamiast $\varepsilon_{1(2)}$ w wyrażeniu na poziomy molekularne $\varepsilon_{\pm}$. W przypadku silnej hybrydyzacji kropek kwantowych, $|t|/\Gamma \gg 1$, wpierw należy zdiagnozować Hamiltonian opisujący układ dwóch kropek wyrażając go w bazie stanu wiążącego i antywiążącego, a następnie wykonać procedurę skalowania dla poziomów molekularnych $\varepsilon_{\pm}$. Równania skalowania w tym przypadku przyjmują następującą postać:

$$\frac{d\tilde{\varepsilon}_{\pm}}{d \ln D} = -\frac{\Gamma_{\mp}}{2\pi}, \quad (7.7)$$

Powyższe równanie wygląda podobnie jak równanie (7.5) z tym, iż sprzężenia stanów molekularnych z elektrodami przybierają postać $\Gamma_{\pm} = \Gamma_1 + \Gamma_2$. Z tego względu, w granicy silnego sprzężenia kropek kwantowych ze sobą, separacja między poziomami energetycznymi nie zależy od sprzężeń $\Gamma_{\pm}$, bowiem obydwa te sprzężenia są takie same $\Gamma_+ = \Gamma_-$.

7.2.2 Temperatura Kondo

W celu wyznaczenia temperatury Kondo dla przypadku $t = 0$ oraz $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_0$ została wykorzystana metoda skalowania, tzw. *poor's man scaling* [97, 109]. Zanim metoda ta zostanie zaadoptowana, wpierw należy znaleźć Hamiltonian Kondo dla rozpatrywanego układu dokonując transformacji Schrieffera – Wolfa [110]. W kolejnym kroku zredukowana jest szerokość pasma elektronowego poprzez wyeliminowanie stanów o energiach z przedziału $D - \delta D \leq |\varepsilon_{\mathbf{k}\beta i}| \leq D$ oraz wprowadzony zostaje nowy, efektywny Hamiltonian Kondo posiadający analogiczną postać jak ten początkowy z tym, że wyrażony przez zrenormalizowane parametry $\tilde{J}_+$, $\tilde{J}_-$, $\tilde{J}_{z1}$ i $\tilde{J}_{z2}$. Informacje o wysoko wzbudzonych stanach (wyeliminowanych) są właśnie zawarte w tych zrenormalizowanych parametrach.

W celu zastosowania powyższej procedury grupy renormalizacyjnej przededefiniowano parametry sprzężeń Γ_i w następujący sposób: $\Gamma_1 = 2\alpha\Gamma \equiv \tilde{\Gamma}(1 - \tilde{p})$ oraz $\Gamma_2 = 2\Gamma \equiv \tilde{\Gamma}(1 + \tilde{p})$, tak więc $\tilde{\Gamma} = (\alpha + 1)\Gamma$ oraz $\tilde{p} = (1 - \alpha)/(1 + \alpha)$. Po wykonaniu procedury skalowania otrzymano następujące równania:

$$\frac{d(\rho\tilde{J}_{\pm})}{d \ln D} = -\rho\tilde{J}_{\pm}(\rho\tilde{J}_{z1} + \rho\tilde{J}_{z2}), \quad (7.8)$$

$$\frac{d(\rho\tilde{J}_{\pm})}{d\ln D} = -2(\rho\tilde{J}_{\pm})^2, \quad (7.9)$$

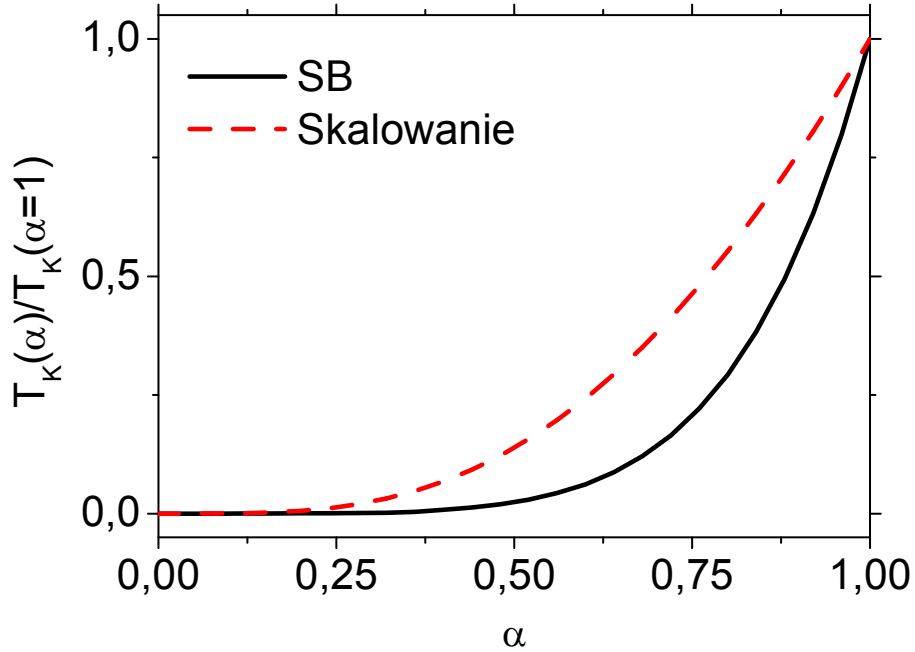
gdzie $\rho = \rho_1 = \rho_2$, z $\rho_i = \sum_{\beta} \rho_{\beta i}$, natomiast $\rho_{\beta i}$ oznacza gęstość stanów w elektrodzie βi ($\beta = L, R$ oraz $i = 1, 2$). W celu rozwiązania powyższego układu równań znaleziono trajektorie skalowania, $(\rho\tilde{J}_{\pm})^2 - (\rho\tilde{J}_{z1})(\rho\tilde{J}_{z2}) = 0$ oraz $\rho\tilde{J}_{z1} - \rho\tilde{J}_{z2} = \text{const} \equiv \rho J_{z1}^0 - \rho J_{z2}^0 = \tilde{p}(\rho(J_{z1}^0 + J_{z2}^0))$, pozwalające zapisać tylko jedno równanie skalowania zamiast dwóch (7.8) oraz (7.9):

$$\frac{d(\rho\tilde{J}_{zi})}{d\ln D} = -2(\rho\tilde{J}_{zi})[\rho\tilde{J}_{zi} \mp \rho\tilde{p}(J_{z1}^0 + J_{z2}^0)], \quad (7.10)$$

dla $i = 1, 2$. Kontynuując procedurę skalowania aż do $D \approx k_B T_K$ i rozwiązując równanie (7.10) otrzymuje się temperaturę Kondo (będącą niezmiennikiem skalowania)

$$T_K = \tilde{D} \exp \left\{ -\frac{1}{\rho(J_{z1}^0 + J_{z2}^0)} \frac{\text{arctanh}(\tilde{p})}{\tilde{p}} \right\}, \quad (7.11)$$

gdzie $\rho(J_{z1}^0 + J_{z2}^0) = \frac{2\tilde{\Gamma}}{\pi} \frac{U}{|\varepsilon_0|(\varepsilon_0 + U)}$. Warto zauważyć, iż dzięki przeformułowaniu definicji sprzężeń powyższe wyrażenie na temperaturę Kondo przypomina to wyznaczone dla pojedynczej kropki kwantowej sprzężonej z ferromagnetycznymi elektrodami [82, 111], gdzie zamiast $\tilde{p}$ znajdowała się spinowa polaryzacja elektrod.



Rysunek 7.2: Znormalizowana temperatura Kondo w funkcji parametru asymetrii sprzężeń α , wyznaczona metodą skalowania (linia przerywana) dla $U = 50\Gamma$, oraz metodą *bozonów pomocniczych* (linia ciągła) dla $U = \infty$. Pozostałe parametry: $\varepsilon_0 = -3.5\Gamma$, $t = 0$.

Na Rys.7.2 zależność temperatury Kondo od parametru α przedstawiono linią przerywaną. Temperatura Kondo T_K osiąga maksymalną wartość dla $\alpha = 1$ ($\tilde{p} = 0$) i znika dla wartości $\alpha \rightarrow 0$ ($\tilde{p} = 1$). Takie zachowanie się T_K jest podobne do tego otrzymanego dla pojedynczej kropki sprzężonej z ferromagnetycznymi elektrodami. Otrzymane rezultaty są również zgodne z tymi otrzymanymi w pracy [112], gdzie bezspinowy układ dwóch kropek kwantowych został zrzutowany na spinowy, uogólniony model Andersona.

7.3 Metoda bozonów pomocniczych

Metoda *bozonów pomocniczych* została zastosowana w celu wyznaczenia konduktancji liniowej oraz oszacowania temperatury Kondo. Metoda ta została już dokładnie omówiona w poprzednich rozdziałach, więc tutaj zostaną przedstawione tylko podstawowe równania dla Hamiltonianu (7.1). Podobnie jak poprzednio, również dla obecnego przypadku operatory kreacji i

anihilacji $d_i^\dagger$ (d_i) są zastępowane przez iloczyny operatora bozonowego i pseudofermionowego $f_i^\dagger b$ ($b^\dagger f_i$). W odróżnieniu od poprzednich sytuacji, tutaj operator $b^\dagger$ kreuje stan pusty dla układu kropek kwantowych (a nie pojedynczej kropki), a $f_i^\dagger$ stan pojedynczo obsadzony przez elektron na i -tej kropce. Wówczas relacja zupełności w rozszerzonej przestrzeni Hilberta ma postać:

$$Q = \sum_i f_i^\dagger f_i + b^\dagger b = 1, \quad (7.12)$$

która zapobiega podwójnemu obsadzeniu układu.

Stosując przybliżenie pola średniego (MF) w stosunku do pola bozonowego $b(t) \rightarrow \langle b(t) \rangle \equiv \bar{b}$ oraz wprowadzając zrenormalizowane parametry $\bar{t} = t\bar{b}^2$, $\bar{V}_{i\mathbf{k}}^\beta = V_{i\mathbf{k}}^\beta \bar{b}$ oraz $\bar{\varepsilon}_i = \varepsilon_i + \lambda$ otrzymujemy efektywny Hamiltonian układu:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{MF} = & \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\beta i} \varepsilon_{\mathbf{k}\beta i} c_{\mathbf{k}\beta i}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta i} + \sum_i \bar{\varepsilon}_i f_i^\dagger f_i + (\bar{t} f_1^\dagger f_2 + \text{h.c.}) \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\beta i} (\bar{V}_{i\mathbf{k}}^\beta c_{\mathbf{k}\beta i}^\dagger f_i + \text{H.c.}) + \lambda (\bar{b}^2 - 1), \end{aligned} \quad (7.13)$$

gdzie λ jest odpowiednim mnożnikiem Lagrange'a uwzględniającym warunek (7.12).

Nieznane parametry $\bar{b}$ oraz λ zostały wyznaczone samozgodnie przy pomocy równań

$$\bar{b}^2 - i \sum_i \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \langle \langle f_i | f_i^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^< = 1, \quad (7.14)$$

$$-i \sum_i \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} (\varepsilon - \bar{\varepsilon}_i) \langle \langle f_i | f_i^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^< + \lambda \bar{b}^2 = 0, \quad (7.15)$$

gdzie $\langle \langle f_i | f_i^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^<$ jest transformatą Fouriera funkcji Greena zdefiniowanej w sposób $G_{ii}^<(t, t') \equiv \langle \langle f_i(t) | f_i^\dagger(t') \rangle \rangle^< = i \langle f_i^\dagger(t') f_i(t) \rangle$, które otrzymano postępując w analogiczny sposób jak w rozdziale 5. Funkcje Greena $\langle \langle f_i | f_i^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon^<$ oraz $\langle \langle f_i | f_i^\dagger \rangle \rangle^r$ wyznaczono z odpowiednich równań ruchu.

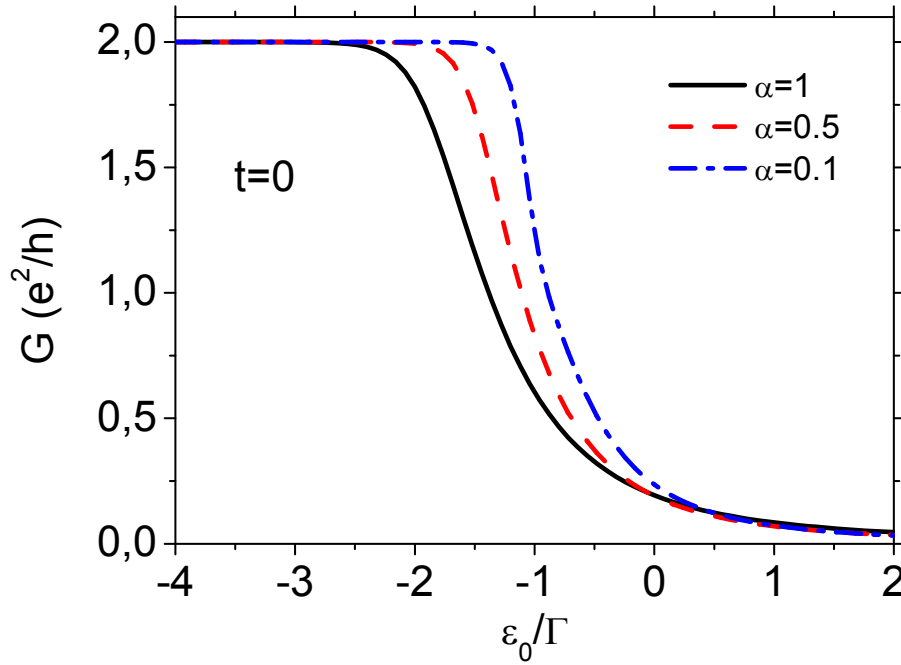
Temperatura Kondo może być zapisana za pomocą zrenormalizowanych parametrów układu w następujący sposób [108]:

$$T_K \equiv \sqrt{\bar{\varepsilon}_0^2 + \bar{\Gamma}^2}, \quad (7.16)$$

gdzie $\bar{\Gamma} = \bar{b}^2(\Gamma_1 + \Gamma_2)$ oraz $\bar{\varepsilon}_1 = \bar{\varepsilon}_2 = \bar{\varepsilon}_0$. Zależność temperatury Kondo od parametru α , uzyskana takim sposobem, przedstawiona jest na Rys. 7.2 za pomocą linii ciągłej. Widać, iż obydwie metody prowadzą do analogicznych jakościowo wniosków.

Analiza transportu ładunkowego przez rozważany układ została wykonana dla stanu równowagowego, $\mu_L = \mu_R \equiv \mu = 0$. W takiej sytuacji konduktancja liniowa jest dana za pomocą formuły Landauera, w której macierz transmisji jest wyznaczona dla poziomu Fermiego i w temperaturze $T = 0$ K.

Jednakże należy podkreślić, iż metoda *bozonów pomocniczych* prezentowana w powyższej postaci nie uwzględnia renormalizacji poziomów energetycznych. W celu uwzględnienia tego efektu, wyjściowe poziomy energetyczne kropek kwantowych zostały zastąpione przez zrenormalizowane poziomy (zachowując starą notację). Z drugiej strony renormalizacja ta może zostać zniesiona poprzez przyłożenie odpowiednich napięć bramkujących. Na Rys. 7.3 przedstawiono konduktancję liniową w zależności od położenia poziomów energetycznych obydwu kropek kwantowych, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_0$, dla kilku wartości parametru asymetrii sprzężenia α . Wyraźnie widać, iż konduktancja liniowa osiąga granicę $2e^2/h$ dla $\varepsilon_0 \ll -\Gamma$. Warto dodać, że maksymalna wartość konduktancji występuje tylko w przypadku zniesienia separacji poziomów wynikającej z ich renormalizacji. Wyniki te pokazują również, iż temperatura Kondo maleje wraz z obniżaniem wartości parametru α , co jest zgodne z poprzednimi wynikami [Rys. 7.2].



Rysunek 7.3: Konduktancja liniowa w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_0$, wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii α , oraz dla $t = 0$ i otrzymana za pomocą metody *bozonów pomocniczych* dla $U \rightarrow \infty$.

7.4 Metoda nierównowagowych funkcji Greena

Transport nierównowagowy został przeanalizowany przy użyciu formalizmu nierównowagowych funkcji Greena, gdzie prąd elektryczny płynący przez układ określony jest przez opóźnioną, przedwczesną oraz korelacyjną funkcje Greena układu kropek i dany przez formułę Meira i Wingreena [27]. Opóźniona (przedwczesna) funkcja Greena $G_{ij}^{r(a)}(\varepsilon)$ została wyznaczona za pomocą odpowiednich równań ruchu. W celu zamknięcia układu równań zastosowano odpowiednie rozszczepienie [77]. Takie przybliżenie jest wystarczające do opisu efektu Kondo dla temperatur bliskich temperaturze Kondo. Szczegółowe wyrażenia na otrzymane funkcje Greena oraz dyskusja dotycząca ważności zastosowanych przybliżeń znajdują się w Dodatku E.

Opóźniona i przedwczesna funkcja Greena zależy od liczb obsadzeń kropek n_i , oraz wartości średnich $n_{i\bar{i}} = \langle d_i^\dagger d_{\bar{i}} \rangle$, które można wyznaczyć przy użyciu równań (2.28) oraz (2.29) pomijając indeks spinu. Jednak wciąż wymagana jest jawna postać korelacyjnej funkcji Greena $G_{ij}^<(\varepsilon)$, która również zawiera powyższe wartości średnie. Równania te muszą więc zostać rozwiązane w sposób samozgodny. Okazuje się jednak, iż wystarczy znać raczej wielkość $\int d\varepsilon G_{ij}^<(\varepsilon)$ aniżeli $G_{ij}^<(\varepsilon)$. Tą wielkość można wyznaczyć w ścisły sposób (w przeciwieństwie do wyznaczenia samej funkcji $G_{ij}^<(\varepsilon)$ [113]). W tym celu należy zapisać równanie Heisenberga dla operatora $d_j^\dagger(t)d_i(t)$, a następnie skorzystać z faktu, iż $\langle (d/dt)d_j^\dagger(t)d_i(t) \rangle = 0$ w stanie stacjonarnym. Po dalszych przekształceniach otrzymuje się równania o następującej postaci:

$$t(n_{i\bar{i}} - n_{\bar{i}i}) - i\Gamma_i n_i = \sum_{\beta} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} f_{\beta}(\varepsilon) \Gamma_i^{\beta} (G_{ii}^r - G_{ii}^a), \quad (7.17)$$

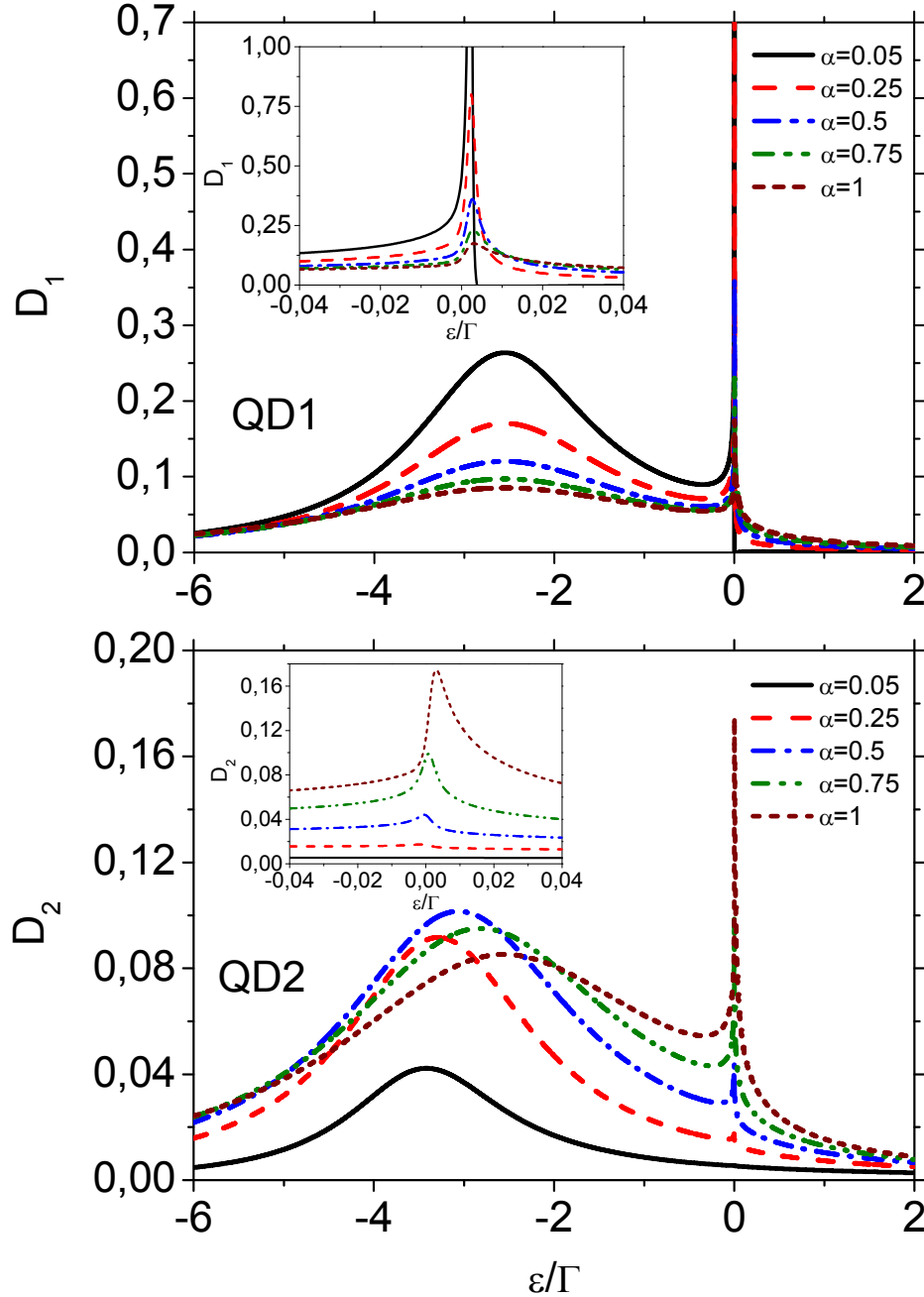
$$t(n_i - n_{\bar{i}}) + (\varepsilon_{\bar{i}} - \varepsilon_i) n_{i\bar{i}} - \frac{i}{2} (\Gamma_i n_{i\bar{i}} + \Gamma_{\bar{i}} n_{\bar{i}i}) = \sum_{\beta} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} f_{\beta}(\varepsilon) [\Gamma_i^{\beta} G_{ii}^r - \Gamma_{\bar{i}}^{\beta} G_{ii}^a]. \quad (7.18)$$

Powyższe równania wraz z odpowiednimi funkcjami Greena zostały rozwiązane numerycznie, a następnie wyznaczono podstawowe wielkości transportowe układu. Natomiast gęstość stanów i -tej kropki obliczono za pomocą formuły:

$$D_i = -\frac{1}{\pi} \Im [G_{ii}^r(\varepsilon)]. \quad (7.19)$$

Należy jednak zwrócić uwagę na to, iż przybliżenie użyte w celu wyznaczenia nierównowagowych funkcji Greena nie bierze pod uwagę renormalizacji poziomów kropek kwantowych (w takim stopniu jak tej rozważanej w poprzednich sekcjach)⁶. Wobec tego, aby uwzględnić tę renormalizację wyjściowe poziomy kropek zostały zastąpione przez ich zrenormalizowane odpowiedniki, jednak pozostawiając starą notację.

W obliczeniach numerycznych założono jednakowe poziomy energetyczne $\varepsilon_i = \varepsilon_0$ (dla $i = 1, 2$) mierzone w odniesieniu do poziomu Fermiego elektrod w stanie równowagowym $\mu_{Li} = \mu_{Ri} = 0$. Ponadto założono wartości poziomów $\varepsilon_0 = -3.5\Gamma$, szerokości pasma $2D = 500\Gamma$, i energii kulombowskiej $U = 50\Gamma$.



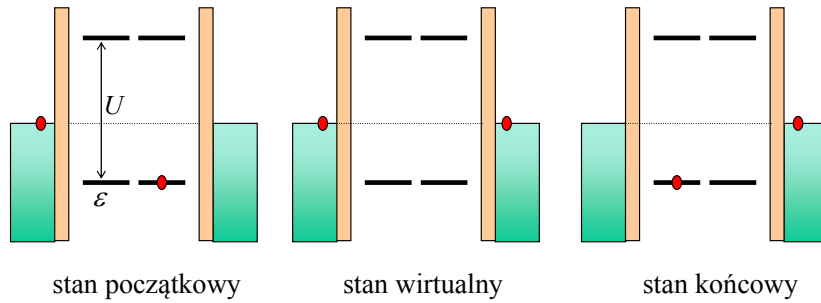
Rysunek 7.4: Gęstość stanów kropki kwantowej QD1, oraz QD2 wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii sprzężeń α . Pozostałe parametry: $\varepsilon_0 = -3.5\Gamma$, $U = 50\Gamma$, $t = 0$.

⁶Zastosowana tu metoda renormalizuje poziomy kropek kwantowych w pewnym stopniu co jest związane z niezerową wartością części rzeczywistych odpowiednich energii własnych. Jednakże, ta renormalizacja nie prowadzi do omawianego poprzednio rozszczepienia poziomów kropek, tudzież zeronapięciowej konduktancji różniczkowej

7.4.1 Wyniki numeryczne dla $t = 0$

Wpierw zostanie omówiony przypadek, w którym kropki kwantowe sprzężone są ze sobą tylko kulombowsko, $t = 0$. Na Rys. 7.4 wykreślono gęstości stanów dla obydwu kropek dla różnych wartości parametru asymetrii α . W gęstości stanów każdej kropki wyłaniają się dwa rezonanse odpowiadające poziomowi kropki i jego kulombowskiego partnera. Ze względu na zachowanie czytelności rysunku drugiego z tych rezonansów nie pokazano. Interesującą cechą gęstości stanów jest pojawienie się wąskiego piku na poziomie Fermiego elektrod. Intensywność i szerokość tego piku silnie zależy od temperatury, wykazując tym samym cechy charakterystyczne dla rezonansu Kondo.

Źródłem tego rezonansu są procesy wielociałowe występujące w niskich temperaturach. Dla założonego reżimu parametrów, $\varepsilon_0 < \mu_{\beta i}$ i $\mu_{\beta i} < \varepsilon_0 + U$, odpowiadającego blokady kulombowskiej, układ kropek może być obsadzany tylko przez jeden elektron, a procesy tunelowania sekwencyjnego są zablokowane. Jednak, dzięki zasadzie nieoznaczoności Heisenberga, mogą występować procesy wyższych rzędów. Jeśli początkowo elektron obsadza kropkę kwantową QD1, to w związku z zasadą nieoznaczoności elektron ten może przetunelować na poziom Fermiego jednej z elektrod dołączonych do kropki QD1, podczas gdy elektron z poziomu Fermiego jednej z elektrod sprzężonych z kropką QD2 może przetunelować na tę kropkę kwantową (QD2). Aby nie została naruszona zasada zachowania energii, proces taki musi zajść w czasie $\hbar/|\varepsilon_0|$. Proces taki został schematycznie przedstawiony na Rys. 7.5. Superpozycja wielu takich aktów tunelowych daje wkład do wąskiego rezonansu w gęstości stanów.



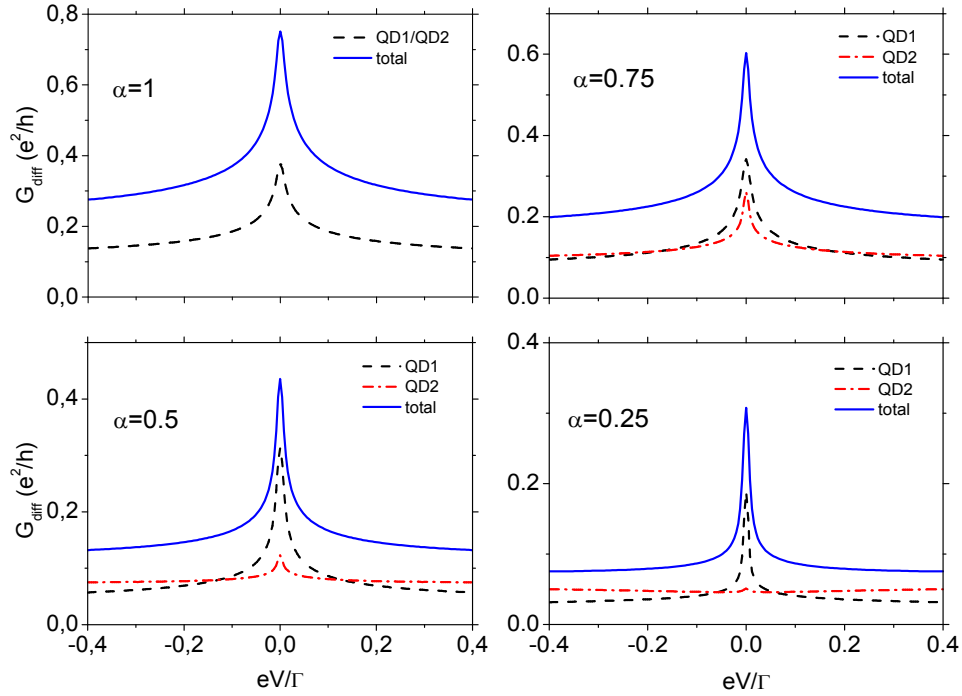
Rysunek 7.5: Schematyczny rysunek przedstawiający procesy wirtualne dające wkład do rezonansu Kondo.

W przypadku pełnej symetrii układu ($\alpha = 1$), gęstość stanów dla kropki kwantowej QD1 jest taka sama jak dla kropki QD2. Sytuacja ta zmienia się, gdy $\alpha \neq 1$. Wraz z obniżaniem wartości parametru α amplituda piku Kondo w gęstości stanów kropki QD2 również maleje i ostatecznie zanika, gdy α dąży do zera. Natomiast odwrotna sytuacja zachodzi w gęstości stanów kropki QD1. Tutaj pik Kondo staje się coraz bardziej wyraźny wraz z obniżaniem wartości parametru α . Takie zachowanie jest związane z faktem, iż amplituda piku Kondo w gęstości stanów kropki QD1 jest głównie określona przez siłę sprzężenia między kropką QD2 a jej elektrodami, podczas gdy intensywność piku Kondo kropki QD2 jest zasadniczo wyznaczane przez sprzężenie kropki QD1 z elektrodami. Stosownie do tego, intensywność piku Kondo w gęstości stanów kropki QD1 (QD2) rośnie (maleje) wraz z obniżaniem wartości parametru α , podczas gdy piki Kondo dla obydwu kropek są takie same dla $\alpha = 1$. To poglądowe wytłumaczenie może być zrozumiane przy pomocy szacunkowych obliczeń biorąc pod uwagę maksymalne wartości konduktancji dla każdego kanału (każdej kropki) równe $G_i^{max} = e^2/h$. Szacując, że konduktancja na poziomie Fermiego wynosi $G_i^{max} \sim \Gamma_{ii}(E_F)\rho_i(E_F)$ można otrzymać wyrażenie $\rho_1(E_F)/\rho_2(E_F) = 1/\alpha$, wyjaśniające powyższe zachowanie się gęstości stanów dla kropek QD1 oraz QD2.

Kiedy $\alpha \ll 1$, pik Kondo w gęstości stanów dla kropki QD1 staje się silnie asymetryczny, a gęstość stanów całkowicie zanika dla energii powyżej poziomu Fermiego. Podobna sytuacja została zaobserwowana w artykule [103]. Poza tym, położenie piku Kondo dla kropki QD2

nieznacznie odsuwa się od poziomu Fermiego (w kierunku dodatnich energii) wraz ze wzrostem parametru α i wykazuje asymetrię dla wszystkich wartości parametru α .

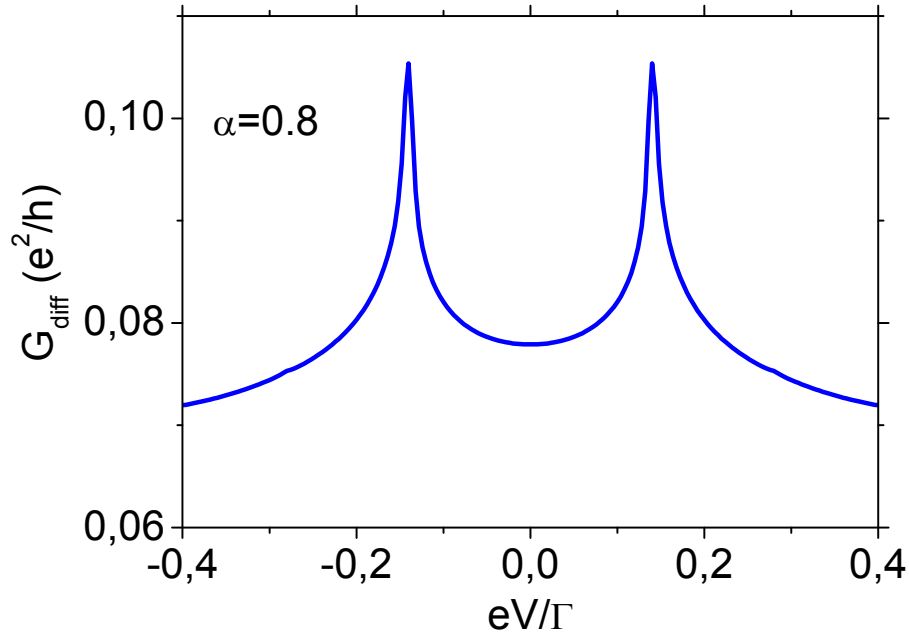
Warto dodać, iż położenie szerokiego maksimum, związanego z poziomem ε_0 , w gęstości stanów dla kropki QD1 (której sprzężenie z elektrodami może być zmieniane) jest praktycznie takie same wraz ze zmianą parametru α , podczas gdy pozycja szerokiego rezonansu w gęstości stanów dla kropki QD2 (sprzężonej z elektrodami ze stałą siłą) zmienia się wraz ze zmianą parametru α . Fakt ten można w prosty sposób wyjaśnić odwołując się do wyrażeń opisujących renormalizację poziomów energetycznych kropek kwantowych [zob. równanie 7.5]. Ponadto amplituda szerokiego maksimum dla kropki QD1 maleje monotonicznie wraz ze wzrostem parametru α , podczas gdy zależność intensywności szerokiego pik w gęstości stanów dla kropki QD2 od α jest bardziej złożona. W granicy $\alpha \rightarrow 0$ szeroki pik w gęstości stanów dla kropki QD1 jest najwyraźniejszy, natomiast jego kulombowski odpowiednik (nie pokazany tutaj) jest wówczas całkowicie zlokalizowany w $\varepsilon_0 + U$.



Rysunek 7.6: Konduktancja różniczkowa dla kropki kwantowej QD1 i QD2, oraz całkowita jej wartość wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii α . Pozostałe parametry jak na Rys. 7.4.

Jak już wspomniano wcześniej rezonanse w gęstości stanów na poziomie Fermiego prowadzą do zeronapięciowej anomalii w konduktancji różniczkowej rozważanego układu. Na Rys. 7.6 przedstawiono konduktancję różniczkową dla obydwu kropek kwantowych w funkcji przyłożonego napięcia transportowego. Dla przypadku symetrycznego ($\alpha = 1$) konduktancja różniczkowa dla obydwu kropek jest taka sama. Sytuacja ta zmienia się gdy, α staje się mniejsze od jedynki ($\alpha < 1$). Wówczas konduktancja związana z kropką kwantową słabo sprzężoną do elektrod (QD1) jest większa od konduktancji odpowiadającej kropce silnie sprzężonej z elektrodami (QD2). Kiedy α jest wystarczająco małe, to konduktancja różniczkowa dla kropki QD2 objawia się tylko w postaci szerokiego tła, podczas gdy konduktancja związana z kropką słabo sprzężoną z elektrodami posiada wyraźny wąski pik. Takie zachowanie można wyjaśnić odwołując się do własności gęstości stanów kropek QD1 oraz QD2 analizowanych powyżej i przedstawionych na Rys. 7.4. Poza tym, całkowita konduktancja różniczkowa maleje wraz ze spadkiem parametru α , a szerokość pik również maleje. Takie zachowanie wskazuje obniżenie wartości efektywnej temperatury Kondo wraz z obniżaniem parametru α . Zjawisko to jest związane z faktem, iż częstość procesów tunelowych prowadzących do rezonansu Kondo spada, gdy kropka QD1 jest odłączana od elektrod (gdy α maleje w sposób ciągły do zera). Ponadto, zgadza się to z zależnością temperatury Kondo od parametru α wyprowadzoną w części 7.2. Ostatecznie, gdy

jedna z kropek jest całkowicie odłączona od elektrod ($\alpha = 1$), to temperatura Kondo zanika i rezonans Kondo również zanika.



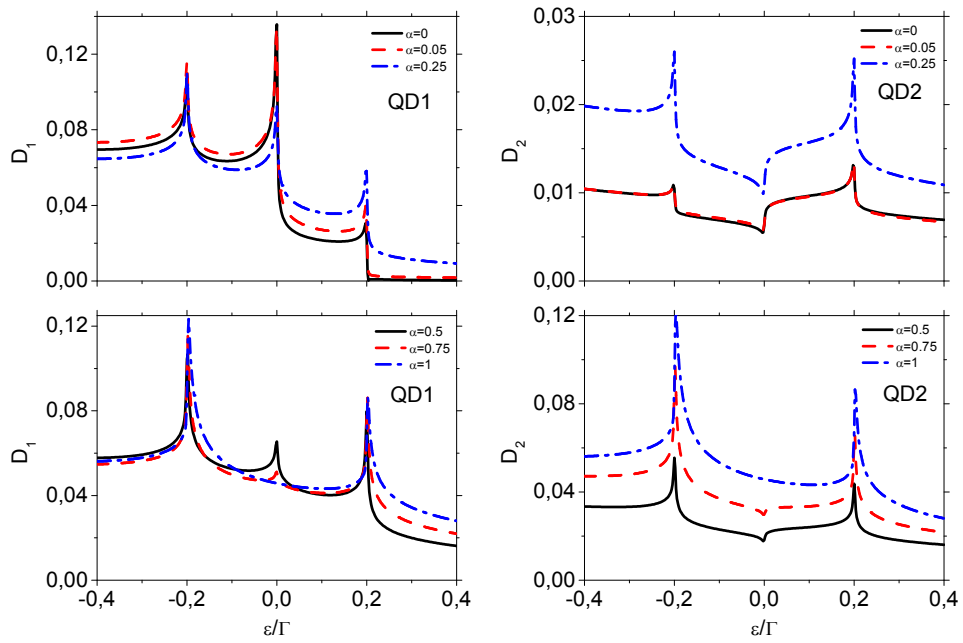
Rysunek 7.7: Konduktancja różniczkowa wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii α w sytuacji, gdy rozszczepienie poziomów związane z ich renormalizacją nie zostało skompensowane napięciami bramkującymi. Położenia zrenormalizowanych poziomów zostały obliczone samozgodnie za pomocą równania (7.5). Pozostałe parametry jak na Rys. 7.4.

Ciekawa sytuacja pojawia się, gdy rozszczepienie poziomów w związku z ich renormalizacją nie jest skompensowane przez napięcia bramkujące. Kiedy $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$, to zeronapięciowa anomalia ulega rozszczepieniu i jej dwa składniki zostają symetrycznie rozsunięte względem poziomu Fermiego, a ich amplitudy stają się mniejsze [zob. Rys. 7.7]. Takie rozszczepienie i tłumienie anomalii Kondo przypomina podobne zachowanie w przypadku spinowego efektu Kondo.

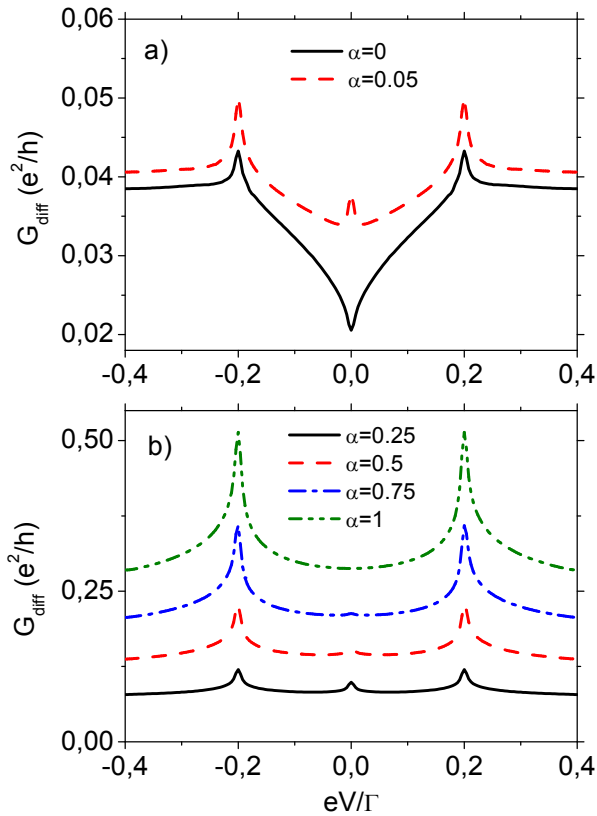
Warto zaznaczyć, iż obecność pików Kondo zależy również od siły sprzężenia kropek kwantowych z elektrodami. Powyższe rozważania były przeprowadzone dla stosunkowo dużych sprzężeń (z pewną ich asymetrią). Okazuje się, że gdy obydwie kropki są słabo sprzężone z elektrodami, to efekt Kondo nie występuje. Takie zachowanie jest zgodne z ostatnimi wynikami eksperymentalnymi [98].

7.4.2 Wyniki numeryczne dla $t \neq 0$

Poprzednie rozważania dotyczyły sytuacji, w której bezpośrednie sprzężenie tunelowe między kropkami było wyłączone. Obecnie będzie przeanalizowany przypadek, w którym sprzężenie takie występuje. Rysunek 7.8 pokazuje gęstość stanów dla kropek QD1 oraz QD2. Gdy obydwie kropki są jednakowo sprzężone z elektrodami ($\alpha = 1$), wówczas obserwuje się strukturę dwóch pików w gęstości stanów dla kropki QD1 oraz QD2 i gęstości stanów dla obydwu kropek są takie same. Piki te położone są w $\varepsilon = \pm 2t$. Wówczas efekt Kondo powstaje w wyniku dozwolonych procesów tunelowych poprzez te stany. Jeśli początkowo elektron obsadza poziom ε_- , to może przetunelować na poziom Fermiego danej elektrody, a w tym czasie inny elektron mający energię $+2t$ musi przetunelować na poziom ε_+ . Koherentna superpozycja takich procesów skutkuje rezonansem Kondo dla energii $\varepsilon = 2t$. W analogiczny sposób można wytłumaczyć obecność pików Kondo w $\varepsilon = -2t$.



Rysunek 7.8: Gęstość stanów kropki kwantowej QD1 wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii sprzężeń α , oraz dla $t = -0.1\Gamma$. Pozostałe parametry jak na Rys. 7.4.



Rysunek 7.9: Konduktancja różniczkowa wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii α , oraz dla $t = -0.1\Gamma$. Pozostałe parametry jak na Rys. 7.4.

Powyższa sytuacja zmienia się dla przypadku $\alpha \neq 1$. Wówczas, oprócz dwóch pików położonych w $\pm 2t$, dodatkowy pik pojawia się w gęstości stanów kropki QD1 na poziomie Fermiego. Jednak zamiast pików, w gęstości stanów kropki QD2 pojawia się wąskie minimum na poziomie Fermiego. Obecność tego minimum oraz maksimum może być wyjaśnione w następujący sposób. W powstaniu tego rezonansu biorą udział raczej wyjściowe stany kropek kwantowych, aniżeli stany molekularne $\varepsilon_{\pm}$. Jednak w dalszym ciągu pojawienie się minimum na poziomie

Fermiego w gęstości stanów kropki QD2 jest intrygujące. Można to wyjaśnić używając argumentów z części 7.4. Należy wpięrw zauważyć, iż dla symetrycznego sprzężenia ($\alpha = 1$) nie pojawia się ani pik, ani ostre minimum w gęstościach stanów na poziomie Fermiego i gęstości stanów dla obydwu kropek są takie same. Kiedy sprzężenia są asymetryczne ($\alpha \neq 1$), to amplituda gęstości stanów na poziomie Fermiego kropki słabiej sprzężonej do elektrod przewyższa tą dla kropki silniej sprzężonej do elektrod. W konsekwencji tego, amplituda gęstości stanów na poziomie Fermiego dla kropki silniej sprzężonej z elektrodami spada wraz z obniżeniem wartości parametru α i pojawia się minimum.

