

外磁场作用下量子点热机

何济洲,张艳超,王秀梅

(南昌大学物理系,江西南昌 330031)

摘 要: 量子点热机是由两个温度和化学势都不同的热库与量子点构成的.基于随机主方程,我们推导出电子在两个热库之间传输的粒子流表达式,进一步计算出电子从两个热库中吸收的热量、热机的功率和效率.通过数值模拟可以画出功率与效率的性能特征曲线,分析了外磁场大小对热机性能的影响.最后,讨论了该热机在最大功率下的效率随两库温度比的关系,并与卡诺效率和 CA 效率比较.

关键词: 单电子隧穿;量子点热机;效率;非平衡和不可逆热力学

中图分类号: O469; TN37 **文献标识码:** A **文章编号:** 0372-2112 (2013) 06-1056-04

电子学报 URL: <http://www.ejournal.org.cn>

DOI: 10.3969/j.issn.0372-2112.2013.06.003

A Quantum Dot Thermoelectric Engine Under the Applied Magnetic Field

HE Ji-zhou, ZHANG Yan-chao, WANG Xiu-mei

(Department of Physics, Nanchang University, Nanchang, Jiangxi 330031, China)

Abstract: A quantum dot thermoelectric engine consists of a quantum dot embedded between two thermal reservoirs at different temperatures and chemical potentials. Based on stochastic master equation, the steady expressions for the particle current of tunneling electrons between two reservoirs are derived analytically. Moreover, the amount of heat extracted from the reservoirs per unit time, the power output and the efficiency are calculated. The performance characteristics curves between the power output and the efficiency are plotted by numerical simulation. The influence of the applied magnetic field on the performance characteristics of the engine is analyzed. Lastly, the variation of the corresponding efficiency at the maximum power output with the ratio of the temperatures between two reservoirs is discussed and the corresponding efficiency is compared with Carnot efficiency and CA efficiency.

Key words: single-electron tunneling; quantum dot thermoelectric engine; efficiency; nonequilibrium and irreversible thermodynamics

1 引言

近年来,纳米技术在实验方面取得的进展激发了人们对小尺寸系统的观察、控制和制造的潜能^[1,2].特别是把不同的异质结纳米材料应用到热电装置中,研究电子在异质结中传输所带来的热效应引起了人们的极大兴趣^[3~5],例如,超晶格^[6]、纳米线^[7~11]、纳米管^[12]和分子结^[13],等等.Humphrey T E 等人在分析可逆量子布朗电子热机时指出,任意温度和化学势的两个热库在电子费米分布相等的地方,它们之间的电子交换是可逆的;如果选择理想“能量过滤器”,电子热机的效率接近卡诺效率^[14,15].另外,在一维或者二维的热电子系统中,两个热库通过电子在一个能级被完全限制的通道内传输来实现能量的直接交换,整个过程中电子态密度变化比

较快,能大大地提高热效率,因此纳米热电材料在低维系统中的应用性较高^[16].最近,Esposito M 研究了零维度的量子点热电装置,指出该装置会得到更高的热电效率^[17,18].进一步,应用有限时间热力学理论,他们研究了单能级量子点热机的热力学性能特征和量子点卡诺循环热机在最大功率时的效率问题^[19,20].

众所周知,当没有外磁场时电子自旋向上、向下的两个状态是作简并的;当系统中加一个外磁场时,电子的自旋简并态将被破坏,能级分裂成两个非简并的能级,两个能级的宽度由磁场强度来决定.本文将在前人研究基础上,考虑在外加磁场作用下单能级量子点热机的性能特征.基于随机主方程,在温度梯度和化学势梯度的驱动下,推导出电子在量子点和两个热库之间作随机性隧穿的粒子流和热流.通过数值模拟,我们分析了

外磁场强度对热机的功率与效率的影响,并与简并时单能级量子点热机、卡诺热机和内卡诺热机的性能做了对比.

