

厦门大学

博士学位论文

库仑耦合量子点热电与热管理器件的性能特性研究

Investigation on the performance characteristics of
Coulomb-coupled quantum-dot thermoelectric and thermal
management devices

张艳超

指导教师姓名: 林国星教授

专业名称: 凝聚态物理

论文提交日期: 2018年 月

论文答辩时间: 2018年 月

学位授予日期: 2018年 月

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2018年 月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

另外,该学位论文为()课题(组)的研究成果,获得()课题(组)经费或实验室的资助,在()实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称,未有此项声明内容的,可以不作特别声明。)

本人声明该学位论文不存在剽窃、抄袭等学术不端行为,并愿意承担因学术不端行为所带来的一切后果和法律责任。

声明人 (签名):

张艳超

指导教师 (签名):

林国良

2018年5月27日

厦门大学学位论文著作权使用声明


本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

摘要

随着纳米科技与量子技术的发展,纳米尺度下的物理过程为当今的技术革命带来了新的机遇与挑战,也为新兴学科的发展提供了丰富的土壤。量子热力学作为一门新兴的学科主要研究纳米尺度下量子系统的热力学性能,其中纳米尺度下热与电的输运及转化是当前研究的热点内容之一。这对于基础物理学的发展与应用具有重要的意义。本文基于库仑耦合量子点系统,研究该量子系统的热-电转化性能及热管理与调控。

本文主要由两部分组成。第一部分包括第二到第四章,主要研究纳米尺度下热-电转化性能。该部分内容基于两个量子点库仑耦合模型,构成了三端量子点热电器件。在这个三端热电器件结构中,能够有效地解耦热流与电流,并且实现高低温热库有效地分离。高低温热库之间只能够通过两个量子点之间的库仑相互作用交换热量。基于赛贝克效应及帕尔帖效应,热电器件能够实现从高温库吸收热量驱动电子克服外界偏压对外做功,也能实现在外部偏压的驱动下将低温库的热量传到高温库的泵热或制冷。进一步提出三端量子点热机和制冷机分别具有两种不同的工作模式,即不同的系统参数配置,可以满足不同的工作要求。研究了热机和制冷机的热力学性能及优化特性,确定了热机和制冷机分别在两种不同配置下的优化区间。系统地分析了非对称能量依赖隧穿对热电器件热力学性能及优化特性的影响。比较了热机在两种不同配置下的性能特性及最大功率下的优化性能。研究表明,理想情况下热机和制冷机在两种不同的配置下都能够实现可逆工作,达到卡诺效率。非对称能量依赖隧穿是实现三端量子点热机或制冷机的必要条件,也是导致系统内部不可逆损失的关键因素,深刻地影响着系统的电子与能量输运以及热电器件的性能。该部分研究作为量子热力学的研究热点对深刻理解量子系统的热力学性能具有重要的理论意义,也为开发新型的纳米热电器件及其实际的应用提供了重要的理论指导。

第二部分包括第五与第六章,主要研究纳米尺度下的热管理。通过构造一个由三个库仑耦合量子点分别与各自的热电子库连接的三端量子点系统可以调控系统热流。在这个系统中,量子点之间的电子输运是被禁止的,但是当不同热电

子库之间存在温度梯度时,由于不同量子点之间的库仑相互作用,不同电子库之间能够实现热输运。基于此,这个三端量子点系统能够实现不同形式的热管理,比如热流交换、热开关和热通路选择。该系统还可以构造两个重要的固态热电路元件:热二极管和热三极管,其中热二极管类比于电子二极管,能够实现热流在正向温度梯度下导通,在反向温度梯度下抑制。研究表明,该系统能够在两个不同的热通路分别实现热二极管操作,具有显著的热整流效果。三端量子点系统存在反常的热输运特征,表现出负微分热阻现象。这是实现热三极管效应最基本的要素。因此,该系统的三个端可以构成基极、集电极和发射极,从而实现类比于电子晶体管的热三极管操作,能够通过基极的热流或温度调控集电极和发射极的热流。具体分析表明,基极的一个微小的热流变化能够引起集电极和发射极较大的热流变化。这使得量子点热三极管能够放大基极端微小的热信号,通过优化集电极和发射极间的库仑相互作用或减小基极能量依赖隧穿几率能够获得更大的热放大系数。这里所提出的量子点热管理器件可为工程技术上调控纳米尺度下的热输运提供了一种可行性方案,在低温固态热电路中具有潜在的应用价值。

关键词: 热电器件; 热二极管; 热三极管; 量子点; 库仑阻塞

ABSTRACT

With the development of nanoscience and quantum technology, physical processes at the nanoscale have brought new opportunities and challenges for today's technological revolutions and also provided rich soil for the development of emerging disciplines. Quantum thermodynamics is an emerging discipline that focuses on the thermodynamic performances in quantum systems at the nanoscale. One of the current research hot-pots is the transport and conversion of heat and electricity at the nanoscale. It is of great significance for the development and application of basic physics. Based on Coulomb-coupled quantum dots, this thesis studies the thermo-electric conversion performance and the thermal management and regulation of quantum systems.

This thesis mainly consists of two parts. The first part includes chapters 2-4 and mainly focuses on the thermo-electric conversion performance at the nanoscale. In this part, a three-terminal quantum dot thermoelectric device based on the Coulomb-coupled model of two quantum dots is established. In this three-terminal structure, it can effectively decouple the heat flow and the charge current, and realize the effective separation of the hot and cold reservoirs. The heat exchange between the hot and cold reservoirs can only be achieved by the Coulomb interaction between the two quantum dots. The three-terminal quantum dot thermoelectric device can directly convert a part of heat from the hot reservoir to electricity based on the Seebeck effect and also work as a solid-state heat pump or refrigerator to pump heat from the cold reservoir to the hot reservoir by electricity based on the Peltier effect. It is further proposed that the three-terminal quantum dot heat engine and refrigerator have, respectively, two different working modes, that is, different systemic parameter configurations can meet different work requirements. The thermodynamic performances and optimum characteristics of the heat engine and refrigerator are investigated. The optimal ranges of the heat engine and refrigerator in two different

configurations are determined. The influence of asymmetric energy-dependent tunneling on the thermodynamic properties and optimization of thermoelectric devices are systematically analyzed. The thermodynamic characteristics and the optimized performance at the maximum power output of the heat engine in two different configurations are compared. The results obtained show that under ideal conditions, both the heat engine and refrigerator can work reversibly in two different configurations and can achieve the Carnot efficiency. In addition, asymmetric energy-dependent tunneling is a necessary condition for the realization of a three-terminal quantum dot heat engine or refrigerator. It is also a key factor that causes irreversible losses in the system. Therefore, asymmetric energy-dependent tunneling affects profoundly the systemic electron and energy transport and the performance of the thermoelectric device. This part as a research focus of quantum thermodynamics is of important theoretical significance for the deep understanding of the thermodynamic performances in quantum systems and also provides important theoretical guidance for the development of new types of nano-thermoelectric devices and their practical applications.

The second part includes chapters 5 and 6 and mainly focuses on the thermal management at the nanoscale. Heat flows can be manipulated by designing a quantum dot system consisting of three Coulomb-coupled quantum dots connected to respective reservoirs. In this structure the electron transport between the quantum dots is forbidden but the heat transport is allowed by the Coulomb interaction to transmit heat between the reservoirs with a temperature difference. It is shown that such a system is capable of performing thermal management operations, such as heat flow swap, thermal switch, and heat path selector. Two important components, the thermal diode and the thermal transistor, are established. The thermal diode is a device that is analogous to an electrical diode and allows heat passing in one direction depending on the applied temperature bias and is blocked in the opposite direction. The thermal diode can be implemented separately in two different paths with significant thermal rectification. The three-terminal quantum dot system has abnormal heat transport

characteristics, showing the phenomenon of negative differential thermal resistance. This is the main ingredient for the thermal transistor effect. Therefore, a quantum-dot thermal transistor is analogous to an electronic transistor consisting of three terminals: the base, the collector, and the emitter. The heat flows through the collector and emitter can be controlled by the temperature of the base. It is found that a small change in the base heat flow can induce a larger heat flow change in the collector and emitter. Such a thermal transistor is able to amplify a small heat signal that is injected into the base. The huge amplification factor can be obtained by optimizing the Coulomb interaction between the collector and the emitter or the energy-dependent tunneling rate at the base. The quantum dot thermal management device proposed in this part provides a feasible solution for engineering heat transport at the nanoscale and has potential applications in low-temperature solid-state thermal circuits.

Keywords: Thermoelectric device; Thermal diode; Thermal transistor; Quantum dot; Coulomb-blockade

目录

第一章 绪论	1
§ 1.1 热电器件	1
§ 1.1.1 热电器件的发展历程	1
§ 1.1.2 热力学基础	4
§ 1.2 热管理器件	8
§ 1.2.1 热管理器件的研究现状	8
§ 1.2.2 热管理的基本概念	9
§ 1.3 库仑耦合量子点	12
§ 1.3.1 量子点	12
§ 1.3.2 库仑耦合量子点器件	13
§ 1.4 本文的研究内容和安排	15
第二章 双量子点库仑耦合模型	16
§ 2.1 系统静电能	16
§ 2.2 系统动力学	20
§ 2.3 本章小结	24
第三章 三端库仑耦合量子点热机	25
§ 3.1 热机的热力学描述	25
§ 3.2 配置 A 下热机的性能	29
§ 3.3 两种配置下的性能比较	33
§ 3.4 本章小结	38
第四章 三端库仑耦合量子点制冷机	40
§ 4.1 制冷机的热力学描述	40
§ 4.2 配置 B 下制冷机的性能	44
§ 4.2.1 电子流与热流	44

§ 4.2.2 性能特性	47
§ 4.3 配置 A 下制冷机的性能	51
§ 4.4 本章小结	52
第五章 三个量子点库仑耦合模型	54
§ 5.1 系统静电能	54
§ 5.2 系统动力学	58
§ 5.3 本章小结	60
第六章 库仑耦合量子点热管理器件	62
§ 6.1 基本热管理	62
§ 6.2 热二极管	65
§ 6.3 热三极管	68
§ 6.4 本章小结	75
第七章 总结与展望	76
§ 7.1 总结	76
§ 7.2 展望	77
参考文献	78
附录	95
致谢	98