Konduktancja różniczkowa dla kilku wartości parametru asymetrii α została przedstawiona na Rys. 7.9. Kiedy kropki kwantowe połączone są w geometrii typu T ($\alpha = 0$), to konduktancja posiada dwa maksima położone w $eV = \pm 2t$ oraz jedno minimum w $eV = 0$. Wygaszenie konduktancji w $eV = 0$ jest rezultatem destruktywnej interferencji kwantowej [22]. Wraz z włączeniem sprzężenia kropki QD1 z jej elektrodami minimum w konduktancji różniczkowej zanika. Zamiast minimum, pojawia się trzecie maksimum położone w $eV = 0$. Dla całkowicie symetrycznego układu ($\alpha = 1$) pik ten znika i tylko dwa maksima boczne są obecne w konduktancji różniczkowej. Warto dodać, iż konduktancja rośnie wraz ze wzrostem parametru α , jako że całkowite sprzężenie układu kropek również wzrasta.

7.5 Orbitalny efekt Kondo w obecności procesów niediagonalnych, $q \neq 0$

W celu zbadania wpływu procesów tunelowania elektronów między kropkami poprzez elektrodę na orbitalny efekt Kondo przedstawiony powyżej rozważono układ podobny do poprzedniego z tym, że w obecnym układzie kropki posiadają wspólną lewą (L) i prawą (R) elektrodę. Taki układ pozwala na włączenie efektów pośredniego oddziaływania, jak było to już zrobione w rozdziale 2. Formalnie wyraża to następująca macierz sprzężenia:

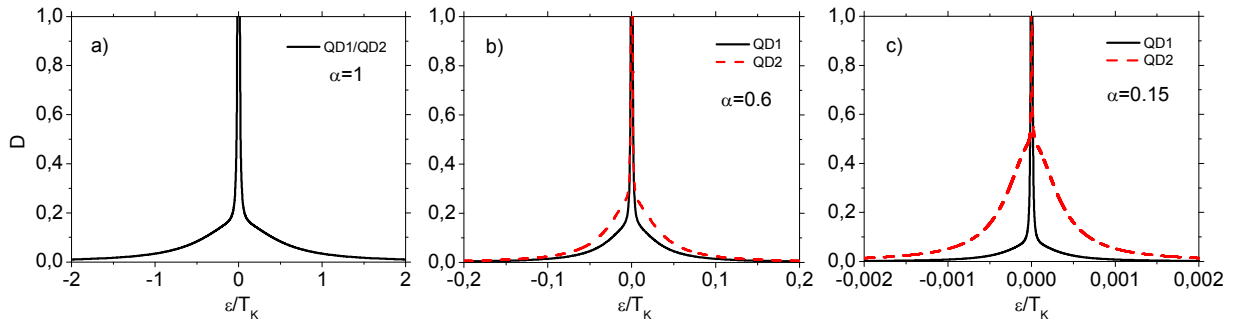
$$\mathbf{\Gamma}^\beta = \Gamma^\beta \begin{pmatrix} \alpha & q_\beta \sqrt{\alpha} \\ q_\beta \sqrt{\alpha} & 1 \end{pmatrix} \quad (7.20)$$

dla lewej ($\beta = L$) i prawej ($\beta = R$) elektrody. W dalszych rozważaniach założono równe wartości tych parametrów $q_L = q_R \equiv q$ spełniające relację $0 \leq q \leq 1$. Prezentowane wyniki zostały otrzymane głównie przy użyciu metody *bozonów pomocniczych* dla temperatury $T = 0$ K.

7.5.1 Efekt Dicke

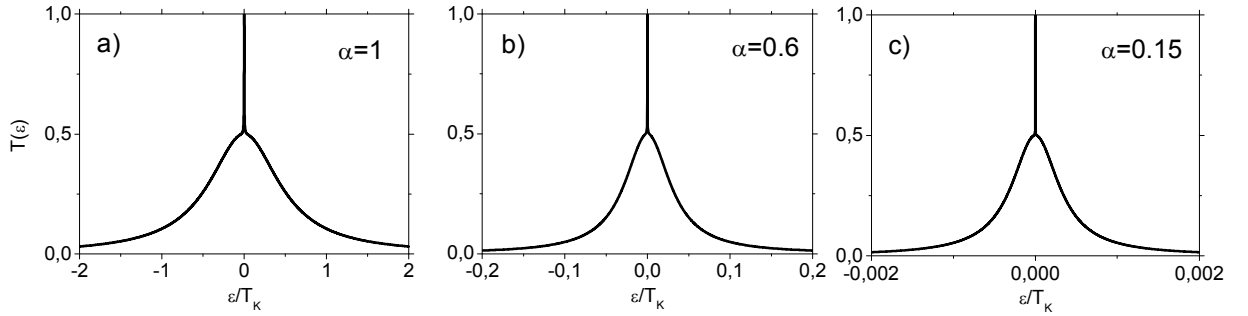
Wpięrw zostanie rozważona sytuacja, w której kropki nie są ze sobą sprzężone bezpośrednio ($t = 0$), a tylko pośrednio poprzez elektrody, $q \neq 0$. W takiej sytuacji poziomy wiążący i antywiążący pokrywają się, a ich wzajemne szerokości zależą od wartości parametru q . Prowadzi to do charakterystycznej dla efektu Dicke linii w gęstości stanów, co przedstawiono na Rys. 7.10. Poprzez analogię do oryginalnego efektu Dicke można powiązać wąski (szeroki) pik Kondo w gęstości stanów ze stanem *subtunelowym* (*supertunelowym*). Kiedy sprzężenie kropek z elektrodami jest symetryczne ($\alpha = 1$), to gęstości stanów dla kropki QD1 oraz QD2 są takie same. W chwili pojawienia się asymetrii w sprzężeniach ($\alpha \neq 1$) powyższe stwierdzenie przestaje być prawdziwe. Wraz ze spadkiem parametru α , szerokości pików Kondo w gęstościach stanów obu kropek również maleją. Obniżenie wartości parametru α sprawia, że szeroka część gęstości stanów kropki silnie sprzężonej z elektrodami (QD2) staje się bardziej widoczna, podczas gdy wąski pik ulega jeszcze większemu zwężeniu. Sprawia to, iż efekt Dicke w gęstości stanów dla kropki QD2 jest wyraźniejszy niż w przypadku kropki QD1.

Efekt Dicke widoczny jest również w transmisji, będącej ściśle związanej z liniową konduktancją, co przedstawiono na Rys. 7.11. Zwężanie się rezonansu Kondo wraz z obniżaniem wartości parametru asymetrii α świadczy o spadku efektywnej temperatury Kondo. Bardziej szczegółowa analiza zostanie podana przy omawianiu zależności temperatury Kondo.



Rysunek 7.10: Gęstość stanów kropki kwantowej QD1, oraz QD2 wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii sprzężeń α , oraz dla $q = 0.99$ przy braku bezpośredniego tunelowania między kropkami kwantowymi ($t = 0$).

Podobnie jak to miało miejsce w przypadku spinowego efektu Kondo rozpatrywanego w rozdziale 5 (dla $q < 1$), tak i obecnie mamy do czynienia ze wzmocnieniem transmisji w pobliżu energii $\varepsilon = 0$, bowiem fazy amplitud transmisji dla kanału wiążącego i antywiążącego są równe dla energii $\varepsilon = 0$ i obydwa składniki interferują ze sobą konstruktywnie prowadząc do maksimum w transmisji w $\varepsilon = 0$.



Rysunek 7.11: Transmisja wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii sprzężeń α , oraz dla $q = 0.99$ przy braku bezpośredniego tunelowania między kropkami kwantowymi ($t = 0$).

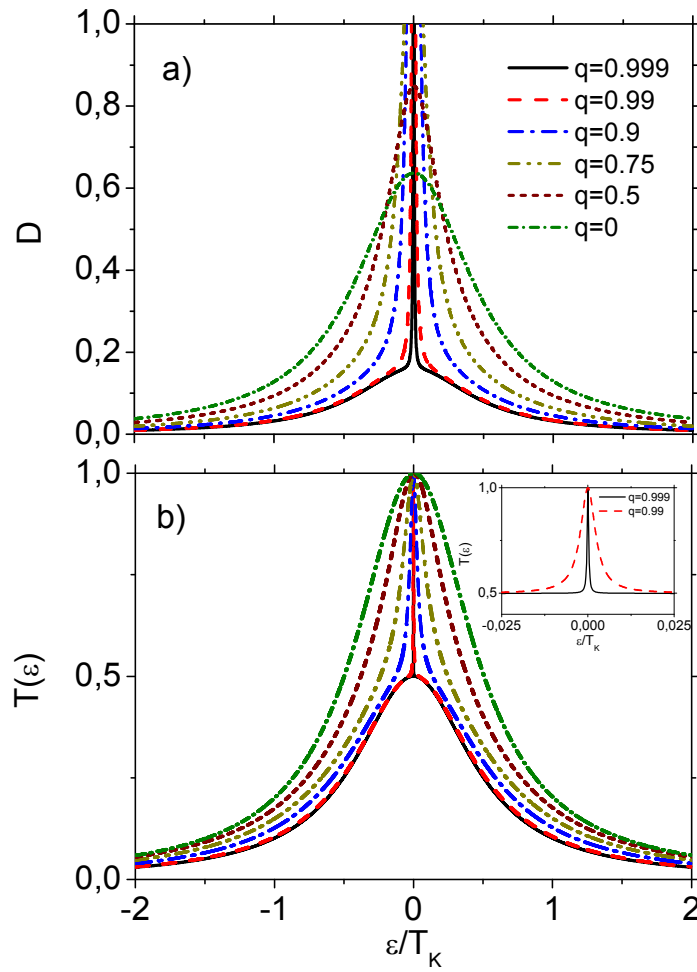
Efekt Dicke jest bardzo czuły na zmianę wartości parametru q co jasno wynika z Rys. 7.12 przedstawiającego gęstość stanów jak i transmisję. Efekt ten występuje praktycznie tylko dla dużych wartości parametru q , natomiast dla mniejszych wartości parametru q linia Dicke przechodzi w krzywą lorenzowską. Poza tym efekt Dicke zanika w transmisji, gdy $q = 1$. Wówczas transmisja posiada również kształt krzywej Lorentza i opisywane jest wyrażeniem:

$$T(\varepsilon) = \frac{1}{2} \frac{(1 + \alpha)^2 \tilde{\Gamma}^2}{(1 + \alpha)^2 \tilde{\Gamma}^2 + (\tilde{\varepsilon}_0 - \varepsilon)^2}, \quad (7.21)$$

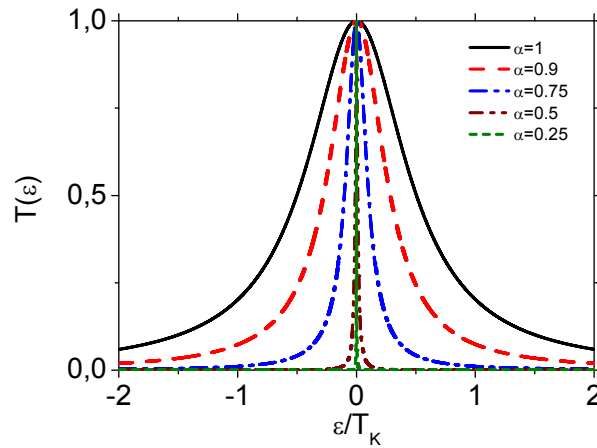
gdzie $\tilde{\Gamma} = \tilde{b}^2 \Gamma / 2$ jest zrenormalizowanym sprzężeniem. Należy jednak pamiętać, że w powyższym wzorze występuje zrenormalizowane sprzężenie. Rozważmy dla przykładu przypadek symetrycznego sprzężenia ($\alpha = 1$). Wiadomo, że w przypadku braku oddziaływań kulombowskich efekt Dicke zanika, gdy $q = 1$, co jest związane z wyłonieniem się *stanu związanego w kontinuum* i rezultatem tego jest linia Lorentza w transmisji [114]. W obecnym przypadku procesy pośredniego tunelowania całkowicie niszczą rezonans Kondo. Można to wytłumaczyć w następujący sposób. Kiedy $q = 1$ i $\alpha = 1$ stan antywiążący jest całkowicie "odłączony" od elektrod co powoduje brak możliwości wymiany elektronu między dwoma stanami molekularnymi. W efekcie efekt Kondo zanika.

Z drugiej strony dla $q = 0$ transmisja dana jest wzorem:

$$T(\varepsilon) = \frac{1}{2} \left[\frac{\tilde{\Gamma}^2}{\tilde{\Gamma}^2 + (\tilde{\varepsilon}_0 - \varepsilon)^2} + \frac{\alpha^2}{\alpha^2 \tilde{\Gamma}^2 + (\tilde{\varepsilon}_0 - \varepsilon)^2} \right]. \quad (7.22)$$



Rysunek 7.12: (a) Gęstość stanów obydwu kropek kwantowych, (b) transmisja wyznaczona dla podanych wartości parametru q , oraz dla $\alpha = 1$ przy braku bezpośredniego tunelowania między kropkami kwantowymi ($t = 0$).



Rysunek 7.13: Transmisja wyznaczona dla podanych wartości parametru α , oraz dla $q = 0$, $t = 0$.

Przypadek ten odpowiada efektowi Kondo w jednopoziomowej kropce kwantowej sprzężonej z ferromagnetycznymi elektrodami, co już zostało wspomniane w tym rozdziale.

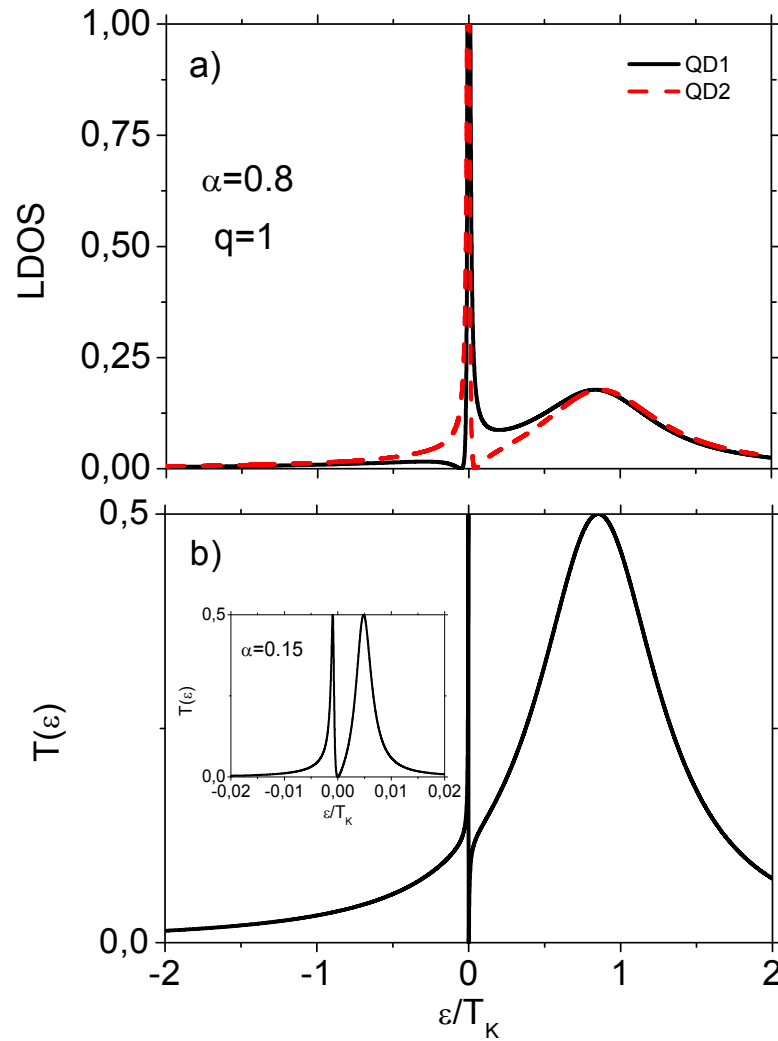
7.5.2 Efekt Fano

Kiedy dozwolone są bezpośrednie przeskoki elektronów między kropkami, wówczas wyjściowa degeneracja poziomów kropek kwantowych zostaje zniesiona i poziom wiążący oraz antywiążący

odsuwają się od siebie. Rezultatem tego są dwa dobrze rozseparowane od siebie piki Kondo w gęstości stanów obu kropek, co widać na Rys. 7.13 przedstawiającym gęstości stanów kropek QD1 oraz QD2 obliczonych dla parametru $q = 1$.

Interesujący jest fakt, że wąskie piki w gęstości stanów dla kropek QD1 i QD2 mają odwrotne symetrie: gęstość stanów kropki QD1 zanika dla ujemnej wartości energii, podczas gdy gęstość stanów kropki QD2 przyjmuje wartość zerową dla dodatniej energii.

Zwykle, gdy asymetria sprzężenia kropek z elektrodami maleje, to szerokość poziomu wiążącego (antywiążącego) rośnie (maleje) i ostatecznie dla $\alpha = 1$ stan antywiążący staje się *stanem związanym w kontinuum*, a poziom wiążący osiąga maksymalną szerokość. W przypadku maksymalnej asymetrii sprzężeń ($\alpha = 0$) obydwa rezonanse przyjmują takie same szerokości. Jednak rozważana obecnie sytuacja jest bardziej skomplikowana, ponieważ szerokości odpowiednich poziomów są renormalizowane poprzez czynnik $\tilde{b}^2$, którego zależność od parametru α musi zostać wyznaczona w sposób samozgodny. Obecnie prawdą jest jedynie fakt, że szerokość poziomu wiążącego mierzona względem szerokości poziomu antywiążącego rośnie ze wzrostem parametru α i jest równa jedności gdy $\alpha = 0$. Jednak, w związku z wspomnianą renormalizacją, szerokości obu pików Kondo mogą być mniejsze dla mniejszych wartości α w porównaniu z szerokością węższego rezonansu dla większej wartości α (z wykluczeniem przypadku $\alpha = 1$).



Rysunek 7.14: (a) Gęstość stanów obydwu kropek kwantowych, (b) transmisja wyznaczona dla $q = 1$, $\alpha = 0.8$, oraz $t = 0.8\Gamma$. Wstawka pokazuje transmisję otrzymaną dla $q = 1$, oraz $\alpha = 0.15$.

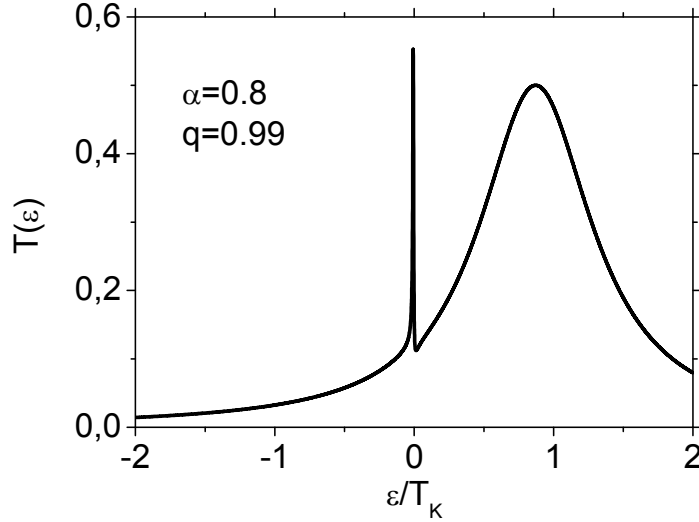
Powyższe zachowanie się gęstości stanów dla zakresu parametru $\alpha \in (0, 1)$ skutkuje antyrezonansem Fano wyłaniającym się w transmisji. Rys. 7.14 przedstawia prawdopodobieństwo transmisji policzone dla parametrów $q = 1$ oraz $\alpha = 0.8$. Dla większej asymetrii sprzężeń antyrezonansowy charakter transmisji jest zachowany, ale stosunek szerokości wąskiego rezonansu

do szerokiego jest większy niż w poprzednim przypadku (wstawka na Rys. 7.14(b)). Wraz z obniżeniem wartości parametru α szerokości obu rezonansów maleją, co świadczy o spadku temperatury Kondo.

Równanie opisujące transmisję dla przypadku $q = 1$ posiada pierwiastki rzeczywiste równe:

$$\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_0 - \frac{2\sqrt{\alpha}}{1+\alpha}\tilde{t}. \quad (7.23)$$

Przestaje to być prawdą dla wartości $q < 1$, gdzie odpowiednie równanie posiada pierwiastki zespolone. Wyjaśnia to fakt dlaczego w przypadku $q < 1$ transmisja nie zanika w pobliżu poziomu antywiążącego i antyrezonans jest mniej wyraźny. Nawet mała zmiana parametru q znacznie zmienia wartość transmisji w okolicach poziomu antywiążącego [Rys. 7.15]



Rysunek 7.15: Transmisja wyznaczona dla $\alpha = 0.$, $t = 0.8\Gamma$, oraz dla $q = 0.99$.

Należy przypomnieć, iż metoda *bozonów pomocniczych* nie bierze pod uwagę renormalizacji opisanej w części 7.2. Gdy renormalizacja ta jest uwzględniona to nawet w przypadku $t = 0$ początkowa degeneracja zostaje zniesiona dla $\alpha \in (0, 1)$. Jednak efekty renormalizacji związane z oddziaływaniem kropek poprzez elektrody nie mogą zostać skompensowane napięciami bramkującymi. Efekty te muszą więc być uwzględnione, a wówczas rezultaty z Rys. 7.14 powinny się zmienić i stać się podobne do tych z Rys. 7.15.

7.5.3 Skalowanie poziomów energetycznych i temperatura Kondo

Skalowanie

W celu zaadaptowania procedury skalowania do przypadku, w którym występują procesy tune-lowie zachodzące między kropkami za pośrednictwem elektrod, należy przededefiniować rozważany model. Dokonanie zmiany polega na rozdzieleniu stanów w elektrodzie na dwa kanały. Jeśli poziomy orbitalne dwóch kropek mają różne symetrie, wówczas wydaje się naturalne rozdzielenie stanów w elektrodach w odniesieniu do tych symetrii. Jako, że kropki opisuje ten sam model, w obecnym przypadku stany w elektrodach są rozdzielone w sposób arbitralny: połowa stanów przypisana jest do jednego kanału, a druga połowa do pozostałego. Takie podejście odpowiada podziałowi elektrody na dwie połowy i powiązanie z każdą połową osobnego kanału. Hamiltonian elektrod można zapisać w następującej postaci

$$\hat{H}_{\text{leads}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\beta=L,R} \sum_{\mu=1,2} \varepsilon_{\mathbf{k}\beta\mu} c_{\mathbf{k}\beta\mu}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\beta\mu}, \quad (7.24)$$

gdzie $c_{\mathbf{k}\beta\mu}$ jest operatorem anihilacji elektronu o wektorze falowym $\mathbf{k}$ w kanale μ elektrody β . Wskaźnik μ został wprowadzony do energii $\varepsilon_{\mathbf{k}\beta\mu}$ tylko formalnie, bowiem energia ta i tak

nie zależy od numeru kanału μ , $\varepsilon_{\mathbf{k}\beta\mu} = \varepsilon_{\mathbf{k}\beta}$. Warto zauważyć, że zbiór dozwolonych wektorów falowych $\mathbf{k}$ jest zredukowany o połowę, ale liczba wszystkich stanów (z obu kanałów) jest zachowana. Człon tunelowy Hamiltonianu układu wyraża się następująco:

$$\hat{H}_T = \sum_{\mathbf{k}\beta} \sum_{i=1,2} \sum_{\mu=1,2} (V_{\mu\mathbf{k}}^\beta c_{\mathbf{k}\beta\mu}^\dagger d_i + \text{H.c.}), \quad (7.25)$$

gdzie $V_{\mu\mathbf{k}}^\beta$ sprzęga poziom orbitalny i -tej kropki z kanałem μ w elektrodzie β . Również parametry $V_{\mu\mathbf{k}}^\beta$ nie zależą od numeru kanału μ , $V_{\mu\mathbf{k}}^\beta = V_{i\mathbf{k}}^\beta$, a indeks ten jest zatrzymany z powodów formalnych.

W dalszych rozważaniach zaniedbuje się zależność amplitud tunelowych od wektora falowego zakładając $V_{\mu\mathbf{k}}^\beta = V_{\mu i}^\beta$ ($V_{i\mathbf{k}}^\beta = V_i^\beta$). Założenie to, szeroko stosowane w literaturze, pozwala wyrazić elementy macierzy sprzężenia Γ_{ij}^β za pomocą gęstości stanów elektrod. Założono również jednakowe elektrody $\varepsilon_{\mathbf{k}L\mu} = \varepsilon_{\mathbf{k}R\mu} = \varepsilon_{\mathbf{k}\mu}$, oraz takie same sprzężenia danej kropki do obu elektrod $V_{\mu i}^\beta = V_{\mu i}$ ($V_i^\beta = V_i$).

Transformacja unitarna stanów elektronowych w elektrodach prowadzi do modów $c_{\mathbf{k}\mu} = (c_{\mathbf{k}L\mu} + c_{\mathbf{k}R\mu})/\sqrt{2}$ oraz $b_{\mathbf{k}\mu} = (c_{\mathbf{k}L\mu} - c_{\mathbf{k}R\mu})/\sqrt{2}$. Mod $c_{\mathbf{k}\mu}$ jest sprzężony do i -tej kropki z siłą $\bar{V}_{\mu i} = \sqrt{2}V_{\mu i}$, podczas gdy mod $b_{\mathbf{k}\mu}$ jest całkowicie rozprzęgnięty i można go pominąć. Powyższa transformacja pozwala zastąpić dwie elektrody przez pojedynczą efektywną elektrodę. W nowej reprezentacji Hamiltonian przyjmuje postać:

$$\hat{H}_{\text{leads}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mu=1,2} \varepsilon_{\mathbf{k}\mu} c_{\mathbf{k}\mu}^\dagger c_{\mathbf{k}\mu}, \quad (7.26)$$

$$\hat{H}_T = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i=1,2} \sum_{\mu=1,2} (\bar{V}_{\mu i} c_{\mathbf{k}\mu}^\dagger d_i + \text{h.c.}). \quad (7.27)$$

Mając tak zdefiniowany układ, można zastosować procedurę skalowania. Dla prostoty rozważania zostały ograniczone do przypadku $V_1 = V_2$. Jednak aby właściwie uwzględnić procesy pośredniego tunelowania między kropkami należy przetransformować układ kropek do reprezentacji stanu symetrycznego (parzystego - e) i antysymetrycznego (nieparzystego - o) w następujący sposób:

$$c_{\mathbf{k}e(o)} = (c_{\mathbf{k}1} \pm c_{\mathbf{k}2})/\sqrt{2} \quad (7.28)$$

$$d_{e(o)} = (d_1 \pm d_2)/\sqrt{2} \quad (7.29)$$

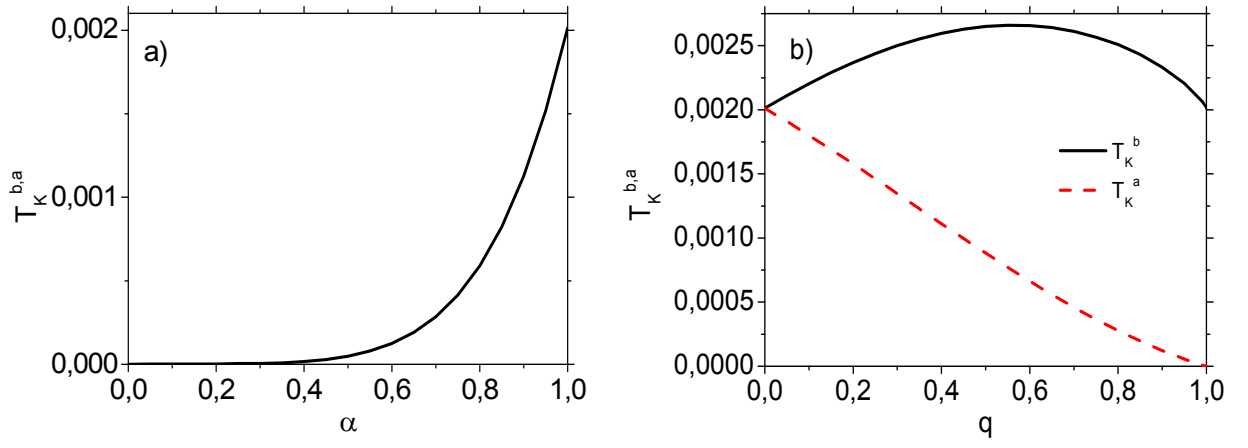
Zakładając $V_{11} = V_{22} \equiv V_0$ oraz $V_{12} = V_{21} \equiv V_q$, Hamiltonian układu przyjmuje następującą postać:

$$\bar{H} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\nu=e,o} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\nu}^\dagger c_{\mathbf{k}\nu} + \sum_{\nu=e,o} \varepsilon_{\nu} d_{\nu}^\dagger d_{\nu} + U n_e n_o + \sum_{\mathbf{k}\beta} \sum_{\nu=e,o} (V_{\nu}^\beta c_{\mathbf{k}\nu}^\dagger d_{\nu} + \text{H.c.}) \quad (7.30)$$

gdzie $V_e = V_0 + V_q$ and $V_o = V_0 - V_q$. Wprowadzając parametryzację: $V_0 = V \cos \theta$ oraz $V_q = V \sin \theta$, wówczas amplitudy tunelowe związane z kanałem *parzystym* oraz *nieparzystym* można przepisać $V_e = V(\cos \theta + \sin \theta)$ oraz $V_o = V(\cos \theta - \sin \theta)$, gdzie $\theta \in \langle 0, \pi/4 \rangle$. Dla $\theta = 0$ dozwolone są tylko akty bezpośredniego tunelowania elektronów, natomiast gdy $\theta = \pi/4$ procesy pośrednie i bezpośrednie są równouprawnione. Szerokości poziomów *parzystego* oraz *nieparzystego* można wyrazić za pomocą nowych zmiennych $\Gamma_e = \Gamma_V(1 + \sin 2\theta)$ oraz $\Gamma_o = \Gamma_V(1 - \sin 2\theta)$. Stosując podstawienie $\sin 2\theta \equiv \Omega$, wielkości te można wyrazić w zwartej postaci $\Gamma_e = \Gamma_V(1 + \Omega)$ oraz $\Gamma_o = \Gamma_V(1 - \Omega)$, gdzie $\Omega \in \langle 0, 1 \rangle$. Teraz dla $\Omega \neq 0$ stany *parzysty* oraz *nieparzysty* nie są jednakowo sprzężone do elektrod, tj. istnieją procesy tunelowe ze zmianą kanału.

Wykonując procedurę skalowania otrzymuje się zrenormalizowane parametry postaci:

$$\tilde{\varepsilon}_{\nu} = \varepsilon_{\nu} - E_0 + \frac{\Gamma_{\nu}}{2\pi} \frac{\delta D}{D}, \quad (7.31)$$



Rysunek 7.16: (a) Temperatura Kondo w funkcji parametru asymetrii sprzężeń α wyznaczona dla kanału wiążącego, oraz antywiążącego, oraz dla $q = 0$, $t = 0$; (b) Temperatura Kondo w funkcji parametru q wyznaczona dla obydwu kanałów, oraz dla $\alpha = 1$, $t = 0$.

gdzie E_0 to energia stanu nieobsadzonego (początkowo $E_0 = 0$), a indeks $\bar{\nu} = e$ dla $\nu = o$ oraz $\bar{\nu} = o$ dla $\nu = e$. Procedura ta prowadzi do następującego równania skalowania:

$$\frac{d\tilde{\varepsilon}_{\bar{\nu}}}{d \ln D} = -\frac{\Gamma_{\bar{\nu}}}{2\pi}, \quad (7.32)$$

z którego łatwo wyznaczyć separacje między poziomami energetycznymi otrzymując formułę:

$$\Delta\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_e - \tilde{\varepsilon}_o = \varepsilon_e - \varepsilon_o + \frac{(\Gamma_o - \Gamma_e)}{2\pi} \ln \left(\frac{D}{\tilde{D}} \right), \quad (7.33)$$

Wstawiając jawne wyrażenia na sprzężenia tunelowe do równania (7.33) otrzymujemy wyrażenie na rozszczepienie poziomów wyrażone bezpośrednio przez parametr "mieszania" kanałów Ω :

$$\Delta\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_e - \varepsilon_o - \Omega \frac{\Gamma_V}{\pi} \ln \left(\frac{D}{\tilde{D}} \right). \quad (7.34)$$

Po pierwsze, nawet w nieobecności bezpośredniego sprzężenia tunelowego kropek ($t = 0$) początkowa degeneracja poziomów $\varepsilon_e = \varepsilon_o$ zostaje usunięta jeśli tylko $\Omega > 0$. Po drugie, separacja ta rośnie wraz ze wzrostem amplitudy procesów pośrednich i osiąga maksymalną wartość kiedy amplituda procesów "mieszkających" kanały jest maksymalna.

Temperatura Kondo

Temperatura Kondo została wyznaczona dla kanału związanego ze stanem wiążącym oraz kanału antywiążącego przy użyciu formuły (7.16) zapisanej dla obu kanałów:

$$\begin{aligned} T_K^b &\equiv \sqrt{\tilde{\varepsilon}_0^2 + \tilde{\Gamma}_b^2}, \\ T_K^a &\equiv \sqrt{\tilde{\varepsilon}_0^2 + \tilde{\Gamma}_a^2}, \end{aligned} \quad (7.35)$$

gdzie zrenormalizowane sprzężenia: $\tilde{\Gamma}_b = \tilde{b}^2 \Gamma_b$, $\tilde{\Gamma}_a = \tilde{b}^2 \Gamma_a$ z $\Gamma_{b,a} = \frac{1}{2}(\Gamma_{11} + \Gamma_{22}) \pm q\sqrt{\Gamma_{11}\Gamma_{22}}$ oraz $\Gamma_{ii} = \Gamma_{ii}^L + \Gamma_{ii}^R$ dla $i = 1, 2$. Wpierw wyznaczono zależność temperatury Kondo (dla obu kanałów) w funkcji parametru asymetrii sprzężeń α oraz w nieobecności bezpośredniego i pośredniego sprzężenia kropek ($t = 0$ oraz $q = 0$). Wówczas temperatury Kondo dla obu kanałów są jednakowe i maleją gdy asymetria sprzężeń rośnie (α maleje) i ostatecznie dla $\alpha = 0$ zanika [Rys. 7.16(a)]. Takie zachowanie wynika z wygaszania fluktuacji ładunku w układzie kropek wraz ze spadkiem wartości parametru α . Ostatecznie, gdy jedna z kropek jest całkowicie

odizolowana od elektrod fluktuacje te również zanikają, a temperatura Kondo osiąga wartość $T_K = 0$.

Rys. 7.16(b) przedstawia zależność temperatury Kondo odpowiadającej kanałowi wiążącemu oraz antywiązącemu od parametru q obliczonej dla przypadku symetrycznych sprzężeń $\alpha = 1$. Widać, iż temperatury Kondo dla obu kanałów zachowują się w różny sposób wraz ze zmianą wartości pozadiagonalnych elementów macierzy sprzężenia. Temperatura Kondo związana z kanałem wiążącym zmienia się w sposób niemonotoniczny, ale raczej powoli, podczas gdy ta odpowiadająca kanałowi antywiązącemu maleje monotonicznie do zera wraz ze wzrostem parametru q . Zanik temperatury Kondo związanej z kanałem antywiązącym, gdy parametr q jest maksymalny, odpowiada za wygaszenie efektu Dicke opisywanego powyżej.

7.6 Podsumowanie

W rozdziale tym rozważano orbitalny efekt Kondo w układzie dwóch kropek kwantowych dołączonych do zewnętrznych elektrod w różnych konfiguracjach. W pierwszym przypadku każda kropka posiadała własną parę elektrod transportowych. W celu opisanie zjawiska Kondo w takim układzie zastosowano różne techniki obliczeniowe. Wykorzystano procedurę skalowania aby otrzymać zrenormalizowane poziomy kropek kwantowych oraz temperaturę Kondo. Obliczenia te pokazały, że asymetria sprzężenia kropek z elektrodami generuje rozszczepienie rezonansu Kondo a jej wzrost prowadzi do zaniku temperatury Kondo. Za pomocą metody *bozonów pomocniczych* obliczono liniową konduktancję oraz temperaturę Kondo. Otrzymane wyniki są jakościowo zgodne z tymi uzyskanymi za pomocą metody skalowania. Obliczenia nierównowagowe zostały wykonane za pomocą metody nierównowagowych funkcji Greena. Otrzymane rezultaty pokazały analogiczne zachowanie się konduktancji różniczkowej jak to uzyskane dla pojedynczej kropki kwantowej sprzężonej z ferromagnetycznymi elektrodami. Włączenie sprzężenia tunelowego między kropkami prowadzi do bogatszej struktury w konduktancji różniczkowej.

Następnie opisano wpływ pośredniego sprzężenia między kropkami na gęstość stanów oraz transmisję. Otrzymane wyniki pokazały, że dla odpowiednio dobranych parametrów układu można zaobserwować efekt Dicke lub efekt Fano. Również dla tego przypadku wyznaczono zrenormalizowane poziomy energetyczne oraz temperaturę Kondo. Wyniki te pokazały, że pośrednie sprzężenie między kropkami prowadzi do zniesienia początkowo założonej degeneracji poziomów kropek.

Część III

Odbicie Andreeva, efekty
termoelektryczne i dudnienia w układzie
dwóch kropek kwantowych

Rozdział 8

Odbicie Andreeva w układzie dwóch kropek kwantowych

W rozdziale tym zostanie zbadany transport elektronowy przez układ dwóch kropek kwantowych sprzężonych z elektrodami ferromagnetycznymi (lub niemagnetycznymi) i jedną elektrodą nadprzewodzącą. Ze względu na występowanie przerwy energetycznej Δ w gęstości stanów nadprzewodnika, dla napięć mniejszych od szerokości tej przerwy, $|eV| < \Delta$, normalne procesy tunelowe są zablokowane. Jednak dla tego zakresu napięć mogą występować procesy tunelowe będące analogonami procesów transportowych występujących na granicy normalny metal/nadprzewodnik, wynikających z tzw. *odbicia Andreeva* [116, 117].

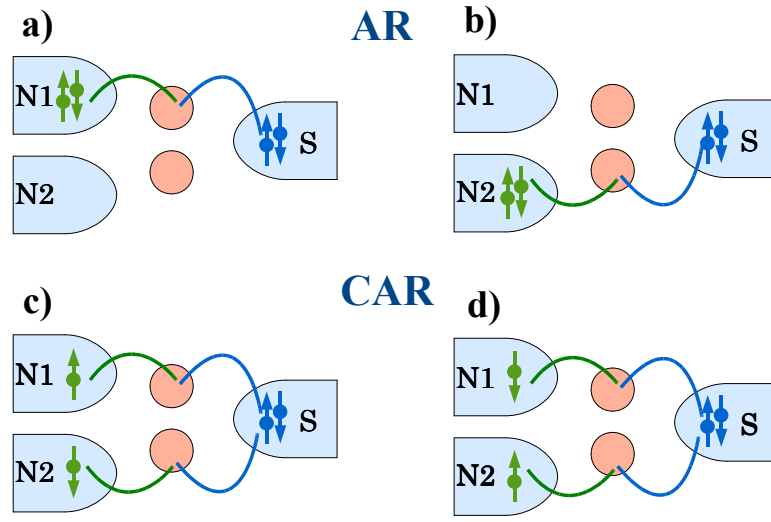
Elektron o energii $\varepsilon < \Delta$ padający z normalnego metalu na granicę z nadprzewodnikiem (w skrócie N/S) nie może propagować do nadprzewodnika jako kwazicząstka, bowiem w obszarze przerwy nadprzewodzącej nie ma żadnych stanów kwazicząstkowych. Wobec tego elektron taki zostaje odbity od granicy normalny metal-nadprzewodnik. Możliwy jest również inny scenariusz. Elektron taki zostaje odbity jako dziura, a do nadprzewodnika wchodzi para elektronów tworząca parę Coopera. W takim procesie odbita dziura posiada spin przeciwnie zorientowany do spinu elektronu padającego i energię $-\varepsilon$. Dla napięć $|eV| \ll \Delta$ praktycznie wszystkie elektrony padające na granicę N/S zostają odbite w taki sposób, co skutkuje dwukrotnie większą konduktancją niż w stanie normalnym [117].

8.1 Odbicie Andreeva w układzie dwóch kropek kwantowych

Elektron tunelujący z elektrody normalnej o energii ϵ (mierzonej względem poziomu Fermiego nadprzewodnika, $\mu_S = 0$) poprzez poziom dyskretny kropki kwantowej nie może tunelować do nadprzewodnika, gdy $|\epsilon| < \Delta$. Jednak może niejako wyrwać drugi elektron o energii $-\epsilon$ i przeciwnym spinie by utworzyć parę Coopera i przetunelować do elektrody nadprzewodzącej, przy czym zostaje odbita dziura (o energii $-\epsilon$) do elektrody normalnej. Proces taki schematycznie przedstawiono na Rys. 8.1. Na potrzeby tego rozdziału procesy takie będziemy nazywać raczej procesami tunelowania Andreeva, aniżeli *odbiciem Andreeva* co jest adekwatne dla międzywierzchni normalny metal-nadprzewodnik, gdzie nie ma bariery tunelowej.

Jeszcze bogatszą gamę procesów tunelowych typu Andreeva daje układ złożony z dwóch kropek kwantowych sprzężonych do wspólnej elektrody nadprzewodzącej, z których każda posiada własną elektrodę normalną (bądź magnetyczną). Schemat takiego układu wraz z możliwymi procesami tunelowymi w reżimie Andreeva pokazany jest na Rys. 8.1. Jeśli procesy tunelowania Andreeva odbywają się za pośrednictwem tylko jednej z dwóch kropek, to procesy te nazywać będziemy po prostu zwykłymi procesami tunelowania Andreeva [Rys. 8.1 (a-b)]. Natomiast, gdy w pojedynczym procesie tunelowania Andreeva uczestniczą obydwie kropki to taki proces nazywać będziemy procesem Andreeva typu CAR⁷. Warto zaznaczyć, iż ostatnio taki układ został przebadany eksperymentalnie [118, 119]. W eksperymentach tych pokazano, że układ taki

⁷CAR - z z ang. *crossed Andreev reflection*.



Rysunek 8.1: Schematyczne przedstawienie procesów tunelowania Andreeva w układzie dwóch kropek kwantowych.

może efektywnie działać jako rozdzielacz par Coopera dzięki możliwości niezależnej manipulacji położeniami poziomów energetycznych obydwu kropek kwantowych. W rozdziale tym będzie jednak omawiany problem niejako odwrotny, tzn. kreacja par Coopera z niezależnych elektronów tunelujących z elektrod normalnych (bądź ferromagnetycznych) do układu dwóch kropek kwantowych sprzężonych z elektrodą nadprzewodzącą. Taka konwersja prądu ładunkowego na prąd par wykorzystuje procesy Andreeva typu AR oraz CAR. Zostanie również pokazane, iż taki prąd może być otrzymany wyłącznie przy wykorzystaniu procesów CAR dzięki dołączeniu elektrod magnetycznych (półmetalicznych). Warto wspomnieć, że przeprowadzono już pierwsze eksperymenty transportowe z kropką kwantową dołączoną do jednej nadprzewodzącej i jednej ferromagnetycznej elektrody [120].

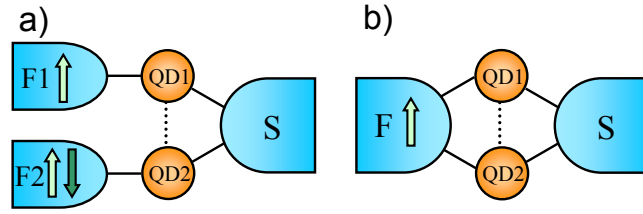
8.2 Model układu i metoda

W rozdziale tym zostanie przeanalizowany transport elektronowy przez układ dwóch kropek kwantowych dla dwóch różnych konfiguracji. W pierwszej z nich kropki kwantowe będą dołączone do jednej wspólnej elektrody magnetycznej, bądź niemagnetycznej, oraz jednej wspólnej elektrody nadprzewodzącej. Układ ten jest równoważny układowi rozpatrywanemu w Rozdziale 2, z tym, że jedną z elektrod, np. elektrodę R , należy zastąpić elektrodą nadprzewodzącą. W drugim z rozpatrywanych tutaj przypadków, każda z kropek będzie posiadać własną elektrodę magnetyczną, a elektroda nadprzewodząca będzie wspólna dla obu kropek. Obydwa układy zostały schematycznie przedstawione na Rys. 8.2. Momenty magnetyczne elektrod ferromagnetycznych mogą znajdować się w jednej z dwóch konfiguracji magnetycznych: równoległej bądź antyrównoległej, co schematycznie jest zaznaczone strzałkami na rysunku 8.2 Układ kropek opisywany jest Hamiltonianem postaci $\hat{H}_{DQD} = \sum_{i\sigma} \varepsilon_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} - t(d_{1\sigma}^\dagger d_{2\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_i U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}$, gdzie znaczenie poszczególnych symboli zostało wyjaśnione w Rozdziale 2.