2 模型和理论

量子点热机模型如图 1 所示:单能级量子点与两个温度和化学势都不相同的电子热库相连,且 $T_l < T_r, \mu_l > \mu_r$,热库中的电子服从费米分布. ϵ 是简并态的轨道能级, ϵ^+ 和 ϵ^- 是外磁场作用下的两个分裂能级. 不考虑电子的两个自旋态(自旋向上、向下)时,能量为 ϵ 的电子通过量子点由温度为 T_l 、化学势为 μ_l 的电子库隧穿到温度为 T_r 、化学势为 μ_r 的电子库中,或者沿着相反的方向隧穿. 当外加一个磁场时,两个电子的自旋简并态被破坏,简并电子的能量 ϵ 就分裂为两个能级 $\epsilon^\pm = \epsilon \pm g\mu_B\mu_0 H/2$,其中 g 为自旋因子, μ_B 为波尔磁子, μ_0 为真空磁导率, H 为磁场强度. 假设 P_0 为量子点中没有电子时的几率, P_+ 为量子点中具有能量为 ϵ^+ 的电子态的几率, P_- 为量子点中具有能量为 ϵ^- 的电子态几率. $\Gamma_{i \rightarrow j}$ 表示电子由 i 态到 j 态的跃迁几率. 基于随机主方程,电子通过量子点能级的整个隧穿过程中占有数几率随时间的演化可以表示为^[21]:

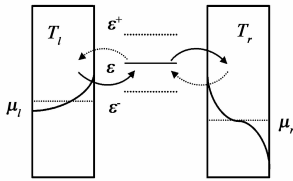


图1 量子点热机模型

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} P_0 \\ P_+ \\ P_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(A+B) & C & D \\ A & -C & 0 \\ B & 0 & -D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_0 \\ P_+ \\ P_- \end{pmatrix} \quad (1)$$

其中

$$A = \Gamma_{0 \rightarrow +} = \sum_v \gamma_v f_v^+$$

$$B = \Gamma_{0 \rightarrow -} = \sum_v \gamma_v f_v^-$$

$$C = \Gamma_{+ \rightarrow 0} = \sum_v \gamma_v (1 - f_v^+)$$

$$D = \Gamma_{- \rightarrow 0} = \sum_v \gamma_v (1 - f_v^-)$$

$$f_v^+ = \exp[(\epsilon^+ - \mu_v)/T_v + 1]^{-1}$$

$$f_v^- = \exp[(\epsilon^- - \mu_v)/T_v + 1]^{-1}$$

($v = l, r$), γ_v 为电子穿过两个热库时的裸穿几率(bare tunneling rate), f_v 为费米分布函数.

根据式(1),系统达到稳态时,电子处在各个态的占有数几率分别为:

$$P_0 = \frac{1}{1 + \frac{A}{C} + \frac{B}{D}}$$

$$P_+ = \frac{A}{C} P_0$$

$$P_- = \frac{B}{D} P_0 \quad (2)$$

那么,电子分别通过 ϵ^+ 和 ϵ^- 能级由温度为 T_l 、化学势为 μ_l 的电子库到温度为 T_r 、化学势为 μ_r 的电子库的粒子流为:

$$J_l^+ = \Gamma_{0 \rightarrow +} P_0 - \Gamma_{+ \rightarrow 0} P_+ \\ = \gamma_l [f_l^+ P_0 - (1 - f_l^+) P_+] \quad (3)$$

$$J_l^- = \Gamma_{0 \rightarrow -} P_0 - \Gamma_{- \rightarrow 0} P_- \\ = \gamma_l [f_l^- P_0 - (1 - f_l^-) P_-] \quad (4)$$

稳态时有 $J_r^+ = -J_l^+$, $J_r^- = -J_l^-$, J_r^+ 和 J_r^- 表示电子分别通过 ϵ^+ 和 ϵ^- 能级由温度为 T_r 、化学势为 μ_r 的电子库到温度为 T_l 、化学势为 μ_l 的电子库的粒子流. 根据开系热力学基本方程,单位时间内电子分别通过两个能级从温度为 T_r 、化学势为 μ_r 的电子库中吸收的热量分别为^[14]:

$$\dot{Q}_r^+ = (\epsilon^+ - \mu_r) J_r^+ \quad (5)$$

$$\dot{Q}_r^- = (\epsilon^- - \mu_r) J_r^- \quad (6)$$

电子分别通过两个能级向温度为 T_l 、化学势为 μ_l 的电子库释放的热量分别为:

$$\dot{Q}_l^+ = -(\epsilon^+ - \mu_l) J_l^+ \quad (7)$$

$$\dot{Q}_l^- = -(\epsilon^- - \mu_l) J_l^- \quad (8)$$

因此,该量子点热机的输出功率和效率分别为:

$$P = (\epsilon^+ - \mu_r) J_r^+ + (\epsilon^- - \mu_r) J_r^- \\ + (\epsilon^+ - \mu_l) J_l^+ + (\epsilon^- - \mu_l) J_l^- \quad (9)$$