CONTENTS

Chapter 1 Introduction	1
§ 1.1 Thermoelectric devices	1
§ 1.1.1 The development of thermoelectric devices	1
§ 1.1.2 The basic of thermodynamics	4
§ 1.2 Thermal management devices	8
§ 1.2.1 Research status of thermal management devices	8
§ 1.2.2 The basic concepts of thermal management	9
§ 1.3 Coulomb-coupled quantum dots	12
§ 1.3.1 Quantum dot	12
§ 1.3.2 Coulomb-coupled quantum-dot devices	13
§ 1.4 Research contents and arrangement of the thesis	15
Chapter 2 The model of two Coulomb-coupled quantum dots	16
§ 2.1 Systemic electrostatic energy	16
§ 2.2 System dynamics	20
§ 2.3 Conclusions	24
Chapter 3 Three-terminal quantum-dot heat engines	25
§ 3.1 Thermodynamic description of heat engines	25
§ 3.2 The performance of the heat engines under configuration A	29
§ 3.3 The performance comparison under two different configurations	33
§ 3.4 Conclusions	38
Chapter 4 Three-terminal quantum-dot refrigerators	40
§ 4.1 Thermodynamic description of the refrigerators	40
§ 4.2 The performance of the refrigerators under configuration B	44
§ 4.2.1 Electron currents and heat flows	44

§ 4.2.2 Performance characteristics	47
§ 4.3 The performance of the refrigerators under configuration A	51
§ 4.4 Conclusions	52
Chapter 5 The model of three Coulomb-coupled quantum dots	54
§ 5.1 Systemic electrostatic energy	54
§ 5.2 System dynamics	58
§ 5.3 Conclusions	60
Chapter 6 Coulomb-coupled quantum-dot thermal management devices	62
§ 6.1 Basic thermal managements	62
§ 6.2 Thermal diodes	65
§ 6.3 Thermal transistors	68
§ 6.4 Conclusions	75
Chapter 7 Summary and prospects	76
§ 7.1 Summary	76
§ 7.2 Prospects	77
References	78
Appendix	95
Acknowledgments	98

第一章 绪论

本章简要回顾热电与热管理器件的发展历程,给出描述热电器件热力学性能的基本定义。阐明库仑耦合量子点热电与热管理器件的可行性。最后给出本文的研究内容及安排。

§ 1.1 热电器件

§ 1.1.1 热电器件的发展历程

1821年,赛贝克(Seebeck)将两种不同的金属A和B连接并在两个接头保持不同的温度 T 和 $T+\Delta T$,如图1.1所示。实验发现在电容器中将有电势差,称为温差电动势。将电容器替换为电阻组成闭合回路,则闭合回路中将有电流通过,称为温差电流。如果两个连接处的温度互换,则回路中的电流反向。这种现象称为赛贝克效应。如果将两种金属相连接,并保持温度不变,如图1.1所示。实验发现,当电路中有电流通过时,两种金属的一个连接处吸收热量,而在另一个连接处放出热量。如果电流反向,则两个连接处的吸放热也产生反转。这种现象是帕尔帖(Peltier)于1834年首先发现的,因此称为帕尔帖效应。

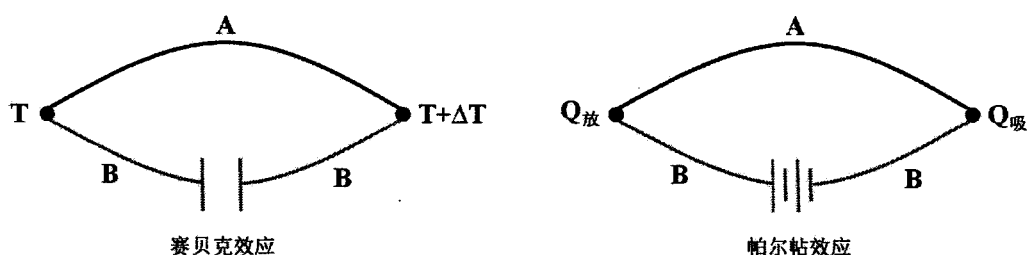


图 1.1 赛贝克效应与帕尔帖效应。

传统的热电器件是基于赛贝克效应实现热电热机或功率发生器,利用温度梯度产生电流或电压将热能转变为电能,或者基于帕尔帖效应作为制冷机在电流的驱动下产生温度梯度实现制冷。理论研究表明,可以通过无量纲参数 $ZT = S^2 \sigma \kappa^{-1} T$ (称为热电优值)衡量热电材料的热电性能[1],其中 Z 称为优值系数

(Figure of merit), S 是材料的赛贝克系数, 定义为温差电动势与温度梯度的比值, σ 是材料的电导率, κ 是材料的热导率, T 为绝对温度。由于金属材料的温差电动势很小, 且具有很大的热导。这导致基于金属材料的热电热机或制冷机的性能太低以至于很难得到实际的应用, 只在温差电偶测温方面得到了有限的应用。随着半导体科学与技术的发展, 对半导体材料的深入研究发现掺杂半导体材料比金属材料具有更加优越的热电性能[2]。半导体热电材料与热电器件的研究获得了科学界的广泛关注。这一发现使得热电材料的研究重新复苏并迎来了新的发展机遇[3-7]。典型的半导体热电器件由 n-型半导体和 p-型半导体构成, 如图 1.2 所示。

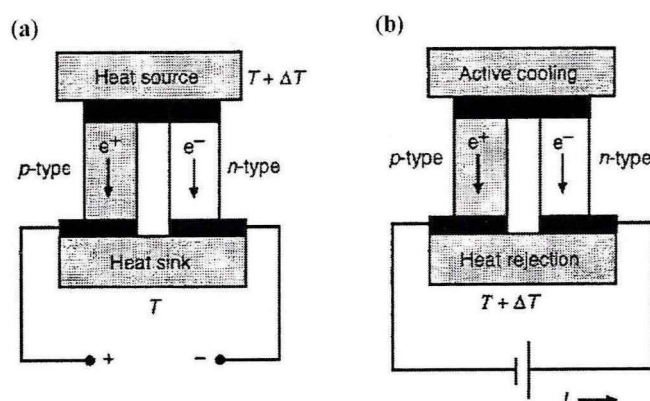


图 1.2 半导体热电器件(a)热机与(b)制冷机[1]。

n-型半导体与 p-型半导体的一端通过金属相连接, 另一端与金属连接作为电极。当器件的一端与高温热库 $T + \Delta T$ 接触, 电极端与低温库 T 接触, 如图 1.2(a)。在温度梯度的驱动下, n-型半导体的负电荷与 p-型半导体正电荷都由高温端向低温端扩散, 并在两个电极间形成电势差实现对外做功。相反地, 如图 1.2(b)所示电极两端外加偏压, 在偏压的驱动下电流由 n-型半导体流向 p-型半导体。此时 n-型半导体的负电荷与 p-型半导体正电荷流向电极, 并将热库的热量由低温端传到电极端释放, 实现对低温端的制冷。半导体热电器件相比较于传统的热机与制冷机具有可靠性高、可扩展性、无移动部件、无噪声、无污染、寿命长等优点。对于能源的回收利用, 取代传统的污染环境的压缩式制冷机缓解环境恶化具有重要的意义。然而当前热电器件的效率相比于传统的热机或制冷机仍旧太低, 新的热电材料的探索与新型热电器件的研发仍是当前研究的热点[8]。

1990s, Hicks 和 Dresselhaus 的开创性工作表明, 纳米结构低维热电材料能够显著地提高热电材料的优值系数, 从而大大地提高热电器件的效率[9,10]。随后, Mahan 等人理论上预测热电材料中参与热电运输的载流子浓度呈现 δ 型分布时, 热电材料能够获得最大的热电优值[11,12]。他们的工作再一次激发了人们对于低维纳米热电材料的研究热情[13,14]。许多新的热电材料与器件相继问世, 例如量子点超晶格[15]、纳米线[16,17]、碳纳米管[18]与分子结[19,20]等。Humphrey 等人研究纳米热电器件的性能发现, 应用具有能量选择电子功能的热电材料使传输电子在一个特殊的共振能级输运时, 热电器件能够实现可逆运行, 其效率可以达到卡诺效率(Carnot efficiency)[21-23]。基于能量电子选择热电器件得到了广泛的研究与应用[24-28]。

经典的热电器件由热电材料作为工作系统耦合到两个具有不同温度和化学势的电子库构成。在这种两端的结构中热流的输运是伴随着电子的输运而实现的。因此, 在两端热电结构中热流与电子流耦合在一起同时由温度梯度与化学势梯度驱动。在实际的应用中, 这种两端的物理连接方式使得热电器件在保持良好电导的同时又具有良好的绝热变得非常困难。这对于获得大的热电优值是不利的, 这也导致经典的两端热电器件系统内耗散很大, 热电器件的效率很低, 而限制其在实验中的实现与应用。最近, Sánchez 和 Büttiker 基于双量子点库仑耦合系统首先提出了一种三端热电器件。该系统能够通过库仑相互作用将高温环境的热波动转化为功率输出, 并且能够实现高效的热-电转换[29]。此后, 三端热电器件吸引了人们越来越多的关注[30-35]。与经典的两端结构比较, 三端结构能够有效地分离高低温热库, 因此能够有效地避免系统的热漏损失。能解耦系统的热流与电流, 实现传导系统(电流)与控制系统(热流)单独调控, 极大地增加了系统的可操作性。控制系统与传导系统的电分离极大地扩展了三端热电器件的应用领域。研究表明, 三端热电器件能够利用电子-电子相互作用[29,36-41]、电子-声子相互作用[42-45]、电子-光子相互作用[46-53]、电子-磁子相互作用[54-56]甚至电子-信息相互作用[57,58]的驱动实现能量的收集与转换。这也使得三端热电器件具有更加广泛的应用前景。如今对纳米尺度下热电材料与器件的研究如雨后春笋般蓬勃发展, 不断涌现出新的概念与突破, 不断深化我们对于微观世界的理解, 并且强劲地推动着新兴学科的发展[59-65]。