Hamiltonian elektrod można zapisać jako $H_{\text{leads}} = H_L + H_R$, gdzie H_L opisuje elektrodę(y), magnetyczne bądź niemagnetyczne, w przybliżeniu nieoddziaływujących elektronów. Nadprzewodząca elektroda została opisana Hamiltonianem BCS w przybliżeniu pola średniego [117]:

$$H_R = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}R\sigma} c_{\mathbf{k}R\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}R\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta^* c_{\mathbf{k}R\downarrow} c_{-\mathbf{k}R\uparrow} + \Delta c_{-\mathbf{k}R\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}R\downarrow}^\dagger \right), \quad (8.1)$$

gdzie $\Delta = |\Delta|e^{i\Phi}$ jest parametrem porządku nadprzewodnika z $|\Delta|$ będącą przerwą nadprzewodnika, a Φ odpowiednią fazą.



Rysunek 8.2: Schematy rozpatrywanych układów kropek kwantowych dołączonych do jednej elektrody magnetycznej (a) bądź dwóch elektrod magnetycznych (b) oraz do jednej elektrody nadprzewodzącej. W przypadku (a) namagnesowania elektrod ferromagnetycznych mogą znajdować się w dwóch konfiguracjach: równoległej i antyrównoległej.

Prąd płynący przez układ został wyznaczony przy użyciu formalizmu nierównowagowych funkcji Greena. Odpowiednia formuła ma następującą postać [122]:

$$J = \frac{ie}{2\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \{ [\Gamma_L^\sigma - \Gamma_R^\sigma] \mathbf{G}_\sigma^<(\omega) + [\mathbf{f}_L(\omega) \Gamma_L^\sigma - \mathbf{f}_R(\omega) \Gamma_R^\sigma] [\mathbf{G}_\sigma^r(\omega) - \mathbf{G}_\sigma^a(\omega)] \}, \quad (8.2)$$

gdzie $\mathbf{G}^{r,a,<}$, Γ_β^σ , oraz $\mathbf{f}_\beta(\omega)$ są macierzami transformat Fouriera funkcji Greena, sprzężeń układu kropek z elektrodą $\beta = L, R$, oraz funkcji Fermiego-Diraca. Jawna postać tych macierzy zostanie podana później. Warto zaznaczyć, że powyższa formuła jest uogólnieniem wzoru na prąd Meira-Wingreena [27] i pozwala badać transport przez układy mezoskopowe sprzężone z różnymi kombinacjami elektrod wykonanych z normalnego metalu, ferromagnetyka, czy też nadprzewodnika.

W nieobecności oddziaływań w centralnym regionie układu (w układzie kropek), tudzież w przybliżeniu pola średniego, słuszne są następujące relacje Keldysza:

$$\mathbf{G}^< = \mathbf{G}^r \Sigma^< \mathbf{G}^a, \quad (8.3)$$

$$\Sigma^< = \Sigma_L^< + \Sigma_R^< = i(\mathbf{f}_L(\omega) \Gamma_L + \mathbf{f}_R(\omega) \Gamma_R). \quad (8.4)$$

Korzystając z równań (8.3-8.4) oraz z równości $\mathbf{G}^r - \mathbf{G}^a = -i\mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma} \mathbf{G}^a$, gdzie $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{\Gamma}_L + \mathbf{\Gamma}_R$ można uprościć wyrażenie (8.2) do odpowiedniej formuły typu Landauera. W przypadku, gdy lewa elektroda ($\beta = L$) jest wykonana z ferromagnetyka, do którego przyłożono napięcie $\mu_L = eV$, natomiast prawa elektroda ($\beta = R$) jest nadprzewodząca z potencjałem chemicznym $\mu_R = 0$, wówczas prąd płynący przez układ można rozdzielić na dwie części:

$$J = J^S + J^A, \quad (8.5)$$

gdzie

$$J^S = \frac{e}{h} \int d\omega [f_L(\omega - eV) - f_R(\omega)] \sum_{i=1,3,\dots} [\mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma}_R \mathbf{G}^a \mathbf{\Gamma}_L]_{ii}, \quad (8.6)$$

$$J^A = \frac{e}{h} \int d\omega [f_L(\omega - eV) - f_L(\omega + eV)] \sum_{i=1,3,\dots}^{j=2,4} G_{ij}^r [\mathbf{\Gamma}_L \mathbf{G}^a \mathbf{\Gamma}_L]_{ji}. \quad (8.7)$$

Prąd J^A wywodzi się od procesów *odbicia Andreeva*, w których elektron z lewej elektrody tunelujący do elektrody nadprzewodzącej zostaje "odbity" do lewej elektrody jako dziura, przy czym w prawej elektrodzie zostaje wykreowana para Coopera. Natomiast prąd J^S wynika z następujących procesów tunelowych: (i) konwencjonalnego tunelowania elektronów, (ii) procesów, w których elektron propagujący z lewej elektrody przez centralny region zostaje "zamieniony" w dziurę w (prawej), nadprzewodzącej elektrodzie⁸, (iii) procesów, w których elektron (dziura) z lewej elektrody tuneluje do elektrody nadprzewodzącej "wyrywa" kwazicząstkę (kwazidziurę) w nadprzewodniku kreując (anihilując) parę Coopera. W temperaturze $T = 0$ K i dla napięć

⁸Proces taki, w teorii BTK (Blonder-Tinkham-Klapwijk) nazywany jest procesem *branch crossing*.

$|eV| < \Delta$ człon J^S znika, $J^S = 0$. Wówczas tylko człon związany z prądem Andreeva J^A daje wkład do transportu. Jednakże dla $|eV| > \Delta$ obydwa składniki dają wkład do prądu.

Funkcje Greena występujące w równaniu (8.2) oraz (8.6-8.7) są zdefiniowane:

$$\mathbf{G}^r(t, t') = -i\theta(t - t')\langle\{\Psi(t), \Psi^\dagger(t')\}\rangle, \quad (8.8)$$

$$\mathbf{G}^<(t, t') = i\langle\Psi^\dagger(t')\Psi(t)\rangle. \quad (8.9)$$

W definicjach tych funkcji wprowadzono notację Nambu [121], gdzie Ψ jest wektorem postaci $\Psi = (d_{1\sigma}, d_{1\bar{\sigma}}, d_{2\sigma}, d_{2\bar{\sigma}})$. Opóźniona funkcja Greena $\mathbf{G}^<(\varepsilon)$ została wyznaczona za pomocą równania Dysona postaci:

$$\mathbf{G}^r = [(\mathbf{g}^r)^{-1} + \mathbf{\Sigma}^r]^{-1}, \quad (8.10)$$

gdzie $\mathbf{g}^r$ jest transformatą Fouriera opóźnionej funkcji Greena układu kropek odizolowanych od elektrod, a $\mathbf{\Sigma}^r$ oznacza energię własną wynikającą z oddziaływania kropek kwantowych z elektrodami. Przedwczesna funkcja Greena jest wyznaczana z równości $\mathbf{G}^a = [\mathbf{G}^r]^\dagger$, natomiast korelacyjna funkcja Greena $\mathbf{G}^<$ otrzymana zostaje następnie z równania (8.3). W celu znalezienia funkcji Greena $\mathbf{G}^r$ należy wyznaczyć funkcję Greena $\mathbf{g}^r$ oraz znać postać energii własnej $\mathbf{\Sigma}^r$. Funkcję $\mathbf{g}^r$ wyznaczono stosując technikę równań ruchu. Dokładny wynik przedstawiono w Dodatku F.

Energie własne $\mathbf{\Sigma}_\beta^r$ wynikające ze sprzężenia tunelowego elektrod z kropkami kwantowymi są wyrażone następująco:

$$\mathbf{\Sigma}_\beta^r = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{V}_\beta^\dagger \mathbf{g}_{\beta\mathbf{k}}^r \mathbf{V}_\beta, \quad (8.11)$$

gdzie $\mathbf{V}_\beta$ jest macierzą diagonalną postaci $[\mathbf{V}_\beta]_{diag} = (V_{\beta 1}^\sigma, -V_{\beta 1}^{\bar{\sigma}*}, V_{\beta 2}^\sigma, -V_{\beta 2}^{\bar{\sigma}*})$, a $\mathbf{g}_{\beta\mathbf{k}}^r$ oznacza opóźnioną funkcję Greena swobodnej elektrody ferromagnetycznej ($\beta = L$), oraz nadprzewodzącej ($\beta = R$). Znalezienie funkcji Greena elektrody ferromagnetycznej nie nastęrcza żadnych trudności, a otrzymany wynik pozwala zapisać energię własną $\mathbf{\Sigma}_L^r$ w przybliżeniu szerokiego pasma, następująco:

$$\mathbf{\Sigma}_L^{\sigma r} = -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} \Gamma_{L11}^\sigma & 0 & \Gamma_{L12}^\sigma & 0 \\ 0 & \Gamma_{L11}^{\bar{\sigma}} & 0 & \Gamma_{L12}^{\bar{\sigma}} \\ \Gamma_{L12}^\sigma & 0 & \Gamma_{L22}^\sigma & 0 \\ 0 & \Gamma_{L12}^{\bar{\sigma}} & 0 & \Gamma_{L22}^{\bar{\sigma}} \end{pmatrix}, \quad (8.12)$$

gdzie skorzystano z faktu, że $\Gamma_{L21}^\sigma = \Gamma_{L12}^{\bar{\sigma}}$. Macierz w równaniu (8.12) definiuje macierz sprzężenia układu kropek z lewą elektrodą, toteż wzór (8.12) można zapisać jako $\mathbf{\Sigma}_L^{\sigma r} = \frac{i}{2}\Gamma$. Wyznaczenie funkcji Greena elektrody nadprzewodzącej jest bardziej skomplikowane, toteż jej wyprowadzenie zostało podane w Dodatku F. Otrzymana energia własna ma postać:

$$\mathbf{\Sigma}_R^r = -\frac{i}{2}\tilde{\rho}_R(\varepsilon) \begin{pmatrix} \Gamma_{R11} & -\tilde{\sigma}\frac{\Delta}{|\varepsilon|}\Gamma_{R11} & \Gamma_{R12} & -\tilde{\sigma}\frac{\Delta}{|\varepsilon|}\Gamma_{R12} \\ -\tilde{\sigma}\frac{\Delta}{|\varepsilon|}\Gamma_{R11} & \Gamma_{R11} & -\tilde{\sigma}\frac{\Delta}{|\varepsilon|}\Gamma_{R12} & \Gamma_{R12} \\ \Gamma_{L12} & -\tilde{\sigma}\frac{\Delta}{|\varepsilon|}\Gamma_{R12} & \Gamma_{R22} & -\tilde{\sigma}\frac{\Delta}{|\varepsilon|}\Gamma_{R11} \\ -\tilde{\sigma}\frac{\Delta}{|\varepsilon|}\Gamma_{R12} & \Gamma_{R12} & -\tilde{\sigma}\frac{\Delta}{|\varepsilon|}\Gamma_{R22} & \Gamma_{R22} \end{pmatrix}, \quad (8.13)$$

gdzie $\tilde{\rho}_R(\varepsilon)$ oznacza bezwymiarową, zmodyfikowaną gęstość stanów elektrody nadprzewodzącej otrzymaną w ramach teorii BCS. Gęstość stanów $\tilde{\rho}_R(\varepsilon)$ ma następującą postać:

$$\tilde{\rho}_R(\varepsilon) = \frac{|\varepsilon|\theta(|\varepsilon| - \Delta)}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}} + \frac{\varepsilon\theta(\Delta - |\varepsilon|)}{i\sqrt{\Delta^2 - \varepsilon^2}}. \quad (8.14)$$

Należy wspomnieć, iż zwykła, niezmodyfikowana gęstość stanów, będącą stosunkiem gęstości stanów w fazie nadprzewodzącej do gęstości stanów w fazie normalnej, zawiera tylko pierwszy człon równania (8.14). Również macierz sprzężeń $\mathbf{\Gamma}_R$ należy definiować poprzez niezmodyfikowaną gęstość stanów. W równaniu (8.13) należy położyć $\tilde{\sigma} = 1$ dla $\sigma = \uparrow$, oraz $\tilde{\sigma} = -1$ dla $\sigma = \downarrow$. Pozostało jeszcze zdefiniować macierz $\mathbf{f}_\beta$. Przybiera ona postać:

$$\mathbf{f}_L = \begin{pmatrix} f(\varepsilon - eV) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f(\varepsilon + eV) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & f(\varepsilon - eV) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f(\varepsilon + eV) \end{pmatrix} \quad (8.15)$$

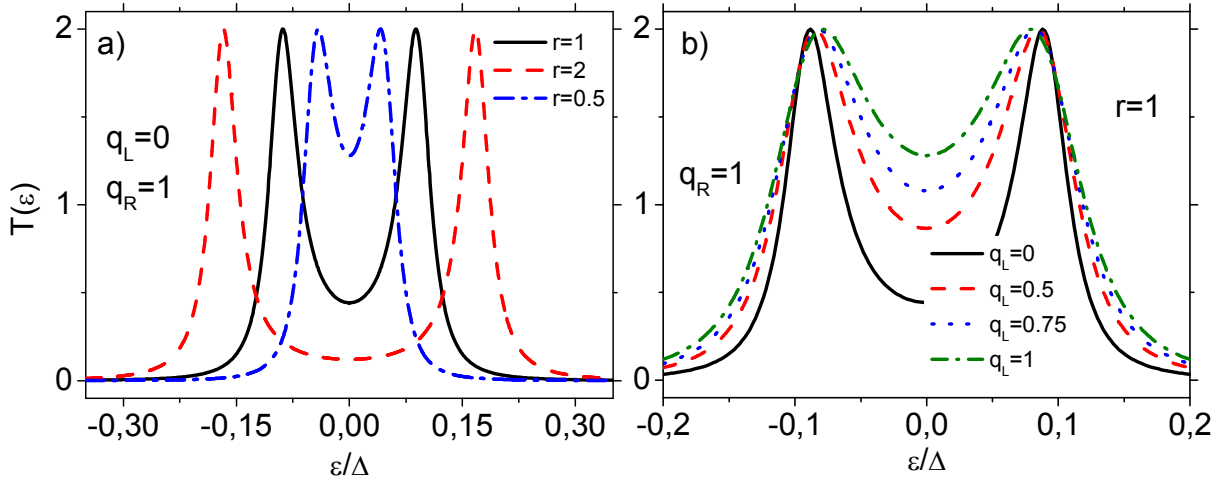
dla elektrody ferromagnetycznej ($\beta = L$), oraz

$$\mathbf{f}_R = \begin{pmatrix} f(\varepsilon) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f(\varepsilon) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & f(\varepsilon) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f(\varepsilon) \end{pmatrix} \quad (8.16)$$

dla elektrody nadprzewodzącej ($\beta = R$).

8.3 Wyniki numeryczne

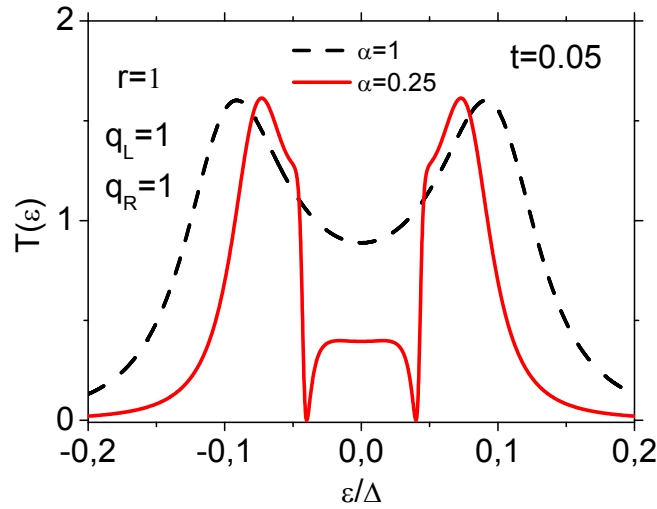
Obliczenia numeryczne zostały przeprowadzone zarówno w liniowej, jak i nieliniowej odpowiedzi. Jako że interesuje nas prąd Andreeva J^A , obliczenia zostały wykonane dla temperatury $T = 0$ K. Naturalna jednostka energii jest związana z wielkością przerwy nadprzewodzącej, toteż wszystkie wielkości o wymiarze energii będą wyrażane w jednostkach Δ . Rozpatrywane tutaj geometrie układu zostały przedstawione na Rys. 8.2. W poprzedniej części rozdziału przedstawiono wyrażenia dla układu z Rys. 8.2(b). Formalnego przejścia do układu z Rys. 8.2(a) dokonujemy podstawiając $q_L = 0$, przy czym potencjały elektrochemiczne dwóch lewych elektrod są takie same. Potencjał elektrochemiczny lewych (lub lewej) elektrod(y) wynosi $\mu_L = eV$, natomiast potencjał elektrochemiczny elektrody nadprzewodzącej pozostaje niezmienny, $\mu_R = 0$. Sprzężenia ferromagnetycznych(ej) elektrod(y) z obydwoma kropkami kwantowymi zostały sparametryzowane następująco $\Gamma_{L11}^\sigma = \alpha\Gamma_L(1 + \tilde{\sigma}p)$, $\Gamma_{L22}^\sigma = \Gamma_L(1 \pm \tilde{\sigma}p)$, $\Gamma_{L12}^\sigma = q_L\Gamma_L\sqrt{\alpha(1 + \tilde{\sigma}p)(1 \pm \tilde{\sigma}p)}$, przy czym $\tilde{\sigma} = 1$ dla $\sigma = \uparrow$, i $\tilde{\sigma} = -1$ dla $\sigma = \downarrow$, a górny (dolny) znak w Γ_{L22}^σ dotyczy konfiguracji równoległej (antyrównoległej) dla przypadku dwóch elektrod ferromagnetycznych. Sprzężenie elektrody nadprzewodzącej zostało opisane przez parametry $\Gamma_{R11}^\sigma = \alpha\Gamma_R$, $\Gamma_{R22}^\sigma = \Gamma_R$, $\Gamma_{R12}^\sigma = q_R\Gamma_R\sqrt{\alpha}$. Parametr α opisuje asymetrię sprzężenia kropek z elektrodami. Kropki kwantowe mogą być w ogólności sprzężone asymetrycznie z elektrodami, toteż wybrano $\Gamma_R = r\Gamma$, oraz $\Gamma_L = \Gamma/2$, gdzie parametr r opisuje tę asymetrię. Ponadto, w celu zoptymalizowania tunelowania Andreeva w obliczeniach przyjęto $\Gamma = 0.1\Delta$ oraz $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 \equiv \varepsilon_0 = 0$.



Rysunek 8.3: Transmisja wyznaczona dla podanych wartości parametru r (a) i dla podanych wartości parametru q_L (b). Pozostałe parametry: $p = 0$, $q_R = 1$, $\alpha = 1$, $\varepsilon_0 = 0$, $t = 0$, $U = 0$.

Na Rys. 8.3(a) przedstawiono transmisję $T(\varepsilon)$ obliczoną dla różnych wartości parametru r opisującego asymetrię sprzężenia lewej i prawej elektrody z kropkami dla układu przedstawionego na Rys. 8.2 (a). Należy zwrócić uwagę, że transmisja jest dwa razy większa niż w przypadku, gdy elektrodę nadprzewodzącą zastąpimy elektrodą normalną. Dzieje się tak, w obecnym przypadku wkład do transmisji dają pary elektronów, a nie pojedyncze elektrony. Wyraźnie też widać, że dla braku asymetrii sprzężenia, $\Gamma_L = \Gamma_R$, piki w transmisji są raczej

słabo rozseparowane, natomiast, dla $r > 0.5$ obserwuje się wyraźne rozszczepienie pików w transmisji. Takie zachowanie można wyjaśnić w następujący sposób. Jako że kropki kwantowe są sprzężone z elektrodą nadprzewodzącą, to położenia ich poziomów ulegają renormalizacji. W związku z symetrią elektron-dziura, gęstość stanów każdej kropki posiada dwa piki dla energii $\pm\sqrt{\varepsilon_0^2 + (\Gamma_R/2)^2}$ odpowiadających położeniu stanów Andreeva. Natomiast sprzężenie kropek z elektrodą normalną (bądź ferromagnetyczną) nadaje tym pikom pewne szerokości, rzędu Γ_L . Wobec tego, w rozpatrywanym przypadku, wzrost sprzężenia z elektrodą nadprzewodzącą powoduje rozsuniecie pików w transmisji. Kiedy $\Gamma_R < \Gamma_L$, poszerzenie obydwu rezonansów powoduje, iż maksima te zlewają się w jeden pik. Sprzężenie z elektrodą nadprzewodzącą nie daje wkładu do poszerzenia, bowiem w rozpatrywanym zakresie energii i temperatury elektrony nie mogą pojedynczo tunelować do elektrody nadprzewodzącej. Bardziej formalnie można to pokazać odwołując się do postaci energii własnej (8.13). W zakresie, $|\varepsilon| \leq \Delta$, energia własna Σ_R^r jest wielkością rzeczywistą, a wkład do poszerzenia poziomu daje tylko część urojona, której w tym przypadku nie ma. Fakt, iż za poszerzenie rezonansów Andreeva odpowiada tylko sprzężenie z elektrodą normalną potwierdza Rys. 8.3(b), gdzie została przedstawiona transmisja dla różnych wartości parametru q_L , którego wzrost sprawia, że efektywne sprzężenie układu kropek z elektrodą normalną wzrasta.

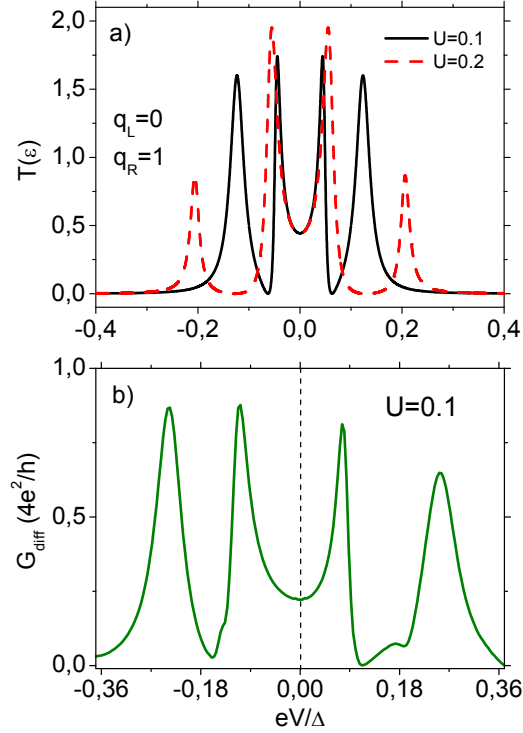


Rysunek 8.4: Transmisja wyznaczona dla skończonej wartości całki przeskoku między kropkami kwantowymi, oraz dla podanych wartości parametru asymetrii sprzężenia α . Pozostałe parametry: $p = 0$, $r = 1$, $q_L = q_R = 1$, $\varepsilon_0 = 0$, $U = 0$.

Włączenie bezpośredniego tunelowania między kropkami kwantowymi ($t \neq 0$) powoduje zmniejszenie amplitudy pików transmisyjnych, co zostało pokazane na Rys. 8.4. Dzieje się tak bowiem sprzężenie tunelowe znosi początkowo założoną degenerację poziomów kropek kwantowych. Wówczas symetria elektron-dziura, dla której częstość procesów Andreeva jest zoptimalizowana, zostaje naruszona i dlatego obserwuje się spadek intensywności maksimów w transmisji. Dodatkowa asymetria sprzężenia danej kropki z elektrodami, $\alpha < 1$, prowadzi do bardziej skomplikowanej zależności w transmisji [Rys. 8.4]. W tym przypadku efekty interferencyjne odgrywają ważną rolę prowadząc do całkowitego wygaszenia transmisji dla pewnych wartości energii.

Do tej pory prezentowane były wyniki dla przypadku braku oddziaływań kulombowskich ($U = 0$). Uwzględnienie tych oddziaływań prowadzi jednak do pewnych nowych własności. Na Rys. 8.5(a) przedstawiona została transmisja przez układ dla wybranych wartości parametru U . Podobnie jak w przypadku opisanym w rozdziale 2, oddziaływanie kulombowskie prowadzi do podwojenia liczby pików w transmisji, tudzież konduktancji. Zauważyć należy, iż intensywność pików kulombowskich jest dużo mniejsza niż amplituda pików głównych. Związane jest to ze wspomnianą symetrią elektron-dziura, która dla stanu $\varepsilon_0 + U$ (gdzie $\varepsilon_0 = 0$) zostaje naruszona. Naruszenie symetrii elektron-dziura jeszcze bardziej jest uwidocznione w zależności konduktancji różniczkowej od przyłożonego napięcia. Główną cechą tej zależności, odróżniającą ją od np.

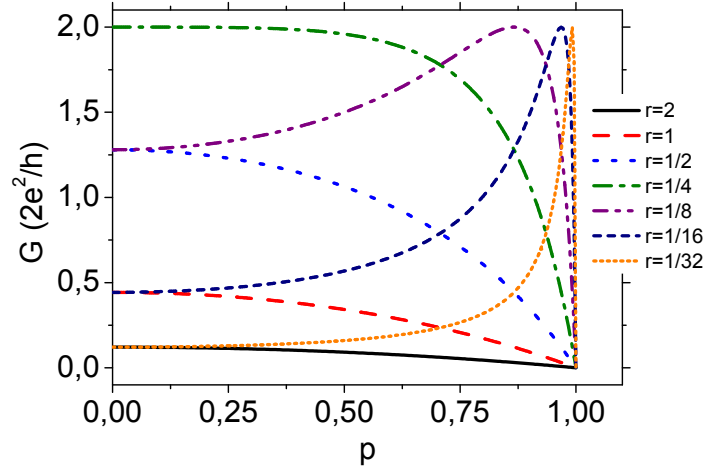
analogicznej zależności uzyskanej dla układu bez elektrody nadprzewodzącej, jest brak symetrii ze względu na zmianę znaku napięcia transportowego. Naruszenie symetrii elektron-dziura powoduje również utratę symetrii w gęstości stanów kropek kwantowych (względem energii $\varepsilon = 0$). Jak już wcześniej wspomniano symetria ta wymagana jest, aby zoptymalizować tworzenie par Coopera, których energia jest równa sumie energii elektronów ją tworzących i musi być równa potencjałowi chemicznemu elektrody nadprzewodzącej $\mu_R = 0$. Wobec tego prąd Andreeva jest również zoptymalizowany, gdy istnieje taka symetria w gęstości stanów kropek kwantowych. Kiedy do elektrod normalnych przyłożone jest ujemne napięcie, to ich potencjały chemiczne ulegają obniżeniu w stosunku do potencjału chemicznego elektrody nadprzewodzącej i wówczas w transporcie uczestniczą tylko maksima z gałęzi o ujemnej energii w gęstości stanów, których symetria różni się od pików z dodatniej gałęzi energii. Warto dodać, iż wspomniana wcześniej symetria elektron-dziura jest zachowana również, gdy spełniony jest warunek $\varepsilon_0 = -U/2$.



Rysunek 8.5: (a) Transmisja, (b) konduktancja różniczkowa w funkcji przyłożonego napięcia wyznaczone dla podanych wartości parametru opisującego oddziaływania kulombowskie na kropkach kwantowych U . Pozostałe parametry: $p = 0$, $r = 1$, $q_L = 0$, $q_R = 1$, $\alpha = 1$, $\varepsilon_0 = 0$, $t = 0$

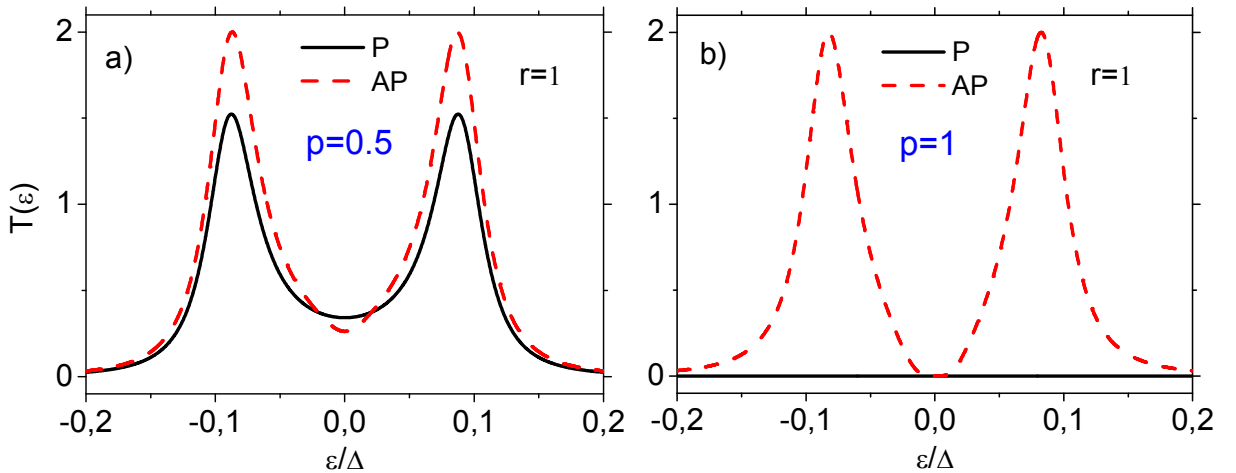
Zbadano również wpływ ferromagnetyzmu elektrod na transport przez rozpatrywany układ w reżimie Andreeva. Na Rys. 8.6 przedstawiono konduktancje liniową w zależności od wielkości polaryzacji elektrod p dla konfiguracji równoległej i dla różnych wielkości asymetrii sprzężenia elektrody normalnej i nadprzewodzącej z układem kropek. Intuicja podpowiada, że wzrost polaryzacji elektrod (w konfiguracji równoległej) powinien powodować spadek konduktancji Andreeva, bowiem parujące elektrony muszą mieć przeciwne spiny, a tych z jedną orientacją jest coraz to mniej, gdy polaryzacja rośnie. Z Rys. 8.6 widać, iż jest to prawdą tylko dla $r > 1/4$. Natomiast dla asymetrii sprzężeń $r < 1/4$ istnieje taka wartość polaryzacji dla której konduktancja osiąga maksymalną wartość $4e^2/h$. Można tutaj wprowadzić analogię warunku dopasowania prędkości Fermiego na międzywierzchni struktury ferromagnetyk–nadprzewodnik ($k_{F\uparrow}k_{F\downarrow} = k_s^2$) następującej postaci $16r^2 + p^2 = 1$. W przypadku, gdy $r > 1/4$ warunek dopasowania nie jest spełniony i dlatego konduktancja maleje monotonicznie wraz ze wzrostem polaryzacji elektrod. Natomiast, dla wartości $r < 1/4$ istnieje taka wartość $p = p_0$, dla której warunek ten jest spełniony i w tym przypadku konduktancja wpierw rośnie ze wzrostem polaryzacji osiągając maksimum dla $p = p_0$, a następnie maleje z dalszym wzrostem polaryzacji.

Dla maksymalnej wartości polaryzacji ($p = 1$) konduktancja znika całkowicie, co jest oczywiste, gdyż na parę Coopera składają się dwa elektrony o przeciwnych spinach.



Rysunek 8.6: Zależność konduktancji liniowej od polaryzacji magnetycznej elektrod wyznaczona dla podanych wartości parametru asymetrii r . Pozostałe parametry: $q_L = 0$, $q_R = 1$, $\alpha = 1$, $t = 0$, $\varepsilon_0 = 0$, $U = 0$.

Zbadano również wpływ konfiguracji magnetycznej elektrod ferromagnetycznych na transmisję przez rozpatrywany układ. Otrzymane rezultaty zostały zamieszczone na Rys. 8.7. Widać, iż w ogólności transmisja w konfiguracji antyrównoległej jest większa od transmisji w konfiguracji równoległej. Opiswany tutaj przypadek jest więc przeciwny do tego, który jest zazwyczaj obserwowany w układach bez elektrody nadprzewodzącej. Poza tym transmisja w konfiguracji równoległej nie osiąga maksymalnej wartości dla żadnej wartości energii, co związane jest z faktem, że dla $r > 1/4$ warunek dopasowania nie jest spełniony. W przypadku całkowicie spolaryzowanych elektrod ($p = 1$) transmisja w konfiguracji równoległej całkowicie zanika, natomiast w konfiguracji antyrównoległej jest niezerowa. Dla $p = 1$ transmisja w konfiguracji antyrównoległej pochodzi tylko od procesów tunelowych typu CAR. Układ taki może więc posłużyć do eksperymentalnej weryfikacji procesów tunelowych typu CAR.



Rysunek 8.7: Transmisja wyznaczona dla konfiguracji równoległej (P) oraz antyrównoległej (AP), oraz dla polaryzacji (a) $p = 0.5$, (b) $p = 1$. Pozostałe parametry: $r = 1$, $q_L = 0$, $q_R = 1$, $\alpha = 1$, $\varepsilon_0 = 0$, $t = 0$, $U = 0$.

8.4 Podsumowanie

Wyniki przedstawione w tym rozdziale pokazały, że asymetria sprzężenia układu kropek z elektrodami (normalnej i nadprzewodzącej) ma duży wpływ na charakterystyki transportowe. W szczególności pokazano, że sprzężenie z elektrodą (elektrodami) normalnymi/ferromagnetycznymi daje wkład do poszerzenia rezonansów Andreeva, natomiast wielkość sprzężenia z elektrodą nadprzewodzącą wpływa tylko na ich położenie. Ponadto, uwzględnienie oddziaływań kulombowskich na kropkach prowadzi, w ogólności, do złamania symetrii w konduktancji różniczkowej.

Znaleziono również warunek dopasowania między asymetrią sprzężenia a wielkością polaryzacji elektrod ferromagnetycznych. Z warunku tego wynika, że dla każdej wartości polaryzacji elektrod, istnieje taka wartość parametru asymetrii, który maksymalizuje konduktancję liniową. Z otrzymanych rezultatów jasno wynika, że nawet dla stosunkowo dużej polaryzacji konduktancja liniowa może osiągnąć wartość $2e^2/h$. Również konfiguracja magnetyczna elektrod ferromagnetycznych ma duży wpływ na własności transportowe układu.

Rozdział 9

Efekty termoelektryczne w transporcie przez układ dwóch kropek kwantowych

W rozdziale tym zostaną rozważone efekty termoelektryczne w transporcie elektronowym przez układ dwóch kropek kwantowych dołączonych do elektrod magnetycznych (niemagnetycznych) w geometrii z Rys. 2.1. Pośród kilku efektów, w których następuje konwersja energii z cieplnej na elektryczną i odwrotnie, rozpatrzone zostanie zjawisko zwane pod nazwą *efektu Seebecka*. Głównym celem wykonanych obliczeń jest pokazanie, że efekty interferencyjne obecne w transporcie przez taki układ [Rozdział 2] znacznie zwiększają efektywność zjawisk termoelektrycznych.

Należy zwrócić uwagę, iż efekty termoelektryczne, choć odkryte w wieku dziewiętnastym, to dopiero teraz wydaje się możliwe ich efektywne wykorzystanie. Wynika to z faktu, iż w konwencjonalnych materiałach efekty te zachodziły z małą wydajnością, co znacząco ograniczało ich zastosowanie. Wydajność urządzeń wykorzystujących zjawiska termoelektryczne jest dana tzw. współczynnikiem dobroci ZT wyrażonym jako $ZT = \sigma S^2 T / \kappa$, gdzie T jest temperaturą roboczą urządzenia. Wzór ten pokazuje, iż aby zwiększyć efektywność urządzenia termoelektrycznego należy zwiększyć termosilę S i/lub przewodnictwo elektryczne σ , oraz zminimalizować przewodnictwo cieplne κ . W materiałach konwencjonalnych zadanie to jest praktycznie niewykonalne, bowiem obowiązuje w nich prawo Wiedemanna - Franza [123] mówiące, iż stosunek przewodności cieplnej do przewodności elektrycznej jest stały w danej temperaturze. Obecnie znane jest ono pod postacią równania $\kappa / \sigma = ST$. Poza tym termosila również zależy od przewodności elektrycznej i zgodnie z relacją Motta [124] maleje ze wzrostem przewodnictwa elektrycznego. Typowe materiały posiadają współczynnik dobroci $ZT < 1$, a w niektórych półprzewodnikach udało zbliżyć się do wartości $ZT \approx 1$. Tak niska efektywność termoelektryczna konwencjonalnych materiałów spowodowała porzucenie wizji wykorzystania efektów termoelektrycznych na szeroką skalę. Z drugiej jednak strony stała się motorem napędowym w poszukiwaniu nowych materiałów, o niekonwencjonalnych własnościach, umożliwiających znaczne zwiększenie efektywności termoelektrycznej. Okazało się też, że takie niekonwencjonalne własności posiadają nanostruktury. Mianowicie odkryto, iż efektywność termoelektryczna wzrasta wraz ze zmniejszeniem rozmiarowości układu [125]. Okazało się, iż na własności termoelektryczne ma wielki wpływ dyskretyzacja poziomów energetycznych (związana ze zmniejszeniem rozmiarów układu), oraz efekty blokady kulombowskiej [126, 127, 128, 129, 130, 131, 132]. Zjawiska te, na ogół, prowadzą do odstępstw od prawa Wiedemanna-Franza i relacji Motta [133, 134]. Poza tym w układach nanoskopowych przewodnictwo termiczne jest raczej niewielkie, co dodatkowo zwiększa współczynnik dobroci ZT [135]. Te cechy układów nanoskopowych spowodowały w ostatnich latach ponowne zainteresowanie efektami termoelektrycznymi i ich potencjalnym wykorzystaniem. Zaczęto badać pod tym kątem, zarówno eksperymentalnie [136, 137, 138, 139, 140] jak i teoretycznie [141, 142, 143, 144, 170, 146, 147, 148], takie struktury nanoskopowe jak kropki kwantowe, nanodrut, molekuly czy złącza półprzewodnikowe. Zauważono np. oscylacje termosily [126, 127], czy przewodności cieplnej [131, 133] w układach z wyspą kulombowską. Ponadto zauważono, iż korelacje spinowe mają silny wpływ na efekty termoelektryczne w reżimie Kondo [149, 198, 151, 152, 153, 154, 155, 203].

Zwiększenie efektywności termoelektrycznej zauważono w wielopoziomowych kropkach kwan-

towych [157, 158, 159]. Również badano wpływ ferromagnetyzmu elektrod w układzie pojedynczej, jednopoziomowej kropki kwantowej sprzężonej z magnetycznymi elektrodami w różnych reżimach sprzężeń [142, 143]. Natomiast niewiele wiadomo na temat własności termoelektrycznych układów złożonych z kilku (co najmniej dwóch) kropek kwantowych [160, 161]. Ze względu na możliwość zaobserwowania różnych efektów interferencyjnych w układach złożonych z dwóch kropek kwantowych, można również spodziewać się silnego wpływu tych efektów na zjawiska termoelektryczne. W rozdziale tym zostanie właśnie przedstawiona analiza wpływu efektów interferencyjnych oraz korelacji kulombowskich na zjawiska termoelektryczne w układzie dwóch kropek kwantowych sprzężonych w ogólności z magnetycznymi elektrodami.

9.1 Model układu i metoda

Model układu jak i jego geometria zostały przedstawione w rozdziale 2. Również obliczenia własności termoelektrycznych układu zostały wykonane w ramach teorii nierównowagowych funkcji Greena przedstawionej w rozdziale 2. W związku z tym prąd elektryczny i cieplny można wyrazić za pomocą następujących wyrażeń:

$$\begin{pmatrix} J \\ J_Q \end{pmatrix} = \frac{1}{h} \sum_{\sigma} \int d\varepsilon \begin{pmatrix} -e \\ \varepsilon - \mu_L \end{pmatrix} (f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)) T_{\sigma}(\varepsilon), \quad (9.1)$$

gdzie $T_{\sigma}(\varepsilon) = \text{Tr}[\mathbf{G}_{\sigma}^a \mathbf{\Gamma}_R^{\sigma} \mathbf{G}_{\sigma}^r \mathbf{\Gamma}_L^{\sigma}]$ oznacza współczynnik transmisji dla elektronów o spinie σ wyrażone poprzez transformaty Fouriera opóźnionej ($\mathbf{G}_{\sigma}^r$) oraz przedwczesnej ($\mathbf{G}_{\sigma}^a$) funkcji Greena, oraz zależne od orientacji spinu macierze sprzężenia $\mathbf{\Gamma}_{\beta}^{\sigma}$ układu kropek z elektrodą β ($\beta = L, R$). W liniowej odpowiedzi, $V \rightarrow 0$ oraz $\Delta T \rightarrow 0$, równanie (9.1) przechodzi w następujące wyrażenie na prąd elektryczny:

$$J = eL_0\Delta\mu + \frac{e}{T}L_1\Delta T, \quad (9.2)$$

oraz prąd cieplny:

$$J_Q = -L_1\Delta\mu - \frac{1}{T}L_2\Delta T, \quad (9.3)$$

gdzie ΔT oznacza różnicę temperatur między elektrodami, natomiast $\Delta\mu = e\Delta V$ z ΔV oznaczającym spadek potencjału między elektrodami. W równaniach (9.2) oraz (9.3) wielkość L_n ($n = 0, 1, 2$) oznacza całkę następującej postaci:

$$L_n = \frac{1}{h} \sum_{\sigma} \int d\varepsilon (\varepsilon - \mu)^n \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} T_{\sigma}(\varepsilon). \quad (9.4)$$

Współczynniki L_n są w ogólności tensorami i nie są bezpośrednio mierzalne. Powiązane są one z wielkościami bezpośrednio obserwowanymi w eksperymencie poprzez pewne relacje, które zostaną podane niżej.

Termosiła, będąca spadkiem napięcia ΔV wyindukowanym przez różnicę temperatur elektrod ΔT , dana jest wyrażeniem:

$$S \equiv \left[\frac{\Delta V}{\Delta T} \right]_{J=0} = -\frac{1}{eT} \frac{L_1}{L_0}. \quad (9.5)$$

Również konduktancja elektryczna oraz cieplna może zostać przedstawiona następująco [162]:

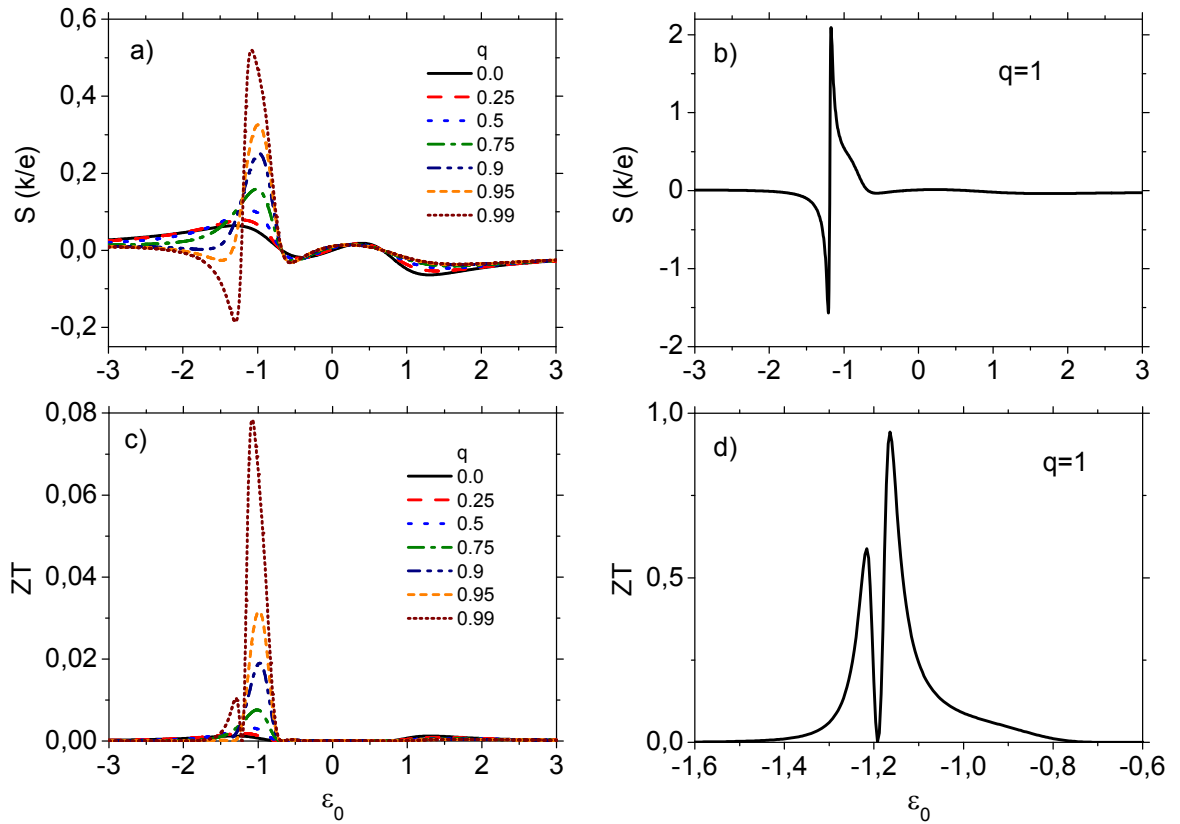
$$G = e^2 L_0, \quad (9.6)$$

$$\kappa = \frac{1}{T} \left(L_2 - \frac{L_1^2}{L_0} \right). \quad (9.7)$$

9.2 Wyniki numeryczne

W celu wykonania obliczeń numerycznych założono, że poziomy kropek kwantowych są spinowo zdegenerowane i jednakowe, tzn. $\varepsilon_{i\sigma} = \varepsilon_0$ (dla $i = 1, 2$, oraz $\sigma = \uparrow, \downarrow$). Poza tym założono, iż obydwie elektrody są wykonane z tego samego materiału ferromagnetycznego, $p_L = p_R \equiv p$, a sprzężenie elektrod do układu kropek jest symetryczne $\Gamma_L = \Gamma_R \equiv \gamma\Gamma$, gdzie γ jest wielkością bezwymiarową, a Γ jednostką energii. Również parametry charakteryzujące sprzężenia pośrednie kropek poprzez elektrodę założono rzeczywiste i jednakowe $q_L = q_R = q$, a dla sprzężenia bezpośredniego przyjęto wartość $t = 0.25\Gamma$. Obliczenia wykonano dla stosunkowo dużej wartości w różnicy sprzężeń danej elektrody z obydwoma kropkami kładąc $\beta = 0.15$. Dla prostoty założono jednakowe całki kulombowskie na obydwu kropkach, $U_1 = U_2 \equiv U$.

