

电声子耦合对量子点非平衡输运的影响*

陈佐子 卢海舟 吕 嵘 朱邦芬†

(清华大学高等研究中心, 清华大学物理系, 北京 100084)

摘要: 电子-声子耦合显著影响半导体量子点和单分子晶体管的非平衡输运. 在非平衡格林函数运动方程方法的框架内, 通过改进电声子解耦, 发现低温下量子点谱函数中声子伴带明显依赖于两边电极费米能级与重整后局域能级的相对位置, 呈现电子-空穴对称性破缺. Kondo 峰的声子伴带分为两类, 分别与由电子或空穴组成的多体自旋单态相对应. 当局域能级存在 Zeeman 分裂时, 两类不同起源的 Kondo 声子伴带在自旋分辨的谱函数中可以相互区分. 谱函数的这些特性也体现在非线性微分电导谱中.

关键词: 量子点; 电声子作用; 谱函数; Kondo 声子伴带

PACC: 7138; 7215Q; 7220H

中图分类号: O469 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-4177(2006)S0-0044-05

1 引言

已经可以在实验室中制备出各种量子点(QD), 包括近年来发展的基于单个分子的单分子晶体管(SMT). 在 SMT 及某些半导体 QD 中, 除了电子-电子库仑相互作用之外, 还存在较强的电-声子相互作用(EPI). 这些量子点体系中曾多次观测到明显的电-声子耦合效应^[1], 包括最近在 SMT 的非平衡输运实验中测量到的 Kondo 峰声子伴带结构^[2]. 迄今已有不少关于量子点输运声子伴带的理论工作, 然而采用不同的理论方法和近似往往得到不同的结果^[3,4]. 虽然数值重整化方法可以定量地描述系统的平衡性质, 但它并不适合直接应用于 Kondo 峰声子伴带这样的非平衡输运系统. 目前 Keldysh 非平衡格林函数方法可以较好地处理非平衡问题, 然而通常在用费曼图展开或自洽玻恩近似求解时往往会涉及一些比较复杂的自洽积分, 计算量较大. 本文将采用一种图像清晰且相对简易的方法, 即结合改进后的正则变换方法和非平衡格林函数运动方程方法, 研究量子点非平衡输运中的电-声子作用的效应.

2 理论计算

通常, 孤立量子点用一个局域能级 ϵ_σ 表示, 量子点通过隧穿与两边电极(费米能级 $\mu_{L(R)}$) 耦合, 系统哈密顿量可由 Anderson-Holstein 模型描述^[4].

隧穿电流可以通过局域电子的谱函数 $A_\sigma(\omega)$ 和 lesser 格林函数 $G_\sigma^<(\omega)$ 求出, 具体的推导和细节可参见文献[5]. 对哈密顿量作正则变换得到 $\bar{H} \equiv e^S H e^{-S} = \bar{H}_{ph} + \bar{H}_{el}$, 其中声子部分为 $\bar{H}_{ph} = \hbar\omega_0 a^\dagger a$, 电子部分为

$$\bar{H}_{el} = \sum_{ak\sigma} \epsilon_{ak} c_{ak\sigma}^\dagger c_{ak\sigma} + \sum_{\sigma} \bar{\epsilon}_{\sigma} n_{\sigma} + \bar{U}_0 n_{\uparrow} n_{\downarrow} + \sum_{ak\sigma} (\bar{V}_{ak} c_{ak\sigma} d_{\sigma} + h. c.) \quad (1)$$

由于电-声子耦合, \bar{H}_{el} 中的各个参数分别被重整化为 $\bar{\epsilon}_{\sigma} = \epsilon_{\sigma} - g\omega_0$, $\bar{U}_0 = U_0 - 2g\omega_0$, $\bar{V}_{ak} = V_{ak} X$, 其中 $g \equiv (\lambda/\omega_0)^2$, $X \equiv \exp[-(\lambda/\omega_0)(a^\dagger - a)]$, λ 为电声子耦合强度. 在局域极化子条件下, 对声子算符 X 做平均场近似, 令 $X = \langle X \rangle$, 则 \bar{H}_{el} 与声子算符解耦, 因而局域电子的 lesser 和 greater 格林函数可以严格展开为^[3]

$$G_{\sigma}^{>(<)}(\omega) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} L_n \bar{G}_{\sigma}^{>(<)}(\omega \mp n\omega_0) \quad (2)$$