§ 1.1 .2 热力学基础

经典的两端热电器件是由热电材料作为中心系统分别与两个热电子库接触而构成的。两个热电子库的温度与化学势分别为 T_α 和 μ_α ($\alpha = L, R$)，如图 1.3 所示。

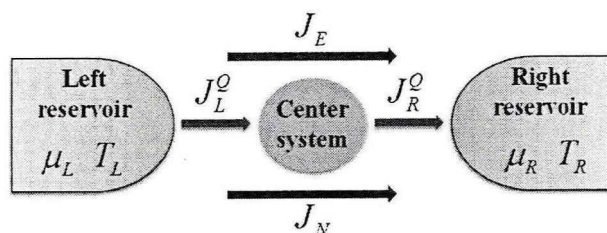


图 1.3 两端热电器件示意图。

非平衡稳态下，可以定义系统的稳态流。如图 1.3 由左侧库流出的热流为 $J_L^Q = -dQ_L/dt$ ，流入右侧库的热流为 $J_R^Q = dQ_R/dt$ ，其中 dQ_L 和 dQ_R 分别为两个电子库的热量变化。稳态下由粒子数与能量守恒可知

$$dN_L + dN_R = 0, \quad (1.1)$$

$$dU_L + dU_R = 0. \quad (1.2)$$

其中 dN_α 和 dU_α 分别为电子库的粒子数与内能变化。定义系统的稳态粒子流与能流分别为

$$J_N \equiv -\frac{dN_L}{dt} = \frac{dN_R}{dt}, \quad (1.3)$$

$$J_E \equiv -\frac{dU_L}{dt} = \frac{dU_R}{dt}. \quad (1.4)$$

(1.3)与(1.4)式中， $J_L^N = -dN_L/dt$ ， $J_L^E = -dU_L/dt$ 为由左侧库流出的粒子流与能流变化。 $J_R^N = dN_R/dt$ ， $J_R^E = dU_R/dt$ 为流入右侧库的粒子流与能流。根据热力学第一定律，可以得到

$$dU_\alpha = dQ_\alpha + dW_\alpha, \quad (1.5)$$

其中 $dW_\alpha = \mu_\alpha dN_\alpha$ 表示库的势能变化或做功。将上式改写为

$$dQ_\alpha = dU_\alpha - dW_\alpha. \quad (1.6)$$

由(1.1)-(1.4)式可以得到

$$J_L^Q \equiv J_L^E - \mu_L J_L^N, \quad (1.7)$$

$$J_R^Q \equiv J_R^E - \mu_R J_R^N. \quad (1.8)$$

根据热力学理论, 热库的熵变定义为 $dS_\alpha = dQ_\alpha/T_\alpha$ 。则系统的总的熵变为

$$dS = dS_L + dS_R = \frac{dQ_L}{T_L} + \frac{dQ_R}{T_R}. \quad (1.9)$$

进一步可以得到系统的熵流

$$J_S = -\frac{J_L^Q}{T_L} + \frac{J_R^Q}{T_R}. \quad (1.10)$$

该系统作为热机, 参数设置为 $T_L > T_R$, $\mu_L < \mu_R$ 。稳态情况下, 系统从高温库吸热 J_L^Q 驱动电子做功, 并将剩余热量 J_R^Q 释放到低温库。由(1.7)和(1.8)式可得输出功

$$P_{out} = J_L^Q - J_R^Q, \quad (1.11)$$

即 $P_{out} = (\mu_R - \mu_L)J_N = \frac{(\mu_R - \mu_L)}{e}I = IV$, 其中电流 $I = eJ_N$, 偏压 $V = (\mu_R - \mu_L)/e$ 。

效率定义为

$$\eta = \frac{P_{out}}{J_L^Q} = \frac{J_L^Q - J_R^Q}{J_L^Q} = 1 - \frac{J_R^Q}{J_L^Q}. \quad (1.12)$$

根据热力学第二定律, 孤立系统的熵变 $dS \geq 0$ (即 $J_S \geq 0$)。可以得到热机的效率为

$$\eta \leq \eta_C = 1 - \frac{T_R}{T_L}, \quad (1.13)$$

其中等号对应于系统的熵变为零, 即热机工作在可逆情况时成立。 $\eta_C = 1 - T_R/T_L$ 为卡诺效率, 是热机的效率上限。

当该系统作为制冷机工作时, 参数设置为 $T_L < T_R$, $\mu_L > \mu_R$ 。此时系统在偏

压 $V = (\mu_L - \mu_R)/e$ 的驱动下输入功 $P_{in} = IV$ 从低温库吸热 J_L^Q 并将热量 J_R^Q 泵到高温库，实现对低温库的制冷。因此，制冷率定义为

$$CP = J_L^Q. \tag{1.14}$$

制冷系数定义为

$$\varepsilon = \frac{CP}{P_{in}} = \frac{J_L^Q}{J_R^Q - J_L^Q}. \tag{1.15}$$

可逆情况下，得到制冷机制冷系数的上限 $\varepsilon_C = T_L/(T_R - T_L)$ ，称为卡诺制冷系数。

三端热电系统的模型图如图 1.4 所示。该模型是在两端模型的基础上引入温度为 T_G 的第三个库。第三个库与中心系统耦合只能交换热量而没有粒子交换，并且可以通过第三个库调控两端系统的粒子与热量输运。因此，图 1.4 虚线内的系统称为传导系统，第三个库与中心系统构成门控系统。

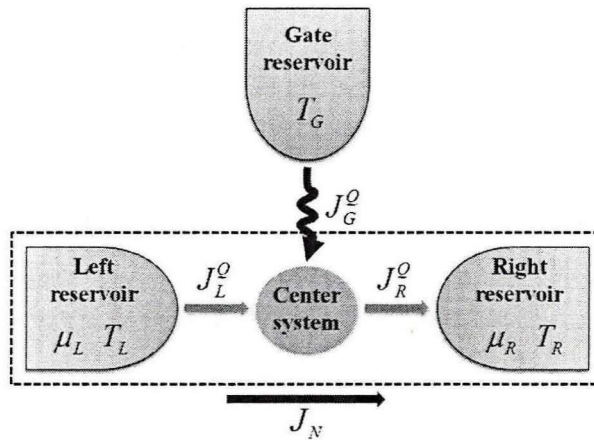


图 1.4 三端热电器件示意图。

根据上面的分析可以得到三端系统的熵变及熵流分别为

$$dS = \frac{dQ_L}{T_L} + \frac{dQ_R}{T_R} + \frac{dQ_G}{T_G}, \tag{1.16}$$

$$J_S = -\frac{J_L^Q}{T_L} + \frac{J_R^Q}{T_R} - \frac{J_G^Q}{T_G}, \tag{1.17}$$

其中 dQ_G 和 J_G^Q 分别为门控系统的热量变化和热流。由于门控系统没有粒子交换，因此门控系统的热流等于能流，即

$$J_G^Q = J_G^E. \quad (1.18)$$

而在实际的三端热电系统中，传导系统处在同温环境，即 $T_L = T_R \equiv T_0$ 。因此，定义传导系统的热流为

$$J_0^Q = J_R^Q - J_L^Q. \quad (1.19)$$

将(1.7)与(1.8)式代入得到

$$J_0^Q = J_0^E - (\mu_R - \mu_L)J_N, \quad (1.20)$$

其中 $J_0^E = J_R^E - J_L^E$ 为传导系统内的能流。由此，可将(1.17)式简化为

$$J_S = \frac{J_0^Q}{T_0} - \frac{J_G^Q}{T_G}. \quad (1.21)$$

表明，存在门控系统的三端热电系统可以等效为二端热电系统。该三端热电系统作为热机工作时，可设置为 $T_G > T_0$ ， $\mu_R > \mu_L$ 。则输出功率为

$$P_{out} = J_G^Q - J_0^Q = IV, \quad (1.22)$$

效率为

$$\eta = \frac{P_{out}}{J_G^Q} = \frac{J_G^Q - J_0^Q}{J_G^Q} = 1 - \frac{J_0^Q}{J_G^Q}. \quad (1.23)$$

作为制冷机时，参数设置为 $T_G < T_0$ ， $\mu_R < \mu_L$ 。则可得制冷率和制冷系数分别为

$$CP = J_G^Q. \quad (1.24)$$

$$\varepsilon = \frac{CP}{P_{in}} = \frac{J_G^Q}{J_0^Q - J_G^Q}. \quad (1.25)$$

可逆情况下，可得到三端热电器件的卡诺效率及卡诺制冷系数分别为 $1 - T_0/T_G$ 及 $T_0/(T_G - T_0)$ 。

热力学理论表明，卡诺效率与制冷系数给出了任何热力学器件效率及制冷系数的上限。但由于系统经过无限缓慢的过程才能达到卡诺极限，此时热机的功率

或制冷机的制冷率为零。因此,卡诺效率缺乏对实际热力学系统的指导意义。1975年, Curzon 和 Ahlborn 考虑热机系统的传热不可逆损失, 提出了内可逆热机模型, 得到了热机工作在最大功率下的效率[66]

$$\eta_{CA} = 1 - \sqrt{\frac{T_L}{T_R}}. \quad (1.26)$$

这个效率被称为 CA 效率, 其中 $T_R > T_L$ 。此后国内外许多学者致力于研究各种不可逆损失对不同类型的热机或制冷机的优化问题[67-81], 并逐渐发展为现代热力学新的分支“有限时间热力学(Finite-time thermodynamics)” [82-84]。Van den Broeck 证明线性范围内 CA 效率是热机最大功率下效率的上限[85]。Esposito 等人证明扩展到非线性范围, CA 效率展开式的二次项对于强耦合对称情况下热机最大功率下的效率是普遍成立的[86]。有限时间热力学的发展为实际热电器件的优化设计提供了理论指导, 正在积极地推动着当今各种能量转换器件的发展。