Zastosowana metoda pozwala obliczyć własności transportowe układu zarówno w granicy silnego, jak i słabego sprzężenia kropek z elektrodami. W zakresie sprzężenia $k_B T / \Gamma \ll \gamma$ na ogół zachodzi relacja $ZT \ll 1$ [134], jednak efekty interferencyjne mogą zmienić ten obraz. Należy nadmienić, iż mimo silnego sprzężenia nie jest rozważany tutaj efekt Kondo, bowiem dla dostępnych eksperymentalnie sprzężeń rzędu kilku meV [25] temperatura robocza układu spełniająca powyższy warunek jest wciąż wyższa od odpowiedniej temperatury Kondo.

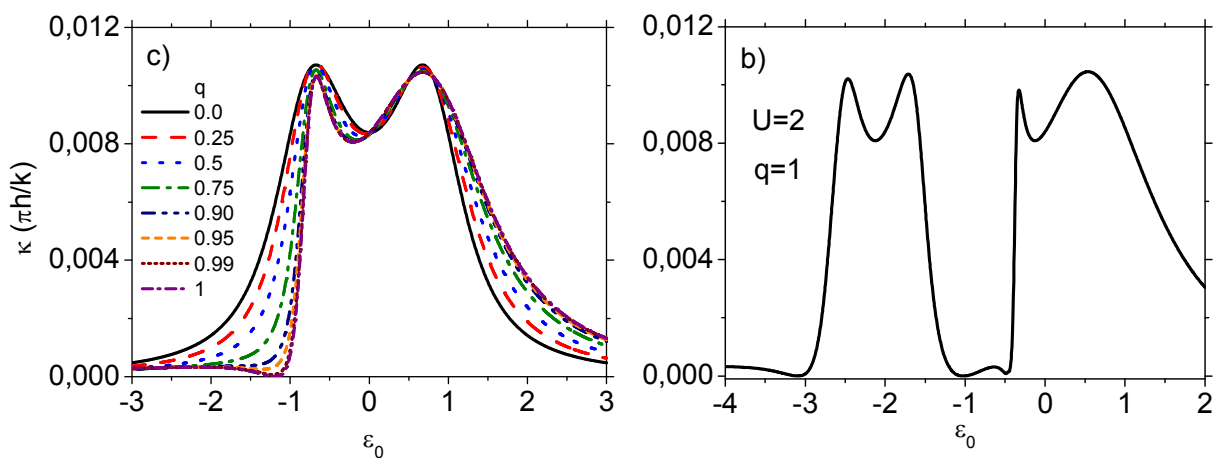


Rysunek 9.1: Współczynniki termoelektryczne: (a-b) termosila, (c-d) ZT w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczone dla podanych wartości parametru q . Pozostałe parametry: $k_B T = 0.01$, $\gamma = 1$, $t = 0.8$, $\alpha = 0.15$, $U = 0$, $p = 0$. Wielkości energetyczne podane są w jednostkach Γ .

Początkowe rozważania rozpoczniemy dla układu kropek kwantowych bez oddziaływań kulombowskich ($U = 0$) sprzężonych z niemagnetycznymi elektrodami ($p = 0$). Na Rys. 9.1 zostały przedstawione zależności wielkości termoelektrycznych w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych ε_0 dla różnych wartości parametru q . Jak wiadomo z rozdziału 2 zmiana wartości parametru q powoduje zmianę pośredniego sprzężenia kropek kwantowych poprzez elektrody. Dla maksymalnej wartości tego parametru ($q = 1$) liniowa konduktancja (elektronowa) złożona jest z dwóch pików, przy czym ten odpowiadający stanowi antywiążącemu wykazuje typowe cechy antyrezonansu z charakterystyczną linią Fano. Dla mniejszych wartości parametru q (ale

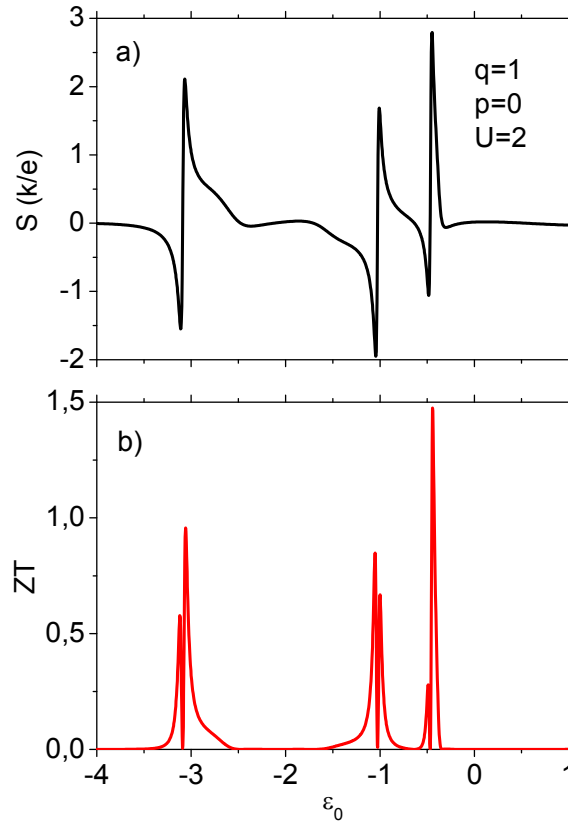
różnych od zera) antyrezonansowy charakter konduktancji znika i składa się ona z dwóch pików lorentzowskich o różnych szerokościach. Ostatecznie, gdy $q = 0$ obydwa piki posiadają takie same szerokości. Analogiczny kształt linii, oraz zależność od parametru q może być zaobserwowana w konduktancji cieplnej [Rys.9.2 (a)]. Takie zachowanie się konduktancji cieplnej jest zrozumiałe, bowiem w rozważanym modelu jedynymi nośnikami ciepła są nośniki ładunku (elektrony i dziury), co wraz z warunkiem $\gamma \gg k_B T/\Gamma$ daje taką zależność. Poza tym, położenia pików konduktancji cieplnej pokrywają się praktycznie z tymi dla konduktancji elektrycznej. Termosiła S [Rys. 9.1 (a-b)] zmienia znak za każdym razem kiedy poziom ε_0 osiąga rezonans. Znikanie termosiły w punktach rezonansu związane jest z faktem, iż prąd elektryczny związany z tunelowaniem elektronów z lewej elektrody do prawej jest skompensowany wówczas przez prąd związany z dziurami, w rezultacie czego nie ma wypadkowego prądu oraz spadku napięcia i termosiła znika. Termosiła przyjmuje wartości dodatnie, ponieważ nośnikami większościowymi są dziury, gdy poziom energetyczny znajduje się poniżej rezonansu. Natomiast, kiedy poziom ε_0 znajduje się powyżej rezonansu, wówczas nośnikami większościowymi są elektrony i stąd ujemne wartości termosiły. Należy przy tym pamiętać, że w związku z gradientem temperatury, w cieplejszej elektrodzie więcej elektronów jest wzbudzonych powyżej poziomu Fermiego aniżeli w chłodniejszej elektrodzie. Jednocześnie w elektrodzie o wyższej temperaturze jest więcej wygenerowanych dziur (poniżej poziomu Fermiego). Dla wartości parametru $q \cong 1$ [Rys.9.1 (b)] można zauważyć dwa dodatkowe punkty, w których termosiła zmienia znak. Jeden z tych punktów jest położony w otoczeniu rezonansu Fano, gdzie konduktancja znika, podczas gdy kolejny taki punkt znajduje się w dolinie pomiędzy rezonansami. Dla pozostałych wartości parametru q obecny jest tylko ten punkt znajdujący się w dolinie. Brak punktu zmiany znaku termosiły z pobliża antyrezonansu staje się zrozumiałe, bowiem dla mniejszych wartości parametru q efekty interferencji są osłabiane i całkowita destruktywna interferencja nie zachodzi (w konsekwencji czego konduktancja nie znika całkowicie).

Ponadto największy wzrost termosiły zachodzi właśnie w pobliżu stanu antywiążącego dla maksymalnej wartości parametru q ($q = 1$). Sugeruje to więc, że efekty interferencyjne mają dominujący wpływ w kreowaniu własności termoelektrycznych rozpatrywanego układu. Wpływ efektów interferencyjnych jest również dobrze widoczny w zależności współczynnika dobroci termoelektrycznej ZT [Fig.9.1 (c-d)], gdzie ZT jest znacznie wzmocnione w pobliżu antyrezonansu Fano (osiągając wartość $ZT \approx 1$). Dla pozostałego zakresu położenia poziomów ZT jest praktycznie wytłumione do zera, nawet w okolicach poziomu wiążącego. Wraz z obniżaniem wartości parametru q wartość współczynnika ZT odpowiadająca ε_0 z pobliża rezonansu Fano również maleje. Zachowanie to świadczy o kluczowym wpływie efektów interferencyjnych na efektywność termoelektryczną rozważanego układu. Warto zaznaczyć, że dla tego zakresu sprzężenia prawo Wiedemanna-Franza jest spełnione oprócz wąskiego zakresu położenia poziomów kropek.



Rysunek 9.2: Konduktancja cieplna w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczone dla podanych wartości parametru q , oraz dla (a) $U = 0$, (b) $U = 2$. Pozostałe parametry: takie jak na Rys. 9.1. Wielkości energetyczne podane są w jednostkach Γ .

W dalszej części rozdziału rozważony zostanie wpływ oddziaływań kulombowskich na własności termoelektryczne układu w obecności antyrezonansu Fano. Otrzymane rezultaty zostały przedstawione na Rys. 9.2(b) i Rys. 9.3. Z Rozdziału 2 wiadomo, iż oddziaływania kulombowskie prowadzą do rozszczepienia struktury dwóch pików, obecnych w przypadku $U = 0$, i pojawienia się charakterystycznej przerwy. Analogiczny scenariusz można zauważyć w zależności konduktancji cieplnej. Podwojenie liczby rezonansów prowadzi również do bogatszej struktury w zależności termosily od położenia poziomów kropek w przypadku skończonego U . W sytuacji $U \neq 0$ termosila zmienia znak dziesięć razy, przy czym cztery punkty zmiany znaku termosily odnoszą się do czterech rezonansów usytuowanych w $\varepsilon_0 \approx \pm t$, oraz $\varepsilon \approx \pm t - U$. Kolejne dwa punkty, w których termosila zmienia znak znajdują się w pobliżu pików Fano i jego kulombowskiego odpowiednika, gdzie konduktancja znika, a więc i termosila. Wyjaśnienie zmiany znaku termosily w tych punktach jest analogiczne jak w przypadku braku oddziaływań kulombowskich. Następne dwa takie punkty są usytuowane w dolinach między wąskim i szerokim rezonansem w konduktancji. Termosila znika w tych punktach w związku z pewną symetrią w położeniu poziomu wiążącego i antywiążącego względem poziomu Fermiego i określoną poprzez siłę sprzężenia elektrod ze stanem wiążącym i antywiążącym. W tych punktach liczba elektronów tunelujących (w jednostce czasu) poprzez poziom wiążący jest skompensowana przez taką samą ilość dziur tunelujących w tym czasie przez stan antywiążący. Można więc to nazwać efektem bipolarnym. Termosila zmienia znak w punkcie symetrii $\varepsilon_0 = -U/2$, co można wyjaśnić w oparciu o efekt bipolarny. Termosila zmienia znak jeszcze w jednym punkcie, gdzie w konduktancji obserwuje się niewielkie maksimum znajdujące się w przerwie kulombowskiej. Taki punkt istnieje również gdy $U = 0$.

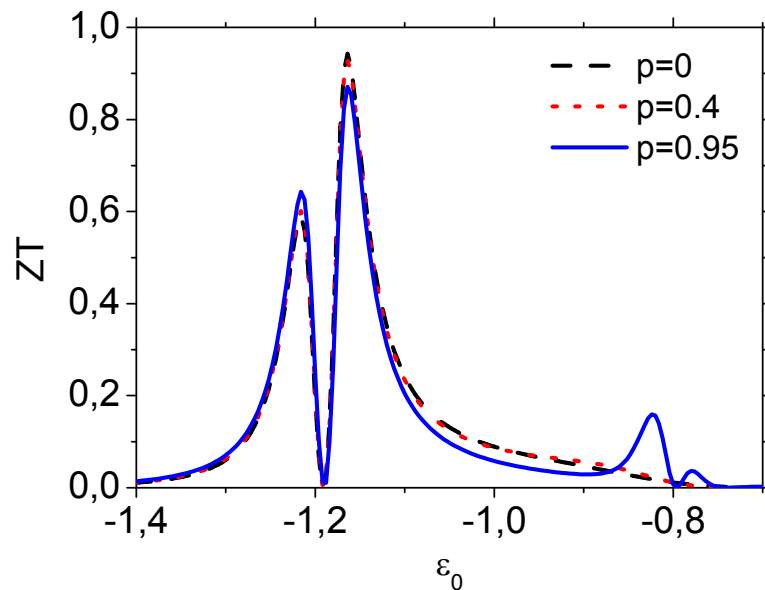


Rysunek 9.3: (a) Termosila, (b) ZT w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczone przy uwzględnieniu oddziaływań kulombowskich ($U = 2$) dla $p = 0$, $q = 1$. Pozostałe parametry jak na Rys. 9.1. Wielkości energetyczne podane są w jednostkach Γ .

Uwzględnienie oddziaływań kulombowskich powoduje również pojawienie się większej liczby rezonansów w zależności współczynnika ZT od ε_0 . Ponadto, korelacje kulombowskie mogą przyczynić się do wzrostu wartości współczynnika ZT , który może przekroczyć jedynkę. Jednak podobnie jak w przypadku $U = 0$, tak i teraz, ZT osiąga znaczne wartości w pobliżu antyre-

zonansów Fano. Poza tym obserwuje się stosunkowo dużą wartość współczynnika dobroci ZT pośrodku przerwy kulombowskiej.

W rozpatrywanym zakresie sprzężeń termosila, oraz współczynnik ZT wykazują raczej słabą zależność od wielkości polaryzacji magnetycznej elektrod [Rys. 9.4]. Jak wspomniano wcześniej, ZT jest znacznie wzmocnione tylko w pobliżu antyrezonansu Fano (dla $U = 0$) i posiada strukturę podwójnego pikę [Rys. 9.4]. Natomiast pomiędzy pikami ZT osiąga wartość równą zero w związku ze znikaniem termosily w tym punkcie, co zostało wyjaśnione powyżej. Należy jednak zwrócić uwagę na fakt, iż dla niezerowej wartości polaryzacji elektrod p dodatkowy pik pojawia się w zależności współczynnika ZT , a którego amplituda (szerokość) wzrasta (maleje) wraz ze wzrostem polaryzacji p . Dla stosunkowo dużych wartości polaryzacji p wyraźnie widać, iż dodatkowy pik ma podobną strukturę do piku głównego, tzn. ma strukturę piku podwójnego. Pojawienie się dodatkowej struktury w zależności współczynnika ZT wraz z dołączeniem ferromagnetycznych elektrod można wyjaśnić w następujący sposób.

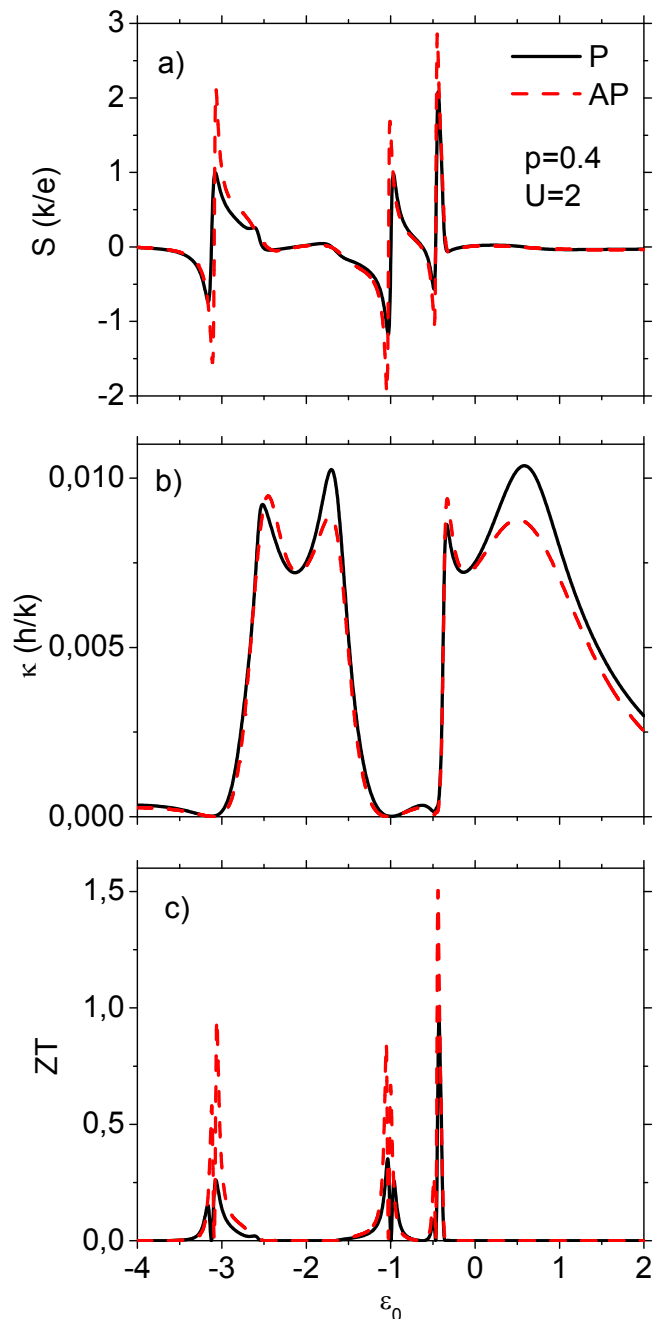


Rysunek 9.4: Zależność współczynnika ZT od położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczona dla podanych wartości polaryzacji magnetycznej elektrod p dla konfiguracji równoległej ich momentów magnetycznych, oraz dla $U = 0$, $q = 1$. Pozostałe parametry jak na Rys. 9.1. Wielkości energetyczne podane są w jednostkach Γ .

Wiadomo, iż sprzężenie kropek z ferromagnetycznymi elektrodami zależy od orientacji spinu, a co za tym idzie również szerokości poziomów (odpowiadających stanowi wiążącemu i antywiązącemu) są spinowo-zależne. W konsekwencji tego piki w konduktancji związane z nośnikami większościowymi (mniejszościowymi) ulegają poszerzeniu (zweżeniu). Wobec tego punkt zaniku konduktancji (w związku z interferencją destruktywną) jest prędzej osiągany przez składnik konduktancji pochodzący od nośników mniejszościowych. Następstwem tego jest rozszczepienie odpowiedniego antyrezonansu w zależności termosily od położenia poziomów kropek kwantowych. Jeden z nich pochodzi od wkładu nośników większościowych, a drugi - mniejszy, od wkładu nośników mniejszościowych. To już wyjaśnia pojawienie się dodatkowej struktury w zależności współczynnika ZT .

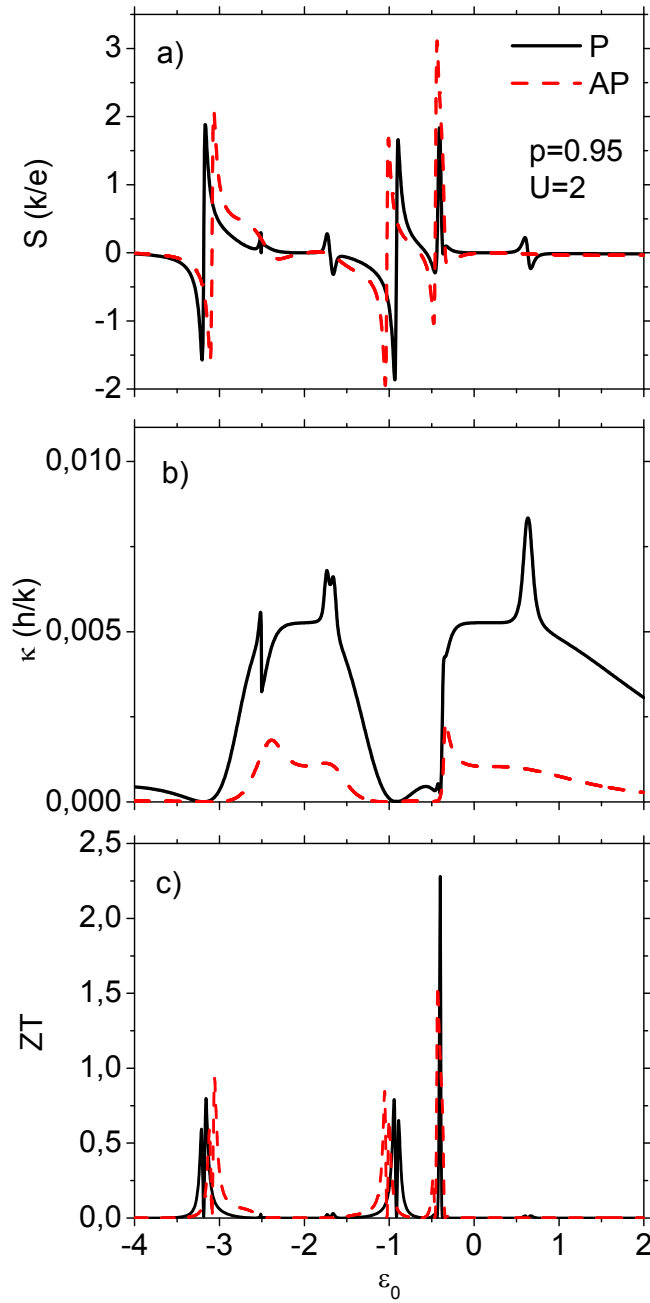
Na Rys. 9.5 oraz Rys. 9.6 zostały przedstawione zależności wielkości termoelektrycznych od położenia poziomów kropek kwantowych w obecności korelacji kulombowskich i wyznaczonych dla równoległej oraz antyrównoległej konfiguracji magnetycznej elektrod, oraz dla różnych wartości polaryzacji p . W konfiguracji antyrównoległej współczynnik ZT praktycznie nie zależy od wielkości polaryzacji p . Nie jest to zbyt zaskakujące, zważywszy na fakt, iż zarówno konduktancja cieplna, jak i elektronowa maleją z taką samą prędkością ze wzrostem polaryzacji p , a termosila praktycznie nie ulega zmianie. W antyrównoległej konfiguracji magnetycznej elektrody z obydwiema orientacjami spinu tunelują między większościowymi i mniejszościowymi

paszami spinowymi co powoduje redukcję konduktancji elektrycznej, a także konduktancji cieplnej.



Rysunek 9.5: Współczynniki termoelektryczne: (a) termosila, (b) konduktancja cieplna, (c) ZT , w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczone dla równoległej (P) i antyrównoległej (AP) konfiguracji magnetycznej, oraz dla $p = 0.4$, $U = 2$, $q = 1$. Pozostałe parametry jak na Rys. 9.1. Wielkości energetyczne podane są w jednostkach Γ .

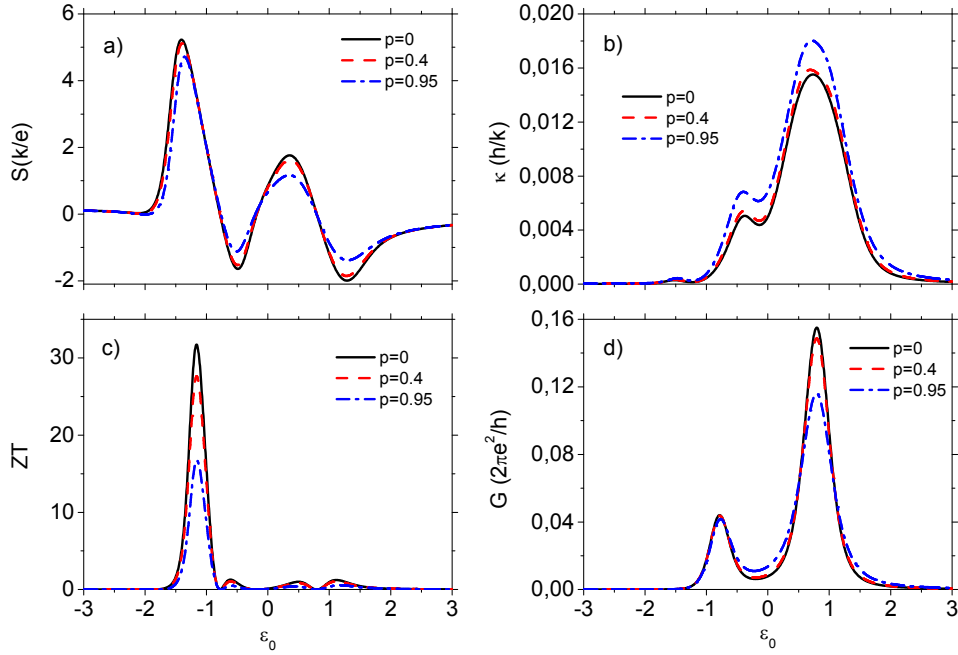
Natomiast w konfiguracji równoległej sytuacja jest bardziej skomplikowana. Tutaj początkowo ze wzrostem polaryzacji spinowej elektrod konduktancja cieplna, termosila i współczynnik ZT maleją. Takie zachowanie się konduktancji cieplnej wraz ze wzrostem polaryzacji jest odwrotne do tego jakie zostało otrzymane w układzie pojedynczej kropki kwantowej [143]. Jednak w tamtym przypadku rozważano inny zakres sprzężeń, a mianowicie sytuację gdy $k_B T / \Gamma \approx \gamma$. Natomiast przy dalszym wzroście polaryzacji p konduktancja cieplna również maleje, ale od pewnej wartości polaryzacji p współczynnik efektywności termoelektrycznej ZT zaczyna wzrastać. Dla stosunkowo dużej polaryzacji elektrod ZT może przewyższyć wartość jaką przyjmował w przypadku niemagnetycznym. Dla dużych wartości polaryzacji elektrod wyraźnie widać, opisane dla przypadku $U = 0$, rozszczenie rezonansów we współczynniku Seebecka S .



Rysunek 9.6: Współczynniki termoelektryczne: (a) termosila, (b) konduktancja cieplna, (c) ZT , w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczone dla równoległej (P) i antyrównoległej (AP) konfiguracji magnetycznej, oraz dla $p = 0.95$, $U = 2$, $q = 1$. Pozostałe parametry jak na Rys. 9.1. Wielkości energetyczne podane są w jednostkach Γ .

W dalszej części tego rozdziału zostanie rozważony przypadek, w którym spełniona jest relacja $k_B T / \Gamma \approx \gamma$. Jako że sprzężenia z elektrodami są teraz zredukowane względem temperatury, powinno się oczekiwać wzrostu efektywności zjawisk termoelektrycznych dla rozpatrywanego układu [134]. Jednak z drugiej strony efekty temperaturowe powinny wytłumić zjawiska interferencyjne obserwowane w poprzednim przypadku. Na Rys. 9.7 zostały przedstawione charakterystyki termoelektryczne wyznaczone dla różnych wartości polaryzacji elektrod i dla konfiguracji równoległej ich namagnesowań. W tym zakresie sprzężeń, podobnie jak w przypadku pojedynczej kropki [143], konduktancja elektryczna [Rys. 9.7(d)] maleje ze wzrostem polaryzacji, podczas gdy konduktancja cieplna [Rys. 9.7(b)] rośnie. Zarówno bezwzględna wartość termosily [Rys. 9.7(a)], jak i współczynnik ZT [Rys. 9.7(c)] również maleją wraz ze wzrostem polaryzacji elektrod. Największe zmiany tych wielkości są obserwowane w okolicach rezonansów ponieważ w rezonansach prąd elektronowy zostaje skompensowany prądem dziurowym. Redukując konduktancję elektryczną (poprzez zwiększenie polaryzacji p) zmniejszeniu ulega również napięcie

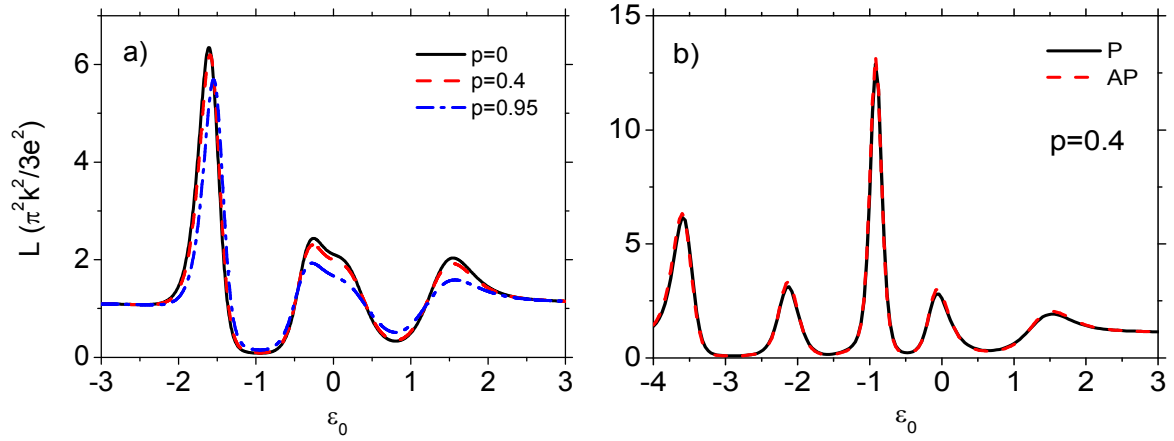
blokujące przepływ prądu elektrycznego. Z drugiej strony wkłady do konduktancji cieplnej pochodzące od elektronów i dziur dodają się konstruktywnie i stąd następuje wzrost konduktancji cieplnej. Wyjaśnienie zachowania pozostałych wielkości jest teraz oczywiste. Należy dodać, iż takie zachowanie jest przeciwne do tego w przypadku $k_B T/\Gamma \ll \gamma$.



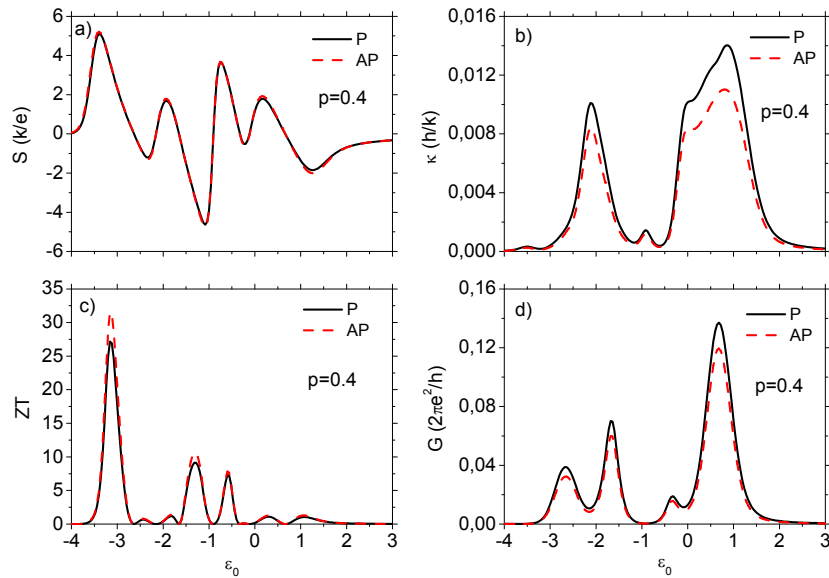
Rysunek 9.7: Współczynniki termoelektryczne: (a) termosila, (b) konduktancja cieplna, (c) ZT , (d) konduktancja elektryczna w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczone dla równoległej konfiguracji magnetycznej, oraz dla podanych wartości polaryzacji magnetycznej elektrod p . Pozostałe parametry: $U = 2$, $q = 1$, $k_B T = 0.1$, $\gamma = 0.1$. Wielkości energetyczne podane są w jednostkach Γ .

Z Rys. 9.7 widać również, że efekty interferencyjne zostały niejako rozmyte, o czym świadczy brak charakterystycznego antyrezonansu w konduktancji elektrycznej [Rys. 9.7(d)], oraz cieplnej [Rys. 9.7(b)]. Zauważyć jednak trzeba, iż największe zmiany współczynnika Seebecka zachodzą w pobliżu poziomu antywiążącego, gdzie konduktancja elektryczna zaczyna zanikać (tam gdzie następował nagły zanik konduktancji w przypadku rezonansu Fano). Wówczas też współczynnik ZT osiąga stosunkowo dużą wartość $ZT \approx 35$, co jest warte zaznaczenia. Efekty te prowadzą do znacznych odchyśleń od prawa Wiedemanna-Franza. Miarą odstępstwa od tego prawa może być zależność współczynnika Lorentza, $L = \kappa/GT$, przedstawiona na Rys. 9.8. Współczynnik ten równy jest jedności jeśli prawo Wiedemanna-Franza jest spełnione. Jak widać z Rys. 9.8 obowiązuje ono tylko dla $|\varepsilon| \gg 0$. Jeszcze większe odstępstwo od prawa Wiedemana-Franza można zaobserwować dla przypadku uwzględniającym oddziaływania kulombowskie na kropkach kwantowych. W szczególności współczynnik Lorentza L ulega znacznemu zwiększeniu w punkcie symetrii $\varepsilon_0 = -U/2$ w związku z efektem blokady kulombowskiej. Zostało to pokazane na Rys. 9.8(b). Widać również, że w reżimie $k_B T/\Gamma \approx \gamma$ położenia pików w konduktancji elektrycznej [Rys. 9.9(d)] i cieplnej [Rys. 9.9(b)] raczej się nie pokrywają, co było obserwowane dla przypadku $\gamma \gg k_B T/\Gamma$. Ponadto w konduktancji cieplnej pojawia się nowa struktura w punkcie symetrii $\varepsilon_0 = -U/2$, której nie obserwuje się w konduktancji elektrycznej, ani też nie pojawiła się w przypadku konduktancji cieplnej dla $k_B T/\Gamma \ll \gamma$. Pojawienie się dodatkowego pików w konduktancji cieplnej w punkcie symetrii $\varepsilon_0 = -U/2$ można wyjaśnić odwołując się do faktu, iż w obecnym reżimie sprzężeń ($\Gamma \approx k_B T$) temperatura osiąga dużo większe wartości niż w poprzednim przypadku ($\gamma \gg k_B T/\Gamma$). W obydwu przypadkach Γ pozostało takie samo, a jedynie zmieniano temperaturę roboczą. Wzrost temperatury powoduje większe rozmycie rozkładu Fermiego-Diraca dla elektrod wokół poziomu Fermiego. Energia tunelującego elektronu nie ma znaczenia dla wielkości konduktancji elektrycznej, ale odgrywa zasadnicze znaczenie dla wielkości konduktancji cieplnej, jako że prąd cieplny jest miarą energii przeniesionej przez

nośniki z elektrody cieplejszej do elektrody chłodniejszej. Jak już wcześniej wspomniano, w punkcie symetrii $\varepsilon_0 = -U/2$ prąd elektryczny zostaje całkowicie skompensowany. Można to sobie wyobrazić następująco: dla poziomów energetycznych leżących powyżej poziomu Fermiego w przypadku gdy $\varepsilon_0 = -U/2$, (wypadkowy) prąd elektronowy płynie z elektrody cieplejszej do elektrody chłodniejszej, natomiast poprzez poziomy leżące poniżej poziomu Fermiego nośnikami większościowymi tunelującymi z cieplejszej elektrody do chłodniejszej są dziury. Ze względu na wspomnianą symetrię, w odpowiedzi liniowej prąd elektronowy zostaje całkowicie skompensowany przez prąd dziurowy. Ze względu na ten sam kierunek przepływu obydwu prądów, energie poszczególnych nośników dodają się konstruktywnie, w przeciwieństwie do ich ładunków. Wobec tego dla wystarczająco wysokiej temperatury pojawia się dodatkowy pik w konduktancji cieplnej, którego intensywność i szerokość wzrasta z dalszym wzrostem temperatury.

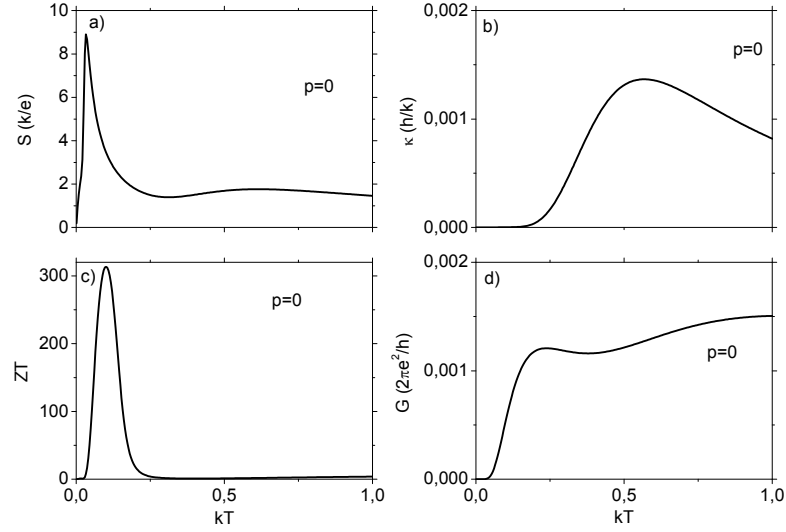


Rysunek 9.8: (a) Współczynnik Lorentza w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych, wyznaczony dla $U = 0$ i podanych wartości polaryzacji p w równoległej konfiguracji magnetycznej elektrod. (b) Współczynnik Lorentza dla $U = 2$ i dla równoległej (P) oraz antyrównoległej (AP) konfiguracji magnetycznej. Pozostałe parametry jak na Rys. 9.7. Wielkości energetyczne podane są w jednostkach Γ .



Rysunek 9.9: Współczynniki termoelektryczne: (a) termosila, (b) konduktancja cieplna, (c) ZT , (d) konduktancja elektryczna w funkcji położenia poziomów kropek kwantowych wyznaczone dla konfiguracji równoległej (P) i antyrównoległej (AP) oraz dla podanych wartości polaryzacji magnetycznej elektrod p . Pozostałe parametry jak na Rys. 9.7. Wielkości energetyczne podane są w jednostkach Γ .

Dalszy wzrost wydajności termoelektrycznej można otrzymać zmieniając konfigurację magnetyczną elektrod z równoległej na antyrównoległą, chociaż współczynniki Seebecka w obydwu konfiguracjach praktycznie się nie różnią od siebie. Taka zmiana konfiguracji magnetycznej elektrod powoduje redukcję zarówno konduktancji elektrycznej, jak i konduktancji cieplnej, przy czym ta druga doznaje stosunkowo większego ubytku, co można wyjaśnić analogicznie jak zostało to uczynione w przypadku zwiększenia polaryzacji p w konfiguracji równoległej. Wobec tego współczynnik ZT ulega zwiększeniu.



Rysunek 9.10: Współczynniki termoelektryczne: (a) termosila, (b) konduktancja cieplna, (c) ZT , (d) konduktancja elektryczna w funkcji temperatury wyznaczone dla położenia poziomów kropek kwantowych z pobliża rezonansu Fano, $\varepsilon_0 = -1.15$, oraz dla $q = 1$, $U = 0$, $\gamma = 0.01$. Pozostałe parametry jak na Rys. 9.7. Wielkości energetyczne podane są w jednostkach Γ .

Z rozpatrywanych przypadków ($k_B T/\Gamma \ll \gamma$, oraz $k_B T/\Gamma \approx \gamma$) widać, że współczynniki termoelektryczne silnie zależą od temperatury. Wobec tego przeprowadzono obliczenia temperaturowe tych współczynników, których wyniki pokazano na Rys. 9.10. Efekty termoelektryczne są zoptymalizowane dla temperatur spełniających warunek $k_B T/\Gamma \approx 0.1$. W tym reżimie współczynnik efektywności termoelektrycznej osiąga maksymalną wartość, który dla rozpatrywanego przykładu wynosi $ZT \approx 314$.

9.3 Podsumowanie

Głównym celem tego rozdziału było pokazanie, że efekty interferencji kwantowej mogą prowadzić do znacznego wzrostu efektywności termoelektrycznej, co jest pożądane z punktu widzenia potencjalnych zastosowań efektów termoelektrycznych. Ponadto, poprzez sterowanie wielkością sprzężenia kropek z elektrodami jak i temperaturą można zoptymalizować efektywność termoelektryczną układu. Pokazano też wpływ oddziaływań kulombowskich oraz ferromagnetyzmu elektrod (jak i wzajemnego ustawienia ich momentów magnetycznych) na efekty termoelektryczne.

Rozdział 10

Dudnienia w charakterystykach transportowych układu dwóch kropek kwantowych

10.1 Wprowadzenie

W rozdziale tym zostanie omówiony transport nierównowagowy przez układ dwóch kropek kwantowych z dołączonymi bramkami, do których przyłożono napięcie zmienne w czasie. Obliczenia zostały wykonane zarówno, gdy elektrody transportowe (źródła i drenu) były wykonane z normalnego metalu, jak i w przypadku elektrod ferromagnetycznych. Ponadto, wykonano analizę zjawisk transportowych, gdy do elektrod tych przyłożone zostało napięcie zależne od orientacji spinu. Przedstawiony układ pozwala zaobserwować dudnienia w charakterystykach transportowych, które mogą zostać wykorzystane w do pewnych praktycznych zastosowań (opisanych pod koniec rozdziału).

Dudnienia fal znane są od dawna w fizyce [166]. Zjawisko to powstaje, gdy częstotliwości dwóch nakładających się na siebie fal nie różnią się zbyt wiele od siebie. W rezultacie takiej interferencji powstaje fala, którą można rozłożyć na dwie składowe oscylujące z różnymi częstotliwościami. Składowa szybkozmienna oscyluje z częstotliwością będącą średnią z częstotliwości drgań fal interferujących ze sobą, a składowa wolnozmienna oscyluje z częstotliwością równą połowie różnicy częstotliwości tych (początkowych) fal. Częstota dudnień związana jest z częstotliwością składowej wolnozmiennej. W oparciu o to zjawisko można zbudować bardzo czułe i dokładne urządzenia do pomiaru częstotliwości sygnału. Akustyczna wersja dudnień wykorzystywana jest np. do strojenia instrumentów. Efekt ten został również zastosowany w elektronice, w celu zmiany częstotliwości sygnału wejściowego (tzw. konwersja w dół), co poprawia czułość i selektywność odbiornika. Kolejnym zastosowaniem dudnień jest spektroskopia mikrofalowa [167].

Mimo powszechnego zastosowania tego zjawiska w elektronice konwencjonalnej, to jego wykorzystanie i obserwacja w układach nanoskopowych jest raczej na poziomie wstępnym. Aczkolwiek dudnienia zostały już zaobserwowane w oscylacjach Rabiego [168, 169], gdy fluktuator jest w rezonansie z kubitami [170, 171], a także w magnetooporze balistycznego złącza tunelowego [172].