其中 $\bar{G}_{\sigma}^{>(<)}$ 是和 \bar{H}_{el} 对应的缀饰格林函数. 求出 $G_{\sigma}^{>(<)}$ 后, 即可得到局域电子谱函数 $A_{\sigma}(\omega) = i(G_{\sigma}^{>}(\omega) - G_{\sigma}^{<}(\omega))$. 此外, 通过 $A_{\sigma}(\omega) = i(G_{\sigma}^r(\omega) - G_{\sigma}^a(\omega))$, 也可求出谱函数. 然而, 如果按通常的方法对 $G_{\sigma}^{r(a)}(\omega)$ 解耦^[6], 忽略了声子布居数 N_{ph} 与 $N_{ph} + 1$ 的区别, 这种近似只在较高温度下才成立. 因而, 高温下两种格林函数的解耦方式所得结果相近, 但在低温下, 原先的解耦方式甚至可能得到错误的结果.

$\bar{G}_{\sigma}^{>(<)}$ 可以通过非平衡格林函数运动方程方法

* 国家自然科学基金(批准号: 10374056, 10574076)和国家重点基础研究发展规划(批准号: 2001CB610508)资助项目

† 通信作者. Email: bfz@tsinghua.edu.cn

2005-11-29 收到

求出^[4]. 在求解运动方程时, 通常的截断近似只在 Kondo 温度 T_K 以上有效^[7], 而在 T_K 以下可以采用由 Lacroix 所提出的截断方法^[8]. 对于当前情况, 需要把 Lacroix 方法进一步推广到非平衡, 有限 Zeeman 分裂和 U_0 的情况. 所以, 必须保留通常忽略掉的一些高阶推迟格林函数, 并近似分解, 如 $\langle\langle d_\sigma c_{ak\bar{\sigma}}^\dagger c_{a'k'\sigma}^\dagger, d_\sigma \rangle\rangle = \langle d_\sigma c_{ak\bar{\sigma}}^\dagger \rangle \langle\langle c_{a'k'\sigma}^\dagger, d_\sigma \rangle\rangle$ 等等, 其中的矩阵元则需要通过相应的非平衡格林函数自洽定出.

3 结果与讨论

图 1 给出了在无在位库仑排斥 U_0 时局域电子谱函数的四种典型构型. 结果表明低温下, 即使电声子相互作用强度和温度不变, 只改变 $\mu_{L(R)}$ 与 $\bar{\epsilon}_0$ 之间的相对位置, 局域电子谱函数中的声子伴带谱型

也有很大改变. 例如, 图 1(a) 中声子伴带对于主共振峰对称分布, 每个声子峰的谱形都有不连续的跳变; 图 1(b) 中声子伴带依然对于主峰左右对称分布, 但是声子峰的谱型却变成光滑的洛仑兹线型; 图 1(c) 与图 1(d) 中, 虽然声子伴带都是洛仑兹线型, 但它们只在主峰的某一侧出现. 谱函数声子伴带的这种特性是隧穿耦合和局域电-声子耦合在低温下共同作用的具体体现. 由于隧穿, 局域能级上电子与空穴可以并存, 它们之间的比例和分界由 $\mu_{L(R)}$ 与 $\bar{\epsilon}_0$ 之间的相对位置控制; 此外, 零温下, 电子和空穴都只能发射声子, 电子贡献主峰以下的声子伴带, 空穴贡献主峰以上的声子伴带, 所以低温下谱函数声子伴带的分布能够体现出量子点中电子-空穴对称性破缺情况.