§ 1.2 热管理器件

§ 1.2.1 热管理器件的研究现状

作为自然界最基本的能量存在形式, 热与电的研究始终与人类的生存和发展紧密相连。但从历史发展的角度而言, 对于热的研究与利用从来没有得到与有关电的研究同样的关注。主要是由于作为热的载体, 声子是没有质量与电量的准粒子, 技术上很难调控[87,88]。而随着纳米科技的发展, 热现象已经成为制约技术进步的瓶颈。基于当前对纳米尺度下热传导物理机制的深入理解与热流调控技术的日益成熟, 纳米尺度下的热管理已经引起了科学界的极大兴趣[87-92]。一个特别令人关注的任务是模拟和建立功能热器件的基本组件, 这是实现固态热电路的关键工具。热二极管效应和负微分热阻是构建功能热器件基本组件的两个最重要的特征。在文献[93]中, 通过控制一维非线性晶格中的热传导, 首先提出了热整流器/热二极管。在随后的工作中, Li 等人基于不同的微观机制显示了在一维非线性晶格中更加明显的热二极管效应, 提出了负微分热阻的概念[94,95]。近些年, 热整流已经在许多不同的系统中被广泛的研究[96-104], 包括量子点系 (quantum-dot systems)[105-107], 金属-电介质表面系统 (metal-dielectric interfaces)

[108], 金属或超导系统 (metal or superconductor systems)[109-112], 量子霍尔导体 (quantum Hall conductors)[113]和自旋量子系统 (spin quantum systems)[114]。

比热整流/热二极管更进一步的热流控制就是实现对热流的调节与放大。在电子学中, 实现这一类操作的元件我们称之为晶体管或三极管。正是由于三极管的发明使得人类的历史由电气时代进入到信息时代。而随着现代纳米技术的发展, 电子器件的尺度越来越小, 集成度越来越高, 电子器件产生的热量也越来越大, 这使得纳米器件的发展遇到了难以突破的瓶颈。为了调控自然界无所不在的热流, 甚至以热流的形式处理热信号并建立一整套能够利用精确的热流控制来实现多种功能的热元件, 类比于电三极管的热三极管的发明将为新兴的声子学的发展带来曙光。因此, 一个特别的任务是进一步构建和实现热三极管。热三极管类似于电子三极管, 可以通过基极温度或基极热流微小的改变来控制集电极和发射极的热流。自从 Li 等人首先理论上提出第一个热三极管之后[95,115], 许多不同类型的热三极管也已经被提出。例如, 超导结构(superconductor) 热三极管[116,117], 近场热三极管(near-field thermal transistors)[118,119], 远场热三极管(far-field thermal transistors)[120-123], 以及量子热三极管(quantum thermal transistors)[124]。其他的热功能器件如热逻辑门(thermal logical gates)[125,126]和热记忆元件(thermal memories)[127-129]也相继被提出。相关的热管理操作也已经在实验上通过利用电子器件[105,111,116]、光子器件[102]或声子器件[90,97] 被实现。最近, Bosisio 等人详细地阐明了一个一般的多端器件能够实现磁热开关效应。这样的器件能够执行热流交换、热开关、热通路选择等一系列热管理操作[130]。

§ 1.2.2 热管理的基本概念

热管理器件的研究是期望建立所有类比电子器件的副本, 实现像管理调控电流一样调控热流, 以此建立新型的固态热电路, 能够在量子调控、量子计算、量子信息等领域获得应用[87,88,92]。因此, 逐渐发展成为一门新的学科——声子学[87,88]。热管理主要是通过外部调控实现对热流的精确控制。最基本的热流调控包括热流交换、热通路选择、热流翻转、热开关等操作。如图 1.5 所示的基本的热流调控分别为

- (a). 热流交换是改变外部参数，不同通路之间的热流互换。
- (b). 热通路选择是在不同的参数下，同等大小的热流只会通过不同的热通路。
- (c). 热流翻转是改变外部参数，原来各通路的热流大小不变但方向与原来相反。
- (d). 热开关是指系统外部参数大于(或小于)某一值时热通路导通，而在小于(或大于)这一值时热通路关闭。

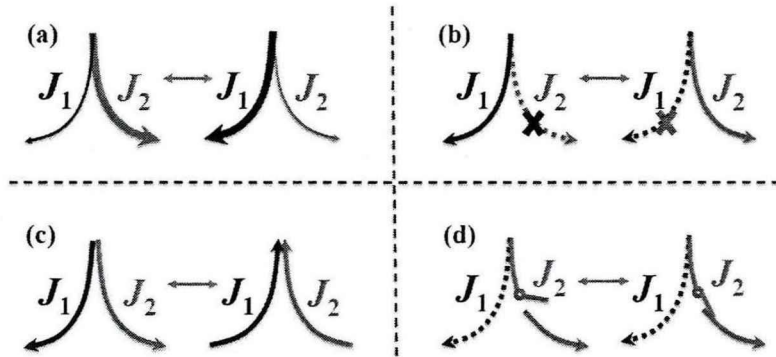


图 1.5 基本热流调控示意图。

热二极管和热三极管是构建固态热电路最重要的两个基本功能器件。热二极管类比于电二极管，实现热流单向导通的器件。图 1.6 右侧图是热二极管的示意图，红色表示高温端，蓝色表示低温端。在正向的温度配置下系统表现良好的热导，热流由高温库流向低温库，并随着温度梯度的增加而增加。而当温度配置反向时，系统表现为非常大的热阻，阻断高温库流向低温库的热流。因此理想热二极管能够实现与电二极管伏安特性曲线具有相同特征的温度梯度-热流曲线，如图 1.6 左侧所示。

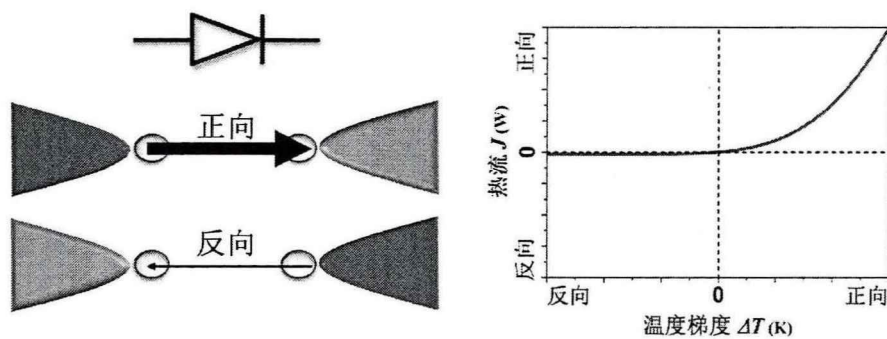


图 1.6 热二极管示意图及热流曲线。

热二极管的整流效果由热整流系数定量的描述。热整流系数定义为正向热流与反向热流之比的绝对值，即

$$R = \left| \frac{J_{\text{正向}}}{J_{\text{反向}}} \right|. \quad (1.27)$$

热整流系数 $R > 1$ 时，表明该热器件具有整流效果。原则上整流系数越大，热二极管的性能越好。

比简单的热整流更进一步的热管理器件就是热三极管。热三极管同样类比于电三极管/晶体管。热三极管由三个端构成，分别是温度为 T_B 的基极、温度为 T_E 的集电极和温度为 T_C 的发射极，如图 1.7 所示。热三极管最重要的功能是实现微小热信号的放大。具体而言，通过基极微小的热流 J_B 能够调控集电极与发射极较大的热流 J_E 和 J_C 。从而实现对微小热信号的放大。通过基极的热流永远保持微小，这是热三极管最基本的要求，否则基极的温度就不能被微小的热信号所控制，因此热三极管也就起不到放大热信号的作用。

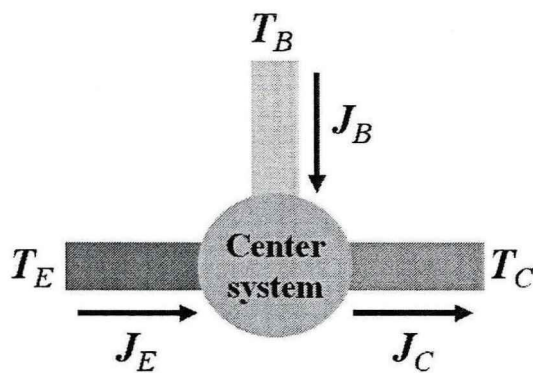


图 1.7 热三极管示意图。

描述热三极管性能的物理量称为热放大因子，定义为集电极或发射极热流的变化除以基极的热流变化，即

$$\alpha_{EIC} = \frac{\partial J_{EIC}}{\partial J_B}. \quad (1.28)$$

热放大因子 $|\alpha_{E/C}| > 1$ 表明基极端小的热流变化引起了发射极或集电极大的热流变化,也就是实现了热流放大的效果。

热逻辑门是实现热逻辑运算的元件,在电子数字电路中通过两个不同的电压编码布尔(Boolean)态“0”和“1”。在热数字电路中则通过两个不同的温度编码“0”和“1”。以此为基础能够实现热信号“与”、“或”、“非”的逻辑运算[88,125]。而热记忆则能够通过温度编码实现热信号的读写功能[88,127]。对于热电路及相关热元件的研究方兴未艾,仍处于理论研究的阶段。相关的理论与技术仍在不断的发展。随着声子学这门新兴学科的逐步建立与发展,对于热的理解与应用一定会深刻地改变我们的世界。