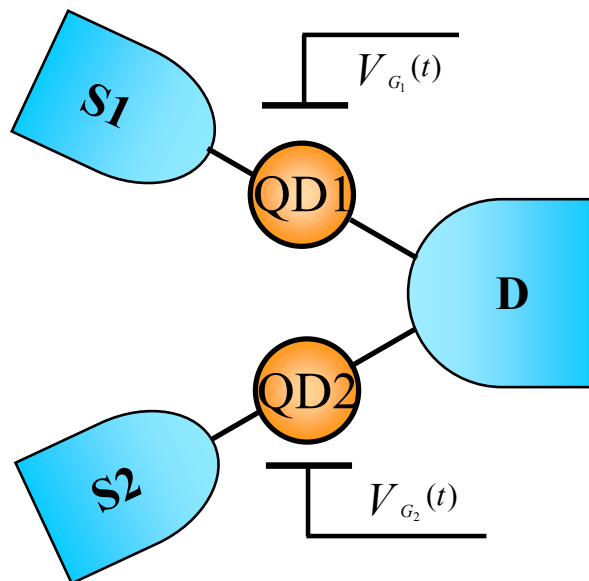
Zjawisko dudnienia w obsadzeniu stanu wzbudzonego kubitów zostało przewidziane dla kubitów Josephsona sprzężonego rezonansowo z układem dwóch poziomów energetycznych [173], przy czym założono brak jakiegokolwiek dekoherencji, która niszczyłaby dudnienia. Dlatego też efekt ten nie został do tej pory zaobserwowany eksperymentalnie w takich układach.

Z drugiej strony koherencja spinu elektronu może być utrzymywana stosunkowo długo w układach kropek kwantowych poprzez zastosowanie różnych technik optycznych [174, 175, 176]. Wobec tego wydaje się zasadne sądzić, że efekt dudnień może być obserwowany w układach kropek kwantowych kontrolowanych wyłącznie napięciami elektrycznymi. Do tej pory nie przeprowadzono eksperymentów pokazujących dudnienia w charakterystykach transportowych odpowiadających takim układom. Również badania teoretyczne skupione były na transporcie niezależnym od orientacji spinu, gdzie pewne parametry zmieniały się w czasie. Dla tych układów

przewidziano jedynie koherentne oscylacje w charakterystykach transportowych [28, 177]. Jednakże, w transporcie zależnym od spinu przez kropkę kwantową, oscylacje te również zależą od orientacji spinu co prowadzi do pojawienia się dudnień [178]. W tym przypadku dwie składowe spinowe prądu oscylują z różnymi częstotliwościami i dudnienia można zauważyć, gdy rozszczepienie poziomu kropki kwantowej w wyniku przyłożonego pola magnetycznego bądź ferromagnetyzmu elektrod jest wystarczająco małe. Z drugiej strony efekty związane z odwróceniem spinu tłumią dudnienia [179]

10.2 Model i opis metody

Rozważany układ zbudowany jest z dwóch jednopoziomowych kropek kwantowych sprzężonych z elektrodami magnetycznymi lub niemagnetycznymi. Ponadto, do elektrod może zostać przyłożone napięcie zarówno elektryczne, jak i spinowe. Geometria rozpatrywanego układu została przedstawiona na Rys. 10.1 i przypomina tę rozważaną w rozdziale 7. Tutaj, każda z kropek posiada własną elektrodę źródłową, natomiast dren jest wspólny dla obu kropek. Poza tym zaniechano efekty pośredniego (koherentnego) tunelowania elektronów między kropkami za pośrednictwem drenu. Bezpośrednie tunelowanie między kropkami kwantowymi również zostało wyeliminowane poprzez wprowadzenie wystarczająco szerokiej i wysokiej bariery tunelowej między nimi. W rzeczywistych układach kropek kwantowych międzywęzłowe oddziaływanie kulombowskie jest co najmniej rząd wielkości mniejsze od oddziaływania kulombowskiego na kropkach, toteż to pierwsze można zaniechać. Ponadto siła tego oddziaływania jest znacznie mniejsza od sprzężenia kropki kwantowej z elektrodą, toteż nawet takie międzywęzłowe oddziaływanie nie prowadzi do rozszczepienia w gęstości stanów. Założenia te pozwalają na wprowadzenie dwóch niezależnych kanałów transportowych.



Rysunek 10.1: Schemat dwóch kropek kwantowych sprzężonych do zewnętrznych elektrod. Każda z kropek dołączona jest do własnej elektrody źródła (S1 dla kropki QD1, S2 dla kropki QD2) i wspólnej elektrody drenu D. Kropki kwantowe zostały zaopatrzone we własne elektrody bramkujące, do których jest przykładane zmienne w czasie napięcie.

Wobec powyższego układ można opisać Hamiltonianem postaci:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha\sigma} c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha\sigma} + \sum_{i=1,2} \sum_{\sigma} \varepsilon_{i\sigma}(t) q_{i\sigma}^\dagger q_{i\sigma} + \sum_{i=1,2} U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \\ & + \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sum_{i,\sigma} (V_{i\sigma}^\alpha c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger q_{i\sigma} + \text{H.c.}). \end{aligned} \quad (10.1)$$

Pierwszy człon Hamiltonianu (10.1) opisuje dwie elektrody źródłowe $\beta = S1, S2$, oraz jedną elektrodę drenu $\beta = D$. Kolejne dwa człony opisują dwie kropki kwantowe z uwzględnieniem oddziaływań kulombowskich, które zawarte są w członie z U . W odróżnieniu od poprzednich rozdziałów tutaj operator kreacji (anihilacji) elektronu o określonej orientacji spinu jest dany symbolem $q_{i\sigma}^\dagger$ ($q_{i\sigma}$), zamiast $d_{i\sigma}^\dagger$ ($d_{i\sigma}$). Zmieniające się w czasie napięcie bramkujące każdą z kropek prowadzi do zależności czasowej położenia poziomu każdej kropki, co zaznaczono dodając czasową zależność poziomów, $\varepsilon_{i\sigma}(t)$. Ostatni człon Hamiltonianu (10.1) opisuje tunelowanie elektronów między kropkami a elektrodami z amplitudą $V_{i\sigma}^\alpha$. Tak jak w poprzednich rozdziałach, tutaj również zastosowano przybliżenie szerokiego pasma, co pozwoliło zaniedbać zależność energetyczną elementów macierzy sprzężenia kropek z elektrodami.

W związku z poczynionymi założeniami (o niezależności dwóch kanałów) macierz gęstości układu może być przedstawiona w postaci iloczynu macierzy gęstości każdej kropki sprzężonej do elektrody źródła i drenu: $\hat{\rho}_{total} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$

Operator $q_{i\sigma}$ każdej z kropek wyrazić można za pomocą operatorów Hubbarda w następujący sposób [180]:

$$q_{i\sigma} = |0\rangle_{ii}\langle\sigma| + \tilde{\sigma}|\bar{\sigma}\rangle_{ii}\langle 2|, \quad (10.2)$$

gdzie $\tilde{\sigma} = 1$ dla $\sigma = \uparrow$, oraz $\tilde{\sigma} = -1$ dla $\sigma = \downarrow$. Operator anihilacji został wyrażony za pomocą czterech możliwych stanów dostępnych na każdej z kropek [181], które spełniają relację zupełności postaci:

$$|0\rangle\langle 0| + \sum_{\sigma} |\sigma\rangle\langle\sigma| + |2\rangle\langle 2| = \hat{1}. \quad (10.3)$$

W dalszych rozważaniach zostanie pominięty wskaźnik numerujący kropki, bowiem otrzymane równania mają taką samą postać dla obydwu kropek.

W kolejnym kroku wprowadza się operatory, które przypisane są stanom danej kropki w następujący sposób: $|0\rangle = e^\dagger$, $|\sigma\rangle = f_\sigma^\dagger$, $|2\rangle = d^\dagger$. Wówczas równania (10.2), oraz (10.3) przybierają następującą postać:

$$q_\sigma = e^\dagger f_\sigma + \sigma f_\sigma^\dagger d, \quad (10.4)$$

$$e^\dagger e + \sum_{\sigma} f_\sigma^\dagger f_\sigma + d^\dagger d = \hat{1}. \quad (10.5)$$

W powyższych równaniach $b^\dagger$ jest operatorem bozonowym, który kreuje stan pusty na kropce, natomiast $f_\sigma^\dagger$ to operator pseudofermionowy kreujący stan obsadzony przez jeden elektron o spinie σ , podczas gdy $d^\dagger$ kreuje stan podwójnie obsadzony z jednym elektronem o spinie σ i drugim o spinie $\bar{\sigma}$. W reprezentacji cząstek pomocniczych operator obsadzenia kropki wyrażony jest następująco: $n_\sigma = f_\sigma^\dagger f_\sigma + d^\dagger d$. Własności operatorów Hubbarda prowadzą do następujących reguł komutacyjnych dla pól pomocniczych [182]:

$$ee^\dagger = dd^\dagger = 1, \quad f_\sigma f_{\sigma'}^\dagger = \delta_{\sigma\sigma'} \quad (10.6)$$

$$ed^\dagger = ef_\sigma^\dagger = f_\sigma e^\dagger = f_\sigma d^\dagger = de^\dagger = df_\sigma^\dagger = 0 \quad (10.7)$$

Hamiltonian (10.1) w nowej reprezentacji przyjmuje następującą postać:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha\sigma} c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha\sigma} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_{i\sigma}(t) (f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + d_i^\dagger d_i) + \sum_i U_i d_i^\dagger d_i \\ & + \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sum_{i\sigma} [V_{i\sigma}^\alpha c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger (e_i^\dagger f_{i\sigma} + \sigma f_{i\sigma}^\dagger d_i) + \text{h.c.}]. \end{aligned} \quad (10.8)$$

Elementy macierzy gęstości wyrazić można jako: $\hat{\rho}_{00} = e^\dagger e$, $\hat{\rho}_{\sigma\sigma} = f_\sigma^\dagger f_\sigma$, $\hat{\rho}_{22} = d^\dagger d$. Wartości oczekiwane z elementów macierzy gęstości ($\rho_{nn} \equiv \langle \hat{\rho}_{nn} \rangle$ with $n = 0, \sigma, 2$) wyrażają prawdopodobieństwo znalezienia się danej kropki kwantowej w stanie nieobsadzonym, w stanie obsadzonym przez elektron o spinie σ , czy też w stanie o podwójnym obsadzeniu, odpowiednio.

W celu znalezienia równań opisujących ewolucję układu w czasie zapisujemy równanie von Neumanna dla operatora macierzy gęstości:

$$\dot{\hat{\rho}}_j = i[H, \hat{\rho}_j], \quad (10.9)$$

gdzie $\hat{\rho}_j = (\hat{\rho}_{00}, \hat{\rho}_{\uparrow\uparrow}, \hat{\rho}_{\downarrow\downarrow}, \hat{\rho}_{22})^T$ dla $j = 1, 2$. Wprowadzając funkcje Greena:

$$\begin{aligned} G_{e\sigma, k\alpha\sigma'}^<(t, t') &= i\langle c_{\mathbf{k}\alpha\sigma'}^\dagger(t') e^\dagger(t) f_\sigma(t) \rangle, \\ G_{d\sigma, k\alpha\sigma'}^<(t, t') &= i\langle c_{\mathbf{k}\alpha\sigma'}^\dagger(t') f_\sigma^\dagger(t) d(t) \rangle, \\ G_{k\alpha\sigma', e\sigma}^<(t, t') &= i\langle f_\sigma^\dagger(t') e(t') c_{\mathbf{k}\alpha\sigma'}(t) \rangle, \\ G_{k\alpha\sigma', d\sigma}^<(t, t') &= i\langle d^\dagger(t') f_\sigma(t') c_{\mathbf{k}\alpha\sigma'}(t) \rangle, \end{aligned} \quad (10.10)$$

uśrednione (termodynamicznie) równania ewolucji czasowej dla macierzy gęstości wyrażają się następująco:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{00} &= - \sum_{k\alpha\sigma} [V_{\alpha\sigma} G_{e\sigma, k\alpha\sigma}^<(t, t) - V_{\alpha\sigma}^* G_{k\alpha\sigma, e\sigma}^<(t, t)], \\ \dot{\rho}_{\sigma\sigma} &= \sum_{k\alpha} [V_{\alpha\sigma} G_{e\sigma, k\alpha\sigma}^<(t, t) - V_{\alpha\sigma}^* G_{k\alpha\sigma, e\sigma}^<(t, t) - \bar{\sigma} V_{\alpha\bar{\sigma}} G_{d\sigma, k\alpha\bar{\sigma}}^<(t, t) + \bar{\sigma} V_{\alpha\bar{\sigma}}^* G_{k\alpha\bar{\sigma}, d\sigma}^<(t, t)], \\ \dot{\rho}_{22} &= \sum_{k\alpha\sigma} \sigma [V_{\alpha\sigma} G_{d\sigma, k\alpha\sigma}^<(t, t) - V_{\alpha\sigma}^* G_{k\alpha\sigma, d\sigma}^<(t, t)]. \end{aligned} \quad (10.11)$$

Następnie, wykorzystując twierdzenie Langreth'a [29] funkcje Greena (10.10) można wyrazić za pomocą funkcji Greena kropki kwantowej, $G_{e(d)\sigma\sigma}^{<,r,a}$, oraz funkcji Greena swobodnych elektrod $g_{k\alpha\sigma}^{<,r,a}$. Jednakże przejście z domeny czasowej do przestrzeni Fouriera w przypadku zjawisk zależnych od czasu nie jest bezpośrednie i trzeba zastosować pewne przybliżenia. Aby zastosować przybliżenie rozwinięcia gradientowego [183] wygodnie jest wprowadzić nowe zmienne czasowe: czas średni $\bar{t} = \frac{t+t'}{2}$ będący wielkością wolnozmienną oraz różnicę czasów $\delta t = t - t'$ będącą wielkością szybkozmienną, i wyrazić funkcje Greena za pomocą tych nowych zmiennych czasowych, tzn. $G(t, t') \rightarrow G(\delta t, \bar{t})$ [183, 184]. Następnie należy rozwinąć funkcję Greena $G(\delta t, \bar{t})$ względem wolnozmienną się zmienną $\bar{t}$ i wziąć transformatę Fouriera względem szybkozmienną się zmienną otrzymując funkcję $G(\omega, \bar{t}) = \sum_n \bar{G}^{(n)}(\omega, \bar{t}) \bar{t}^n$, gdzie $\bar{G}^{(n)}$ jest n -tą pochodną względem $\bar{t}$. Ograniczając się do pierwszego członu rozwinięcia gradientowego funkcje Greena (10.10) można zapisać w następujący sposób:

$$\begin{aligned} G_{k\alpha\sigma, e\sigma}^<(\omega, \bar{t}) &= V_{\alpha\sigma} [g_{k\alpha\sigma}^r G_{e\sigma\sigma}^<(\omega, \bar{t}) + g_{k\alpha\sigma}^a G_{e\sigma\sigma}^a(\omega, \bar{t})], \\ G_{e\sigma, k\alpha\sigma}^<(\omega, \bar{t}) &= V_{\alpha\sigma}^* [G_{e\sigma\sigma}^r(\omega, \bar{t}) g_{k\alpha\sigma}^< + G_{e\sigma\sigma}^<(\omega, \bar{t}) g_{k\alpha\sigma}^a], \\ G_{k\alpha\sigma, d\sigma}^<(\omega, \bar{t}) &= V_{\alpha\sigma} [g_{k\alpha\sigma}^r G_{d\sigma\sigma}^<(\omega, \bar{t}) + g_{k\alpha\sigma}^a G_{d\sigma\sigma}^a(\omega, \bar{t})], \\ G_{d\sigma, k\alpha\sigma}^<(\omega, \bar{t}) &= V_{\alpha\sigma}^* [G_{d\sigma\sigma}^r(\omega, \bar{t}) g_{k\alpha\sigma}^< + G_{d\sigma\sigma}^<(\omega, \bar{t}) g_{k\alpha\sigma}^a]. \end{aligned} \quad (10.12)$$

Zastosowany tutaj najniższy rząd rozwinięcia gradientowego jest wystarczający do opisu transportu sekwencyjnego.

Funkcje Greena kropki kwantowej w domenie czasowej zdefiniowano następująco: $G_{\sigma\sigma}(t, t') = \langle \langle q_\sigma(t) | q_\sigma^\dagger(t') \rangle \rangle = \langle \langle e_\sigma^\dagger(t) f_\sigma(t) | f_\sigma^\dagger(t') e(t') \rangle \rangle + |\sigma|^2 \langle \langle f_\sigma^\dagger(t) d(t) | d^\dagger(t') f_\sigma(t') \rangle \rangle$. Pozostałe człony funkcji $G_{\sigma\sigma}(t, t')$ znikają dla $t' = t$, wobec czego zostały pominięte, bowiem dla przeprowadzenia dalszych obliczeń wystarczy znajomość tych funkcji dla $t' = t$. W przybliżeniu szerokiego pasma można zaniedbać część rzeczywistą funkcji Greena $g_{k\alpha\sigma}^{r,a}$. Przy takich założeniach równania (10.11) przyjmują postać:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{00} &= -\frac{i}{2\pi} \int d\omega \sum_{\alpha\sigma} [\Gamma_\sigma^\alpha f^\alpha(\omega) G_{e\sigma\sigma}^>(\omega, \bar{t}) + \Gamma_\sigma^\alpha (1 - f^\alpha(\omega)) G_{e\sigma\sigma}^<(\omega, \bar{t})] \\ \dot{\rho}_{\sigma\sigma} &= \frac{i}{2\pi} \int d\omega \sum_{\alpha} [\Gamma_\sigma^\alpha f^\alpha(\omega) G_{e\sigma\sigma}^>(\omega, \bar{t}) + \Gamma_\sigma^\alpha (1 - f^\alpha(\omega)) G_{e\sigma\sigma}^<(\omega, \bar{t}) - \Gamma_{\bar{\sigma}}^\alpha f^\alpha(\omega) G_{d\sigma\sigma}^>(\omega, \bar{t}) \\ &\quad - \Gamma_{\bar{\sigma}}^\alpha (1 - f^\alpha(\omega)) G_{d\sigma\sigma}^<(\omega, \bar{t})] \\ \dot{\rho}_{22} &= \frac{i}{2\pi} \int d\omega \sum_{\alpha\sigma} [\Gamma_\sigma^\alpha f^\alpha(\omega) G_{d\sigma\sigma}^>(\omega, \bar{t}) + \Gamma_\sigma^\alpha (1 - f^\alpha(\omega)) G_{d\sigma\sigma}^<(\omega, \bar{t})] \end{aligned} \quad (10.13)$$

Po zastosowaniu rozwinięcia gradientowego funkcje Greena kropek kwantowych wyrażone w przestrzeni Fouriera zależą od średniego czasu $\bar{t}$. W przybliżeniu słabego sprzężenia z elektrodami funkcje te przyjmują następującą postać:

$$\begin{aligned} G_{e\sigma\sigma}^<(\omega, \bar{t}) &= i2\pi\rho_{\sigma\sigma}\delta(\omega - \varepsilon_\sigma(\bar{t})) \\ G_{e\sigma\sigma}^>(\omega, \bar{t}) &= -i2\pi\rho_{00}\delta(\omega - \varepsilon_\sigma(\bar{t})) \\ G_{d\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^<(\omega, \bar{t}) &= i2\pi\rho_{22}\delta[\omega - (\varepsilon_\sigma(\bar{t}) + U)] \\ G_{d\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^>(\omega, \bar{t}) &= -i2\pi\rho_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}\delta[\omega - (\varepsilon_\sigma(\bar{t}) + U)]. \end{aligned} \quad (10.14)$$

W celu otrzymania powyższych funkcji Greena poczyniono dwa przybliżenia: wspomniane wcześniej przybliżenie słabego sprzężenia, równoznaczne ze stwierdzeniem, że $V_{i\sigma}^\alpha \rightarrow 0$, oraz przybliżenie adiabatyczne. Przybliżenie adiabatyczne zastosowano w stosunku do zmieniającego się w czasie położenia poziomu $\varepsilon_\sigma(t)$ rozwijając go wokół czasu średniego $\bar{t}$: $\varepsilon_\sigma(\tau) \approx \varepsilon_\sigma(\bar{t}) + \dot{\varepsilon}_\sigma(\tau)|_{\tau=\bar{t}}(\tau - \bar{t}) + \mathcal{O}(2)$ i zatrzymując tylko dwa pierwsze człony. Przybliżenie adiabatyczne pozwala zapisać: $\int_{\bar{t}}^t dt_1 \varepsilon_\sigma(\tau) \approx \varepsilon_\sigma(\bar{t})\delta t$ i po zastosowaniu transformaty Fouriera otrzymuje się funkcje Greena (10.14). Ostatecznie wstawiając równania (10.14) do (10.13) równania ewolucji czasowej macierzy gęstości przyjmują następującą postać:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{00} &= \sum_{\sigma} [F_{\sigma}^-(\varepsilon_{\sigma})\rho_{\sigma\sigma} - F_{\sigma}^+(\varepsilon_{\sigma})\rho_{00}] \\ \dot{\rho}_{\sigma\sigma} &= F_{\sigma}^+(\varepsilon_{\sigma})\rho_{00} - F_{\sigma}^-(\varepsilon_{\sigma})\rho_{\sigma\sigma} \\ &\quad - F_{\bar{\sigma}}^+(\varepsilon_{\bar{\sigma}} + U)\rho_{\sigma\sigma} + F_{\bar{\sigma}}^-(\varepsilon_{\bar{\sigma}} + U)\rho_{22} \\ \dot{\rho}_{22} &= \sum_{\sigma} [F_{\sigma}^+(\varepsilon_{\sigma} + U)\rho_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} - F_{\sigma}^-(\varepsilon_{\sigma} + U)\rho_{22}], \end{aligned} \quad (10.15)$$

gdzie, $F_{\sigma}^+(x'_{\sigma}) = \sum_{\alpha} \Gamma_{\alpha\sigma} f^{\alpha}(x'_{\sigma})$, $F_{\sigma}^-(x'_{\sigma}) = \sum_{\alpha} \Gamma_{\alpha\sigma} (1 - f^{\alpha}(x'_{\sigma}))$, oraz $F_{\sigma}^+(x'_{\sigma}) = \sum_{\alpha} \Gamma_{\alpha\sigma} f^{\alpha}(x'_{\sigma})$, $x'_{\sigma} = \{\varepsilon_{\sigma}, \varepsilon_{\sigma} + U\}$.

Prąd płynący z elektrody α ($\alpha = S1, S2, D$) do kropki QDj otrzymuje się stosując definicję:

$$J_{\alpha}^j = -e\langle \dot{N}_{\alpha} \rangle = -i\frac{e}{\hbar}\langle [H, N_{\alpha}] \rangle, \quad (10.16)$$

gdzie N_{α} oznacza liczbę obsadzeń w elektrodzie α . Wykonując analogiczne obliczenia jak w przypadku wyprowadzania równań ruchu dla macierzy gęstości otrzymuje się następujące wyrażenie na prąd

$$\begin{aligned} J_{\alpha}^j &= i\frac{e}{\hbar} \sum_{\sigma} \int \frac{d\omega}{2\pi} \Gamma_{j\sigma}^{\alpha} f^{\alpha}(\omega) [G_{e\sigma\sigma}^>(\omega, \bar{t}) + G_{d\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^>(\omega, \bar{t})] \\ &\quad + \Gamma_{j\sigma}^{\alpha} [1 - f^{\alpha}(\omega)] [G_{e\sigma\sigma}^<(\omega, \bar{t}) + G_{d\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^<(\omega, \bar{t})]. \end{aligned} \quad (10.17)$$

Wstawiając funkcje Greena (10.14) do wyrażenia na prąd (10.17) otrzymujemy:

$$J_{\alpha}^j = \frac{e}{\hbar} \sum_{\sigma} [F_{\alpha\sigma}^+(\varepsilon_{\sigma})\rho_{00} - F_{\alpha\sigma}^-(\varepsilon_{\sigma})\rho_{\sigma\sigma} + F_{\alpha\sigma}^+(\varepsilon_{\sigma} + U)\rho_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} - F_{\alpha\sigma}^-(\varepsilon_{\sigma} + U)\rho_{22}] \quad (10.18)$$

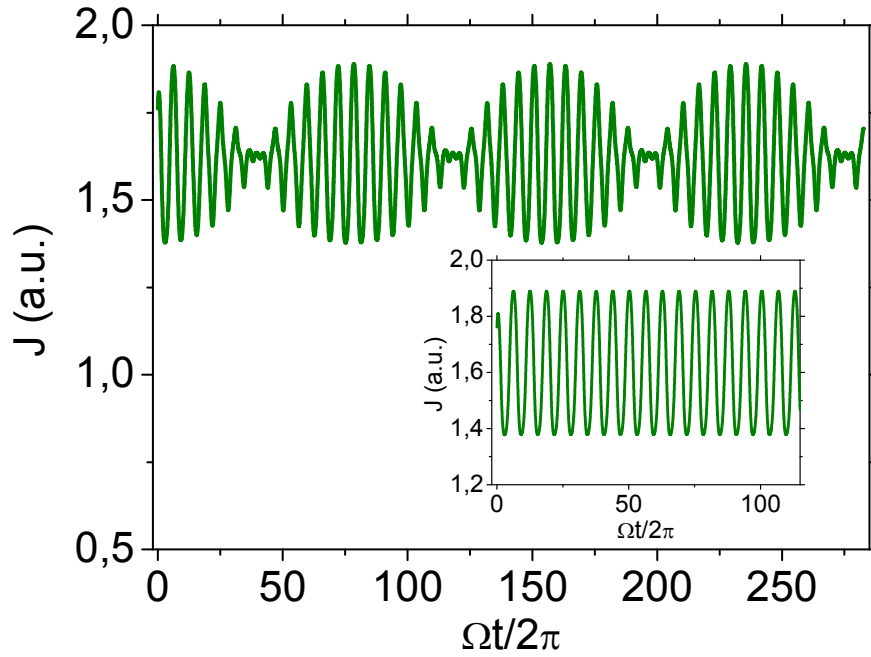
Prąd płynący przez kropkę QDj można zsymetryzować w następujący sposób: $J^j = (J_{Sj}^j - J_D^j)/2$. Całkowity prąd płynący przez układ jest równy $J = J^1 + J^2$.

10.3 Wyniki numeryczne

W obliczeniach numerycznych założono, że czasowa zależność położenia poziomów kropek kwantowych jest następującej postaci: $\varepsilon_{i\sigma}(t) = \varepsilon_{i\sigma} + \delta_i \cos \Omega_i t$, gdzie $\varepsilon_{i\sigma}$ jest składnikiem niezależnym od czasu. Częstości Ω_i , oraz amplitudy δ_i zewnętrznych sygnałów przyłożonych do kropek kwantowych mogą być zmieniane niezależnie, co wynika z geometrii układu. W rozpatrywanym

układzie potencjały chemiczne źródeł, oraz drenu są symetryczne względem poziomu Fermiego elektrod w równowadze, tj. $\mu_{S1} = \mu_{S2} = eV/2$ and $\mu_D = -eV/2$, gdzie V jest przyłożonym napięciem między elektrodą źródła (S1, S2), a elektrodą drenu (D). Poza tym kropki kwantowe są sprzężone symetrycznie z elektrodami: $\Gamma_1^S = \Gamma_2^S = \Gamma_1^D = \Gamma_2^D = \Gamma$, gdzie Γ jest jednostką energii. W przypadku słabego sprzężenia Γ przyjmuje wartość kilku meV . Dla prostoty założono równe i zdegenerowane spinowo poziomy (dokładniej składowe niezależne od czasu) kropek: $\varepsilon_{i\sigma} = \varepsilon_0$, oraz jednakowe amplitudy oscylującego sygnału ($\delta_1 = \delta_2 = \delta$). Ponadto założono takie same oddziaływania kulombowskie na kropkach kwantowych $U_1 = U_2 = U$. W celu rozwiązania równań ruchu dla macierzy gęstości założono następujące warunki początkowe $\rho_{00}^{(1,2)} = 1$, co jest równoznaczne ze stwierdzeniem, iż początkowo żadna z kropek nie była obsadzona.

Należy jeszcze zaznaczyć, że poczynione założenia podczas wyprowadzania równań (10.15), jak i wyrażenia na prąd (10.18) ograniczają rozpatrywany model do szczególnych reżimów. Zastosowane przybliżenia są ważne gdy: i) $\varepsilon_i \approx \mu_{Si}$, wtedy musi zachodzić $\hbar\Omega \ll k_B T$, $\Gamma \ll k_B T$, ii) $-W/2 < \varepsilon_i < \mu_{Si}$ dla $\hbar\Omega \ll W$ i $\Gamma \ll W$ [183]. Tylko takie przypadki rozpatrywane są w tym rozdziale.



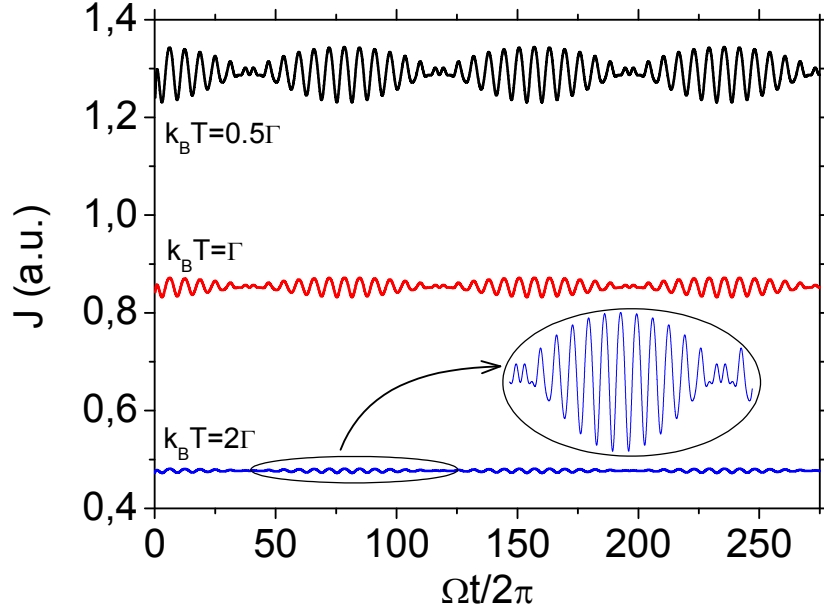
Rysunek 10.2: Czasowa ewolucja prądu wyznaczona dla układu z niemagnetycznymi elektrodami, oraz dla częstości (a) $\Omega_1 = 1.04\Omega$, $\Omega_2 = 0.96\Omega$, (b) $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega$. Pozostałe parametry: $\varepsilon_0 = -\Gamma$, $\delta = 0.2\Gamma$, $U = \Gamma$, $k_B T = 0.1\Gamma$, $eV = 2\Gamma$. Ω jest jednostką częstości.

10.3.1 Niemagnetyczne elektrody

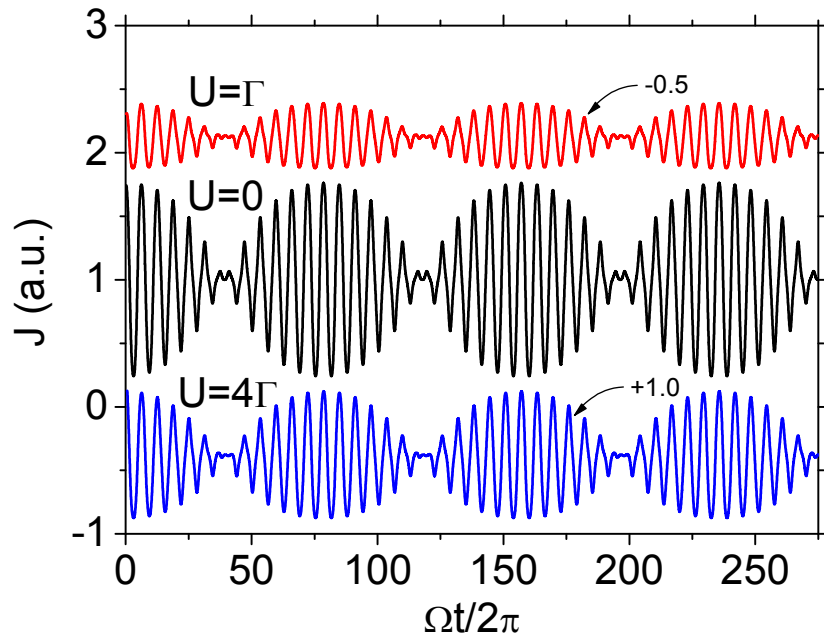
Rozważania rozpoczniemy od układu kropek sprzężonych do niemagnetycznych elektrod. W przypadku, gdy częstości napięć bramkujących kropki kwantowe różnią się nieznacznie od siebie, w prądzie pojawia się przebieg charakterystyczny dla dudnień [Rys. 10.2]. Całkowity prąd dudni z częstością będącą podwójną różnicą częstości prądów płynących przez każdą z kropek. Prąd całkowity można rozłożyć na dwie części: szybkozmienną – oscylującą z częstością średnią $F = \frac{1}{2}(f_1 + f_2)$, oraz wolnozmienną – drgającą z częstością $\Delta f = \frac{1}{2}(f_1 - f_2)$, gdzie $f_1 = \Omega_1/2\pi$, oraz $f_2 = \Omega_2/2\pi$. To właśnie ta druga częstość kontroluje amplitudę obwiedni i jest odpowiedzialna za dudnienia. Częstotliwość dudnień wynosi $F_b = 2\Delta f$ i jest podwójną różnicą częstotliwości sygnałów wejściowych. Wobec tego częstotliwość dudnień można obniżyć poprzez redukcję różnicy w częstościach prądów płynących przez każdą z kropek. Częstość tą można kontrolować całkowicie poprzez zmianę częstości napięć bramkujących. W przypadku, gdy częstości napięć bramkujących są równe ($\Omega_1 = \Omega_2$), wówczas nie obserwuje się dudnień i pozostają tylko zwykłe oscylacje prądu, co pokazano na Rys. 10.2(b). Elektryczna kontrola dudnień faworyzuje rozpatrywany układ do obserwacji dudnień w eksperymencie. Ponadto, tutaj

w przeciwieństwie do efektu przewidzianego dla pojedynczej kropki kwantowej [178], dudnienia są utrzymywane w czasie.

Na Rys. 10.3 został przedstawiony wpływ temperatury na dudnienia w prądzie. Zgodnie z oczekiwaniami wzrost temperatury powoduje tłumienie amplitudy dudnień. Jednakże, nawet dla stosunkowo wysokich temperatur (zobacz powiększenie na Rys. 10.3) dudnienia nie znikają. Z drugiej strony amplitudę dudnień można wzmocnić zwiększając amplitudy sygnałów bramkujących kropki (δ). Wynika z tego, że dudnienia można obserwować nawet dla $k_B T > \Gamma$ jeśli tylko δ jest wystarczająco duże.



Rysunek 10.3: Czasowa ewolucja prądu wyznaczona dla układu z niemagnetycznymi elektrodami, oraz dla podanych wartości temperatury. W elipsach pokazano powiększone fragmenty zaznaczone na wykresie. Pozostałe parametry: $\Omega_1 = 1.04\Omega$, $\Omega_2 = 0.96\Omega$, $\varepsilon_0 = -\Gamma$, $\delta = 0.2\Gamma$, $U = \Gamma$, $k_B T = 0.1\Gamma$, $eV = 2\Gamma$. Ω jest jednostką częstotliwości.



Rysunek 10.4: Czasowa ewolucja prądu wyznaczona dla układu z niemagnetycznymi elektrodami, oraz dla podanych wartości parametru U . Pozostałe parametry jak na Rys. 10.3. Dla przejrzystości wykresu przebiegi dla $U = \Gamma$ oraz $U = 4\Gamma$ zostały przesunięte o zaznaczone strzałkami wartości.

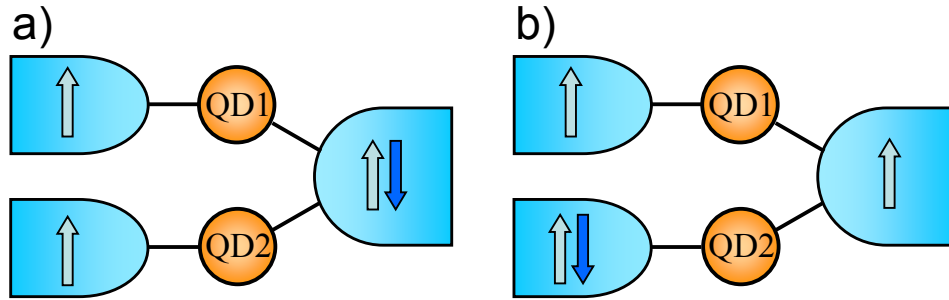
Prezentowane do tej pory wyniki zostały uzyskane przy założeniu braku oddziaływań kulombowskich. Włączenie tych oddziaływań nie niszczy dudnień, co można zaobserwować na Rys. 10.4. Z drugiej strony korelacje kulombowskie wpływają zarówno na amplitudę dudnień, jak i na średnią wartość prądu. W ogólności, oddziaływania kulombowskie tłumią amplitudę dudnień, chociaż zależność ta nie jest monotoniczna. Kiedy $\varepsilon_0 + U$ znajduje się w oknie transportowym, amplituda dudnień maleje wraz ze wzrostem parametru U , natomiast dla $\varepsilon_0 + U > \mu_S$ amplituda ta ponownie zaczyna wzrastać. Jednakże, nie osiąga ona wartości maksymalnej, jaką można obserwować dla przypadku $U = 0$.

Średni prąd również wykazuje niemonotoniczne zachowanie wraz ze wzrostem wartości parametru U osiągając duże wartości gdy $\varepsilon_0 \approx \mu_D$ i $\varepsilon_0 + U$ zbliża się do μ_{Sj} (ale nie za blisko, $\varepsilon_0 + U \not\approx \mu_{Sj}$, w związku z warunkiem nałożonym podczas rozwinięcia gradientowego). Natomiast, gdy $\varepsilon_0 + U$ znajduje się poza oknem transportowym, średni prąd maleje ulegając nasyceniu dla dostatecznie dużego U .

10.3.2 Ferromagnetyczne elektrody

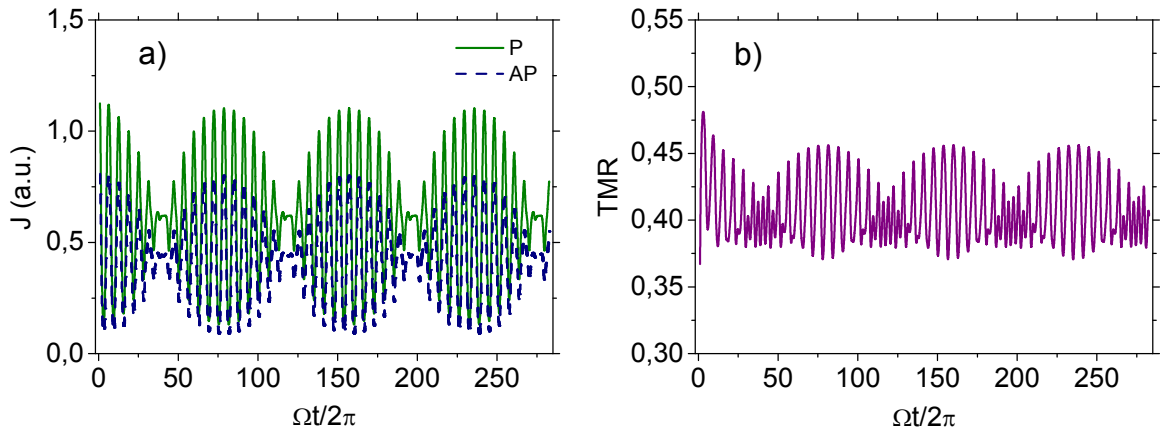
W przypadku, gdy elektrody wykonane są z ferromagnetyka, to możliwe są różne konfiguracje magnetyczne. Rozpatrywane tutaj konfiguracje namagnesowań elektrod są schematycznie przedstawione na Rys. 10.5.

Na początku zostanie przeanalizowana konfiguracja, dla której momenty magnetyczne elektrod źródłowych są przyszpilone i zorientowane w tym samym kierunku, natomiast magnetyzacja elektrody drenu może przyjmować dwa kierunki: taki jak namagnesowania źródeł lub przeciwnie skierowany [Rys. 10.5(a)]. Prąd elektryczny dla obydwu konfiguracji z Rys. 10.5(a), tj. konfiguracji równoległej i antyrównoległej, oraz tunelowy magnetoopór został obliczony dla polaryzacji elektrod równej $p_{S1} = p_{S2} = p_D = 0.5$ i przedstawiony na Rys. 10.6. Wyniki te pokazują obecność dudnień w obydwu konfiguracjach magnetycznych oraz w TMRze. Jednakże, dudnienia TMRu są nieco zniekształcone.



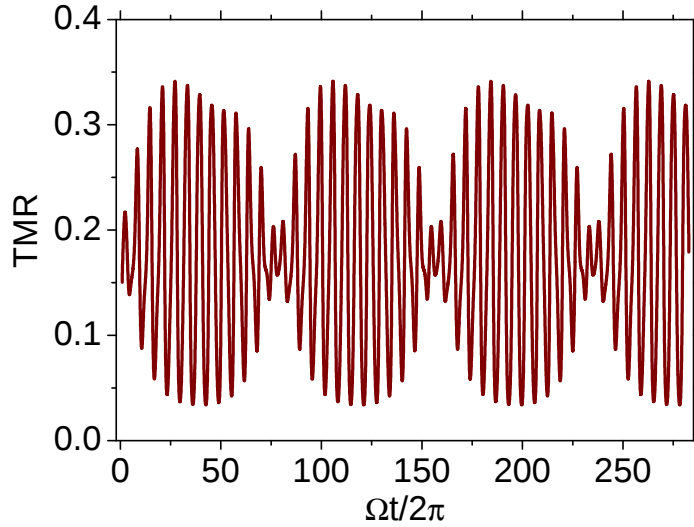
Rysunek 10.5: Konfiguracje magnetyczne.

TMR przyjmuje dodatnie wartości, bowiem rozpatrywany jest przypadek słabego sprzężenia z elektrodami, a kropki kwantowe nie oddziałują ze sobą. Warto dodać, że procesy łamiące spinową symetrię, tj. procesy odwracające spin, mogą zmienić znak TMRu [179]. W związku z faktem, że czas relaksacji spinowej w kropkach kwantowych może osiągać wartości rzędu milisekund [185, 186, 187] a nawet sekundy [188] i jest znacznie dłuższy od średniego czasu tunelowania elektronu ($\sim \Gamma^{-1}$), procesy te nie zostały uwzględnione w przedstawianych tu rozważaniach.



Rysunek 10.6: Czasowa ewolucja (a) prądu wyznaczona dla konfiguracji równoległej (P), oraz antyrównoległej (AP), (b) TMRu dla przypadku z Rys. 10.5(a), oraz dla $p = 0.5$, $U = 4\Gamma$. Pozostałe parametry jak na Rys. 10.3.

Teraz zostanie przeanalizowany przypadek przedstawiony na Rys. 10.5(b), gdy namagnesowania jednej z elektrod źródłowych, oraz elektrody drenu są przyszpilone i skierowane w tym samym kierunku, a kierunek magnetyzacji pozostałej elektrody źródłowej może być zmieniany. W tym przypadku różnica między konfiguracją równoległą i antyrównoległą jest mniej zauważalna, co uwidacznia się w obniżeniu wartości TMRu. Z drugiej strony przebieg dudnień jest tutaj wyraźniejszy.



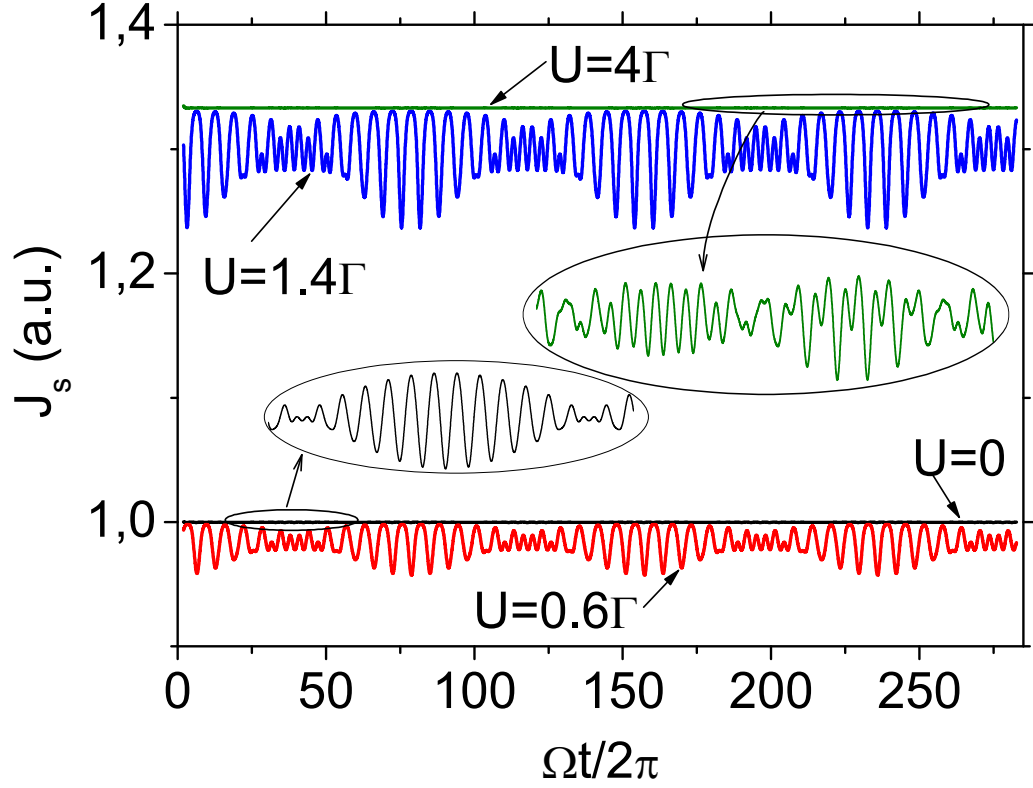
Rysunek 10.7: Czasowa ewolucja TMRu wyznaczona dla konfiguracji z Rys. 10.5(b). Pozostałe parametry jak na Rys. 10.6.