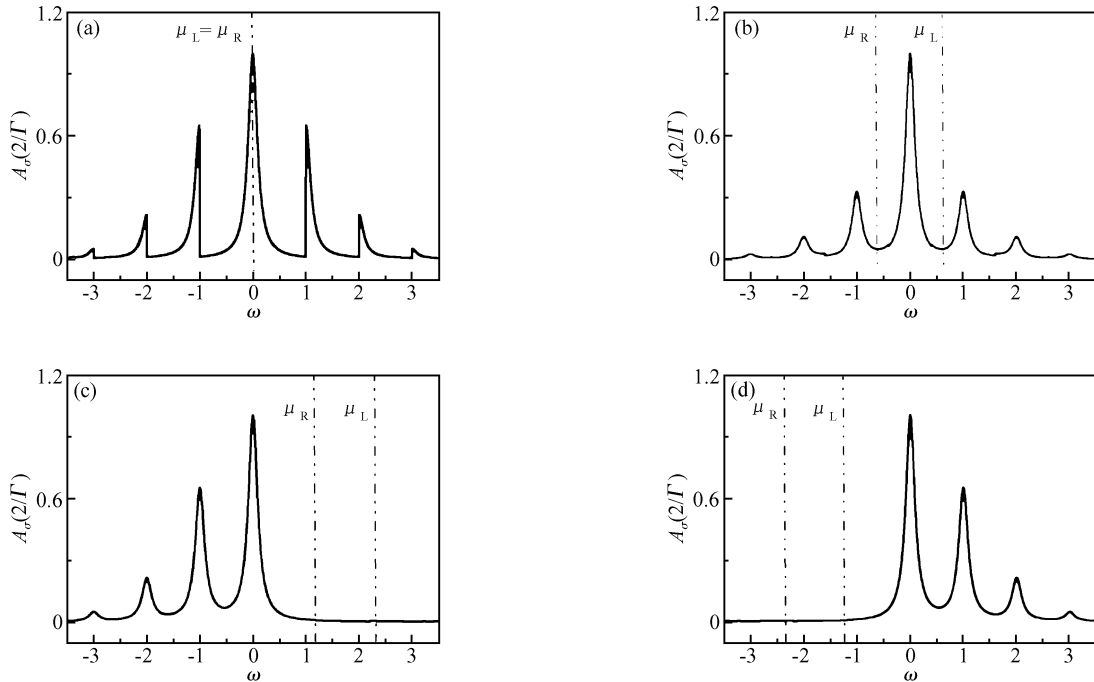


图 1 四种典型构型下的局域电子谱函数 $A_\sigma(\omega)$ (a) $eV_{\text{mid}} = \bar{\epsilon}_0, eV_{\text{bias}} = 0$; (b) $eV_{\text{mid}} = \bar{\epsilon}_0, eV_{\text{bias}} = 1.2\omega_0$; (c) $eV_{\text{mid}} = \bar{\epsilon}_0 + 1.8\omega_0, eV_{\text{bias}} = 1.2\omega_0$; (d) $eV_{\text{mid}} = \bar{\epsilon}_0 - 1.8\omega_0, eV_{\text{bias}} = 1.2\omega_0$ 其中 $eV_{\text{mid}} = (\mu_L + \mu_R)/2, eV_{\text{bias}} = \mu_L - \mu_R, \bar{\epsilon}_0 = (\epsilon_\uparrow + \epsilon_\downarrow)/2 = 0, \Gamma_{L(R)} = 0.2\omega_0, \lambda = 0.8\omega_0, T = 0, \bar{U}_0 = 0$.

Fig.1 Typical spectral functions $A_\sigma(\omega)$ in the absence of the Coulomb interaction, $\bar{U}_0 = 0$ (a) $eV_{\text{mid}} = \bar{\epsilon}_0, eV_{\text{bias}} = 0$; (b) $eV_{\text{mid}} = \bar{\epsilon}_0, eV_{\text{bias}} = 1.2\omega_0$; (c) $eV_{\text{mid}} = \bar{\epsilon}_0 + 1.8\omega_0, eV_{\text{bias}} = 1.2\omega_0$; (d) $eV_{\text{mid}} = \bar{\epsilon}_0 - 1.8\omega_0, eV_{\text{bias}} = 1.2\omega_0$ Here $eV_{\text{mid}} = (\mu_L + \mu_R)/2, eV_{\text{bias}} = \mu_L - \mu_R, \bar{\epsilon}_0 = 0, \omega_0 = 1, \Gamma = 0.2\omega_0, \lambda = 0.8\omega_0, T = 0,$ and $\bar{U}_0 = 0$.