§ 1.3 库仑耦合量子点

§ 1.3.1 量子点

量子点是人造的亚微粒(submicron)结构,包含 10^3 - 10^9 个原子和等量级的电子。在半导体量子点结构中,绝大多数电子都被紧束缚在原子周围,只有极少的自由电子[131]。量子点在三个维度的限制导致量子点像原子一样具有离散的能级结构。因量子点在许多性质上与原子相似,所以量子点也被称为“人造原子”[132]。量子点是典型的零维(0-Dimension)结构,因其在三个维度受限,低温下量子效应强烈地影响量子点的电子输运。库仑阻塞效应(Coulomb blockade effects)是量子点的电子输运一个最主要的现象[133,134]。库仑阻塞效应指的是当导体(金属或半导体)的尺寸足够小时,导体形成单电子岛,也称为库仑岛。电子隧穿到库仑岛所需要的充电能可以远大于低温下的热动能。这种情况下,就会出现一种十分有趣的现象:当某一个电子隧穿到库仑岛,由于库仑相互作用它将阻止第二个电子再进入到同一个库仑岛。只有当电子离开库仑岛后,其他的电子才能隧穿到库仑岛。这种现象就被称为库仑阻塞效应。利用库仑阻塞效应能够实现单电子隧穿过程。单个量子点被称为“人造原子”,而当两个量子点相互耦合则被称为“人造分子”。根据两个量子点间的耦合强度,两个量子点能够形成类离子键(ioniclike bond)表示弱隧穿耦合,或形成类共价键(covalentlike bond)表示强隧穿耦合。在类共价键情况,两个量子点是强耦合的。电子能够以相位相干的形式在

两个量子点之间隧穿，此时电子的行为不能被作为一个粒子定域在一个量子点上，而应作为一个相干波被非定域化到两个量子点，并用量子力学来描述。在类离子键的情况下，量子点之间以弱的、静电的方式耦合，两个量子点之间的电子隧穿是可以忽略的，因此表现为经典的特性，这种情况的两个量子点耦合可以由库仑阻塞理论来描述。这种两个量子点弱耦合的系统将是本文的研究重点。

§ 1.3.2 库仑耦合量子点器件

在新型的热电材料与器件中，量子点以其优越的性能在众多材料中脱颖而出。量子点结构自然地提供了具有 δ 型态密度的能量传输通道，可以作为理想的热电材料获得最大的热电效率[11]。有关库仑阻塞情况下量子点的电子输运与热电现象在理论[135-137]与实验[138-142]上已经得到了广泛的研究。为量子点热电器件的研究提供了足够的支持。典型的两端量子点热电器件是由量子点嵌入到两个具有不同温度和化学势的电子库构成。基于赛贝克与帕尔帖效应量子点热电器件能够作为热机[14,75, 143-147]、热泵[148,149]或制冷机[150-153]实现不同的功能。2011年，Sánchez和Büttiker首先提出了三端库仑耦合量子点热机模型，该热机模型克服了两端热电器件的缺点，为热电器件的研究提供了新的思路[29]，并迅速成为当前的研究热点[154-161]。最近，三端库仑耦合量子点热机已经在实验上被实现[162]。实验上，能够通过GaAs/AlGaAs半导体材料制备量子点结构。该结构的自由电子被强烈地限制在GaAs和AlGaAs的界面，形成二维电子气[162]。三端库仑耦合量子点系统的扫描电子显微图如图1.8所示。

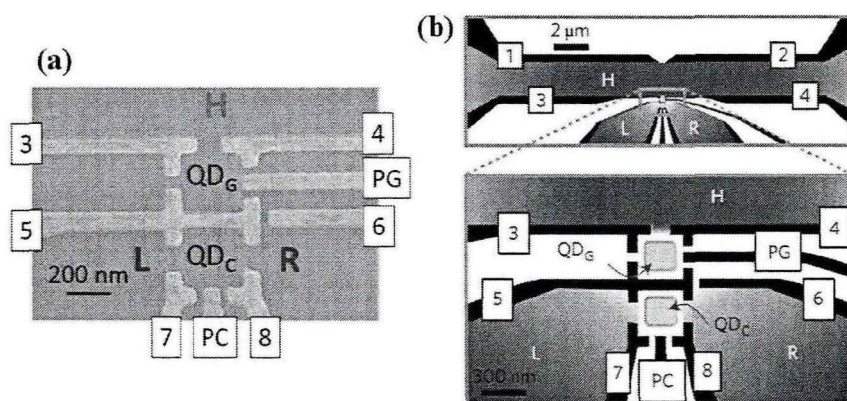


图 1.8 (a)库仑耦合量子点系统扫描电子显微图, (b)门控系统示意图[162]。

每个量子点(QD_G 和 QD_C)的平版印刷尺寸是(300×300)nm²。但是, 由于栅极的静电损耗, 预计有效量子点尺寸将进一步减小到大约(200×200)nm²。每个电子库(L, R, H)装备有退火的 Au / Ge 衬垫, 保证了电子库与二维电子气之间良好的电接触。使用标准光学和电子束光刻技术将 Ti / Au 电极布局到样品表面上, 然后通过对电子系统施加负电压, 可以将其用作为门电极或栅极, 如图 1.8(b)所示(编号 1-8)。两个量子点 QD_G 和 QD_C 彼此非常接近, 通过良好的电容性耦合确保足够大的库仑相互作用。电极 PG 和 PC 分别控制量子点 QD_G 和 QD_C 的电化学势, 可以精确的调节量子点系统的电子占有数。门电极 1-4 通过电流加热技术[163]可以增加电子库 H 的温度, 而其他电子库保持与基底相同的温度。例如门电极 1-4 通过交流电电流 150nA 频率 11Hz 能够使电子库 H 的温度升高大约 100mK[162]。通过门电极 7 和 8 的电压能够直接影响对应的隧穿势垒, 从而打破能量依赖隧穿的左右对称性。例如, 增加门电极 8 的电压, 量子点 QD_C 与电子库 R 间的势垒高度增加, 因此对应的隧穿几率减小。能量依赖隧穿能够在顶栅定义的结构(top-gate-defined)中自然发生[164]。然而试验中通过门电极 7 和 8 直接控制相关参数得到的结果并不能满足实验要求。因此, 通过门电极 5 和 6 施加更小的电压能够显著地影响量子点 QD_C 与电子库 R 之间势垒的形状。最终, 通过门电极 5-8 能够实现量子点 QD_C 与电子库 L 和 R 之间的能量依赖隧穿几率。库仑耦合量子点热机的试验结果与理论计算符合的非常好, 这也为量子点热电器件的进一步应用打下了坚实的基础。

近几年, 对双量子点库仑耦合模型纳米尺度下的热流与电流的详细研究已经激发了热整流研究的新进展。最近的许多实验已经验证了通过电压波动或热波动可以控制和管理电流[165], 并且能够实现整流[166,167]、逻辑随机响应[168]和热门控[169,170]等功能。但是, 这些研究由于量子点与电子库的连接方式使得系统的内部同时存在电流与热流。热整流或热开关的实现是通过对电子的调控间接实现的, 原则上并不是纯粹的热管理器件。Ruokola 等人首先提出了一个真正意义的热二极管模型。该模型由两个量子点和两个热电子库构成, 每个量子点分别与各自的热电子库弱耦合, 两个量子点之间以电容耦合的方式连接。在库仑阻塞情况下, 该模型量子点实现单电子波动。这个库仑耦合量子点系统一个最明显的特征是: 两个量子点以电容耦合的方式连接, 因此系统内(两个量子点系统之

间)的电子输运是被禁止的,但是两个量子点间的电子波动能够实现不同电子库之间交换热量。研究表明,这样的系统能够实现热二极管效应[171]。最近,Zhang等人研究发现,可以通过三个库仑耦合量子点分别连接到相应的电子库所构成的三端子量子点系统来操纵热流。由于每个量子点之间通过电容耦合的形式连接,因此在这个结构中,量子点之间的电子输运是被禁止的,但是通过量子点间的库仑相互作用允许在具有温差的电子库之间传递热量。这样一个系统能够执行热量管理操作,例如热流交换,热开关和热通路选择。一个重要的热整流器,即热二极管,可以分别在两个不同的路径中实现[172]。而且通过适当的参数选择该模型还能够实现热三极管效应,这个工作将在本文的第六章详细讨论。

§ 1.4 本文的研究内容和安排

本论文主要以博士期间发表在《Applied Physics Letters》、《Physical Review E》、《Energy》等学术期刊上的论文为基础,研究了库仑耦合量子点系统在热电及热管理方面的应用。对库仑耦合量子点热电器件的结构优化及参数设计做了详细的研究。并提出了以库仑耦合量子点系统构造新型热管理器件的具体方案。本文内容的具体安排,第二章建立两个量子点库仑耦合模型并计算该模型的静电能及系统动力学。第三与第四章在第二章的基础上实现三端库仑耦合量子点热机与制冷机,并详细分析热机与制冷机的特性及优化性能。第五章进一步构建了三个量子点库仑耦合模型,计算得出了该模型的静电能及系统的热流。第六章给出了三个量子点库仑耦合模型实现不同热管理操作的结构设计方案。最后一章为全文的总结及对未来工作的展望。

第二章 双量子点库仑耦合模型

本章建立两个量子点库仑耦合模型，两个量子点以电容的形式耦合[29,162]。通过计算得到系统的静电能与充电能，并且进一步得到系统稳态情况下的电流与热流以及详细描述了它们的输运过程。