Tłumienie TMRu, w porównaniu z tym dla konfiguracji z Rys. 10.5(a), łatwo zrozumieć jeśli się zauważy, że obecnie jeden z kanałów transportowych jest częściowo zablokowany w związku z względną różnicą kierunków namagnesowań elektrod w konfiguracji antyrównoległej, podczas gdy w poprzednim przypadku obydwa kanały były źle przewodzące w konfiguracji antyrównoległej. Warto też zwrócić uwagę na przesunięcie dudnień w fazie o $\pi/2$. Ponadto pojawia się niewielkie zniekształcenie dudnień w górnych półkolach i pochodzące od różnych symetrii profili prądu w pobliżu węzłów obwiedni dla konfiguracji P i AP.

10.3.3 Napięcie spinowe

Spinowo spolaryzowany transport może być zrealizowany poprzez dołączenie elektrod, których potencjały elektrochemiczne zależą od orientacji spinu. Urządzenia dostarczające czy-

stego prądu spinowego, bez uczestnictwa prądu ładunkowego, nazywa się bateriami spinowymi [189, 190, 191]. Czysty prąd spinowy można otrzymać wykorzystując pole magnetyczne, bądź techniki optyczne [192, 193]. Jednak, metody te nie wydają się być dosyć efektywne. Stąd też zaczęto poszukiwać metody otrzymywania prądu spinowego, która byłaby kontrolowana w sposób elektryczny. Taka kontrola jest ważna z punktu widzenia zastosowań, bowiem wówczas łatwiej jest integrować pozostałe układy kwantowe (jak kropki kwantowe) z taką elektrycznie sterowaną baterią spinową.

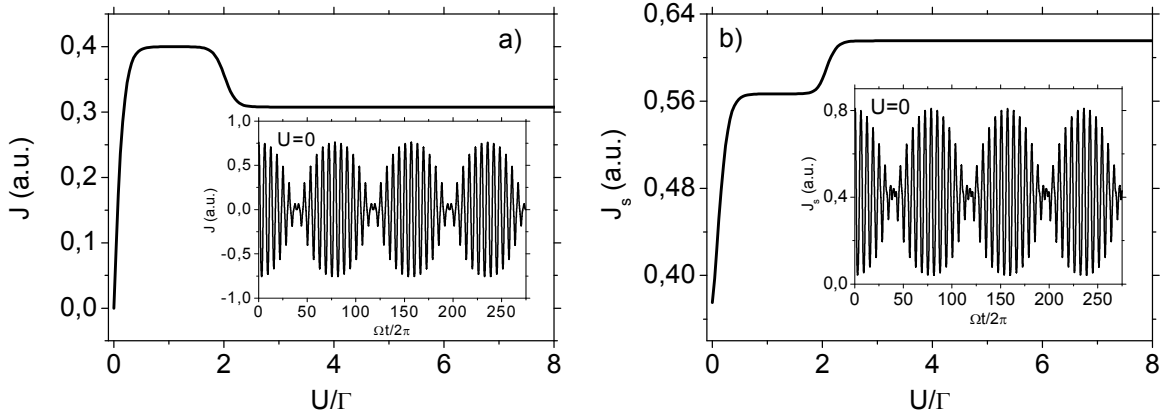


Rysunek 10.8: Czasowa ewolucja prądu spinowego wyznaczona dla przypadku symetrycznej baterii spinowej, oraz dla podanych wartości parametru U , oraz dla $\varepsilon_0 = 0$. Pozostałe parametry: takie jak na Rys. 10.3.

W przypadku symetrycznych bipolarnych baterii spinowych potencjały elektrochemiczne elektrod spełniają następujące relacje: $\mu_{Sj\uparrow} = \mu_{D\downarrow}$, oraz $\mu_{Sj\downarrow} = \mu_{D\uparrow}$ dla $j = 1, 2$. Wprowadzając napięcie spinowe V_s , potencjały elektrochemiczne elektrod można zapisać jako: $\mu_{Sj\sigma} = e(V + \tilde{\sigma}V_s)/2$ i $\mu_{D\sigma} = -e(V + \tilde{\sigma}V_s)/2$, gdzie $\tilde{\sigma} = 1$ ($\tilde{\sigma} = -1$) dla $\sigma = \uparrow$ ($\sigma = \downarrow$). Rozważane przypadki będą dotyczyć czystego prądu spinowego, bez uczestnictwa prądu ładunkowego, toteż poczyniono założenie o braku napięcia ładunkowego $V = 0$. Wówczas wypadkowy prąd elektryczny znika, bowiem ilość nośników z jedną orientacją spinu płynąca w jednym kierunku jest równoważona przez taką samą liczbę nośników o przeciwnej orientacji spinu płynącą w przeciwnym kierunku. Natomiast pojawia się niezerowy prąd spinowy, który definiuje się następująco: $J_s = \hbar(J_{\uparrow} - J_{\downarrow})/2e$, gdzie $J_{\sigma} = J_{\sigma}^1 + J_{\sigma}^2$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$). Warto dodać, że w przypadku niezdegenerowanego spinowo poziomu kropki kwantowej może pojawić się pewien niezerowy prąd elektryczny [191, 197, 196].

Na Rys. 10.8 przedstawiono ewolucję czasową prądu spinowego wyznaczoną dla różnych wartości parametru U . Dudnienia prądu spinowego w obecności oddziaływań kulombowskich wykazują bardziej skomplikowany charakter, podczas gdy dla znikającego U dudnienia te są w pełni symetryczne. Poza tym, dla $U = 0$ amplituda dudnień jest bardzo mała. Wraz ze wzrostem oddziaływań kulombowskich dudnienia prądu spinowego stają się coraz to bardziej asymetryczne, a punkty węzłowe zanikają. Zamiast węzłów pojawiają się nowe oscylacje, tak że prąd spinowy wykazuje dwa rodzaje oscylacji: oscylacje główne, oraz pewne oscylacje wtórne pojawiające się w pobliżu punktów węzłowych (istniejących dla przypadku $U = 0$). Dla coraz to

większych wartości parametru U oscylacje główne stają się bardziej asymetryczne, a oscylacje wtórne coraz to wyraźniejsze. Zauważyć można, że amplituda dudnień jest mała zarówno dla $U = 0$, jak i dla dużych wartości U . Dzieje się tak, bowiem stan $\varepsilon_0 + U$ znajduje się wówczas daleko od potencjałów chemicznych elektrod. Z drugiej strony, gdy $\varepsilon_0 + U$ znajduje się poza oknem transportowym, wówczas średni prąd spinowy znacznie wzrasta w przeciwieństwie do prądu elektrycznego w przypadku niemagnetycznym [Rys. 10.4]. Kiedy U staje się dostatecznie duże (tzn. $\varepsilon_0 + U \gg \mu_{\alpha\sigma}$), wówczas prawdopodobieństwo podwójnego obsadzenia kropki praktycznie jest znikome ($\rho_{22} \approx 0$), a liczby obsadzeń n_σ również maleją. Z drugiej strony ρ_σ wzrasta. Takie zachowanie się tych wielkości pozwala na efektywniejsze tunelowanie elektronów przez kropkę co podnosi wielkość prądu spinowego. Ostatecznie dla $U \gg \mu_{\alpha\sigma}$ średni prąd spinowy ulega nasyceniu.



Rysunek 10.9: Stacjonarny prąd elektryczny (a), spinowy (b) w funkcji parametru U . Wstawki przedstawiają ewolucję czasową prądu ładunkowego i spinowego wyznaczonego dla $\varepsilon_0 = 0$, $U = 0$. Pozostałe parametry jak na Rys. 10.3.

Obecnie zostanie przedyskutowany przypadek asymetrycznych baterii spinowych, tzn. gdy $\mu_{Sj\sigma} = \tilde{\sigma}eV_s$, oraz $\mu_{D\sigma} = 0$. Poziom energetyczny każdej kropki kwantowej jest położony symetrycznie względem napięcia spinowego w elektrodach źródłowych, tzn. ε_0 znajduje się w środku przedziału: $\langle \mu_{Sj\uparrow}, \mu_{Sj\downarrow} \rangle$. Wówczas, dla $U = 0$, dana liczba elektronów z jedną orientacją spinu płynie w jednym kierunku, podczas gdy taka sama ilość nośników o przeciwnym spinie przepływa w przeciwnym kierunku generując prąd spinowy bez wytworzenia wypadkowego prądu elektrycznego. Jednak w związku z oscylacjami poziomów kropek kwantowych prąd elektryczny jest generowany (chwilowo), ale jego średnia wartość znika. Z Rys. 10.9 wynika, że zarówno prąd ładunkowy jak i prąd spinowy wykazują dobrze zdefiniowany wzór dudnień. Włączenie oddziaływań kulombowskich indukuje niezerowy średni prąd elektryczny, co związane jest ze złamaniem symetrii rozłożenia stanów ε_0 oraz $\varepsilon_0 + U$, która istnieje gdy $\varepsilon_0 = -U/2$.

Początkowo średni prąd elektryczny szybko rośnie wraz ze wzrostem U osiągając wartość maksymalną dla $U \approx 0.4\Gamma$ i nie zmienia się, aż $\varepsilon_0 + U$ nie przekroczy $\mu_{Sj\uparrow}$, kiedy to ulega nieznacznej redukcji i w końcu ulega nasyceniu. W przeciwieństwie do prądu elektrycznego, średni prąd spinowy w ogólności rośnie wraz ze wzrostem wielkości oddziaływań kulombowskich ulegając nasyceniu dla dostatecznie dużych wartości parametru U . Zależności te zostały przedstawione na Rys. 10.9, gdzie wykreślono stacjonarny prąd elektryczny i spinowy, który można utożsamić z średnim prądem elektrycznym i spinowym dla rozpatrywanego tu zjawiska. Należy jednak zaznaczyć, że nie można tego uczynić, gdy $\varepsilon_0 + U$ znajduje się blisko $\mu_{S\uparrow}$ w związku z nałożonymi warunkami przybliżenia gradientowego.

Warto dodać, że dla $\varepsilon_0 < \mu_D$ zarówno średni prąd ładunkowy, jak i spinowy może zmienić znak prowadząc do ujemnej wartości konduktancji różniczkowej. Poza tym, w przeciwieństwie do przypadku symetrycznych baterii spinowych, dudnienia zachowują symetrię również dla skończonych wartości parametru U .

10.4 Potencjalne zastosowania proponowanego urządzenia

Zaproponowany układ kropek kwantowych może znaleźć dwa potencjalne zastosowania. Po pierwsze, urządzenie to można wykorzystać do precyzyjnego pomiaru częstotliwości pewnego sygnału. W takim przypadku, w jednym ramieniu znajduje się kropka kwantowa dołączona do elektrody źródła i drenu, podczas gdy drugie ramię dołączone jest do źródła nieznanego sygnału. Wówczas to ramię z kropką kwantową pełni rolę kanału odniesienia i poprzez regulację częstości sygnału odniesienia można dokładnie określić częstość nieznanego sygnału obserwując dudnienia w prądzie wypadkowym.

Drugim z zastosowań tego urządzenia byłoby wykorzystanie go do kodowania (modulacji) sygnału. Przyrząd taki byłby odpowiednikiem superheterodyny w skali nano. Urządzenie to mieszałoby dwa sygnały elektryczne o nieco różniących się częstotliwościach drgań, w konsekwencji czego powstałby sygnał będący złożeniem sygnału wolnozmiennego i szybkozmiennego (co zostało opisane w sekcji 10.3.1). Następnie można wydzielić sygnał o niskiej częstości, który dalej może być przetwarzany. Z punktu widzenia zastosowań jest to bardzo ważne, bowiem sygnał o niższej częstości jest znacznie łatwiejszy w przetwarzaniu.

10.5 Podsumowanie

W rozdziale tym pokazano, że przykładając zmienne napięcia bramkujące kropki kwantowe o nieco różniących się częstotliwościami można zaobserwować dudnienia w prądzie ładunkowym i/lub prądzie spinowym oraz w TMRze. Opisano wpływ efektów temperaturowych oraz korelacji kulombowskich na dudnienia w charakterystykach transportowych rozpatrywanego układu. Poza tym, zaproponowano potencjalne zastosowania takiego układu.

Dodatek A

Diagonalizacja Hamiltonianu układu kropek kwantowych

A.1 Transformacja Hamiltonianu układu dwóch kropek kwantowych do postaci diagonalnej

W dodatku tym zostanie wykonana transformacja Hamiltonianu układu dwóch kropek kwantowych sprzężonych ze sobą członem tunelowym (2.3) do postaci diagonalnej. Cel ten można osiągnąć przechodząc od wyjściowych operatorów kropek kwantowych do operatorów odpowiadających stanowi wiążącemu i antywiązącemu;

$$\begin{pmatrix} d_{+\sigma} \\ d_{-\sigma} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{1\sigma} \\ d_{2\sigma} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

Zakładając, iż $\varepsilon_{1\sigma} = \varepsilon_{2\sigma} = \varepsilon_0$, oraz nie uwzględniając oddziaływań kulombowskich (podstawiając $U_i = 0$ ($i = 1, 2$)), Hamiltonian (2.3) układu izolowanych kropek kwantowych przyjmuje postać

$$\hat{H}_{DQD} = \sum_{\sigma} \left[(\varepsilon_0 + t) d_{\sigma+}^{\dagger} d_{\sigma+} + (\varepsilon_0 - t) d_{\sigma-}^{\dagger} d_{\sigma-} \right]. \quad (\text{A.2})$$

Wówczas Hamiltonian tunelowy (2.4) przyjmuje postać:

$$\hat{H}_T = \sum_{\mathbf{k}\beta\sigma} \sum_{i=+,-} (V_{i\mathbf{k}\beta}^{\sigma} c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma} + \text{H.c.}), \quad (\text{A.3})$$

gdzie elementy $V_{i\mathbf{k}\beta}^{\sigma}$ podlegają następującej transformacji:

$$\begin{pmatrix} V_{+\mathbf{k}\beta}^{\sigma} \\ V_{-\mathbf{k}\beta}^{\sigma} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{1\mathbf{k}\beta}^{\sigma} \\ V_{2\mathbf{k}\beta}^{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Jest teraz jasne, iż w przypadku symetrycznego sprzężenia danej elektrody do obydwu kropek $\alpha = 1$, stan antywiązący jest całkowicie rozprzęgnięty od elektrod i nie bierze udziału w transporcie. Staje się tzw. *stanem związanym w kontinuum* [34, 35, 36, 91].

A.2 Transformacja Hamiltonianu układu trzech kropek kwantowych do postaci diagonalnej

Dla układu trzech kropek kwantowych, opisywanego w rozdziale 3, przy braku oddziaływań kulombowskich dokonujemy następującej transformacji:

$$\begin{aligned}\tilde{d}_{1\sigma} &= \frac{1}{2}(d_{1\sigma} + \sqrt{2}d_{2\sigma} + d_{3\sigma}), \\ \tilde{d}_{2\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(d_{1\sigma} - d_{3\sigma}), \\ \tilde{d}_{3\sigma} &= \frac{1}{2}(d_{1\sigma} - \sqrt{2}d_{2\sigma} + d_{3\sigma}).\end{aligned}\tag{A.5}$$

Zakładając, że $\varepsilon_{i\sigma} = \varepsilon_0$ dla $i = 1, 2, 3$, to Hamiltonian izolowanego układu trzech kropek kwantowych staje się diagonalny i przyjmuje postać:

$$\tilde{H}_{QD} = (\varepsilon_0 + \sqrt{2}t)\tilde{d}_{1\sigma}^\dagger \tilde{d}_{1\sigma} + \varepsilon_0 \tilde{d}_{2\sigma}^\dagger \tilde{d}_{2\sigma} + (\varepsilon_0 - \sqrt{2}t)\tilde{d}_{3\sigma}^\dagger \tilde{d}_{3\sigma}.\tag{A.6}$$

Natomiast Hamiltonian tunelowy można zapisać następująco:

$$\tilde{H}_T = \sum_{\mathbf{k}\beta\sigma} \sum_{i=1,3} (\tilde{V}_{i\mathbf{k}\beta}^\sigma c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger \tilde{d}_{i\sigma} + \text{h.c.}),\tag{A.7}$$

gdzie

$$\tilde{V}_{1\mathbf{k}\beta}^\sigma = \frac{\sqrt{2}}{2}V_{2\mathbf{k}\beta}^\sigma,\tag{A.8}$$

$$\tilde{V}_{3\mathbf{k}\beta}^\sigma = -\frac{\sqrt{2}}{2}V_{2\mathbf{k}\beta}^\sigma,\tag{A.9}$$

oraz

$$\tilde{V}_{2\mathbf{k}\beta}^\sigma = 0.\tag{A.10}$$

Stąd wynika jasny wniosek, iż centralny stan molekularny jest efektywnie "odłączony" od elektrod. Staje się więc tak, jak w przypadku dwóch kropek kwantowych, tzw. *stanem związanym w kontinuum*.

Dodatek B

Wyznaczenie fazy amplitudy transmisji dla układu dwóch kropek kwantowych

W dodatku tym zostanie pokazane, iż w obrębie rezonansu antywiążącego faza amplitudy transmisji ulega zmianie o wartość równą π . W oparciu o formalizm funkcji Greena prawdopodobieństwo transmisji przez układ kropek kwantowych w stanie równowagi można zapisać w następujący sposób:

$$T(\varepsilon) = \text{Tr}[\mathbf{\Gamma}_L \mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma}_R \mathbf{G}^a], \quad (\text{B.1})$$

gdzie macierze $\mathbf{\Gamma}_\beta$ dane są wzorem (2.5) przy zaniedbaniu zależności elementów $\Gamma_{\beta ij}$ od orientacji spinu. W takim przypadku, tj., gdy elektrody są niemagnetyczne, również funkcje Greena nie zależą od orientacji spinu co pozwala zapisać je w postaci:

$$\mathbf{G}^{r,a} = \begin{pmatrix} G_{11}^{r,a} & G_{12}^{r,a} \\ G_{21}^{r,a} & G_{22}^{r,a} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

Wstawiając równanie (2.5) oraz (B.2) do wyrażenia na współczynnik transmisji (B.1) i obliczając ślad otrzymujemy:

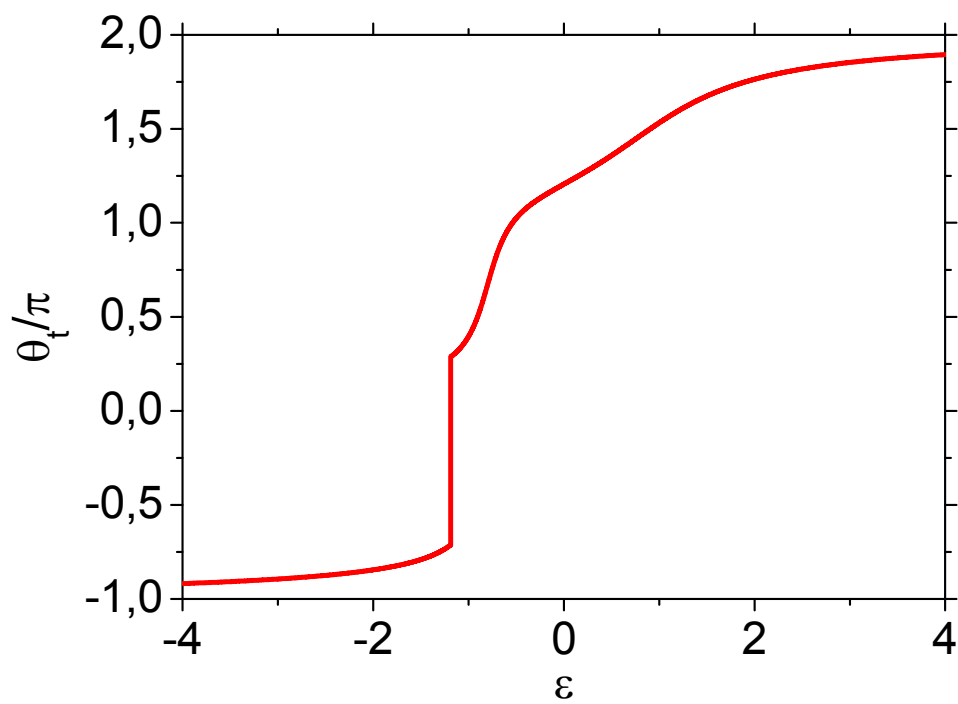
$$T(\varepsilon) = \sum_{i,j} \sum_{r,s} \Gamma_{Lri} G_{ij}^r \Gamma_{Rjs} G_{sr}^a = \left| \sum_{ij} \sqrt{\Gamma_{Lii}} G_{ij}^r \sqrt{\Gamma_{Rjj}} \right|^2 \equiv \left| \sum_{ij} t_{ij} \right|^2 = |t|^2. \quad (\text{B.3})$$

W powyższym równaniu t jest amplitudą transmisji, którą można zapisać w postaci $t = |t|e^{i\theta_t}$, gdzie θ_t jest poszukiwaną fazą amplitudy transmisji. Stosując elementarne przekształcenia algebry zespolonej otrzymujemy argument funkcji t , a więc fazę:

$$\theta_t = \arctan \frac{\Im[t]}{\Re[t]}. \quad (\text{B.4})$$

Na Rys. B.1 przedstawiona jest zależność fazy amplitudy transmisji od energii dla parametrów z rozdziału 2, przy założeniu, że $U = 0$ oraz $p = 0$. Wykres ten dobitnie pokazuje zmianę fazy amplitudy transmisji o π przy przechodzeniu przez poziom antywiązący. Widać, iż faza ulega zmianie w sposób nieciągły przy przejściu przez poziom antywiązący. Jest to typowe zachowanie fazy dla amplitudy transmisji mającej punkty, w których znika jej wartość. Warto również dodać, iż faza amplitudy transmisji θ_t w ogólności nie pokrywa się z fazą Friedela θ_F [200]. Ta ostatnia⁹ jest prawie zawsze funkcją ciągłą, natomiast ta pierwsza tylko w szczególnych warunkach zachowuje ciągłość, a w ogólności jest nieciągłą. Aczkolwiek, obydwie te fazy można powiązać ze sobą poprzez uwzględnienie biegunów funkcji transmisji [201]. Jeśli pierwiastki tej funkcji są rzeczywiste to faza amplitudy transmisji zmienia się o π w tych punktach i wówczas obydwie te fazy różnią się dokładnie o wartość równą π . Warto wspomnieć, że faza Friedela doznaje nagłego skoku w otoczeniu *stanu związanego w kontinuum*, bowiem związana z nim gęstość stanów posiada kształt delty-Diraca.

⁹Z fazy Friedela powiązana jest gęstość stanów poprzez równanie $d\theta_F/d\varepsilon = \pi\rho(\varepsilon)$.



Rysunek B.1: Przebieg zmienności fazy amplitudy transmisji od energii wyznaczony dla parametru asymetrii $\alpha = 0.15$, oraz dla $U = 0$, $p = 0$.

Dodatek C

Metoda diagramowa

C.1 Rozwinięcie perturbacyjne

Rozwinięcie perturbacyjne zredukowanej macierzy gęstości oraz energii własnych względem parametru sprzężenia kropek z elektrodami, Γ , przyjmuje postać:

$$P_{\chi_2}^{\chi_1} = P_{\chi_2}^{\chi_1(0)} + P_{\chi_2}^{\chi_1(1)} + \dots, \Sigma_{\chi_2\chi_2'}^{\chi_1\chi_1'} = \Sigma_{\chi_2\chi_2'}^{\chi_1\chi_1'(1)} + \Sigma_{\chi_2\chi_2'}^{\chi_1\chi_1'(2)} + \dots \quad (C.1)$$

W przeprowadzanych rozważaniach potrzebny jest prąd w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń. W takim przypadku wystarczy znać energie własne pierwszego rzędu $\Sigma^{(0)}$, które wyznaczone są poprzez zsumowanie wszystkich nieredukowalnych diagramów pierwszego rzędu. Energie własne należy obliczyć stosując reguły prezentowane w części 4. Znając energie własne pierwszego rzędu można obliczyć odpowiednie elementy macierzy gęstości (rzędu zerowego) korzystając z równania Louville' dla przypadku stacjonarnego:

$$0 = \langle \chi_1 | [H_{\text{DQD}} + H_t, \hat{\rho}] | \chi_2 \rangle + \sum_{\chi_1'\chi_2'} \Sigma_{\chi_2\chi_2'}^{\chi_1\chi_1'(1)} P_{\chi_2'}^{\chi_1'(0)}. \quad (C.2)$$

Elementy macierzowe $P_{\chi_2'}^{\chi_1'(0)}$ są w pełni określone poprzez narzucenie warunku normalizującego prawdopodobieństwa:

$$\sum_{\chi} P_{\chi}^{\chi(0)} = 1. \quad (C.3)$$

C.2 Przykłady energii własnych pierwszego rzędu

W dodatku tym zostaną zaprezentowane przykłady dwóch wybranych energii własnych i odpowiadające im przedstawienie diagramowe. W ogólności energie własne są zespolone - część urojona związana jest z częstością procesów tunelowych, natomiast część rzeczywistą można powiązać z efektami renormalizującymi. Graficzne przedstawienie energii własnej $\Sigma_{|0,\sigma\rangle|0,\sigma\rangle}^{|\sigma,0\rangle|\sigma,0\rangle}$ pokazuje Rys. C.1, natomiast jej analityczna postać dana jest następującym wyrażeniem

$$\begin{aligned} \Sigma_{|0,\sigma\rangle|0,\sigma\rangle}^{|\sigma,0\rangle|\sigma,0\rangle} = & \sum_{\alpha,\sigma'} \left\{ P_{\alpha 22}^{-,\sigma}(\varepsilon_{1\sigma}) - P_{\alpha 11}^{-,\sigma}(\varepsilon_{2\sigma}) + P_{\alpha 22}^{+,\sigma'}(\varepsilon_{1\sigma} + \varepsilon_{2\sigma'} + U_0 - \varepsilon_{2\sigma}) \right. \\ & - P_{\alpha 11}^{+,\sigma'}(\varepsilon_{1\sigma'} + \varepsilon_{2\sigma} + U_0 - \varepsilon_{1\sigma}) + P_{\alpha 11}^{+,\bar{\sigma}}(\varepsilon_{1\sigma} + \varepsilon_{1\bar{\sigma}} + U_1 - \varepsilon_{2\sigma}) \\ & - P_{\alpha 22}^{+,\bar{\sigma}}(\varepsilon_{2\sigma} + \varepsilon_{2\bar{\sigma}} + U_2 - \varepsilon_{1\sigma}) - i\pi \left[\gamma_{\alpha 22}^{-,\sigma}(\varepsilon_{1\sigma}) + \gamma_{\alpha 11}^{-,\sigma}(\varepsilon_{2\sigma}) \right. \\ & + \gamma_{\alpha 22}^{+,\sigma'}(\varepsilon_{1\sigma} + \varepsilon_{2\sigma'} + U_0 - \varepsilon_{2\sigma}) + \gamma_{\alpha 11}^{+,\sigma'}(\varepsilon_{1\sigma'} + \varepsilon_{2\sigma} + U_0 - \varepsilon_{1\sigma}) \\ & \left. \left. + \gamma_{\alpha 11}^{+,\bar{\sigma}}(\varepsilon_{1\sigma} + \varepsilon_{1\bar{\sigma}} + U_1 - \varepsilon_{2\sigma}) + \gamma_{\alpha 22}^{+,\bar{\sigma}}(\varepsilon_{2\sigma} + \varepsilon_{2\bar{\sigma}} + U_2 - \varepsilon_{1\sigma}) \right] \right\}. \quad (C.4) \end{aligned}$$

W powyższym równaniu stany $|2,0\rangle$, $|0,2\rangle$ oznaczają podwójnie obsadzoną pierwszą i drugą kropkę kwantową, odpowiednio. Z powodu stosunkowo dużego oddziaływania kulombowskiego na kropkach stany te rozpatrywane są jedynie jako wirtualne (stany pośredniczące). Na Rys. C.2

został przedstawiony przykład energii własnej $\Sigma_{|0,\sigma\rangle|\sigma,0\rangle}^{|\sigma,0\rangle|\sigma,0\rangle}$ zawierającej pozadiagonalne elementy macierzy Γ_{β}^{σ} dany wyrażeniem:

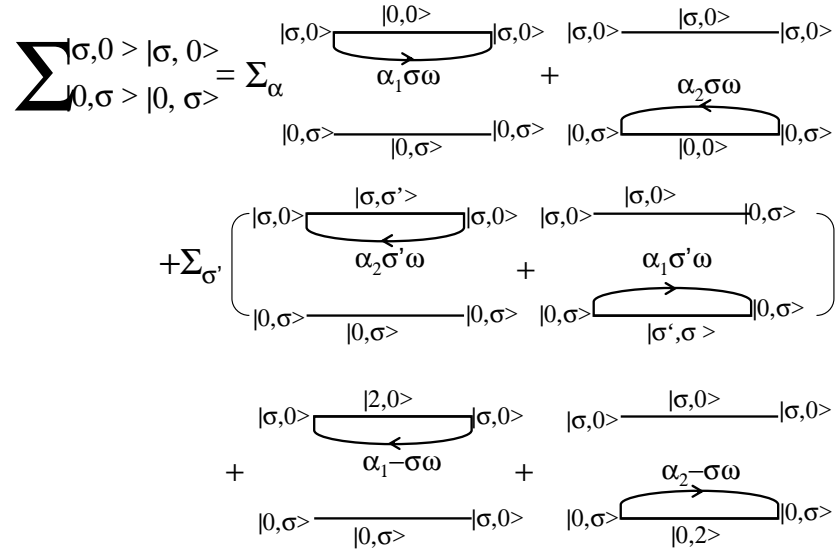
$$\Sigma_{|0,\sigma\rangle|\sigma,0\rangle}^{|\sigma,0\rangle|\sigma,0\rangle} = \sum_{\alpha} \{P_{\alpha_{12}}^{-,\sigma}(\varepsilon_{1\sigma}) - i\pi\gamma_{\alpha_{12}}^{-,\sigma}(\varepsilon_{1\sigma}) + P_{\alpha_{12}}^{+,\sigma}(\varepsilon_{2\sigma} + U_0) + i\pi\gamma_{\alpha_{12}}^{+,\sigma}(\varepsilon_{2\sigma} + U_0)\}, \quad (\text{C.5})$$

gdzie

$$P_{\alpha_{ij}}^{\pm,\sigma}(x) = \pm \frac{\Gamma_{\alpha_{ij}}^{\sigma}}{2\pi} \left[\text{Re}\Psi\left(\frac{1}{2} + i\frac{x - \mu_{\alpha}}{2\pi k_B T}\right) - \log\left(\frac{D}{2\pi k_B T}\right) \right], \quad (\text{C.6})$$

$$\gamma_{\alpha_{ij}}^{\pm,\sigma}(x) = \frac{\Gamma_{\alpha_{ij}}^{\sigma}}{2\pi} f^{\pm}(x - \mu_{\alpha}). \quad (\text{C.7})$$

W powyższych równaniach $f^{+}(x)$ oznacza funkcję Fermiego-Diraca, $f^{-}(x) = 1 - f^{+}(x)$, a $\Psi(x)$ jest funkcją digamma. Parametr obciążenia D może tutaj być w naturalny sposób utożsamiony z energią ładowania kropki U . Warto również dodać, iż energie własne nie zależą od parametru obciążenia, bowiem człony zależne od D znoszą się nawzajem.



Rysunek C.1: Graficzne przedstawienie energii własnej $\Sigma_{|0,\sigma\rangle|\sigma,0\rangle}^{|\sigma,0\rangle|\sigma,0\rangle}$ (a). Sumowanie odbywa się po wskaźnikach elektrod i po spinowych stopniach swobody $\alpha = L, R$ oraz $\sigma' = \uparrow, \downarrow$. Każda linia tunelowa posiada indeks elektrody α , spinu σ oraz przypisana jest jej częstość ω .

$$\Sigma_{|0,\sigma\rangle|\sigma,0\rangle}^{|\sigma,0\rangle|\sigma,0\rangle} = \sum_{\alpha} \left[\begin{array}{c} |\sigma,0\rangle \xrightarrow{|\sigma,0\rangle} |\sigma,0\rangle \\ \alpha_{12}\sigma\omega \\ |\sigma,0\rangle \xleftarrow{|\sigma,0\rangle} |0,\sigma\rangle \end{array} + \begin{array}{c} |\sigma,0\rangle \xrightarrow{|\sigma,0\rangle} |\sigma,0\rangle \\ \alpha_{12}\sigma\omega \\ |\sigma,0\rangle \xrightarrow{|\sigma,\sigma\rangle} |0,\sigma\rangle \end{array} \right]$$

Rysunek C.2: Graficzna reprezentacja energii własnej $\Sigma_{|0,\sigma\rangle|\sigma,0\rangle}^{|\sigma,0\rangle|\sigma,0\rangle}$.

Dodatek D

Procedura skalowania

Poniżej zostanie szczegółowo przedstawiona zastosowana procedura skalowania [97, 69] zarówno dla modelu Andersona, jak i modelu Kondo układu dwóch kropek kwantowych sprzężonych z elektrodami. Skalowanie dla modelu Andersona musi zostać przerwane, kiedy osiągnięta zostanie pewna temperatura. Jednak w tej temperaturze model Andersona może zostać przetransformowany do modelu Kondo poprzez transformację Schrieffera-Wolffa, gdzie skalowanie może być dalej przeprowadzane dla modelu Kondo. Dzięki skalowaniu wykonanemu dla modelu Andersona można otrzymać zrenormalizowane wartości poziomów energetycznych układu, a skalowanie dla modelu Kondo daje informację o temperaturze Kondo.

D.1 Procedura skalowania dla modelu Andersona

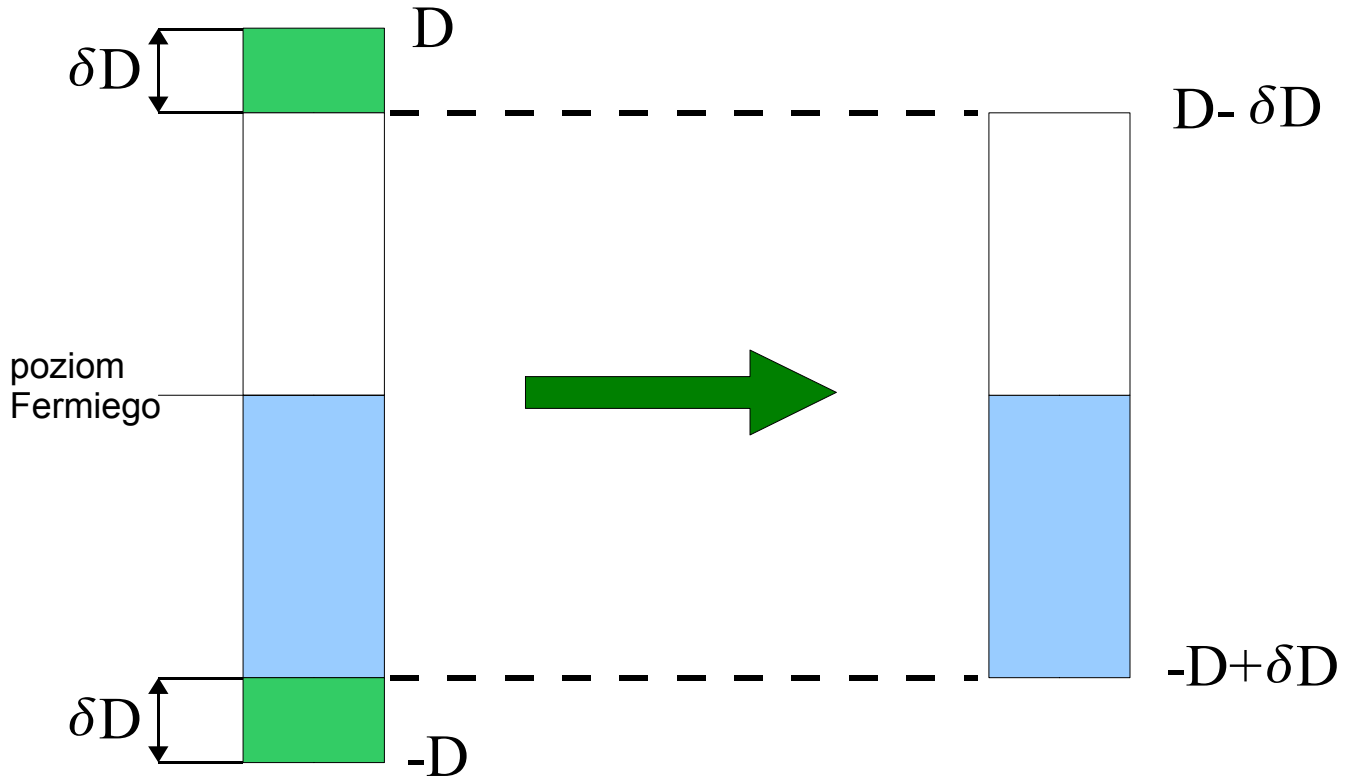
Model Andersona zawiera człony hybrydujące stany kropek kwantowych ze stanami elektrody, wobec czego ładunek kropki kwantowej może ulec zmianie. Takie fluktuacje ładunku prowadzą do renormalizacji poziomów energetycznych układu kropek. Niech elektroda posiada niezależna od energii gęstość stanów ograniczoną krawędziami pasm dla energii $-D$ oraz D . Zakładamy, iż pasmo jest w połowie wypełnione ($\mu = 0$). Wówczas w niskich temperaturach stany wysokowzbudzeniowe z pobliża krawędzi pasma, odpowiadające energiom $D - \delta D \leq |\varepsilon_{\mathbf{k}}| \leq D$ są albo całkowicie obsadzone, albo kompletnie puste. Wobec tego można by wnioskować, że nie wnoszą żadnego wkładu i mogą być pominięte. Okazuje się jednak, że stany te są ważne z punktu widzenia własności transportowych i muszą zostać uwzględnione. W celu uwzględnienia ich wpływu stosuje się procedurę, w której stany o energiach $D - \delta D \leq |\varepsilon_{\mathbf{k}}| \leq D$ zostają wyeliminowane i wprowadza się efektywny Hamiltonian układu, mający analogiczną postać do Hamiltonianu wyjściowego, opisujący sprzężenie poziomów kropek ze stanami elektrody o energiach $-D + \delta D \leq \varepsilon_{\mathbf{k}} \leq D - \delta D$. Idea ta została schematycznie pokazana na Rys. D.1. Nowy Hamiltonian musi dawać takie same wyniki jak jego poprzednik. W tym celu należy uwzględnić wpływ usuniętych stanów (stanów wysokowzbudzeniowych) poprzez wprowadzenie zrenormalizowanych parametrów wyjściowego Hamiltonianu. Informacja o stanach wysokowzbudzeniowych będzie zawarta w tych zrenormalizowanych parametrach.

W celu wyeliminowania stanów z pobliża krawędzi pasma należy rozseparować całkowitą funkcję falową na trzy składniki $\Psi \rightarrow (\Psi_0, \Psi_1, \Psi_2)$. Człon Ψ_i opisuje stan układu kropek obsadzonego przez $i = 0, 1, 2$ elektrony. Równanie Schrödingera $\mathbf{H}\Psi = E\Psi$ można wówczas zapisać jak następuje [97]:

$$\begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} & H_{02} \\ H_{10} & H_{11} & H_{12} \\ H_{20} & H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.1})$$

Elementy macierzowe H_{ij} zdefiniowane są przy pomocy operatorów P_i rzutujących całkowitą funkcję falową Ψ na jej i -ty komponent Ψ_i w następujący sposób: $H_{ij} = P_i H_A P_j$.

W celu uproszczenia notacji wprowadzamy następujący zapis dla operatorów kropek kwantowych: $d_1 \equiv d_{\uparrow}$, $d_2 \equiv d_{\downarrow}$. Możliwe stany układu to: $|0\rangle$ -stan pusty, $|\uparrow\rangle$ -kropka kwantowa QD1 obsadzona przez elektron, $|\downarrow\rangle$ -elektron obsadza kropkę kwantową QD2, oraz $|2\rangle$ -podwójne obsadzenie układu. Operatory rzutowania na stan pusty $P_0 = |0\rangle\langle 0|$, pojedynczo obsadzony



Rysunek D.1: Idea skalowania. Stany wysokowzbudzeniowe z pobliża krawędzi pasma, zaznaczone kolorem zielonym, zostają usunięte, a ich wkład zostaje uwzględniony w zrenormalizowanych parametrach efektywnego Hamiltonianu mającego analogiczną postać jak wyjściowy Hamiltonian układu.

$P_1 = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$, podwójnie obsadzony $P_2 = |2\rangle\langle 2|$. Z takiej postaci tych operatorów wyraźnie widać ich podstawową własność $P_i^2 = P_i$. Z postaci elementów macierzowych H_{ij} jasno wynika, iż macierz $\mathbf{H}$ jest macierzą hermitowską. Wobec tego zachodzi równość $H_{ji}^\dagger = H_{ij}$. Ponadto zakładając, iż dwa elektrony nie mogą jednocześnie przetunelować na układ kropek, to $H_{20} = H_{02} = 0$. Natomiast operatory kreacji i anihilacji $d_\sigma^\dagger$ oraz d_σ wyrażają się następująco:

$$d_\sigma^\dagger = |\sigma\rangle\langle 0| + \tilde{\sigma}|2\rangle\langle\bar{\sigma}|, \quad (\text{D.2})$$

$$d_\sigma = |0\rangle\langle\sigma| + \tilde{\sigma}|\bar{\sigma}\rangle\langle 2|, \quad (\text{D.3})$$

gdzie $\tilde{\sigma} = 1$ jeśli $\sigma = \uparrow$ oraz $\tilde{\sigma} = -1$ jeśli $\sigma = \downarrow$. Powyższe operatory wyrażone są poprzez operatory Hubbarda [180]:

$$X_{\sigma;0} = |\sigma\rangle\langle 0| = d_\sigma^\dagger(1 - n_{\bar{\sigma}}), \quad (\text{D.4})$$

$$X_{0;\sigma} = |0\rangle\langle\sigma| = d_\sigma(1 - n_{\bar{\sigma}}), \quad (\text{D.5})$$

$$X_{2;\sigma} = |2\rangle\langle\sigma| = d_{\bar{\sigma}}^\dagger n_\sigma, \quad (\text{D.6})$$

$$X_{\sigma;2} = |\sigma\rangle\langle 2| = d_{\bar{\sigma}} n_\sigma, \quad (\text{D.7})$$

gdzie operator $X_{\sigma;0}$ opisuje kreację elektronu na danej kropce ze stanu nieobsadzonego $|0\rangle$, natomiast operator $X_{0;\sigma}$ kreuje stan pusty ze stanu obsadzonego pojedynczym elektronem; $X_{2;\sigma}$ kreuje stan $|\bar{\sigma}\rangle$ ze stanu $|\sigma\rangle$, w którym obsadzana jest kropka σ ; operator $X_{\sigma;2}$ anihiluje elektron z kropki $\bar{\sigma}$ ze stanu podwójnie obsadzonego $|2\rangle$ do stanu $|\sigma\rangle$. Dzięki zupełności i ortonormalności stanów $\{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |2\rangle\}$ operatory Hubbarda spełniają następujące własności zupełności $\sum_p X_{p;p} = I$ oraz zwiężenia $X_{p;q}X_{p';q'} = \delta_{qp'}X_{p;q'}$. Operatory rzutowania w reprezentacji operatorów kreacji i anihilacji wyrażają się $P_0 = (1 - n_\uparrow)(1 - n_\downarrow)$, $P_1 = n_\uparrow + n_\downarrow - 2n_\uparrow n_\downarrow$, $P_2 = n_\uparrow n_\downarrow$. Łatwo zauważyć, że: $P_0 + P_1 + P_2 = 1$.