图 2 给出了与图 1 相应的微分电导随 V_{mid} 或 V_{bias} 的变化关系. 图中每个微分电导峰对应某个费米面与其中一个谱函数峰对齐的结果. 可以看到微分电导中第 n 阶声子峰只有当两边电极偏压超过 n 个声子能量后才出现, $eV_{\text{bias}} \geq n\omega_0$. 这是谱函数对费米面依赖性的具体体现. 需要指出的是, 如果采用通

常的解耦方法, 所得的谱函数并不依赖 $\mu_{L(R)}$, 且算出的微分电导即便在零偏压下也存在声子峰. 考虑到零温和零偏压下电子既不能吸收也不能发射声子, 不会发生声子辅助隧穿过程, 所以本文结果更为合理.

图 3 给出了有效库仑排斥势 $U_0 > 0$, 且量子点

处在 Kondo 区时的自旋分辨的谱函数. 电声子相互作用的引入使得 Kondo 峰劈裂为一系列位于 $\mu_{L(R)} \pm n\omega_0$ 的 Kondo 声子伴带. Kondo 主峰两侧的 Kondo 声子伴带之间有较大差别. 逐渐增大局域能级的 Zeeman 劈裂 Δ 时, $A_\downarrow(\omega)$ 中所有 Kondo 峰都往低能处移动并有所减弱, 而 $A_\uparrow(\omega)$ 中所有

Kondo 峰则往相反方向移动. 由于 Kondo 主峰两侧的 Kondo 伴带随着 Δ 增大衰减的速度差别较大, 导致在适当的 Δ 下, 自旋向下(上)的谱函数中 Kondo 伴带只在 Kondo 主峰以下(上)出现. 两边电极加上偏压后, 每个 Kondo 峰被进一步分裂成两个较小的子峰, 分别对应左右两个费米面的贡献.

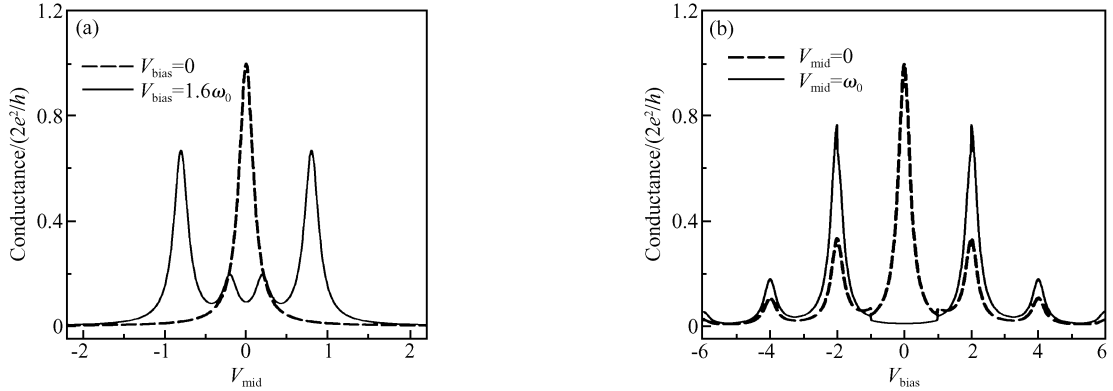


图 2 $\bar{U}_0 = 0$ 时的微分电导谱 (a) V_{bias} 固定, 改变 V_{mid} ; (b) V_{mid} 固定, 改变 V_{bias} 其余参数如图 1.

Fig.2 Differential conductance at $\bar{U}_0 = 0$ (a) Varying V_{mid} for fixed V_{bias} ; (b) Varying V_{bias} for fixed V_{mid} The rest of the parameters are the same as in Fig.1.