§ 2.1 系统静电能

双量子点库仑耦合模型如图 2.1(a)所示。

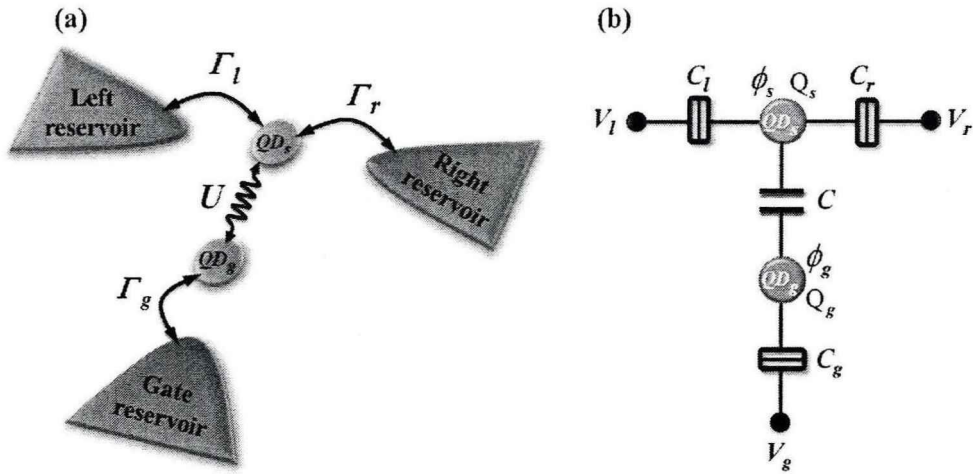


图 2.1 (a)双量子点库仑耦合模型, (b)电容耦合等效电路。

模型由三个独立的电子库(标记为 l 、 r 和 g)和两个量子点 QD_s 和 QD_g 构成。量子点 QD_s 分别与电子库 l (Left reservoir)和 r (Right reservoir)通过非对称隧穿势垒弱耦合在一起。电子库 l 和 r 之间能够通过量子点 QD_s 交换电子和能量。因此将该子系统称为传导系统(标记为 s)。量子点 QD_g 与电子库 g 弱耦合,该子系统表现出明显的电子与能量波动。在这个模型中能够控制传导系统 s 的电子输运,因此称为控制系统或门系统(标记为 g)。两个子系统之间通过量子点 QD_s 与 QD_g 电容耦合在一起,只能够通过库仑相互作用 U 交换能量而没有电子交换。传输几率

Γ_l 、 Γ_r 和 Γ_g 描述电子在量子点与电子库之间的隧穿过程。双量子点库仑耦合模型的等效电路如图 2.1(b)所示。每个量子点的电荷量为 Q_s 、 Q_g ，静电势为 ϕ_s 、 ϕ_g 。量子点 QD_s 与 QD_g 之间的耦合等效为电容 C ，量子点与电子库之间的耦合等效为 C_l 、 C_r 和 C_g ，包含一个电容并连一个电阻。每个电子库的电势为 V_l 、 V_r 和 V_g 。

根据图 2.1(b)的等效电路，可以得到每个量子点的总电荷量为

$$Q_s = C_l(\phi_s - V_l) + C_r(\phi_s - V_r) + C(\phi_s - \phi_g), \quad (2.1a)$$

$$Q_g = C_g(\phi_g - V_g) + C(V_g - V_s). \quad (2.1b)$$

将(2.1)式改写为矩阵形式得到

$$\begin{pmatrix} Q_s + C_l V_l + C_r V_r \\ Q_g + C_g V_g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{\Sigma s} & -C \\ -C & C_{\Sigma g} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_s \\ \phi_g \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

式中 $C_{\Sigma s} = C_l + C_r + C$ 定义为量子点 QD_s 的总电容， $C_{\Sigma g} = C_g + C$ 定义为量子点 QD_g 的总电容。将(2.2)式进一步改写为

$$\begin{pmatrix} \phi_s \\ \phi_g \end{pmatrix} = \frac{1}{C_{\Sigma s} C_{\Sigma g} - C^2} \begin{pmatrix} C_{\Sigma g} & C \\ C & C_{\Sigma s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_s + C_l V_l + C_r V_r \\ Q_g + C_g V_g \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

根据静电能(electrostatic energy) $U = \frac{1}{2} \mathbf{Q}^T \mathbf{V}$ ，代入(2.2)式与(2.3)式可得到双量子点库仑耦合系统的静电能为

$$U(n_s, n_g) = \frac{1}{2} \frac{1}{C_{\Sigma s} C_{\Sigma g} - C^2} \begin{pmatrix} Q_s + C_l V_l + C_r V_r & Q_g + C_g V_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{\Sigma g} & C \\ C & C_{\Sigma s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_s + C_l V_l + C_r V_r \\ Q_g + C_g V_g \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

其中 $Q_s = n_s q$ ， $Q_g = n_g q$ 。 n_s 和 n_g 分别表示量子点 QD_s 和量子点 QD_g 上的电子数，

q 为元电荷。由(2.4)式进一步化简得到

$$U(n_s, n_g) = \frac{1}{2} \frac{1}{C_{\Sigma s} C_{\Sigma g} - C^2} \begin{pmatrix} n_s^2 q^2 C_{\Sigma g} + n_g^2 q^2 C_{\Sigma s} + 2n_s n_g q^2 C + 2n_s q C C_g V_g + 2n_g q C_{\Sigma s} C_g V_g \\ + 2n_s q C_{\Sigma g} \sum_i C_i V_i + 2n_g q C \sum_i C_i V_i + 2C C_g V_g \sum_i C_i V_i \\ + C_{\Sigma g} (\sum_i C_i V_i)^2 + C_{\Sigma s} (C_g V_g)^2 \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

其中 $i=l,r$ 。

在库仑阻塞情况下，每个量子点最多只能占据一个电子。因此，由(2.5)式可得当 n_s, n_g 分别等于 0 和 1 时，系统处于不同量子态时的静电能分别为

$$U(0,0) = \frac{1}{2} \frac{1}{C_{\Sigma_s} C_{\Sigma_g} - C^2} \left(2CC_g V_g \sum_i C_i V_i + C_{\Sigma_g} \left(\sum_i C_i V_i \right)^2 + C_{\Sigma_s} (C_g V_g)^2 \right), \quad (2.6a)$$

$$U(1,0) = \frac{1}{2} \frac{1}{C_{\Sigma_s} C_{\Sigma_g} - C^2} \left(q^2 C_{\Sigma_g} + 2qCC_g V_g + 2qC_{\Sigma_g} \sum_i C_i V_i \right) + U(0,0), \quad (2.6b)$$

$$U(0,1) = \frac{1}{2} \frac{1}{C_{\Sigma_s} C_{\Sigma_g} - C^2} \left(q^2 C_{\Sigma_s} + 2qC_{\Sigma_s} C_g V_g + 2qC \sum_i C_i V_i \right) + U(0,0), \quad (2.6c)$$

$$U(1,1) = \frac{1}{2} \frac{1}{C_{\Sigma_s} C_{\Sigma_g} - C^2} (2q^2 C) + U(1,0) + U(0,1) + U(0,0). \quad (2.6d)$$

根据(2.6)式，可以得到系统处于不同量子态时系统静电能随门系统的电势 V_g 的变化曲线，如图 2.2 所示。

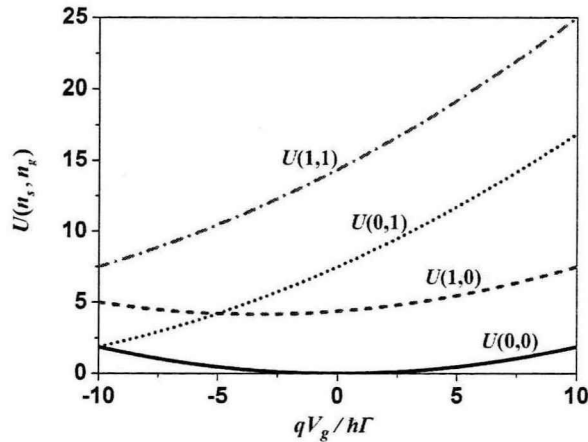


图 2.2 双量子点库仑耦合系统的静电能。参数： $C_l = C_r = C_g = q^2 / (20\hbar\Gamma)$,

$$C = q^2 / (50\hbar\Gamma), V_l = -10\hbar\Gamma/q, V_r = 10\hbar\Gamma/q.$$

由图 2.2 可以发现，双量子点系统为空态时(没有电子占据)具有最小的静电能。当有量子点隧穿到量子点，系统的静电能增加，增加的静电能称为系统的充

电能(Charging energy)。由(2.6)式可得充电能

$$U_{s0} = U(1,0) - U(0,0), \quad (2.7)$$

表示量子点 QD_s 为空态时, 电子隧穿到量子点 QD_s 时所需的充电能。

$$U_{g0} = U(0,1) - U(0,0), \quad (2.8)$$

表示量子点 QD_s 为空态时, 电子隧穿到量子点 QD_g 时所需的充电能。而当量子点

QD_g 被电子占据时, 电子隧穿到量子点 QD_s 需要的充电能为

$$U_{s1} = U(1,1) - U(0,1) = U_{s0} + U, \quad (2.9)$$

当量子点 QD_s 被电子占据时, 电子隧穿到量子点 QD_g 需要的充电能为

$$U_{g1} = U(1,1) - U(1,0) = U_{g0} + U, \quad (2.10)$$

其中

$$U = \frac{q^2}{\tilde{C}}, \quad (2.11)$$

$\tilde{C} = (C_{s_s} C_{s_g} - C^2) / C$ 为等效电容。能量 U 表示当一个电子隧穿到一个量子点并且在另一个量子点被占据后离开这个量子点时两个子系统所交换的能量。图 2.3 给出了系统不同状态下的充电能随门电势 V_g 的变化曲线。每个量子点充电能的差值等于交换的能量 U 。

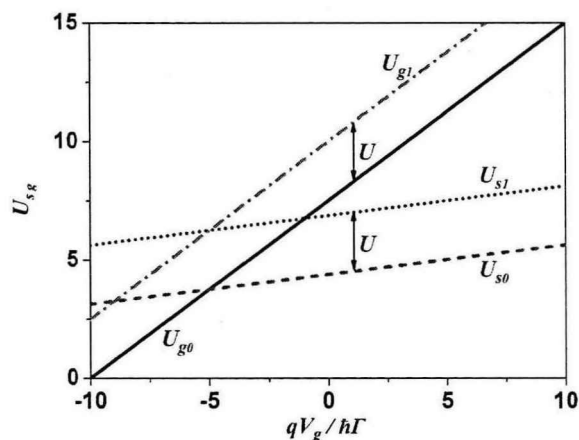


图 2.3 双量子点库仑耦合系统的充电能。参数与图 2.2 的相同。

§ 2.2 系统动力学

量子点作为典型的零维结构具有离散的能级[132]。在双量子点库仑耦合模型中，假设每个量子点只有一个单一能级，表示为 ε_α ，接近电子库的费米能级并与电子库相互作用。其他的能级明显远离电子库的费米能级因而可以忽略。每个电子库由无相互作用的电子构成，并且始终处于热平衡。则系统总的哈密顿量为

$$H = H_D + H_R + H_T, \quad (2.12)$$

其中

$$H_D = \sum_{\alpha=s,g} \varepsilon_\alpha d_\alpha^\dagger d_\alpha + U d_s^\dagger d_s d_g^\dagger d_g, \quad (2.13)$$