Biorąc pod uwagę powyższe założenia równanie (D.1) można zapisać jak następuje:

$$[H_{11} + H_{12}(E - H_{22})^{-1}H_{21} + H_{10}(E - H_{00})^{-1}H_{01}] \Psi_1 = E\Psi_1. \quad (\text{D.8})$$

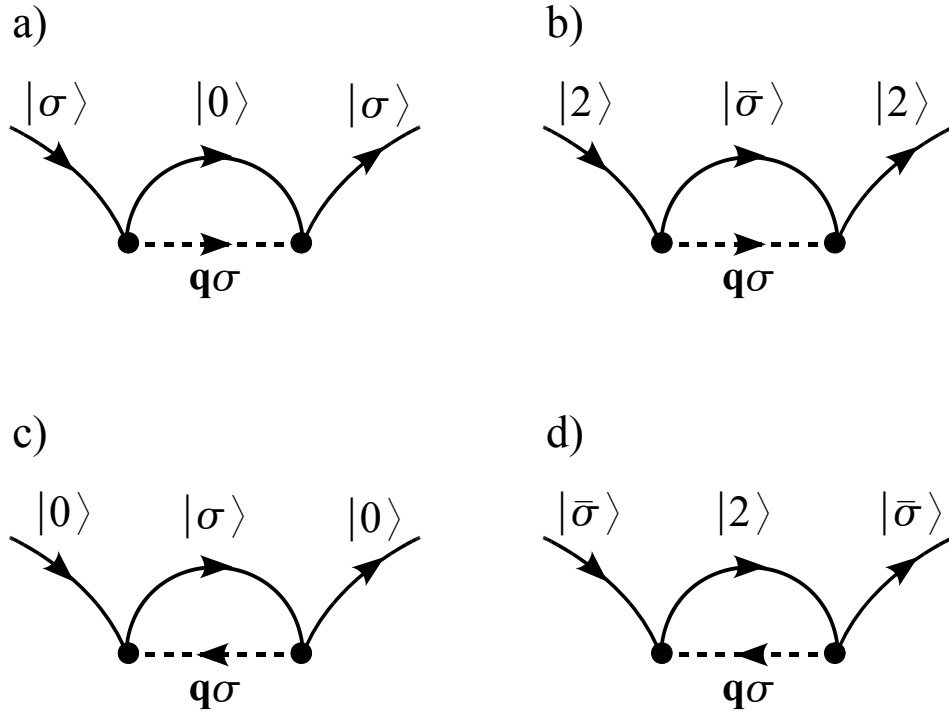
Człon H_{11} można traktować jak Hamiltonian układu niezawierający wkładów pochodzących od stanów wysokowzbudzeniowych (z pobliża krawędzi pasm), które są uwzględnione w drugim i trzecim członie efektywnego Hamiltonianu podanego w równaniu (D.8). Człony te mogą być wyznaczone traktując je jako zaburzenie (względem sprzężenia), a następnie dodane do wyrazu niezaburzonego H_{11} poprzez renormalizację odpowiednich parametrów.

Wyrazy pozadiagonalne H_{10} oraz H_{21} , prowadzące do zmiany stanu ładunkowego układu kropek, mogą być powiązane z Hamiltonianem tunelowym H_T (7.3). Przyjmują one następującą postać:

$$H_{01} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger [X_{0;\sigma} + \tilde{\sigma} X_{\bar{\sigma};2}] \quad (\text{D.9})$$

$$H_{21} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}\sigma}^* [X_{\sigma;0} + \tilde{\sigma} X_{2;\bar{\sigma}}] c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (\text{D.10})$$

W najniższym rzędzie względem sprzężenia z elektrodami człony H_{00} oraz H_{22} można wyrazić jako $H_0 = H_{\text{leads}} + H_{\text{DQD}}$. W celu znalezienia wkładów od stanów z krawędzi pasma należy obliczyć wyrażenia $H_{12}(E - H_0)^{-1}H_{21}$, oraz $H_{10}(E - H_0)^{-1}H_{01}$ opisujące procesy drugiego rzędu, w których elektron (dziura) jest rozpraszany(a) do górnej (dolnej) krawędzi pasma i z powrotem.



Rysunek D.2: Graficzne przedstawienie procesów drugiego rzędu uzyskanych w metodzie skalowania dla modelu Andersona. Linia ciągła oznacza propagator układu kropek kwantowych zaopatrzonego w odpowiednie stany, natomiast linia przerywana oznacza stan elektronu przewodnictwa w górnej krawędzi pasma (a-b), lub dziury w dolnej krawędzi pasma (c-d), odpowiednio. Diagramy (a-b) opisują procesy elektronowe, w których elektron obsadzający układ kropek zostaje rozproszony do górnej krawędzi pasma i z powrotem. Diagramy (c-d) przedstawiają procesy dziurowe, gdzie elektron z dolnej krawędzi pasma zostaje rozproszony do układu kropek i z powrotem do dolnej krawędzi pasma. Podczas tego procesu zostaje wykreowany pośredni stan obsadzony dziurą w dolnej krawędzi pasma.

Zostanie teraz wyznaczony wkład od procesu przedstawionego na diagramie z Rys. D.2. Należy rozważyć:

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} X_{\sigma;0} V_{\mathbf{k}\sigma}^* c_{\mathbf{k}\sigma} (E - H_0)^{-1} c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger V_{\mathbf{k}'\sigma} X_{0;\sigma}. \quad (\text{D.11})$$

Dla prostoty zaniedbujemy zależność amplitud tunelowych od wektora falowego $V_{\mathbf{k}\sigma} \rightarrow V_\sigma$. Człon (D.11) można zapisać:

$$(E - H_0)^{-1} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger V_{\mathbf{k}\sigma} X_{0;\sigma} = V_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger (E - H_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})^{-1} X_{0;\sigma}, \quad (\text{D.12})$$

gdzie skorzystano z rozwinięcia:

$$\begin{aligned} (E - H_0)^{-1} &= (E - H_{\text{leads}} - H_{\text{DQD}})^{-1} = \varepsilon^{-1} [1 - \varepsilon^{-1} H_{\text{leads}}]^{-1} \\ &= \varepsilon^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} (\varepsilon^{-1} H_{\text{leads}})^n. \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

W powyższym równaniu ε oznacza $\varepsilon = (E - H_{\text{DQD}})^{-1}$. Działając każdym członem powyższego rozwinięcia na operator $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ łatwo jest już pokazać prawdziwość równania (D.12). Wykonując analogiczną procedurę w stosunku do wyrażenia $(E - H_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})^{-1} X_{0;\sigma}$ otrzymuje się równość $(E - H_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})^{-1} X_{0;\sigma} = X_{0;\sigma} (E - H_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}'\sigma} + \varepsilon_\sigma)^{-1}$. Wkład (D.11) można oszacować w następujący sposób:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} X_{\sigma;0} V_{\mathbf{k}\sigma}^* c_{\mathbf{k}\sigma} (E - H_0)^{-1} c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger V_{\mathbf{k}'\sigma} X_{0;\sigma} &\approx - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} |V_\sigma|^2 c_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger X_{\sigma;\sigma} (D - \varepsilon_\sigma)^{-1} \\ &= - \frac{|V_\sigma|^2 \rho_\sigma \delta D}{D - \varepsilon_\sigma} X_{\sigma;\sigma}, \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

gdzie zastosowano przybliżenie $\varepsilon_{\mathbf{k}'\sigma} \approx D$, bowiem elektrony są rozpraszane do stanów z pobliża krawędzi pasma $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} \in \langle D - \delta D, D \rangle$. Zaniedbano zależność od energii E , a człon stały H_0 włączono do przededefiniowanej wielkości E . Zaniedbanie zależności od energii E jest uzasadnione dla wzbudzeń o niskiej energii w stosunku do D . Korzystając z faktu, iż w stanie początkowym górna krawędź jest nieobsadzona przez elektrony można było zapisać $c_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$, a następnie $\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{\sigma, \sigma} = \sum_{\mathbf{k}} 1 = \rho_\sigma \delta D$.

Postępując analogicznie można wyznaczyć wkłady elektronowe oraz dziurowe od pozostałych diagramów. Pozostały wkład od procesów elektronowych ma postać:

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} X_{2;\bar{\sigma}} V_{\mathbf{k}\sigma}^* c_{\mathbf{k}\sigma} (E - H_0)^{-1} c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger V_{\mathbf{k}'\sigma} X_{\bar{\sigma};2} \approx - \frac{|V_\sigma|^2 \rho_\sigma \delta D}{D - \varepsilon_\sigma - U} X_{2;2}, \quad (\text{D.15})$$

Wkłady od dziurowe, pochodzą od procesów, w których elektron z dolnej krawędzi pasma jest rozpraszany do układu kropek i z powrotem. Alternatywnie, można patrzeć na ten proces jako wzbudzenie wirtualnego stanu dziurowego w dolnej krawędzi pasma. Wkłady te mają postać:

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger X_{0;\sigma} (E - H_0)^{-1} X_{\sigma;0} c_{\mathbf{k}'\sigma} V_{\mathbf{k}'\sigma}^* \approx - \frac{|V_\sigma|^2 \rho_\sigma \delta D}{D + \varepsilon_\sigma} X_{0;0}, \quad (\text{D.16})$$

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger X_{\bar{\sigma};2} (E - H_0)^{-1} X_{2;\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}'\sigma} V_{\mathbf{k}'\sigma}^* \approx - \frac{|V_\sigma|^2 \rho_\sigma \delta D}{D + \varepsilon_\sigma + U} X_{\bar{\sigma};\bar{\sigma}}. \quad (\text{D.17})$$

Tutaj zastosowano przybliżenie $\varepsilon_{\mathbf{k}'\sigma} \approx -D$, oraz skorzystano z faktu, iż początkowo dolna krawędź pasma jest całkowicie obsadzona $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$. Człon (D.14) można traktować jako poprawkę do energii $E_{1\sigma}$ pojedynczo obsadzonego układu kropek wynikającą z procesów drugiego rzędu z wirtualnymi wzbudzeniami w górnej krawędzi pasma. Pozostałe wkłady renormalizujące energię $E_{1\sigma}$ dane są przez (D.17) i wynikają z wirtualnych wzbudzeń dziur w dolnej krawędzi pasma. Wkład (D.15) renormalizuje energię E_2 , a wkład (D.16) wchodzi do energii E_0 . Grupując odpowiednio wszystkie wkłady otrzymuje się zrenormalizowane energie:

$$\tilde{E}_0 = E_0 - \sum_{\sigma} \frac{|V_\sigma|^2 \rho_\sigma \delta D}{D + \varepsilon_\sigma}, \quad (\text{D.18})$$

$$\tilde{E}_{1\sigma} = E_{1\sigma} - \frac{|V_\sigma|^2 \rho_\sigma \delta D}{D - \varepsilon_\sigma} - \frac{|V_{\bar{\sigma}}|^2 \rho_{\bar{\sigma}} \delta D}{D + \varepsilon_{\bar{\sigma}} + U}, \quad (\text{D.19})$$

$$\tilde{E}_2 = E_2 - \sum_{\sigma} \frac{|V_\sigma|^2 \rho_\sigma \delta D}{D - \varepsilon_\sigma - U}. \quad (\text{D.20})$$

Jako, że $\varepsilon_\sigma = E_{1\sigma} - E_0$, oraz $U = E_2 - E_{1\uparrow} - E_{1\downarrow} + E_0$, to również efektywny Hamiltonianu Andersona będzie posiadać zrenormalizowane parametry $\tilde{\varepsilon}_\sigma = \varepsilon_\sigma + \delta\varepsilon_\sigma$, oraz $\tilde{U} = U + \delta U$, gdzie $\delta\varepsilon_\sigma$ oraz δU są poprawkami pochodzącymi od przedstawionych powyżej diagramów.

$$\delta\varepsilon_\sigma = \delta D \left(\sum_\sigma \frac{|V_\sigma|^2 \rho_\sigma}{D + \varepsilon_\sigma} - \frac{|V_\sigma|^2 \rho_\sigma}{D - \varepsilon_\sigma} - \frac{|V_{\bar{\sigma}}|^2 \rho_{\bar{\sigma}}}{D + \varepsilon_{\bar{\sigma}} + U} \right), \quad (\text{D.21})$$

$$\delta U = \delta D \sum_\sigma \left(\frac{|V_\sigma|^2 \rho_\sigma}{D - \varepsilon_\sigma} + \frac{|V_{\bar{\sigma}}|^2 \rho_{\bar{\sigma}}}{D + \varepsilon_{\bar{\sigma}} + U} - \frac{|V_\sigma|^2 \rho_\sigma}{D - \varepsilon_\sigma - U} - \frac{|V_{\bar{\sigma}}|^2 \rho_{\bar{\sigma}}}{D + \varepsilon_{\bar{\sigma}}} \right). \quad (\text{D.22})$$

Jeśli wszystkie elektrody są wykonane z tego samego materiału to zachodzi $\rho_\uparrow = \rho_\downarrow \equiv \rho$. Warto zauważyć, iż wielkość renormalizacji ściśle zależy od parametrów układu ε_σ oraz U i ich relacji w stosunku do szerokości pasma $2D$. Jeśli zachodzi relacja $\varepsilon_\sigma \ll -D$ oraz $\varepsilon_\sigma + U \gg D$, to wówczas układ kropek będzie pojedynczo obsadzony, a procesy tunelowe drugiego rzędu do krawędzi pasm nie mogą powodować rzeczywistych fluktuacji ładunku w układzie kropek. W tym przypadku można jednak wykonać transformację modelu Andersona do modelu Kondo i wówczas zastosować procedurę skalowania. Natomiast gdy ε_σ oraz U znajdują się daleko od krawędzi pasma, ale blisko poziomu Fermiego, to wówczas nie ma znaczącej renormalizacji parametrów Hamiltonianu Andersona. Najbardziej interesujący przypadek zachodzi, gdy $-D \ll \varepsilon_\sigma \ll \mu$ oraz $\mu \gg \varepsilon_\sigma + U \gg D$. Wówczas zrenormalizowane parametry Hamiltonianu Andersona można oszacować następująco:

$$\tilde{\varepsilon}_\sigma = \varepsilon_\sigma + \frac{\Gamma_{\bar{\sigma}}}{2\pi} \frac{\delta D}{D}, \quad (\text{D.23})$$

natomiast $\delta U \approx 0$. Wystarczy przejść z powrotem do zmiennych numerujących kropki, $\sigma = \uparrow \Rightarrow i = 1$ oraz $\sigma = \downarrow \Rightarrow i = 2$, a otrzyma się równanie (7.4). Warto dodać, że uwzględnione w rachunku zaburzeń procesy tunelowe (do drugiego rzędu włącznie) nie uwzględniają renormalizacji amplitud tunelowych $V_{i\mathbf{k}}$, bowiem elementy H_{00} oraz H_{22} Hamiltonianu (D.1) zostały uwzględnione w zerowym rzędzie względem $V_{i\mathbf{k}}$ i zastąpione przez H_0 . Wobec tego można uznać sprzężenie Γ_i za niezmiennik skalowania, jeśli zachodzi $\Gamma_i \ll D$.

D.2 Procedura skalowania dla modelu Kondo

Jeśli $\tilde{D} = D - \delta D$ zbliża się do poziomu $\tilde{\varepsilon}$, to procedura skalowania Andersona przestaje być ważna. Model Andersona można przetransformować poprzez transformację Schrieffera-Wolffa do modelu Kondo i następnie zastosować procedurę skalowania dla tego modelu. Jak już wcześniej wspomniano model Kondo nie uwzględnia rzeczywistych fluktuacji ładunku w układzie kropek. Wobec tego należy założyć pojedyncze obsadzenie układu kropek, a informacje o stanie pustym i podwójnie obsadzonym układu kropek zawrzeć w efektywnych stałych sprzężenia nowego, efektywnego Hamiltonianu typu $s-d$. Hamiltonian ten opisuje oddziaływanie *izospinu* układu kropek z *izospinem* elektronów przewodnictwa w elektrodach. W celu jego wyznaczenia należy zastosować transformację Schrieffera-Wolffa w stosunku do Hamiltonianu Andersona. Elementy pozadiagonalne Hamiltonianu z równania (D.8), $H_{ij} = P_i H_A P_j$ można zapisać następująco:

$$H_{01} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_\sigma (1 - n_{\bar{\sigma}}), \quad (\text{D.24})$$

$$H_{21} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}\sigma}^* d_\sigma^\dagger n_{\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (\text{D.25})$$

Następnie należy wyznaczyć człony $H_{12}(E - H_{22})^{-1}H_{21}$, oraz $H_{10}(E - H_{00})^{-1}H_{01}$ zawierające informacje o wirtualnych wzbudzeniach układu kropek do stanów o podwójnym i pustym obsadzeniu, odpowiednio. Z założenia o pojedynczym obsadzeniu układu kropek wynikają równości $n_\uparrow + n_\downarrow = 1$ oraz $n_\uparrow n_\downarrow = 0$. Po wykonaniu obliczeń i pogrupowaniu wyrazów oraz wprowadzeniu operatorów *izospinu* dla układu kropek efektywny Hamiltonian $s-d$ można zapisać w

następującej postaci:

$$H_{sd} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} J_+ S^+ c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} + J_- S^- c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow} + (J_z^\uparrow c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} - J_z^\downarrow c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}) S^z, \quad (\text{D.26})$$

gdzie operatory *izospinu* są zdefiniowane następująco:

$$S^+ \equiv d_\uparrow^\dagger d_\downarrow, \quad (\text{D.27})$$

$$S^- \equiv d_\downarrow^\dagger d_\uparrow, \quad (\text{D.28})$$

$$S^z \equiv \frac{1}{2} (n_\uparrow - n_\downarrow), \quad (\text{D.29})$$

natomiast sprzężenia mają postać:

$$J^\pm = \frac{1}{2} V_\sigma V_\sigma^* \left(\frac{1}{\varepsilon_\uparrow + U} - \frac{1}{\varepsilon_\uparrow} + \frac{1}{\varepsilon_\downarrow + U} - \frac{1}{\varepsilon_\downarrow} \right), \quad (\text{D.30})$$

$$J_z^\sigma = |V_\sigma|^2 \left(\frac{1}{\varepsilon_\sigma + U} - \frac{1}{\varepsilon_\sigma} \right). \quad (\text{D.31})$$

Mając Hamiltonian Kondo można przeprowadzić procedurę skalowania, analogicznie jak dla modelu Andersona. Podobnie jak poprzednio, stany wysokowzbudzeniowe, z pobliża krawędzi pasma zostają wyeliminowane i wprowadza się efektywny Hamiltonian Kondo układu ze zrenormalizowanymi parametrami sprzężenia, które to zawierają informację o usuniętych stanach.

Hamiltonian układu można przedstawić w postaci danej równaniem (D.1), z tym, że obecnie funkcja falowa Ψ_1 opisuje stan, w którym nie ma elektronów przewodnictwa w górnej krawędzi pasma $\langle D - \delta D, D \rangle$, bądź dziur w dolnej krawędzi pasma $\langle -D, -D + \delta D \rangle$, natomiast Ψ_0 opisuje stan z co najmniej jedną dziurą w dolnej krawędzi pasma, a Ψ_2 opisuje stan z co najmniej jednym elektronem w górnej krawędzi pasma. Zanedbując stany (rzeczywiste) wysokowzbudzeniowe z dwoma elektronami, bądź dwiema dziurami oraz procesy jednoczesnego przeniesienia dwóch elektronów lub dziur ($H_{02} = H_{20} = 0$) Hamiltonian układu przyjmuje postać (D.8). Pierwszy człon H_{11} ma postać oryginalnego Hamiltonianu (D.26), ale nie zawiera żadnych wkładów pochodzących od stanów z krawędzi pasma, które są zawarte w dwóch pozostałych członach. I tak jak w przypadku modelu Andersona człony te zostaną oszacowane w najniższym rzędzie (ze względu na sprzężenie) rachunku zaburzeń, a następnie włączone do H_{11} w postaci zrenormalizowanych parametrów. W najniższym rzędzie ze względu na sprzężenie ($\Gamma \rightarrow 0$) człony H_{00} oraz H_{22} może zostać przybliżony przez Hamiltonian elektrod H_{leads} . Wyrażenia $H_{12}(E - H_{\text{leads}})^{-1}H_{21}$, oraz $H_{10}(E - H_{\text{leads}})^{-1}H_{01}$ wyznaczamy analogicznie jak w przypadku skalowania przeprowadzonego dla modelu Andersona, z tym że obecnie H_{12} , H_{01} mają postać (D.26). Powstałe w ten sposób wyrażenia:

$$J_+ J_- \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} S^- c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{q}'\downarrow} (E - H_{\text{leads}})^{-1} S^+ c_{\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \quad (\text{D.32})$$

$$\approx J_+ J_- \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\frac{1}{2} - S^z \right) \rho \delta D c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} (E - D + \varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow})^{-1}$$

$$J_+ J_- \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} S^+ c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{q}'\uparrow} (E - H_{\text{leads}})^{-1} S^- c_{\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} \quad (\text{D.33})$$

$$\approx J_+ J_- \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\frac{1}{2} + S^z \right) \rho \delta D c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} (E - D + \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})^{-1}$$

$$J_+ J_- \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} S^+ c_{\mathbf{q}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} (E - H_{\text{leads}})^{-1} S^- c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\downarrow} \quad (\text{D.34})$$

$$\approx J_+ J_- \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\frac{1}{2} + S^z \right) \rho \delta D (\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}) (E - D - \varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow})^{-1}$$

$$J_+ J_- \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} S^- c_{\mathbf{q}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow} (E - H_{\text{leads}})^{-1} S^+ c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\uparrow} \quad (\text{D.35})$$

$$\approx J_+ J_- \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\frac{1}{2} - S^z \right) \rho \delta D (\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}) (E - D - \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})^{-1}$$

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} J_z^\sigma S^z c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}'\sigma} (E - H_{\text{leads}})^{-1} J_z^\sigma S^z c_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \\ & \approx (J_z^\sigma)^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (S^z)^2 \rho \delta D c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} (E - D + \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{D.36})$$

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} J_z^\sigma S^z c_{\mathbf{q}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma} (E - H_{\text{leads}})^{-1} J_z^\sigma S^z c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}\sigma} \\ & \approx (J_z^\sigma)^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (S^z)^2 \rho \delta D (\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}) (E - D - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{D.37})$$

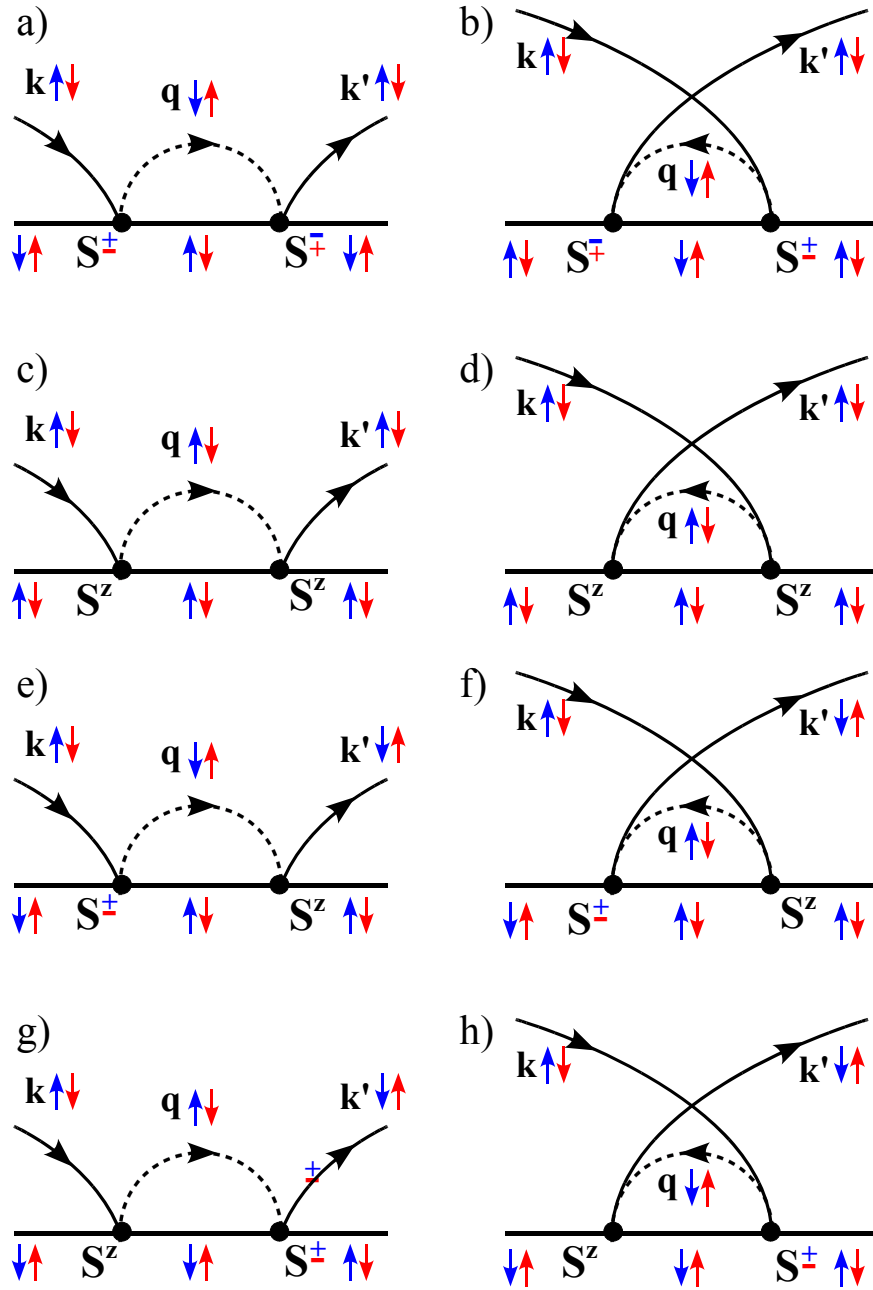
$$\begin{aligned} & \mp \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} J_z^\mp S^z c_{\mathbf{k}'\mp}^\dagger c_{\mathbf{q}'\mp} (E - H_{\text{leads}})^{-1} J_\pm S^\pm c_{\mathbf{q}\mp}^\dagger c_{\mathbf{k}\pm} \\ & \approx -\frac{1}{2} J_z^\mp J_\pm \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} S^\pm \rho \delta D c_{\mathbf{k}'\mp}^\dagger c_{\mathbf{k}\pm} (E - D + \varepsilon_{\mathbf{k}\pm})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{D.38})$$

$$\begin{aligned} & \pm \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} J_z^\pm S^z c_{\mathbf{q}'\pm}^\dagger c_{\mathbf{k}'\pm} (E - H_{\text{leads}})^{-1} J_\pm S^\pm c_{\mathbf{k}\pm}^\dagger c_{\mathbf{q}\pm} \\ & \approx \frac{1}{2} J_z^\pm J_\pm \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} S^\pm \rho \delta D (\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - c_{\mathbf{k}\pm}^\dagger c_{\mathbf{k}'\pm}) (E - D - \varepsilon_{\mathbf{k}\pm})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{D.39})$$

$$\begin{aligned} & \mp \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} J_\pm S^\pm c_{\mathbf{k}'\mp}^\dagger c_{\mathbf{q}'\pm} (E - H_{\text{leads}})^{-1} J_z^\pm S^z c_{\mathbf{q}\pm}^\dagger c_{\mathbf{k}\pm} \\ & \approx -\frac{1}{2} J_z^\pm J_\pm \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} S^\pm \rho \delta D c_{\mathbf{k}'\mp}^\dagger c_{\mathbf{k}\pm} (E - D + \varepsilon_{\mathbf{k}\pm})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{D.40})$$

$$\begin{aligned} & \pm \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} J_\pm S^\pm c_{\mathbf{q}'\mp}^\dagger c_{\mathbf{k}'\pm} (E - H_{\text{leads}})^{-1} J_z^\mp S^z c_{\mathbf{k}\mp}^\dagger c_{\mathbf{q}\mp} \\ & \approx \frac{1}{2} J_z^\mp J_\pm \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} S^\pm \rho \delta D (\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - c_{\mathbf{k}\mp}^\dagger c_{\mathbf{k}'\pm}) (E - D - \varepsilon_{\mathbf{k}\mp})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{D.41})$$

opisują procesy przedstawione na diagramach D.3. Wyprowadzając powyższe wyrażenia wykorzystano relacje $S^+ S^- = 1/2 + S^z$, oraz $S^- S^+ = 1/2 - S^z$ i $S^z S^\pm = \pm S^\pm$, oraz $S^\pm S^z = \mp S^\pm$. W równaniach (D.38-D.41) obowiązuje notacja $\sigma = (\uparrow, \downarrow) \equiv (+, -)$ w stosunku do operatorów $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$, $c_{\mathbf{q}'\sigma}$ oraz sprzężeń J_z^σ . Przykładowo diagram [D.3(a)] przedstawia proces, w którym elektron o wektorze falowym $\mathbf{k}$ z pasma przewodnictwa $(-D + \delta D, D - \delta D)$ i mający *izospin* σ zostaje rozpraszany na elektronie o *izospinie* $\bar{\sigma}$ zlokalizowanym na kropkach. W wyniku tego oddziaływania *izospinów* ze sobą, elektron o *izospinie* $\bar{\sigma}$ zostaje rozproszony do pewnego stanu wirtualnego o wektorze falowym $\mathbf{k}'$ z górnej krawędzi pasma $\langle D - \delta D, D \rangle$. Po takim procesie *izospin* zlokalizowany na kropkach uległ odwróceniu. W dalszym ciągu procesu elektron z górnej krawędzi pasma jest rozpraszany na zlokalizowanym *izospinie*, w wyniku czego *izospin* zostaje powtórnie odwrócony, a elektron przewodnictwa zostaje rozproszony do stanu z pasma $(-D + \delta D, D - \delta D)$.



Rysunek D.3: Diagramowe przedstawienie procesów rozproszeniowych drugiego rzędu dla modelu Kondo. Ciągła linia pozioma oznacza propagator układu kropek kwantowych, a kropki symbolizują wierzchołki rozpraszania. Rozpraszanie elektronów przewodnictwa (linia ciągła zakrzywiona) do stanu zlokalizowanego w układzie kropek kwantowych i z powrotem odbywa się poprzez wysokowzbudzeniowe stany pośrednie (linia przerywana) z górnej, bądź dolnej krawędzi pasma. Diagramy (a, c, e, g) opisują procesy, w których elektron przewodnictwa ($\mathbf{k}, \sigma$) jest rozpraszany poprzez stan pośredni ($\mathbf{q}, \sigma_q$) z górnej krawędzi pasma do stanu ($\mathbf{k}', \sigma'$). Procesy (b, d, f, h), w których elektron z dolnej krawędzi pasma ($\mathbf{q}, \sigma_q$) zostaje rozproszony do stanu ($\mathbf{k}', \sigma'$) w paśmie. Po akcie rozproszenia zostaje wykreowana dziura o wektorze falowym $\mathbf{q}$, która propaguje aż do momentu, gdy elektron przewodnictwa o wektorze falowym $\mathbf{k}$ zostaje rozproszony do stanu o wektorze falowym $\mathbf{q}$.

Wyrażenia (D.36) oraz (D.37) reprezentują człony stałe, bowiem $(S^z)^2 = 1/4$, a więc nie zawierają operatorów działających na zlokalizowany *izospin*. Wobec tego wyrażenia stałe opisujące potencjał rozpraszający elektronów w elektrodach i wchodzące w skład tych diagramów, jak i występujące w członach (D.32-D.35) oraz części zawierające $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ w członach dziurowych mogą zostać włączone do H_{leads} .

Wyznaczone poprawki należy włączyć do wyrazu H_{11} . I tak, wyrażenia (D.32-D.35) wchodzą w skład zrenormalizowanego parametru J_z^σ , a pozostałe wyrażenia renormalizują $J_\pm$. Zrenor-

malizowane parametry Hamiltonianu Kondo można przedstawić jako $\tilde{J}_z^\sigma = J_z^\sigma + \delta J_z^\sigma$, oraz $\tilde{J}_\pm = J_\pm + \delta J_\pm$, gdzie:

$$\delta J_z^\sigma = -J_+ J_- \rho \delta D \left(\frac{1}{E - D + \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} + \frac{1}{E - D - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} \right), \quad (\text{D.42})$$

$$\delta J_\pm = -\frac{1}{2} J_\pm (J_z^\uparrow + J_z^\downarrow) \rho \delta D \left(\frac{1}{E - D + \varepsilon_{\mathbf{k}\pm}} + \frac{1}{E - D - \varepsilon_{\mathbf{k}\mp}} \right). \quad (\text{D.43})$$

W rozważanym reżimie parametr D stanowi największą skalę energetyczną, więc można dokonać następującego przybliżenia równań (D.42) oraz (D.43):

$$\delta J_z^\sigma = 2J_+ J_- \rho \frac{\delta D}{D}, \quad (\text{D.44})$$

$$\delta J_\pm = J_\pm (J_z^\uparrow + J_z^\downarrow) \rho \frac{\delta D}{D}, \quad (\text{D.45})$$

z których można bezpośrednio otrzymać równania skalowania (7.8) oraz (7.9) przedstawione w Rozdziale 7.

Dodatek E

Funkcje Greena układu dwóch kropek kwantowych w reżimie Kondo

W dodatku tym zostaną przedstawione wyrażenia na funkcje Greena G_{ij} dla układu rozpatrywanego w rozdziale 7 otrzymane metodą równań ruchu. Postać tych funkcji jest następująca:

$$G_{ii} = \frac{1}{M} \left\{ \left[1 + \frac{U}{W} (n_{\bar{i}} A_{\bar{i}} - n_{i\bar{i}} \tilde{t}) \right] \Omega_{\bar{i}\bar{i}} + \frac{U}{W} (n_{\bar{i}} \tilde{t} - n_{i\bar{i}} A_i) \Omega_{i\bar{i}} \right\}, \quad (\text{E.1})$$

$$G_{i\bar{i}} = \frac{1}{M} \left\{ \frac{U}{W} (n_i \tilde{t} - n_{i\bar{i}} A_{\bar{i}}) \Omega_{\bar{i}\bar{i}} + \left[1 + \frac{U}{W} (n_i A_i - n_{i\bar{i}} \tilde{t}) \right] \Omega_{i\bar{i}} \right\}, \quad (\text{E.2})$$

gdzie

$$\begin{aligned} M &= \Omega_{11} \Omega_{22} - \Omega_{12} \Omega_{21} \\ \Omega_{ii} &= \varepsilon - \varepsilon_i - \Sigma_{ii}^{(0)} + \frac{U}{W} (\alpha_i A_{\bar{i}} + \gamma_i \tilde{t}) \\ \Omega_{i\bar{i}} &= t - \frac{U}{W} (\gamma_i A_{\bar{i}} + \alpha_i \tilde{t}), \\ W &= A_1 A_2 - \tilde{t}^2 \\ A_1 &= \varepsilon - \varepsilon_1 - U - \Sigma_{11}^{(0)} - \Sigma_{11}^c - \Sigma_{22}^e - \Sigma_{22}^d, \\ A_2 &= \varepsilon - \varepsilon_2 - U - \Sigma_{22}^{(0)} - \Sigma_{22}^c - \Sigma_{11}^f - \Sigma_{11}^d, \\ \tilde{t} &= t + \Sigma_{22}^a + \Sigma_{11}^b, \\ \alpha_1 &= \Sigma_{22}^{dI} + \Sigma_{11}^{cI} + \Sigma_{22}^{eI}, \\ \alpha_2 &= \Sigma_{11}^{dI} + \Sigma_{11}^{fI} + \Sigma_{22}^{cI}, \\ \gamma_1 &= \Sigma_{22}^{aI} + \Sigma_{11}^{bI}, \\ \gamma_2 &= \Sigma_{22}^{aI} + \Sigma_{11}^{bI}. \end{aligned}$$

Energie własne są zdefiniowane w następujący sposób:

$$\begin{aligned} \Sigma_{ii}^{a(n)} &= \sum_{\mathbf{k}\alpha} |V_{i\mathbf{k}}^\alpha|^2 \frac{t}{\Lambda} (\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} + \Delta\varepsilon) F_\alpha^{(n)}(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \\ \Sigma_{ii}^{b(n)} &= \sum_{\mathbf{k}\alpha} |V_{i\mathbf{k}}^\alpha|^2 \frac{t}{\Lambda} (\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} - \Delta\varepsilon) F_\alpha^{(n)}(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \\ \Sigma_{ii}^{c(n)} &= \sum_{\mathbf{k}\alpha} |V_{i\mathbf{k}}^\alpha|^2 \frac{2t^2}{\Lambda} F_\alpha^{(n)}(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Sigma_{ii}^{d(n)} &= \sum_{\mathbf{k}\alpha} \frac{|V_{i\mathbf{k}}^\alpha|^2}{\varepsilon + \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 - U} F_\alpha^{(n)}(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \\
\Sigma_{ii}^{e(n)} &= \sum_{\mathbf{k}\alpha} |V_{i\mathbf{k}}^\alpha|^2 \frac{t(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha})(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} + \Delta\varepsilon) - 2t^2}{\Lambda} F_\alpha^{(n)}(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \\
\Sigma_{ii}^{f(n)} &= \sum_{\mathbf{k}\alpha} |V_{i\mathbf{k}}^\alpha|^2 \frac{t(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha})(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} - \Delta\varepsilon) - 2t^2}{\Lambda} F_\alpha^{(n)}(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \\
\Sigma_{ii}^{d(I)} &= \sum_{\mathbf{k}\alpha} \frac{|V_{i\mathbf{k}}^\alpha|^2}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}} f_\alpha(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha})
\end{aligned}$$

gdzie $\Lambda = (\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha})[(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} + \Delta\varepsilon)(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} - \Delta\varepsilon) - 4t^2]$, $\Delta\varepsilon = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$, $F_\alpha^{(n)}(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) = f_\alpha(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha})$ dla $n = I$ oraz $F_\alpha^{(n)}(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) = 1$ dla $n = 0$. Energia własna $\Sigma_{ij}^{(0)}$ oznacza energię własną układu bez oddziaływań kulombowskich.

Zakładając, iż $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_0$, energie własne zawierające funkcję Fermiego mogą zostać wyznaczone analitycznie i wyrażone za pomocą funkcji digamma. W tym celu należy w energiach własnych $\Sigma_{ii}^{j(I)}$ ($j = a, b, c, d, e, f$) przejść z sumowania po wektorze falowym $\mathbf{k}$ na całkowanie po energii ε , a następnie rozłożyć otrzymane wyrażenie na ułamki proste. Następnie do każdego członu należy zastosować tożsamość (2.25). Otrzymane wyrażenia będą miały postać:

$$\int \frac{f(x)dx}{x - a \pm i0^\pm} = \mathcal{P} \left[\int \frac{f(x)dx}{x - a} \right] \mp i\pi f(a), \quad (\text{E.3})$$

gdzie symbol $\mathcal{P}$ oznacza wartość główną całki. Całka ta może zostać wyznaczona za pomocą metody całkowania po konturze zespolonym. Jednak, aby funkcja całkowa spełniała lemat Jordana należy wpierw ją zregularyzować, przemnażając ją przez funkcję obcięcia np. typu Lorentza postaci $h(x) = D^2/((x - \mu_\beta)^2 + D^2)$. Parametr D spełnia rolę parametru obcięcia i w praktyce przyjmuje się za niego parametr modelu przyjmujący największą wartość (jak np. szerokość pasma). Jak widać w granicy $D \rightarrow \infty$ otrzymana funkcja pokrywa się z funkcją wyjściową. Rozpatrywaną całkę po przemnożeniu przez funkcję obcięcia można zapisać w postaci:

$$S = \int dx \frac{f(x)h(x)}{x - a} = \frac{D}{2i} \left[\int \frac{f(x)dx}{(x - a)(x - \mu_\beta - iD)} - \int \frac{f(x)dx}{(x - a)(x - \mu_\beta + iD)} \right]. \quad (\text{E.4})$$

Pierwsza (druga) całka w równaniu (E.4) posiada bieguny w $x = a$, $x = \mu_\beta + (-)iD$, oraz w $x = (2n + 1)i\pi$ dla $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. W obszarze blokady kulombowskiej wkład od pierwszego bieguna można pominąć. Stosując kontur w kształcie półokręgu łączącego się z osią rzeczywistych ($\Re[z]$) i zamykającego górną półpłaszczyznę ($\Im[z] \geq 0$) obliczamy drugą całkę występującą w równaniu (E.4). Analogiczny kontur zamykający dolną półpłaszczyznę posłuży do wyznaczenia pierwszej całki z równania (E.4). Wykorzystując sumacyjną reprezentację funkcji digamma, oraz traktując D jako największą skalę energetyczną ($D \rightarrow \infty$), całka (E.4) przyjmuje następującą postać:

$$S = \Re \left[\Psi \left(\frac{1}{2} + i \frac{a - \mu_\beta}{2\pi k_B T} \right) \right] - \ln \left(\frac{D}{2\pi k_B T} \right), \quad (\text{E.5})$$

gdzie $\Psi(x)$ oznacza funkcję digamma. Należy dodać, że chociaż pojedyncza całka S zależy od parametru obcięcia to energia własna już nie, bowiem człony logarytmiczne znoszą się w niej parami.

Chociaż prezentowana tutaj metoda równań ruchu prowadzi do jakościowo dobrych rezultatów dla temperatur $T \gtrsim T_K$, to zawodzi w niższych temperaturach, szczególnie gdy $T \ll T_K$. Ta wada metody związana jest z rozbieżnością logarytmiczną funkcji digamma. Szczegółowe rozważania na ten temat można znaleźć w referencjach [204, 203, 202, 205], a tutaj zostaną tylko wymienione. Rozbieżność funkcji digamma prowadzi do niefizycznego zachowania się liniowej konduktancji [204]. I tak obliczenia wykonane przy pomocy techniki *bozonów pomocniczych*

(które są ściśle dla temperatury $T = 0$ K) pokazują, iż konduktancja liniowa ulega nasyceniu wraz z obniżaniem poziomu energetycznego kropki. Zostało to pokazane na Rys. 7.3 w Rozdziale 7. Jednak w przypadku zastosowanej metody równań ruchu, poniżej pewnej wartości położenia poziomu, konduktancja zaczyna maleć i nie ulega nasyceniu [204]. Zauważono również, że metoda równań ruchu, z zastosowanymi różnymi przybliżeniami rozprężnienia, nie zachowuje relacji zupełności ani też nie spełnia reguły sum Friedela [206]. Z drugiej strony przybliżenie rozprężnienia zastosowane w tej pracy prowadzi do nadzwyczaj dobrej zależności liczby obsadzeń kropki jako funkcji położenia poziomu. Zgodność ta jest porównywalna do wyników otrzymywanych przy użyciu numerycznej grupy renormalizacji [204]. Biorąc to wszystko pod uwagę należy stwierdzić, że prezentowana tutaj metoda równań ruchu prowadzi do niewłaściwych wyników w niskich temperaturach i jest ograniczona do przypadku $T \gtrsim T_K$. Z drugiej strony technika ta posiada niespotykaną dla innych metod zaletę pozwalając badać efekt Kondo w silnej nierównowadze. Należy jeszcze wspomnieć o przybliżeniu zaproponowanym przez Lacroix [202, 207], które również nie daje poprawnych wyników i prowadzi do niewłaściwego wyrażenia na temperaturę Kondo.

Dodatek F

Funkcja Greena w przestrzeni Nambu

F.1 Funkcja Greena układu dwóch kropek kwantowych

W dodatku tym zostanie przedstawiona jawna postać elementów macierzowych funkcji Greena układu dwóch kropek kwantowych odizolowanych od elektrod. Hamiltonian takiego układu ma postać $\hat{H}_{DD} = \sum_{i\sigma} \varepsilon_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} - t(d_{1\sigma}^\dagger d_{2\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_i U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}$. Jednakże funkcja Greena dla układu opisywanego powyższym Hamiltonianem została wyznaczona w rozszerzonej przestrzeni, co pozwoliło uwzględnić wszystkie procesy elektronowe i dziurowe. Takie całościowe potraktowanie problemu ważne jest w przypadku transportu elektronowego w układach mezoskopowych zawierających elektrody nadprzewodzące.