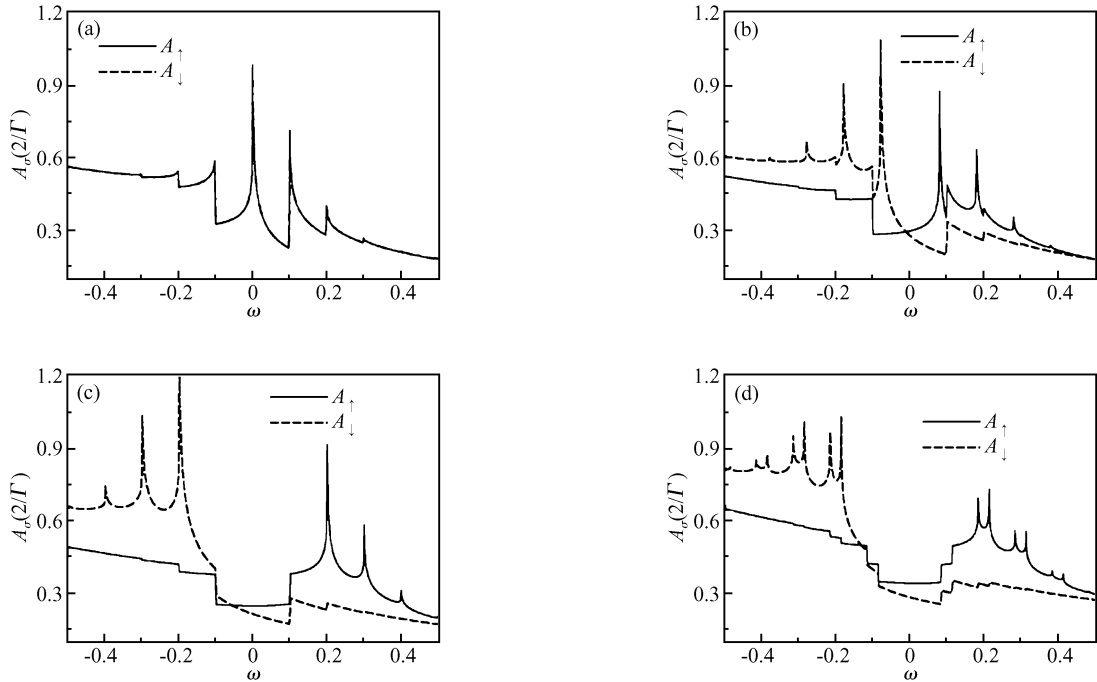


图 3 有 Kondo 效应时不同 Zeeman 劈裂和偏压下自旋分辨的电子谱函数 $A_s(\omega)$ (a) $\Delta = 0, eV_{\text{bias}} = 0$; (b) $\Delta = 0.08\Gamma, eV_{\text{bias}} = 0$; (c) $\Delta = 0.2\Gamma, eV_{\text{bias}} = 0$; (d) $\Delta = 0.2\Gamma, eV_{\text{bias}} = 0.03\Gamma$ 其中 $eV_{\text{mid}} = 0, \bar{\epsilon}_0 = -2.5\Gamma, \omega_0 = 0.1, \Gamma_{L(R)} = 1, g = 0.6, T = 0.0002\Gamma, U_0 = 100\Gamma$.

Fig.3 Effect of Zeeman splitting and bias voltage on the spin-resolved spectral function $A_s(\omega)$ when the Kondo effect is taken into account (a) $\Delta = 0, eV_{\text{bias}} = 0$; (b) $\Delta = 0.08\Gamma, eV_{\text{bias}} = 0$; (c) $\Delta = 0.2\Gamma, eV_{\text{bias}} = 0$; (d) $\Delta = 0.2\Gamma, eV_{\text{bias}} = 0.03\Gamma$ Here $eV_{\text{mid}} = 0, \omega_0 = 0.1\Gamma, \Gamma = 1, g = 0.6, T = 0.0002\Gamma, \bar{\epsilon}_0 = -2.5\Gamma, \text{ and } U_0 = 100\Gamma$.