表示库仑耦合量子点的哈密顿量， (d^\dagger, d) 为量子点的产生/湮灭算符， U 表示量子点之间的库仑相互作用，

$$H_R = \sum_k \sum_{\alpha=l,r,g} \varepsilon_{\alpha k} c_{\alpha k}^\dagger c_{\alpha k}, \quad (2.14)$$

是电子库的哈密顿量， $\varepsilon_{\alpha k}$ 是波矢为 k 的无相互作用电子的能量， (c^\dagger, c) 表示电子库的产生/湮灭算符，

$$H_T = \sum_k \sum_{\alpha=l,r,g} (t_{\alpha k} c_{\alpha k}^\dagger d_\alpha + t_{\alpha k}^* d_\alpha^\dagger c_{\alpha k}), \quad (2.15)$$

表示量子点与电子库之间的隧穿哈密顿量， $t_{\alpha k}$ 及其共轭 $t_{\alpha k}^*$ 为隧穿振幅。量子点与电子库之间的耦合强度定义为 $\gamma(\varepsilon) = \sum_k (2\pi/\hbar) \sigma_\alpha(\varepsilon) |t_{\alpha k}(\varepsilon)|^2$ ，其中 $\sigma_\alpha(\varepsilon)$ 为电子库的态密度。

库仑阻塞情况下，每个量子点的单一能级最多只能有一个电子占据，因此双量子点库仑耦合系统的量子态 $|n_s, n_g\rangle$ 可以由每个量子点上的电子占有数 n_s 和 n_g 表示，分别为： $|0,0\rangle$ 、 $|0,1\rangle$ 、 $|1,0\rangle$ 、 $|1,1\rangle$ 。每一个量子态的占有几率为 p_{n_s, n_g} ，如图 2.4 所示。图中 $\Gamma_{\alpha n}^\pm$ 表示当其中一个量子点有 n ($n=0,1$)个电子占据时，电子通过电子库 α ($\alpha=s, g$ 其中 $s=l, r$)进入(+)或者离开(-)另一个量子点时的传输几率。

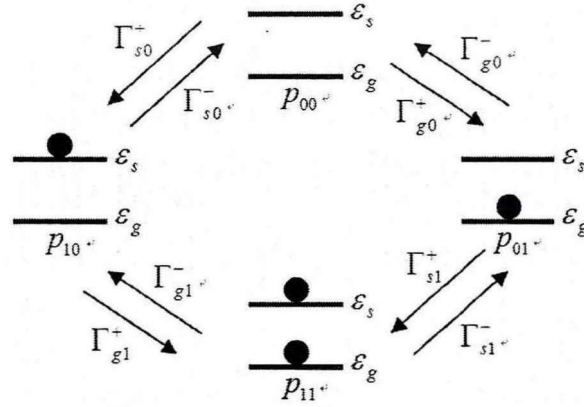


图 2.4 双量子点库仑耦合系统量子态与传输几率。

在量子开放系统中，系统量子态的占有几率分别表示为密度矩阵的对角元，即： $\mathbf{p} = (p_{00}, p_{01}, p_{10}, p_{11})^T$ 。在弱耦合情况下($\hbar\gamma \ll k_B T$)，量子点能级宽度能够忽略，电子的输运过程被描述为序贯隧穿(sequential tunneling)。这种情况下，密度矩阵的非对角元对稳态下的量子态占有几率是没有影响的。因此系统量子态的占有几率随时间的演化由主方程给出[173-175]，即

$$\begin{pmatrix} \dot{p}_{00} \\ \dot{p}_{10} \\ \dot{p}_{01} \\ \dot{p}_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Gamma_{s0}^+ - \Gamma_{g0}^+ & \Gamma_{s0}^- & \Gamma_{g0}^- & 0 \\ \Gamma_{s0}^+ & -\Gamma_{s0}^- - \Gamma_{g1}^+ & 0 & \Gamma_{g1}^- \\ \Gamma_{g0}^+ & 0 & -\Gamma_{s1}^+ - \Gamma_{g0}^- & \Gamma_{s1}^- \\ 0 & \Gamma_{g1}^+ & \Gamma_{s1}^+ & -\Gamma_{s1}^- - \Gamma_{g1}^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{00} \\ p_{10} \\ p_{01} \\ p_{11} \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

其中 $\Gamma_{sn}^\pm = \Gamma_{ln}^\pm + \Gamma_{rn}^\pm$ ，($s = l, r$)。根据费米黄金律(Fermi's golden rule)，传输几率 Γ_{an}^\pm 分别为

$$\Gamma_{an}^+ = \gamma_{an} f(\varepsilon_\alpha + U_{an}), \quad (2.17)$$

表示电子由电子库隧穿到量子点的几率。其中 γ_{an} 为耦合强度，也可称为电子裸穿几率。 U_{an} 为不同量子态下的充电能。电子由量子点隧穿回电子库的几率为

$$\Gamma_{an}^- = \gamma_{an} [1 - f(\varepsilon_\alpha + U_{an})], \quad (2.18)$$

其中 $f(x) = \{\exp[(x - \mu_\alpha)/(k_B T_\alpha)] + 1\}^{-1}$ 是费米-狄拉克分布函数。 k_B 是玻尔兹曼常数。假设每一个电子库都可视为无限大热源，并都处于局域热平衡，温度为 T_α ，化学势为 μ_α 。

由主方程(2.16)式可得到稳态, 即 $\dot{p}_{n_s, n_g} = 0$, 情况下每个量子态的占有几率为

$$p_{00} = \frac{1}{\Omega} \left(\Gamma_{s1}^+ \Gamma_{g1}^- \Gamma_{s0}^- + \Gamma_{g0}^- \Gamma_{g1}^- \Gamma_{s0}^- + \Gamma_{g0}^- \Gamma_{g1}^+ \Gamma_{s1}^- + \Gamma_{g0}^- \Gamma_{s0}^- \Gamma_{s1}^- \right), \quad (2.19a)$$

$$p_{10} = \frac{1}{\Omega} \left(\Gamma_{g0}^+ \Gamma_{s1}^+ \Gamma_{g1}^- + \Gamma_{s0}^+ \Gamma_{s1}^+ \Gamma_{g1}^- + \Gamma_{s0}^+ \Gamma_{g0}^- \Gamma_{g1}^- + \Gamma_{s0}^+ \Gamma_{g0}^- \Gamma_{s1}^- \right), \quad (2.19b)$$

$$p_{01} = \frac{1}{\Omega} \left(\Gamma_{g1}^+ \Gamma_{s0}^+ \Gamma_{s1}^- + \Gamma_{g0}^+ \Gamma_{g1}^- \Gamma_{s0}^- + \Gamma_{g0}^+ \Gamma_{g1}^+ \Gamma_{s1}^- + \Gamma_{g0}^+ \Gamma_{s0}^- \Gamma_{s1}^- \right), \quad (2.19c)$$

$$p_{11} = \frac{1}{\Omega} \left(\Gamma_{g0}^+ \Gamma_{s1}^+ \Gamma_{g1}^+ + \Gamma_{s0}^+ \Gamma_{s1}^+ \Gamma_{g1}^+ + \Gamma_{s0}^+ \Gamma_{g0}^- \Gamma_{g1}^+ + \Gamma_{s0}^+ \Gamma_{g0}^- \Gamma_{s1}^+ \right), \quad (2.19d)$$

其中 Ω 为归一化因子。

根据式(2.9), 可以得到由量子点到左侧库和右侧库的稳态电荷流分别为

$$I_l = q \left(\Gamma_{l0}^- p_{10} - \Gamma_{l0}^+ p_{00} + \Gamma_{l1}^- p_{11} - \Gamma_{l1}^+ p_{01} \right), \quad (2.20)$$

$$I_r = q \left(\Gamma_{r0}^- p_{10} - \Gamma_{r0}^+ p_{00} + \Gamma_{r1}^- p_{11} - \Gamma_{r1}^+ p_{01} \right). \quad (2.21)$$

由粒子数守恒, 可以得到电荷流 I_l 和 I_r 满足 $I_r = -I_l$ 。

由式(2.20)和(2.21)可以得到, 进入左侧和右侧电子库的热流为

$$J_l = (\varepsilon_s + U_{s0} - \mu_l) \left(\Gamma_{l0}^- p_{10} - \Gamma_{l0}^+ p_{00} \right) + (\varepsilon_s + U_{s1} - \mu_l) \left(\Gamma_{l1}^- p_{11} - \Gamma_{l1}^+ p_{01} \right), \quad (2.22)$$

$$J_r = (\varepsilon_s + U_{s0} - \mu_r) \left(\Gamma_{r0}^- p_{10} - \Gamma_{r0}^+ p_{00} \right) + (\varepsilon_s + U_{s1} - \mu_r) \left(\Gamma_{r1}^- p_{11} - \Gamma_{r1}^+ p_{01} \right). \quad (2.23)$$

并且, 由子系统 g 注入到子系统 s 的总的热流为

$$J_g = (\varepsilon_g + U_{g0} - \mu_g) \left(\Gamma_{g0}^+ p_{00} - \Gamma_{g0}^- p_{01} \right) + (\varepsilon_g + U_{g1} - \mu_g) \left(\Gamma_{g1}^+ p_{10} - \Gamma_{g1}^- p_{11} \right). \quad (2.24)$$

因为子系统 g 中只存在电子波动, 因此稳态下没有电子流, 即 $I_g = 0$ 。可得

$$\Gamma_{g0}^+ p_{00} - \Gamma_{g0}^- p_{01} = - \left(\Gamma_{g1}^+ p_{10} - \Gamma_{g1}^- p_{11} \right), \quad (2.25)$$

代入(2.24)式, 可将热流 J_g 化简为

$$J_g = U \left(\Gamma_{g1}^+ p_{10} - \Gamma_{g1}^- p_{11} \right). \quad (2.26)$$