$\eta =$

$$\frac{(\epsilon^+ - \mu_r) J_r^+ + (\epsilon^- - \mu_r) J_r^- + (\epsilon^+ - \mu_l) J_l^+ + (\epsilon^- - \mu_l) J_l^-}{(\epsilon^+ - \mu_r) J_r^+ + (\epsilon^- - \mu_r) J_r^-} \quad (10)$$

3 性能特征分析

为了分析量子点热机性能特征以及磁场强度对热机性能的影响,我们假设 $\gamma_l = \gamma_r = \gamma$, $g\mu_B\mu_0 H/2k = \Delta\epsilon_H, \Delta\epsilon_H$ 的大小代表磁场的强弱,单位为 K. 并设定参数 $T_l = 1\text{K}$, $T_r = 2\text{K}$, $\mu_l/k = 12\text{K}$, $\mu_r/k = 10\text{K}$ (k 为波尔兹曼常数, K 为绝对温度的单位).

在给定了以上参数的条件下,根据式(9)和(10),通过数值模拟可以分别画出在不同磁场强度的情况下,输出功率和效率随能量 ϵ 变化的特征曲线,如图 2 和 3 所示. 由图 2 可以看到,在磁场强度一定的条件下,功率随能量 ϵ 变化的曲线是一条抛物线,在 ϵ_p 处,功率取得最大值 P_m . 在没有外加磁场时,电子通过简并单个能级隧穿,在 $\epsilon < \epsilon_p$ 范围内,功率要大于有磁场的情况,在 $\epsilon > \epsilon_p$ 范围内,磁场强度对功率的影响不明显. 随着磁场

强度的增强,最大功率 P_m 逐渐减小,与之对应的 ϵ_p 值增大.

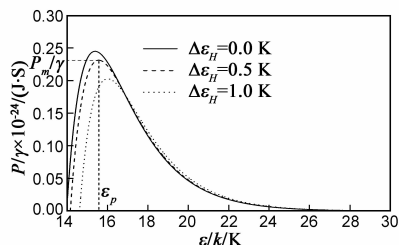


图2 在磁场强度取不同值时,功率随能量 ϵ/k 的变化曲线

由图3可以看出,在没有外加磁场的情况下,效率最大可以达到卡诺效 $\eta_C = 1 - T_l/T_r = 0.5$,随着能量 ϵ 的增大,效率单调性地减小;存在外磁场时,效率随着能量 ϵ 先增大后减小,在 ϵ_η 处,效率达到最大值 η_m ,随着磁场强度的增强,最大效率 η_m 减小,对应的 ϵ_η 值增大.

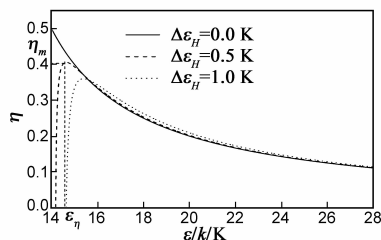


图3 在磁场强度取不同值时,效率随能量 ϵ/k 的变化曲线

从图2和图3可以发现,功率取最大值 P_m 和效率取最大值 η_m 时分别对应着不同的能量 ϵ_p 和 ϵ_η .为了更清楚地看出最大效率 η_m 、最大功率下的效率 η_p 、最大功率 P_m 和最大效率下的功率这些重要的优化性能参数的变化,我们画出了在相同的给定条件下功率随着效率变化的曲线,如图4所示.

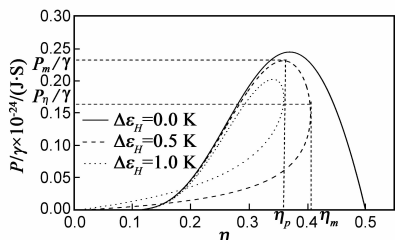


图4 在磁场强度取不同值时,功率随效率的变化曲线

从图4中可以看出:没有外加磁场的情况下,功率随效率的变化是一条非闭合的曲线,最大效率为卡诺效率 η_C ,对应零输出功率.当加上外磁场时,功率随效率的变化是一条闭合的曲线,最大功率 P_m 和最大功率对应的效率 η_p 以及最大效率 η_m 都随着磁场强度的增大而减小.我们把斜率为负值的区间: $P_\eta < P < P_m$, $\eta_p < \eta < \eta_m$ 称为热机的优化区间,随着磁场强度的增大,优化区间也逐渐减小.