Kondo 声子伴带的特性可以由一个直观物理图像来解释. 为简明起见, 先讨论 $\Delta=0$ 且 $\mu_L = \mu_R = \mu$ 的情况. 低温下当量子点中包含奇数个电子时, 未配对的局域电子会通过高阶隧穿过程和电极中 μ 以上的激发电子反铁磁耦合形成一个多体电子自旋单态, 在谱函数中引入一个钉扎在 μ 附近的 Kondo 共振峰. 要满足能量守恒, 只有在 $\mu + \omega_0$ 以上的激发电子才能通过发射一个声子来参与自旋交换过程, 所以在 $\mu + \omega_0$ 处可能出现 Kondo 峰的一个声子伴带. 同理, 未配对的局域空穴和 μ 以下的空穴激发态也会因反铁磁耦合引入一个位于 μ 的多体空穴自旋单态. 不过由它发射一个声子引进的声子伴带则位于 $\mu - \omega_0$. 由此可见, Kondo 声子伴带可以分为两类, Kondo 主峰以上的声子伴带起源于声子辅助的电子态之间的自旋交换过程, 而 Kondo 主峰以下的声子伴带则来自于声子辅助的空穴态之间的自旋交换过程. 这两种交换过程对 Kondo 主峰的贡献可以分

别通过 Kondo 主峰两边声子伴带得到. 因而, 图 3 表明, 当 Zeeman 分裂 $\Delta=0$ 时, 两种自旋交换过程共同对 Kondo 主峰起作用. 随着 Δ 增大, 这两种过程发生几率都在减少, 只是其中一种比另一种减少的更快. 当 Zeeman 分裂增到一定值时, 其中一种自旋交换过程可以被忽略, 而另一种仍有一定几率发生, 所以 $A_s(\omega)$ 中只看到一种 Kondo 声子伴带. 继续增加 Δ , 剩下的一种自旋交换过程也会消失, $A_s(\omega)$ 中将看不到任何 Kondo 峰.

图 4 给出了与图 3 相应的非线性微分电导. $\Delta=0$ 时, EPI 使得表征 Kondo 效应的零偏压反常峰 (ZPL) 分裂为一系列位于 $eV_{\text{bias}} = \pm n\omega_0$ 的子峰. $\Delta \neq 0$ 时, ZPL 进一步劈裂为两个位于 $eV_{\text{bias}} = \pm \Delta$ 的子峰, 同时各个声子峰也相应移动至 $eV_{\text{bias}} = \pm (\Delta + n\omega_0)$. 可以看到在 $-\Delta < eV_{\text{bias}} < \Delta$ 之间没有出现声子峰, 这正是有限 Zeeman 分裂下谱函数中 Kondo 声子伴带特性的具体体现.

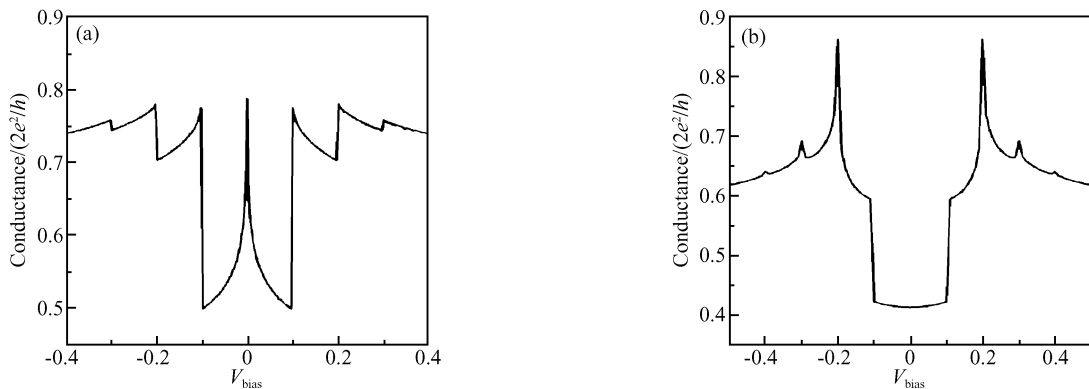


图 4 有 Kondo 效应时不同 Zeeman 劈裂下的非线性微分电导谱 (a) $\Delta=0$; (b) $\Delta=0.2\Gamma$ 其余参数如图 3.