Poszukiwana macierz w domenie czasowej ma postać $\mathbf{g}^r(t, t') = -i\theta(t - t')\langle\{\psi(t), \psi^\dagger(t')\}\rangle$, gdzie wektor $\psi \equiv \Psi = (d_{1\sigma}, d_{1\bar{\sigma}}^\dagger, d_{2\sigma}, d_{2\bar{\sigma}}^\dagger)$. W przestrzeni Fouriera macierz ta posiada elementy $[\mathbf{g}]_{ij}^{\sigma\sigma'} \equiv g_{ij}^{\sigma\sigma'}$ postaci:

$$g_{ij}^{\sigma\sigma'} = \frac{1}{\Omega_\sigma} \left[\left(\Lambda_{ij}^{\sigma\sigma'} \pm \Theta_{ij}^{\sigma\sigma'} \frac{U_i}{z \mp \varepsilon_{i\sigma} \mp U_i} \right) \left(z \mp \varepsilon_{i\sigma} \mp \frac{U_i t (n_{i\bar{\sigma}} - n_{i\bar{\sigma}})}{z \mp \varepsilon_{i\sigma} \mp U_i} \right) + \left(\Lambda_{ij}^{\sigma\sigma'} \pm \Theta_{ij}^{\sigma\sigma'} \frac{U_i}{z \mp \varepsilon_{i\sigma} \mp U_i} \right) \left(\mp t - \frac{U_i t n_{i\bar{\sigma}}}{z \mp \varepsilon_{i\sigma} \mp U_i} \right) \right], \quad (\text{F.1})$$

gdzie górny znak dotyczy funkcji "elektronowych": $\langle\langle d_{i\sigma} | d_{j\sigma'}^\dagger \rangle\rangle$ oraz $\langle\langle d_{i\sigma} | d_{j\sigma'} \rangle\rangle$, a dolny znak odwołuje się do funkcji "dziurowych": $\langle\langle d_{i\sigma}^\dagger | d_{j\sigma'} \rangle\rangle$ oraz $\langle\langle d_{i\sigma}^\dagger | d_{j\sigma'}^\dagger \rangle\rangle$. Dla funkcji "elektronowych" $\Lambda_{ij}^{\sigma\sigma'} = \langle\{d_{i\sigma}, d_{j\sigma'}^\dagger\}\rangle = 0$ ($\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}$), oraz $\Theta_{ij}^{\sigma\sigma'} = \langle\{d_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}, d_{j\sigma'}^\dagger\}\rangle = -\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}\langle d_{i\sigma} d_{i\bar{\sigma}} \rangle$ ($\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'} n_{i\bar{\sigma}} + \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}\langle d_{i\sigma} d_{i\bar{\sigma}}^\dagger \rangle$), natomiast dla funkcji "dziurowych" należy wziąć $(\Lambda_{ij}^{\sigma\sigma'})_d = (\Lambda_{ij}^{\sigma\sigma'})^\dagger$ oraz $(\Theta_{ij}^{\sigma\sigma'})_d = (\Theta_{ij}^{\sigma\sigma'})^\dagger$. Dla opóźnionej funkcji Greena należy wybrać $z = \varepsilon + i0^+$. Warto dodać, iż funkcja Greena (F.1) ze względu na obecność sprzężenia tunelowego między kropkami kwantowymi i oddziaływań kulombowskich na kropkach musiała zostać wyznaczona w sposób przybliżony ze względu na sprzężenie tunelowe. Dla $t = 0$ powyższy wynik jest ścisły.

F.2 Funkcja Greena elektrody nadprzewodzącej

Zostanie tutaj przedstawione wyprowadzenie funkcji Greena nadprzewodnika opisywanego teorią BCS w przybliżeniu pola średniego. Hamiltonian układu dany jest wzorem (8.1). Niech macierz transformaty Fouriera funkcji Greena elektrody nadprzewodzącej w przestrzeni Nambu 2×2 ma postać:

$$G_{BCS} = \langle\langle \Phi | \Phi^\dagger \rangle\rangle, \quad (\text{F.2})$$

z wektorem Nambu $\Phi_{\mathbf{k}} = (c_{\mathbf{k}\sigma}, c_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}}^\dagger)^T$. Dla $\sigma = \uparrow$ funkcja ta posiada elementy macierzowe $\langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow} | c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle$, $\langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow} | c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle\rangle$, $\langle\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle$, oraz $\langle\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle\rangle$. Pisząc równania ruchu Heisenberga dla

operatorów $c_{\mathbf{k}\uparrow}(t)$ oraz $c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger(t)$ otrzymujemy układ równań różniczkowych postaci:

$$i \frac{dc_{\mathbf{k}\uparrow}(t)}{dt} = \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}(t) + \Delta c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger(t), \quad (\text{F.3})$$

$$i \frac{dc_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger(t)}{dt} = -\varepsilon_{-\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger(t) + \Delta^* c_{\mathbf{k}\uparrow}(t), \quad (\text{F.4})$$

których rozwiązanie prowadzi do następujących zależności czasowych szukanych operatorów:

$$c_{\mathbf{k}\uparrow}(t) = \frac{1}{2} c_{\mathbf{k}\uparrow} \left[e^{-iE_{\mathbf{k}}t} \left(1 + \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) + e^{+iE_{\mathbf{k}}t} \left(1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \right] + \frac{1}{2} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}}} (e^{-iE_{\mathbf{k}}t} - e^{iE_{\mathbf{k}}t}), \quad (\text{F.5})$$

$$c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger(t) = \frac{1}{2} c_{\mathbf{k}\uparrow} \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}}} (e^{-iE_{\mathbf{k}}t} - e^{iE_{\mathbf{k}}t}) + \frac{1}{2} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \left[e^{-iE_{\mathbf{k}}t} \left(1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) + e^{+iE_{\mathbf{k}}t} \left(1 + \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \right], \quad (\text{F.6})$$

gdzie $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2}$ jest energią kwazicząstki o wektorze falowym $\mathbf{k}$. Wstawiając wyznaczoną zależność (F.5) oraz jej hermitowskie sprzężenie do definicji opóźnionej funkcji Greena $G_{BCS}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{\Phi(t), \Phi^\dagger(t')\} \rangle$ otrzymujemy element $[G_{BCS}^r(t, t')]_{11}$:

$$[G_{BCS}^r(t, t')]_{11} = -\frac{i}{2} \theta(t - t') \left[\left(1 + \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) e^{-iE_{\mathbf{k}}(t-t')} + \left(1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) e^{iE_{\mathbf{k}}(t-t')} \right] \quad (\text{F.7})$$

Postępując w podobny sposób można otrzymać pozostałe elementy macierzy (F.2). Dla przykładu podamy elementy $\langle \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} | c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle \rangle$, oraz $\langle \langle c_{\mathbf{k}\downarrow} | c_{-\mathbf{k}\uparrow} \rangle \rangle$. Elementy te przyjmują następującą postać:

$$[G_{BCS}^r(t, t')]_{12} = \mp \frac{i}{2} \theta(t - t') \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}}} \left[e^{-iE_{\mathbf{k}}(t-t')} - e^{iE_{\mathbf{k}}(t-t')} \right], \quad (\text{F.8})$$

gdzie górny znak dotyczy funkcji $\langle \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} | c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle \rangle$, a dolny odnosi się do funkcji $\langle \langle c_{\mathbf{k}\downarrow} | c_{-\mathbf{k}\uparrow} \rangle \rangle$. Stąd właśnie został wprowadzony parametr $\tilde{\sigma} = \pm 1$ w macierzy (8.13) dla różnych orientacji spinu.

Wykonując sumowanie po wektorze falowym $\mathbf{k}$ otrzymuje się energię własną prawej elektrody. Dla przykładu pokażemy jak wyznaczyć sumę $\sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} [G_{BCS}^r(t, t')]_{12} (-V_{\mathbf{k}}^*)$. Dla prostoty wprowadzono $\tau = t - t'$, oraz pominięto wskaźniki numerujące kropki. Należy więc policzyć sumę:

$$- \mp \frac{i}{2} \theta(\tau) \sum_{\mathbf{k}} |V_{\mathbf{k}}|^2 \frac{\Delta}{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} \left[e^{-i\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2} \tau} - e^{i\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2} \tau} \right]. \quad (\text{F.9})$$

Wykorzystując własność delty Diraca $\int \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) d\varepsilon = 1$, oraz przybliżenie szerokiego pasma wobec gęstości stanów w fazie normalnej ($\rho_N(\varepsilon) = \rho_N = \text{const}$) otrzymuje się:

$$- \mp \frac{i}{2} \theta(\tau) \Gamma_N \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{\Delta}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \left[e^{-i\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2} \tau} - e^{i\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2} \tau} \right], \quad (\text{F.10})$$

gdzie $\Gamma_N = 2\pi\rho_N$. Dokonując podstawienia $\xi^2 = \varepsilon^2 + \Delta^2$ i wykorzystując własności funkcji podcałkowej otrzymujemy wyrażenie postaci:

$$\mp i\theta(\tau) \Gamma_N \int \frac{d\xi}{2\pi} \frac{|\xi|}{\sqrt{\xi^2 - \Delta^2}} \frac{\Delta}{|\xi|} e^{-i\xi\tau}, \quad (\text{F.11})$$

Transformata Fouriera równania (F.11) prowadzi do energii własnej:

$$\mp \frac{i}{2} \Gamma_N \frac{|\omega|}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}} \frac{\Delta}{|\omega|}. \quad (\text{F.12})$$

Przy wykonywaniu całkowania po czasie należy pamiętać o infinitezymalnie małym czynniku $i0^+$ dzięki któremu usuwana jest rozbieżność w $+\infty$.

Energię własną Σ_R można otrzymać również w inny sposób, z a mianowicie przy wykorzystaniu równania (8.10). W tym celu należy również znać funkcje Greena kropki kwantowej

w obecności sprzężenia z elektrodami. Funkcję tę można wyznaczyć stosując metodę równań ruchu. Dla przykładu zostaną podane elementy Σ_{R11} , oraz Σ_{R12} w reprezentacji energetycznej:

$$\Sigma_{R11}^r = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\omega + \varepsilon_{-\mathbf{k}}}{(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})(\omega + \varepsilon_{-\mathbf{k}}) - \Delta^2}, \quad (\text{F.13})$$

$$\Sigma_{R12}^r = \sum_{\mathbf{k}} \frac{-\Delta}{(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})(\omega + \varepsilon_{-\mathbf{k}}) - \Delta^2}. \quad (\text{F.14})$$

W celu wyznaczenia powyższych sum należy zamienić sumowanie po wektorze falowym $\mathbf{k}$ na całkowanie po energii wykorzystując własność delty Diraca $\int \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) = 1$. Otrzymuje się następujące całki:

$$\Sigma_{R11}^r = \frac{\Gamma_N}{2\pi} \int d\varepsilon \frac{\omega + \varepsilon}{(\omega - \varepsilon)(\omega + \varepsilon) - \Delta^2}, \quad (\text{F.15})$$

$$\Sigma_{R12}^r = \frac{\Gamma_N}{2\pi} \int d\varepsilon \frac{-\Delta}{(\omega - \varepsilon)(\omega + \varepsilon) - \Delta^2}. \quad (\text{F.16})$$

W celu policzenia całek (F.15), oraz (F.16) wystarczy rozpatrzeć tylko całkę postaci $\int d\varepsilon / [(\varepsilon - \omega)(\varepsilon + \omega) - \Delta^2]$, bowiem funkcja $\varepsilon / [(\omega - \varepsilon)(\omega + \varepsilon) - \Delta^2]$ jest funkcją nieparzystą. Obliczenie tej całki (np. metodą residuów) daje wynik $i\pi / \sqrt{\omega^2 - \Delta^2}$, co po podstawieniu do równań (F.15), oraz (F.16) pozwala wyrazić energie własną Σ_{R11} w postaci:

$$\Sigma_{R11} = -\frac{i\Gamma_N}{2} \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}, \quad (\text{F.17})$$

a energia własna Σ_{R12} sprowadza się do wzoru (F.12).

Abstract

The Thesis is devoted to transport phenomena through systems of coupled quantum dots attached to magnetic/nonmagnetic or spin-biased leads. Specifically, the interference and Coulomb correlation effects in double- and triple quantum dot systems coupled to the external leads are investigated theoretically. To obtain basic transport characteristics, including current-voltage curves, linear and nonlinear conductance, and tunnel magnetoresistance (TMR) associated with magnetization rotation, different methods have been used – adequate to the investigated physical problem.

The Thesis consists of ten chapters. The first chapter plays a role of the introductory part which includes a short description of the basic properties of quantum dots, like energy level and charge quantization. The basic theory of electron transport through quantum dots is also described in this chapter. In chapter 2, the interference and Coulomb correlation effects in spin-dependent transport through two coupled quantum dots attached to ferromagnetic leads with collinear (parallel and antiparallel) magnetizations is analyzed theoretically in linear and nonlinear regime. A general model of such a system is assumed and the relevant Green functions are derived by the equation of motion (EOM) method. To close the set of equations the Hartree-Fock type approximation scheme has been applied. The dot occupation numbers and the Green functions are calculated self-consistently. It has been found that the magnitude and sign of the off-diagonal elements of the coupling matrix has great impact on the Fano antiresonance. Moreover, finite intradot Coulomb repulsions can lead to a significant enhancement of TMR.

In chapter 3 spin-polarized transport through triple quantum dot attached to ferromagnetic leads is described. It is assumed that only one of the dots is coupled to the leads. The analogue of the Dicke effect – known in atomic physics, has been found in linear conductance. Additionally, we have calculated the TMR effect associated with rotation of the leads' magnetic moments from antiparallel to parallel alignment, and shown that the intra-dot Coulomb correlation leads to some resonance-like enhancement of TMR at some values of the level positions. Chapter 4 is devoted to the spin-dependent transport through double quantum dot system weakly coupled to the external ferromagnetic leads. The presented results have been obtained using real-time diagrammatic technique in the parallel, serial, and intermediate geometries. The effects due to virtual tunneling processes between the two dots via the leads, associated with off-diagonal coupling matrix elements, are also considered. Negative differential conductance and negative tunnel magnetoresistance have been found in the case of serial and intermediate geometries, while no such behavior has been observed for double quantum dots coupled in parallel. It is also shown that transport characteristics strongly depend on the magnitude of the off-diagonal coupling matrix elements.

Chapters 5 - 7 describe orbital and spin Kondo effects in systems of double- and triple quantum dots attached to the metallic leads. To describe this phenomenon various techniques have been utilized, like *poor's man scaling* method, *slave-boson* approach and non-equilibrium Green function technique. Chapter 5 describes Kondo effect in double quantum dot system. The first section of this chapter is devoted to the essence of the Kondo effect and displays the most important discoveries corresponding to the Kondo assisted transport through quantum dot. The *slave-boson* method is described in section 5.2. It is shown that the Kondo peak reveals features typical for the Dicke effect, i.e., one Kondo peak plays a role of the *superradiant* mode while the second Kondo peak plays a role of *subradiant* mode. It has been shown that the nondiagonal elements of the coupling matrix play a significant role in the Dicke-Kondo phenomenon. In chapter 6 the Dicke-Kondo effect in triple quantum dot system is considered. The Kondo peak in the local density of states of the central dot becomes narrower due to the interplay of the Kondo and Dicke effects. The Kondo peak is even totally suppressed when the bare energy levels of the side dots are equal and located at the Fermi level. This leads to suppression of the zero-bias Kondo peak in the differential conductance. The interplay of the Kondo and Dicke resonances also has a significant impact on the shot-noise characteristics. In chapter 7 the orbital Kondo effect in a spinless system of two single-level quantum dots connected to electron reservoirs has been considered. Various techniques have been used to

describe basic features of the Kondo physics. First, we used the scaling technique to evaluate the level renormalization and the corresponding Kondo temperature. Then, we used the slave boson technique to calculate local density of states and linear conductance. To find nonlinear conductance we used the nonequilibrium Green's-function method. The obtained results show that asymmetry in coupling of two dots to the electrodes leads to the splitting of the zero-bias anomaly. In further part of the chapter 7 the influence of the nondiagonal elements of the coupling matrix has been investigated. The presented results show the possibility to observe Dicke-like or Fano-like line in linear conductance. Moreover, for this case the scaling procedure has been adapted and the Kondo temperature has been also evaluated.

In chapter 8 Andreev-like tunneling has been investigated in system of two quantum dots attached to normal (nonmagnetic or ferromagnetic) leads and one superconducting electrode. Here, the influence of the asymmetry in coupling of normal and superconducting leads, as well as Coulomb correlations and magnetism of the normal leads on the Andreev-like tunneling has been considered. The described system can be considered as Cooper pair generator. Chapter 9 describes thermoelectric effects in the system considered in chapter 2. In particular, the influence of the quantum interference effect, Coulomb correlation and ferromagnetism of the external leads on the thermoelectric efficiency has been investigated. The great enhancement of the thermoelectric efficiency has been found due to Fano effect. In last chapter beatings in transport characteristics has been reported for the system of two quantum dots attached to nonmagnetic, ferromagnetic or spin-biased leads. To describe the time-dependent phenomenon in such a system I combine the rate equation for density matrix with the non-equilibrium Green function formalism and *slave-boson* method. The presented results have been obtained within the weak coupling approximation and using gradient expansion. At the end of chapter 10 some potential practical applications of the considered phenomenon have been suggested.

Bibliografia

- [1] R. P. Feynman, *Engineering and Science*, (1960, Caltech); www.zyvex.com/nanotech/feynman.html,
- [2] S. M. Reimann, M. Manninen, Rev. Mod. Phys. **74**, 1283 (2002).
- [3] L. Kouwenhoven *et al*, *Electron transport in quantum dots*, (Kluwer 1997).
- [4] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, L. M. K. Vandersypen, Rev. Mod. Phys. **79**, 1217 (2007).
- [5] L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, S. Tarucha, Rep. Prog. Phys. **64**, 701 (2001).
- [6] C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B **44**, 1646 (1991),
- [7] I. Weymann, J. König, J. Martinek, J. Barnaś, G. Schön, Phys. Rev. B **72**, 115334 (2005),
- [8] U. Fano, J. W. Cooper, Phys. Rev. Lett. **86**, 4636 (2001).
- [9] U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
- [10] A. E. Miroshnichenko, S. Flach, Y. S. Kivshar, Rev. Mod. Phys. **82**, 2257 (2010).
- [11] J. Gores, D. Goldhaber-Gordon, S. Heemeyer, M. A. Kastner, H. Shtrikman, D. Mahalu, and U. Meirav, Phys. Rev. B **62**, 2188 (2000).
- [12] K. Kobayashi *et al*, Phys. Rev. Lett. **88**, 256806 (2002),
- [13] K. Kobayashi *et al*, Phys. Rev. B. **68**, 235304 (2003),
- [14] A. C. Johnson *et al*, Phys. Rev. Lett. **93**, 106803 (2004),
- [15] S. Sasaki, H. Tamura, T. Akazaki, T. Fujisawa, Phys. Rev. Lett. **103**, 266806 (2009).
- [16] P. Stefański, B. R. Bułka, Phys. Rev. Lett **86**, 5128 (2001); P. Stefański, A. Tagliacozzo, B. R. Bułka, Phys. Rev. Lett **93**, 186805 (2004).
- [17] M. L. Landron de Guevara, F. Claro, P. A. Orellana, Phys. Rev. B **67**, 195335 (2003).
- [18] H. Lu, R. Lü, B.-F. Zhu, Phys. Rev. B **71**, 235320 (2005).
- [19] H. Lu, R. Lü, B.-F. Zhu, J. Phys.: Condens. Matter **18**, 8961 (2006).
- [20] S. Y. Cho, R. H. McKenzie, K. Kang, C. K. Kim, J. Appl. Phys.: Condens. Matter **15**, 1147 (2003),
- [21] Feng Chi, Shu-Shen Li, J. Appl. Phys. **99**, 043705 (2006),
- [22] P. Trocha, J. Barnaś, Phys. Rev. B **76**, 165432 (2007).
- [23] Y. Tanaka, N. Kawakami, Phys. Rev. B **72**, 085304 (2005).
- [24] K. Hamaya, M. Kitabatake, K. Shibata, M. Jung, M. Kawamura, K. Hirakawa, T. Machida, T. Taniyama, S. Ishida, and Y. Arakawa, Appl. Phys. Lett. **91**, 232105 (2007).

- [25] W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, T. Fujisawa, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 1 (2002).
- [26] T. Kubo, Y. Tokura, T. Hatano, and S. Tarucha, *Phys. Rev. B* **74**, 205310 (2006).
- [27] Y. Meir, N. S. Wingreen, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2512 (1992).
- [28] A. -P. Jauho, N. S. Wingreen, Y. Meir, *Phys. Rev. B* **50**, 5528 (1994).
- [29] H. Haug, A. P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semi-Conductors*, edited by M. Cardona *et al.* (Springer-Verlag, Heidelberg 1998).
- [30] B. Średniawa, *Mechanika kwantowa*, (PWN 1981).
- [31] M. Julierre, *Phys. Lett. A* **54**, 225 (1975),
- [32] P. M. Tedrow, R. Meservey, *Phys. Rev. Lett.* **26**, 192 (1971).
- [33] A. Kogan, S. Amasha, D. Goldhaber-Gordon, G. Granger, M. A. Kastner, and H. Shtrikman, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 166602 (2004).
- [34] J. von Neumann, E. Wigner, *Phys. Z.* **30**, 465 (1929).
- [35] L. Fonda, R.G. Newton, *Ann. Phys.* **10**, 490 (1960).
- [36] F.H. Stillinger, D.R. Herrick, *Phys. Rev. A* **11**, 446 (1975).
- [37] C. Emary, *Phys. Rev. B* **76**, 245319 (2007).
- [38] M. C. Rogge, R. J. Haug, *Phys. Rev. B* **77**, 193306 (2008).
- [39] L. Gaudreau, A. S. Sachrajda, S. Studenikin, P. Zawadzki, A. Kam, J. Lapointe, *AIP Conf. Proc.* **893**, 857 (2007).
- [40] T. Kuzmenko, K. Kikoin, Y. Avishai, *Phys. Rev. B* **69**, 195109 (2004).
- [41] T. Kuzmenko, K. Kikoin, Y. Avishai, *Y Phys. Rev. Lett.* **96**, 046601 (2006)
- [42] D. S. Saraga, D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 166803 (2003).
- [43] R. Žitko, J. Bonča, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 047203
- [44] M. L. Ladrón de Guevara, P. A. Orellana, *Phys. Rev. B* **73**, 205303 (2006).
- [45] Z.-T. Jiang, Q.-F. Sun, Y. Wang, *Phys. Rev. B* **72**, 045332 (2005).
- [46] I. V. Dinu, M. Tolea, A. Aldea, *Phys. Rev. B* **76**, 113302 (2007).
- [47] I. Gómez, F. Dominguez-Adame, P. A. Orellana, *J. Phys.: Condens. Matter* **16** 1613 (2004).
- [48] W.-Z. Wang, *Phys. Rev. B* **76**, 115114 (2007).
- [49] T. Vorrath and T. Brandes, *Phys. Rev. B* **68**, 035309 (2003).
- [50] T. Brandes and B. Kramer, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3021 (1999).
- [51] T. Brandes, *Phys. Rep.* **408**, 315 (2005).
- [52] P.A. Orellana, F. Dominguez-Adame, E. Diez, *Physica E* **35**,126 (2006).
- [53] P. A. Orellana, M. L. Ladrón de Guevara and F. Claro *F Phys. Rev. B* **70**, 233315 (2004).
- [54] R. H. Dicke, *Phys. Rev.* **89**, 472 (1953).
- [55] R. H. Dicke, *Phys. Rev.* **93**, 99 (1954).

- [56] R. G. DeVoe and R. G. Brewer, Phys. Rev. Lett. **76**, 2049 (1996).
- [57] H. Schoeller and G. Schön, Phys. Rev. B **50**, 18436 (1994); J. König, J. Schmid, H. Schoeller, and G. Schön, Phys. Rev. B **54**, 16820 (1996).
- [58] J. König, *Quantum Fluctuations in the Single-Electron Transistor* (Shaker, Aachen, (1999).
- [59] J. König, H. Schoeller, and G. Schön, Phys. Rev. Lett. **76**, 1715 (1996).
- [60] A. Thielmann, M. H. Hettler, J. König, and G. Schön, Phys. Rev. B **68**, 165341 (2003).
- [61] B. Wunsch, M. Braun, J. König, and D. Pfannkuche, Phys. Rev. B **72**, 205319 (2005).
- [62] P. Trocha, I. Weymann, J. Barnaś, Phys. Rev. B **80**, 165333 (2009).
- [63] J. Aghassi, A. Thielmann, M. H. Hettler, and G. Schön, Phys. Rev. B **73**, 195323 (2006).
- [64] R. J. Soulen, Jr., J. M. Byers, M. S. Osofsky, B. Nadgorny, T. Ambrose, S. F. Cheng, P. R. Broussard, C. T. Tanaka, J. Nowak, J. S. Moodera, A. Barry, and J. M. D. Coey, Science **282**, 85 (1998).
- [65] I. Weymann, Phys. Rev. B **75**, 195339 (2007); Phys. Rev. B **78**, 045310 (2008).
- [66] I. Weymann, J. Barnaś, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 096208 (2007).
- [67] J. Kondo, Prog. Theor. Phys. **32**, 37 (1964).
- [68] K. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [69] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **40**, 416 (1978).
- [70] L. I. Glazmann, M. E. Raikh, JETP. Lett. A **47**, 452 (1988).
- [71] T. K. Ng, P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. A **61**, 1768 (1988).
- [72] L. Kouwenhoven, L. I. Glazman, Phys. World, (2001); L. P. Kouwenhoven, Science **281**, 240 (1998).
- [73] D. Goldhaber-Gordon *et al*, Nature **391**, 156, (1998).
- [74] S. M. Cronenwett *et al.*, Science **281**, 540 (1998).
- [75] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
- [76] P.G. Silvestrov, Y. Imry, Phys. Rev. B **75**, 115335 (2007).
- [77] Y. Meir, N. S. Wingreen, and P. A. Lee, Phys. Lett. **66**, 3048 (1991); Phys. Lett. **70**, 2601 (1993).
- [78] N. S. Wingreen, Y. Meir, Phys. Rev. B **49**, 11040 (1994).
- [79] K. Kang and B. I. Min, Phys. Rev. B **52**, 10689 (1995).
- [80] R. Świrkowicz, J. Barnaś, and M. Wilczyński, Phys. Rev. B **68**, 195318 (2003).
- [81] S. Sasaki, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, W. G. van der Wiel, M. Eto, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, Nature (London) **405**, 764 (2000).
- [82] J. Martinek, Y. Utsumi, H. Imamura, J. Barnaś, S. Maekawa, J. König, G. Schön, Phys. Rev. Lett. **91**, 127203 (2003).
- [83] R. Lopez, D. Sanchez, Phys. Rev. Lett. **90**, 116602 (2003).
- [84] B. R. Bulka, S. Lipiński, Phys. Rev. B **67**, 024404 (2003).

- [85] R. Świrkowicz, M. Wilczyński, M. Wawrzyniak, and J. Barnaś, Phys. Rev. B **73**, 193312 (2006); R. Świrkowicz, M. Wilczyński, and J. Barnaś, J. Phys.: Condens. Matter **18**, 2291 (2006).
- [86] A. N. Pasupathy *et al*, Science **306**, 86 (2004).
- [87] P. Coleman, Phys. Rev. B **29**, 3036 (1984).
- [88] A. A. Abrikosov, Physics **2**, 5 (1965).
- [89] S. E. Barnes, J. Phys F **7** 1375 (1977).
- [90] V. Dorin, P. Schlottmann, Phys. Rev. B **47**, 5095 (1993).
- [91] H. Friedrich, D. Wintgen, Phys. Rev. A **31**, 3964 (1985); H. Friedrich, D. Wintgen, Phys. Rev. A **32**, 3231 (1985).
- [92] E. Vernek, P. A. Orellana, S. E. Ulloa, Phys. Rev. B **82**, 165304 (2010).
- [93] B. H. Wu, J. C. Cao, K.-H. Ahn, Phys. Rev. B **72**, 165313 (2005).
- [94] 52G. B. Lesovik, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **49**, 513 (1989) [JETP Lett. **49**, 592 (1989)].
- [95] G. Grüner and A. Zawadowski, Rep. Prog. Phys. **37**, 1497 (1974); G. Zaránd and A. Zawadowski, Phys. Rev. Lett. **72**, 542 (1994).
- [96] D. Boese, W. Hofstetter, and H. Schoeller, Phys. Rev. B **64**, 125309 (2001).
- [97] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1993).
- [98] A. Hübner, K. Held, J. Weis, and K. v. Klitzing, Phys. Rev. Lett. **101**, 186804 (2008).
- [99] U. Wilhelm, J. Schmid, J. Weis, K.v. Klitzing, Physica (Amsterdam) **14E**, 385 (2002).
- [100] T. Pohjola, H. Schoeller, and G. Schön, Europhys. Lett., **54**, 241 (2001).
- [101] Q.-F. Sun and H. Guo, Phys. Rev. B **66**, 155308 (2002).
- [102] D. Sztienkiel and R. Świrkowicz, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 256205 (2007).
- [103] D. Sztienkiel and R. Świrkowicz, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 386224 (2007).
- [104] A. W. Holleitner, A. Chudnovskiy, D. Pfannkuche, K. Eberl, and R. H. Blick, Phys. Rev. B **70**, 075204 (2004).
- [105] J. Wen, J. Peng, B. Wang, and D. Y. Xing, Phys. Rev. B **75**, 155327 (2007).
- [106] S. Lipiński and D. Krychowski, Phys. Status Solidi b **243**, 206 (2005).
- [107] S. Lipiński and D. Krychowski, Phys. Rev. B **81**, 115327 (2010).
- [108] J. S. Lim, M.-S. Choi, R. López, and R. Aguado, Phys. Rev. B **74**, 205119 (2006).
- [109] P. W. Anderson, J. Phys. C **3**, 2436 (1970).
- [110] J. R. Schrieffer, P. A. Wolf, Phys. Rev. **149**, 491 (1966).
- [111] D. Matsubayashi and M. Eto, Phys. Rev B **75**, 165319 (2007).
- [112] V. Kashcheyevs, A. Schiller, A. Aharony, and O. Entin-Wohlman, Phys. Rev. B **75**, 115313 (2007).
- [113] T. K. Ng, Phys. Rev. Lett. , 3635 (1993).
- [114] T. V. Shahbazyan and M. E. Raikh, Phys. Rev. B **49**, 17123 (1994).

- [115] P. Trocha and J. Barnaś, J. Nanosci. Nanotechnol. **10**, 2489 (2010).
- [116] A. F. Andreev, Sov. Phys. JETP **19**, 1228 (1964).
- [117] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, 2d ed., (McGraw-Hill, Inc., 1996).
5Phys. Rev. B **72**, 205310 (2005).
- [118] L. Hofstetter, S. Csonka, J. Nygård, C. Schönenberger, Nature **462**, 960 (2009).
- [119] L. G. Herrmann, F. Portier, P. Roche, A. Levy Yeyati, T. Kontos, C. Strunk, Phys. Rev. Lett. **104**, 026801 (2010).
- [120] L. Hofstetter, A. Geresdi, M. Aagesen, J. Nygård, C. Schönenberger, S. Csonka, Phys. Rev. Lett. **104**, 246804 (2010).
- [121] Y. Nambu, Phys. Rev. **117**, 648 (1960).
- [122] Z. Y. Zeng, F. Claro, B. Li, Phys. Rev. B **68**, 115319 (2003).
- [123] R. Franz, G. Wiedemann, Annalen der Physik **165**, 497 (1853).
- [124] M. Cutler and N. F. Mott, Phys. Rev. **181**, 1336 (1969).
- [125] L. D. Hicks and M. S. Dresselhaus, Phys. Rev. B **47**, 16631 (1993).
- [126] W. J. Beenakker and A. A. M. Staring, Phys. Rev. B **46**, 9667 (1992).
- [127] Y. M. Blanter, C. Bruder, R. Fazio, and H. Schoeller, Phys. Rev. B **55**, 4069 (1997).
- [128] M. Turek and K. A. Matveev, Phys. Rev. B **65**, 115332 (2002).
- [129] J. Koch, F. von Oppen, Y. Oreg, and E. Sela, Phys. Rev. B **70**, 195107 (2004).
- [130] B. Kubala and J. König, Phys. Rev. B **73**, 195316 (2006).
- [131] X. Zianni, Phys. Rev. B **75**, 045344 (2007).
- [132] X.-M. Zhang, X. Chen, W. Lu, Phys. Lett. A **372**, 2816 (2008).
- [133] B. Kubala, J. König, and J. Pekola, Phys. Rev. Lett. **100**, 066801 (2008).
- [134] P. Murphy, S. Mukerjee, and J. Moore, Phys. Rev. B **78**, 161406(R) (2008).
- [135] R. Venkatasubramanian, Recent Trends in Thermoelectric Materials Research III, Semiconductors and Semimetals Vol. 71 (Academic Press, New York, 2001), pp. 175–201; G. Chen, Recent Trends in Thermoelectric Materials Research III, Semiconductors and Semimetals Vol. 71 (Academic, New York, 2001), pp. 203–259.
- [136] P. Reddy, S. Y. Jang, R. A. Segalman, and A. Majumdar, Science **315**, 1568 (2007).
- [137] A. I. Hochbaum, R. Chen, R. D. Delgado, W. Liang, E. C. Garnett, M. Najarian, A. Majumdar, and P. Yang, Nature (London) **451**, 163 (2008).
- [138] K. Baheti, J. A. Malen, P. Doak, P. Reddy, S. Y. Jang, T. D. Tilley, A. Majumdar, and R. A. Segalman, Nano Lett. **8**, 715 (2008).
- [139] A. I. Boukai, Y. Bunimovich, J. Tahir-Kheli, J. K. Yu, W. A. Goddard III, and J. R. Heath, Nature (London) **451**, 168 (2008).
- [140] K. Schwab, E. A. Henriksen, J. M. Worlock, and M. L. Roukes, Nature (London) **404**, 974 (2000).
- [141] L. G. C. Rego and G. Kirczenow, Phys. Rev. Lett. **81**, 232 (1998).
- [142] Y. Dubi and M. Di Ventra, Nano Lett. **9**, 97 (2009).
- [143] R. Świrkowicz, M. Wierzbicki, and J. Barnaś, Phys. Rev. B **80**, 195409 (2009).

- [144] T. Markussen, A. P. Jauho, and M. Brandbyge, Phys. Rev. B **79**, 035415 (2009).
- [145] M. Galperin, A. Nitzan, and M. A. Ratner, Mol. Phys. **106**, 397 (2008).
- [146] A. M. Lunde, K. Flensberg, and L. I. Glazman, Phys. Rev. Lett. **97**, 256802 (2006).
- [147] D. Segal, Phys. Rev. B **72**, 165426 (2005).
- [148] F. Pauly, J. K. Viljas, and J. C. Cuevas, Phys. Rev. B **78**, 035315 (2008).
- [149] D. Boese and R. Fazio, Europhys. Lett. **56**, 576 (2001).
- [150] B. Dong and X. L. Lei, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 11747 (2002).
- [151] M. Krawiec and K. I. Wysokinski, Phys. Rev. B **73**, 075307 (2006).
- [152] R. Sakano, T. Kita, and N. Kawakami, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 074709 (2007).
- [153] R. Scheibner, H. Buchmann, D. Reuter, M. N. Kiselev, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. Lett. **95**, 176602 (2005).
- [154] R. Franco, J. Silva-Valencia, M.S. Figueira, J. Magn. Magn. Mater. **320**, 242 (2008).
- [155] M. Yoshida and L. N. Oliveira, Physica B **404**, 3312 (2009).
- [156] T. A. Costi and V. Zlatić, Phys. rev. B **81**, 235127 (2010).
- [157] M. Wierzbicki and R. Świrkowicz, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 185302 (2010).
- [158] J. Liu, Q.-F. Sun, and X. C. Xie, Phys. Rev. B **81**, 245323 (2010).
- [159] D. M.-T. Kuo, Jpn. J. Appl. Phys. **48**, 125005 (2009).
- [160] Z.-Y. Zhang, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 086214 (2007).
- [161] Y. S. Liu and X. F. Yang, J. Appl. Phys. **108**, 023710 (2010).
- [162] J. M. Ziman, *Electrons and Phonons. The Theory of Transport Phenomena in Solids* (Oxford University Press, 1960).
- [163] M. Galperin, A. Nitzan, and M. A. Ratner, Phys. Rev. B **75**, 155312 (2007).
- [164] J.-S. Wang, J. Wang, and J. T. Lü, Eur. Phys. J. B **62**, 381 (2008).
- [165] Y. Dubi, and M. Di Ventra, *Preprint* cond-mat/0910.0425v2
- [166] P. M. Fishbane, S.G. Gasiorowicz, S. T. Thornton, *Physics For Scientists and Engineers with Modern Physics*, Pearson Education, Inc., Third Edition (2005).
- [167] H. Qin, F. Simmel, R. H. Blick, J. P. Kotthaus, W. Wegscheider, and M. Bichler, Phys. Rev. B **63**, 035320 (2001).
- [168] R.W. Simmonds, K.M. Lang, D. A. Hite, S. Nam, D. P. Pappas, and J. M. Martinis, Phys. Rev. Lett. **93**, 077003 (2004).
- [169] F. H. L. Koppens, C. Buizert, K. J. Tielrooij, I. T. Vink, K. C. Nowack, T. Meunier, L. P. Kouwenhoven, L. M. K. Vandersypen, Nature **442**, 756 (2006).
- [170] Y. M. Galperin, D. V. Shantsev, J. Bergli, and B. L. Altshuler, Europhys. Lett. **71**, 21 (2005).
- [171] F. Meier and D. Loss, Phys. Rev. B **71**, 094519 (2005).
- [172] J. C. Egues, C. Gould, G. Richter, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. B **64**, 195319 (2001).
- [173] L. -C. Ku and C. C. Yu, Phys. Rev. B **72**, 024526 (2005).

- [174] J. A. Gupta, D. D. Awschalom, X. Peng, and A. P. Alivisatos, Phys. Rev. B **59**, R10421 (1999).
- [175] A. Greulich, M. Wiemann, F. G. G. Hernandez, D. R. Yakovlev, I. A. Yugova, M. Bayer, A. Shabaev, Al. L. Efros, D. Reuter, and A. D. Wieck, Phys. Rev. B **75**, 233301 (2007).
- [176] A. Greulich, R. Oulton, E. A. Zhukov, I. A. Yugova, D. R. Yakovlev, M. Bayer, A. Shabaev, Al. L. Efros, I. A. Merkulov, V. Stavarache, D. Reuter, and A. Wieck, Phys. Rev. Lett. **96**, 227401 (2006).
- [177] N. S. Wingreen, A. -P. Jauho, and Y. Meir, Phys. Rev. B **48**, 8487(R) (1993).
- [178] F. M. Souza, Phys. Rev. B **76**, 205315 (2007).
- [179] E. Perfetto, G. Stefanucci, and M. Cini, Phys. Rev. B **78**, 155301 (2008).
- [180] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London Ser. A **285**, 542 (1965).
- [181] Z. Zou, P. W. Anderson, Phys. Rev. B **37**, 627 (1988).
- [182] J.C. Le Guillou, E. Ragoucy, Phys. Rev. B **52**, 2403 (1995).
- [183] J. H. Davies , S. Hershfield, P. Hyldgaard, and J. W. Wilkins, Phys. Rev. B **47**, 4603 (1993).
- [184] A. R. Hernández, F. A. Pinheiro, C. H. Lewenkopf, and E. R. Mucciolo, Phys. Rev. B **80**, 115311 (2009).
- [185] J. M. Elzerman, R. Hanson, L. H. Willems van Beveren, B. Witkamp, L. M. K. Vandersypen, and L. P. Kouwenhoven, Nature (London) **430**, 431 (2004).
- [186] A. C. Johnson, J. R. Petta, J. M. Taylor, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, Nature 435, **925** (2005).
- [187] F. H. L. Koppens, K. C. Nowack, and L. M. K. Vandersypen, Phys. Rev. Lett. **100**, 236802 (2008).
- [188] S. Amasha, K. MacLean, I. P. Radu, D. M. Zumbühl, M. A. Kastner, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett. **100**, 046803 (2008).
- [189] J.E. Hirsch, Phys. Rev. Lett. **83**, 1834 (1999).
- [190] P. Sharma and P. W. Brouwer, Phys. Rev. Lett. **91**, 166801 (2003).
- [191] D.-K. Wang, Q.-F. Sun, and H. Guo, Phys. Rev. B **69**, 205312 (2004).
- [192] E. R. Mucciolo, C. Chamon, and C. M. Marcus, Phys. Rev. Lett. **89**, 146802 (2002).
- [193] S. K. Watson, R.M. Potok, C.M. Marcus, and V. Umansky, Phys. Rev. Lett. **91**, 258301 (2003).
- [194] S. M. Frolov, A. Venkatesan, W. Yu, and J. A. Folk, and W. Wegscheider, Phys. Rev. Lett. **102**, 116802 (2009).
- [195] S. M. Frolov, S. Lüscher, W. Yu, Y. Ren, J. A. Folk, and W. Wegscheider, Nature **458**, 868 (2009).
- [196] R. Świrkowicz, J. Barnaś, and M. Wilczyński, J. Magn. Magn. Mater. **321**, 2414 (2009).
- [197] Y. J. Bao, N. H. Tong, Q. -F. Sun, and S. Q. Shen, Europhys. Lett. **83**, 37007 (2008).
- [198] B. Dong, H. L. Cui, and X. L. Lei, Phys. Rev. B **69**, 035324 (2004).
- [199] B. Dong, I. Djuric, H. L. Cui, and X. L. Lei, J. Phys.: Condens. Matter **16**, 4303 (2004).
- [200] J.S. Langer, V. Ambegaokar, Phys. Rev. **121**, 1090 (1961).

- [201] A.L. Yeyati, M. Büttiker, Phys. Rev. B **62**, 7307 (2000).
- [202] C. Lacroix, J. Appl. Phys **53**, 2131 (1982).
- [203] T. A. Costi, J. Phys. C: Solid State Phys. **19**, 5665 (1986).
- [204] T. Lobo, M.S. Figueira, R. Franco, J. Silva-Valencia, and M.E. Foglio, Physica B **398**, 446 (2007).
- [205] H.-G. Luo, J.-J. Ying, and S.-J. Wang, Phys. Rev. B **59**, 9710 (1999).
- [206] T. Lobo, M. S. Figueira, and M. E. Foglio, Nanotechnology **17**, 6016 (2006); *ibid* **21**, 274007 (2010).
- [207] C. Lacroix, J. Phys. F: Metal Phys. **11**, (1981), 2389.

Lista publikacji

- [1] P. Trocha, *The influence of spin-flip scattering on the preparation and detection of a single spin state in a quantum dot attached to a spin battery*, Sol. Stat. Com. **151**, 725 (2011) (IF - 1.837).
- [2] P. Trocha, *Beating in electronic transport through quantum dot based devices*, Phys. Rev. B. **82**, 115320 (2010) (IF - 3.475).
- [3] P. Trocha, *Orbital Kondo effect in double quantum dots*, Phys. Rev. B. **82**, 125323 (2010) (IF - 3.475).
- [4] P. Trocha, J. Barnaś, *Kondo - Dicke resonances in electronic transport through double quantum dots*, J. Nanosci. Nanotechnol. **10** 2489 (2010) (IF - 1.987).
- [5] P. Trocha, J. Barnaś, *Resonances in electronic transport through systems of coupled quantum dots*, J. Non- Cryst. Sol. **356**, 1875 (2010), (IP - 1.572).
- [6] P. Trocha, I. Weymann, J. Barnaś, *Negative tunnel magnetoresistance and differential conductance in transport through double quantum dots*, Phys. Rev. B. **80**, 165333 (2009), (IF- 3.475).
- [7] P. Trocha, J. Barnaś, *Kondo-Dicke resonances in electronic transport through triple quantum dots*, Phys. Rev. B **78**, 075424 (2008), (IF - 3.475)
- [8] P. Trocha, J. Barnaś, *Dicke - like effect in spin - polarized transport through coupled quantum dots*, J. Phys.: Condens. Matter. **20**, 125220 (2008), (IF - 1.964).
- [9] P. Trocha, J. Barnaś, *Spin-polarized transport through two quantum dots: interference and Coulomb correlation effects*, Mat. Sci. (Poland) **26**, 707 (2008), (IF - 0.368).
- [10] 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), (IF - 3.475).
- [11] P. Trocha, J. Barnaś, *Role of interference and Coulomb correlation effects in spin - polarized transport through coupled quantum dots*, Phys. Stat. Sol. b **244**, 2553 (2007), (IF - 0.836).
- [12] P. Trocha, J. Barnaś, *Interference and Coulomb correlation effects in spin - polarized transport through coupled quantum dots*, Mat. Sci. (Poland) **25**, 545 (2007), (IF - 0.334).
- [13] P. Trocha, J. Barnaś, *Coherent transport through systems of coupled quantum dots*, Acta Phys. Pol. A **112**, 473 (2007), (IF - 0.340).
- [14] J. Barnaś, I. Weymann, P. Trocha, S. Krompiewski, V. Dugaev, *Spin and charge transport through quantum dots and molecules*, J. Phys.: Conf. Ser. **104**, 012016 (2007).
- [15] P. Trocha, J. Barnaś, *Spin - polarized resonant tunneling through two coupled quantum dots*, Phys. Stat. Sol. c **3**, 113 (2006).
- [16] P. Trocha, *The role of the indirect tunneling processes and asymmetry in couplings in orbital Kondo transport through double quantum dots*, w przygotowaniu.
- [17] P. Trocha, J. Barnaś, *Enhancement of thermoelectric effects in double quantum dots due to interference and Coulomb correlation phenomena*, w przygotowaniu.

- [18] P. Trocha, J. Barnaś, *Andreev transport through double quantum dots coupled to ferromagnetic and superconducting leads* , w przygotowaniu.