4 最大输出功率时对应的效率

为了与卡诺热机效率进行比较,我们分析在不同场强大小的条件下量子点热机在最大输出功率下的效率随温度比 $(1 - \tau)$ 的变化情况, $\tau = T_l/T_r$,如图5所示,并与卡诺效率 $\eta_C = 1 - T_l/T_r$ 和 CA 效率 $\eta_{CA} = 1 - \sqrt{T_l/T_r}$ (内可逆卡诺热机最大功率下的效率^[22])比较.

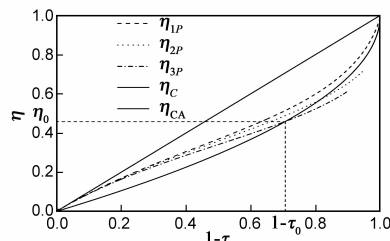


图5 在磁场强度取不同值时,最大功率下的效率随温度比 $(1-\tau)$ 的变化曲线

从图5可以发现,该量子点热机在最大输出功率时的效率小于卡诺效率 η_C ,在没有外加磁场的情况下,最大输出功率下的效率 $\eta_{1P} > \eta_{CA}$,图中第一条虚线所示;外磁场存在时,量子点热机存在一个温比范围,超过这个温度比范围,就失去热机的作用.随着磁场的增加,最大输出功率下的效率减少,图中第二条点线和第三条点虚线所示.当 $1 - \tau < 1 - \tau_0$ 时,最大输出功率时的效率大于 CA 效率, $1 - \tau > 1 - \tau_0$ 时,最大输出功率时的效率小于 CA 效率.

5 结论

本文应用电子通过量子点的随机传输理论,考虑了外加磁场对量子点热机性能特征的影响.结果发现:(1)在没有外加磁场,电子的自旋向上、向下看作是简并的时候,电子通过单个简并能级隧穿,功率随效率的变化是一条非闭合的曲线,最大效率可以达到卡诺效率,对应零输出功率,最大输出功率时的效率 $\eta_{1P} > \eta_{CA}$;

(2)当加上外磁场时,自旋简并被破坏,电子的单个能级分裂成两个能级,这时功率随效率的变化是一条闭合的曲线,最大功率 P_m 和最大功率对应的效率 η_p 以及最大效率 η_m 都随着磁场强度的增大而减小.当 $1 - \tau < 1 - \tau_0$ 时,最大输出功率时的效率大于 CA 效率, $1 - \tau > 1 - \tau_0$ 时,最大输出功率时的效率小于 CA 效率.

参考文献

- [1] Bustamante C, Liphardt J, Ritort F. The non-equilibrium thermodynamics of small systems[J]. Physics Today, 2005, 58(7): 43-48.
- [2] Muller D J, Dufrene Y F. Atomic force microscopy as a multi-