Fig. 4 Effect of Zeeman splitting on the nonlinear differential conductance in the presence of Kondo effect (a) $\Delta=0$; (b) $\Delta=0.2\Gamma$ The rest of the parameters are the same as in Fig. 3.

4 结论

结合改进后的正则变换方法和非平衡格林函数运动方程方法, 本文着重讨论低温下量子点局域电子谱函数中声子伴带的特点以及它们在非平衡输运性质中的体现. 理论计算结果表明, 声子伴带的形状明显依赖于量子点中电子-空穴对称性破缺的情况. Kondo 主峰以上的 Kondo 声子伴带来源于声子辅助的电子自旋交换过程, 而 Kondo 主峰以下的 Kondo 声子伴带则来源于声子辅助的空穴自旋交换过程. 有限 Zeeman 分裂下的自旋分辨谱函数中这两类自旋交换过程可以相互区分. 谱函数的这些特性同时也反映在非线性微分电导中.

参考文献

- [1] Park H, Park J, Lim A K L, et al. Nanomechanical oscillations in a single- C_{60} transistor. *Nature (London)*, 2000, 407: 57
- [2] Yu L H, Keane Z K, Cizek J W, et al. Inelastic electron tunneling via molecular vibrations in single-molecule transistors. *Phys Rev Lett*, 2004, 93: 266802
- [3] Chen Z Z, Lü R, Zhu B F. Effects of electron-phonon interaction on nonequilibrium transport through a single-molecule transistor. *Phys Rev B*, 2005, 71: 165324
- [4] Chen Z Z, Lu H, Lü R, et al. Phonon-assisted Kondo effect in a single-molecule transistor out of equilibrium. *J Phys Condens Matter*, 2006, 18: 5435
- [5] Meir Y, Wingreen N S. Landauer formula for the current through an interacting electron region. *Phys Rev Lett*, 1992, 68: 2512
- [6] Zhu J X, Balatsky A V. Theory of current and shot-noise

- spectroscopy in single-molecular quantum dots with a phonon mode. Phys Rev B, 2003, 67: 165326
- [7] Meir Y, Wingreen N S, Lee P A. Low-temperature transport through a quantum dot: the Anderson model out of equilibrium. Phys Rev Lett, 1993, 70: 2601
- [8] Lacroix C. Density of states for the Anderson model. J Phys F: Metal Phys, 1981, 11: 2389

Effect of Electron-Phonon Interaction on Nonequilibrium Transport in Quantum Dot Systems*

Chen Zuozi, Lu Haizhou, Lü Rong, and Zhu Bangfen[†]

(Center for Advanced Study, Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: The electron-phonon interaction has important effects on the nonequilibrium transport through the semiconductor quantum dot (QD) or the single molecule transistor. Based on the improved electron-phonon disentangled scheme and the equation of motion approach of the nonequilibrium Green functions, it is found that at low temperature, the phonon sidebands in the spectral function are quite sensitive to the relative positions of the renormalized QD level and the Fermi levels in the leads, showing the broken particle-hole symmetry in the QD. The phonon satellites of the Kondo peak come from two types of spin exchange processes. In the presence of moderate Zeeman splitting, these two types of Kondo satellites can be recognized in the spin resolved spectral function. These features of the spectral functions will also manifest themselves in the non-linear differential conductance.

Key words: quantum dot; electron-phonon interaction; spectral function; Kondo-phonon satellite

PACC: 7138; 7215Q; 7220H

Article ID: 0253-4177(2006)S0-0044-05

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Nos. 10374056, 10574076) and the State Key Development Program for Basic Research of China (No. 2001CB610508)

[†] Corresponding author. Email: bfz@tsinghua.edu.cn

Received 29 November 2005