- functional molecular toolbox in nanobiotechnology[J]. Nature Nanotechnology, 2008, 3(5): 261 – 269.
- [3] Snyder G J, Toberer E S. Complex thermoelectric materials[J]. Nature Materials, 2008, 7(2): 105 – 114.
- [4] Pichanusakorn P, Bandaru P. Nanostructured thermoelectrics[J]. Materials Science & Engineering R-Reports, 2010, 67(2 – 4): 19 – 63.
- [5] Majumdar A. Thermoelectricity in semiconductor nanostructures[J]. Science, 2004, 303(5659): 777 – 778.
- [6] Harman T C, Taylor P J, Walsh M P, Laforge B E. Quantum dot super lattice thermoelectric materials and devices[J]. Science, 2002, 297(5590): 2229 – 2232.
- [7] Boukai A I, Bunimovich Y, Tahir-Kheli J, Yu J K, Goddard W A, Heath J R. Silicon nanowires as efficient thermoelectric materials[J]. Nature, 2008, 451(7175): 168 – 171.
- [8] Heremans J P, Jovovic V, Toberer E S, et al. Enhancement of thermoelectric efficiency in PbTe by distortion of the electronic density of states[J]. Science, 2008, 321(5888): 554 – 558.
- [9] 贺兵香, 何济洲. 双势垒 InAs/InP 纳米线异质结热电子制冷机[J]. 物理学报, 2010, 59(6): 3846 – 3850.
He B X, He J Z. Thermoelectric refrigerator of double-barrier InAs/InP nanowire structure[J]. Acta Physica Sinica, 2010, 59(6): 3846 – 3850. (in Chinese)
- [10] 贺兵香, 何济洲, 缪贵玲. 纳米线异质结构对电子制冷机性能的影响[J]. 物理学报, 2011, 60(4): 040509-1 – 040509-5.
He B X, He J Z, Miao G L. Influence of the nanowire heterostructure on the performance of an electron refrigerator[J]. Acta Physica Sinica, 2011, 60(4): 040509-1 – 040509-5. (in Chinese)
- [11] 王小敏, 何济洲, 王建辉. 能量选择性电子热机和制冷机的性能特征分析[J]. 电子学报, 2008, 36(11): 2178 – 2184.
Wang X M, He J Z, Wang J H. Analysis of performance characteristics of the energy selective electron heat engine and refrigerator[J]. Acta Electronica Sinica, 2008, 36(11): 2178 – 2184. (in Chinese)
- [12] Small J P, Perez K M, Kim P. Modulation of thermoelectric power of individual carbon nanotubes[J]. Physical Review Letters, 2003, 91(25): 256801-1 – 256801-4.
- [13] Reddy P, Jang S Y, Segalman R, Majumdar A. Thermoelectricity in molecular junctions[J]. Science, 2007, 315(5818): 1568 – 1570.
- [14] Humphrey T E, Newbury R, Taylor R P, Linke H. Reversible quantum Brownian heat engines for electrons[J]. Physical Review Letters, 2002, 89(11): 116801-1 – 116801-7.
- [15] Humphrey T E, Linke H. Reversible thermoelectric nanomaterials[J]. Physical Review Letters, 2005, 94(9): 096601-1 – 1096601-4.
- [16] Hicks L D, Dresselhaus M S. Thermoelectric figure of merit of a one-dimensional conductor[J]. Physical Review B, 1993, 47(24): 16631 – 16634.
- [17] Esposito M, Lindenberg K, Van den Broeck C. Thermoelectric efficiency at maximum power in a quantum dot[J]. Europhysics Letters, 2009, 85(6): 60010-1 – 60010-4.
- [18] Esposito M, Lindenberg K. Universality of efficiency at maximum power[J]. Physical Review Letters, 2009, 102(13): 130602-1 – 130602-4.
- [19] Esposito M, Kawai R, Lindenberg K, Van den Broeck C. Finite-time thermodynamics for a single-level quantum dot[J]. Europhysics Letters, 2010, 89(2): 20003-1 – 20003-7.
- [20] Esposito M, Kawai R, Lindenberg K, Van den Broeck C. Quantum-dot Carnot engine in maximum power[J]. Physical Review E, 2010, 81(4): 041106-1 – 041106-6.
- [21] Bonet E, Deshmukh M M, Ralph D C. Solving rate equations for electron tunneling via discrete quantum states[J]. Physical Review B, 2002, 65(4): 045317-1 – 045317-10.
- [22] Curzon F, Ahlborn B. Efficiency of a Carnot engine at maximum power output[J]. American Journal of Physics, 1975, 43(1): 22 – 26.

作者简介



何济洲 男, 1962 年 10 月出生于江西东乡. 2003 年毕业于厦门大学物理系凝聚态物理专业, 获理学博士学位. 现为南昌大学物理系教授、博导, 江西省高校学科带头人. 主要从事凝聚态理论、现代热力学理论、统计物理的若干前沿课题和新材料的热学性质、开发应用的研究.

E-mail: hjzhou@ncu.edu.cn



张艳超 男, 1987 年 3 月出生于内蒙古赤峰市. 2011 年毕业于南昌大学物理系应用物理专业, 获理学学士学位. 现为南昌大学凝聚态物理专业在读研究生. 主要研究方向为凝聚态理论、现代热力学理论和新材料的热学性质的研究.

E-mail: zhangyc1110@qq.com