在本文的研究中, 令 $\mu_g = \mu_l$, $C_g = C_l = C_r \equiv C_0$, 每个量子点的能量

$\varepsilon_s = \varepsilon_g = 0$, 可得

$$E_l = U_{s0} - \mu_l = \frac{(C_0 + C) \left[q^2 + 2C_0 (\mu_r - \mu_l) \right]}{2C_0 (2C_0 + 3C)}, \quad (2.27)$$

$$E_r = U_{s0} - \mu_r = \frac{q^2(C_0 + C) - 2C_0(C_0 + 2C)(\mu_r - \mu_l)}{2C_0(2C_0 + 3C)}, \quad (2.28)$$

和

$$U = \frac{q^2 C}{C_0(2C_0 + 3C)}. \quad (2.29)$$

可将方程(2.22)和(2.23)进一步改写为

$$J_l = E_l(\Gamma_{l0}^- p_{l0} - \Gamma_{l0}^+ p_{00}) + (E_l + U)(\Gamma_{ll}^- p_{ll} - \Gamma_{ll}^+ p_{0l}), \quad (2.30)$$

$$J_r = E_r(\Gamma_{r0}^- p_{r0} - \Gamma_{r0}^+ p_{00}) + (E_r + U)(\Gamma_{rl}^- p_{rl} - \Gamma_{rl}^+ p_{0l}). \quad (2.31)$$

根据图 2.4 可知, 系统的量子态经过一个顺时针的循环过程, 即 $p_{00} \rightarrow p_{0l} \rightarrow p_{ll} \rightarrow p_{lr} \rightarrow p_{00}$, 则大小为 U 的热量由子系统 s 传输到子系统 g 。而当系统的量子态经历一个逆时针循环过程, 即 $p_{00} \rightarrow p_{lr} \rightarrow p_{ll} \rightarrow p_{0l} \rightarrow p_{00}$, 则热量由子系统 g 进入子系统 s 。具体的能量与电子的输运过程如图 2.5 所示。

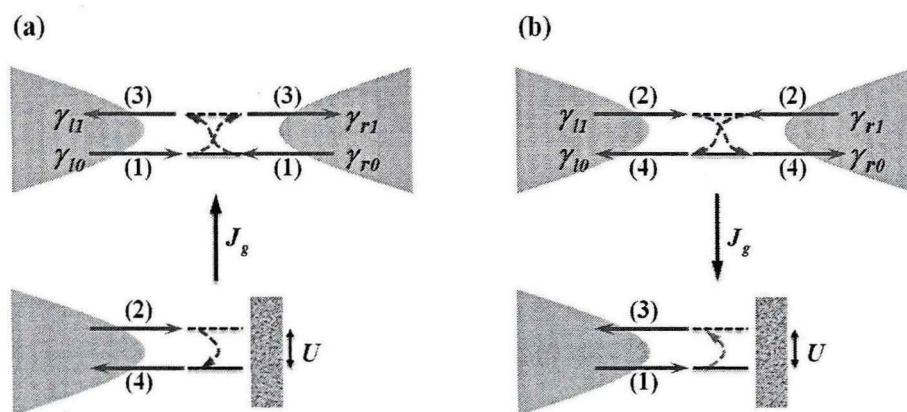


图 2.5 电子与能量输运示意图。

图 2.5(a)具体描述了量子态经历一个逆时针循环过程。该过程可以描述为四个过程: (1)低能电子由左/右侧库隧穿到量子点 QD_s 。(2) 由于量子点 QD_s 已经被占据, 因此电子由电子库 g 隧穿到量子点 QD_s 需要额外的能量 U 以克服库仑相互作用, 此时量子点系统的电子能量升高。(3)高能电子携带能量 U 隧穿到右/左侧电子库, 并将能量释放到子系统 s 。(4)低能量子隧穿回电子库 g , 系统回到初始

状态。稳态下, 逆时针循环过程产生热流 J_g , 从子系统 g 吸热并释放到子系统 s 。而量子态经历一个顺时针循环过程, 如图 2.5(b)所示。该过程可描述为: (1)低能电子隧穿到量子点 QD_g 。(2)高能电子由左/右侧电子库吸热隧穿到量子点 QD_s , 在库仑相互作用下量子点 QD_g 上电子能量增加。(3) 量子点 QD_s 上的高能电子隧穿回电子库 g , 并将热量释放到子系统 g , 同时量子点 QD_s 上电子能量降低。(4) 量子点 QD_s 上的低能电子隧穿到右/左侧电子库。系统完成一个循环回到初始状态。稳态下, 这个过程产生的热流由子系统 s 流向子系统 g 。通过上述分析可知, 通过具体的结构与参数设计本章所提出的库仑耦合量子点模型能够构造热机与制冷机。该内容将在第三章和第四章具体研究。

§ 2.3 本章小结

本章内容作为第三与第四章的基础, 建立了三端库仑耦合量子点模型。在库仑阻塞情况下, 计算了量子点系统不同量子态下的静电能与量子态变化所需的充电能, 得到了描述电容型耦合量子点之间的库仑相互作用。基于主方程方法, 推导出了三端量子点系统的电荷流与热流的表达式, 并且详细表述了系统的电荷流与热流的输运特性, 为第三与第四章分别建立三端库仑耦合量子点热机与制冷机提供了理论支持。

第三章 三端库仑耦合量子点热机

三端库仑耦合量子点热机是基于双量子点库仑耦合模型构造出来的热电器件，由 Sánchez 和 Büttiker 首先提出。并且确定了该三端库仑耦合量子点热机在理想情况下能够实现可逆，热电转换效率能够达到卡诺效率[29]。但对于实际的热电热机，非理想情况下即考虑不可逆损失时所包含的物理内容更加丰富，对于热机的构造及优化更加具有指导意义。因此，本章的内容将在文献[29]的基础上进一步提出两种不同的热机工作方式，并且着重研究系统内部不可逆损失对三端库仑耦合量子点热机的性能特性的影响。最后系统的比较两种不同配置下热机的性能、优化区间及最大功率下的优化性能。

§ 3.1 热机的热力学描述

第二章的研究表明，库仑耦合量子点模型能够通过子系统 s 与子系统 g 之间的热量交换，实现子系统 s 的电子输运。因此，可以通过精心的结构与参数设计实现三端库仑耦合量子点热机。在本章的研究，我们首先令电子流 $I \equiv I_r = -I_l$ 。设置量子点能级 $\varepsilon_s = \varepsilon_g = 0$ ，并且左侧电子库与右侧电子库具有相同的温度，即 $T_l = T_r \equiv T_s$ 。但两侧的化学势不同，因此定义偏压 $q\Delta V = \mu_r - \mu_l$ 。非对称能量依赖隧穿表示为 $\gamma_{am} = \gamma$ 然而 $\gamma_{l1} = \gamma_{r0} = \lambda\gamma$ ($0 \leq \lambda \leq 1$)，这里 λ 定义为耗散因子 (dissipation factor) [157, 158]。根据方程(2.20)-(2.26)，可以得电子流 I ，热流 J_l 、 J_r 和 J_g 随温差 ΔT 和偏压 ΔV 变化的曲线，如图 3.1 所示。

理论上，热电热机是由温差驱动电子克服偏压对外做功的装置。在我们的模型及参数条件下，实现热机操作既是实现 $I\Delta V > 0$ 同时热流 J_g 由高温子系统流向低温子系统。结合图 3.1 的具体分析，可以发现能够实现热机操作的工作区间及对应的参数，如图 3.2 所示。其中红色区域的边界由 $J_g = 0$ 确定，而黑色区域的边界由 $I = 0$ 确定。

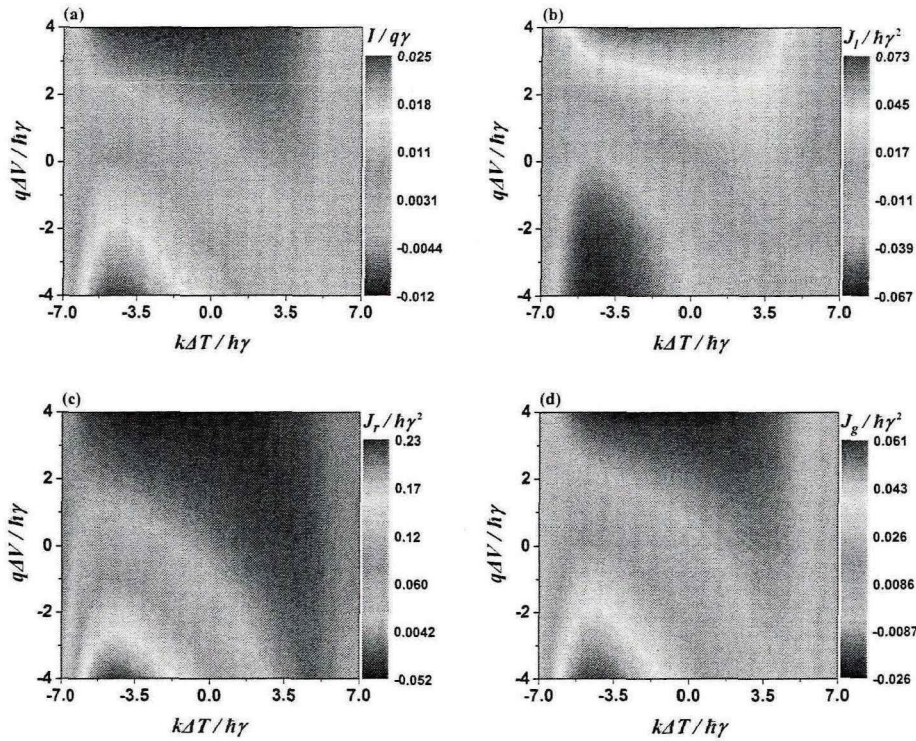


图 3.1 当 $\lambda = 0.01$ 时, 电子流 I , 热流 J_l 、 J_r 和 J_g 随温差 ΔT 和偏压 ΔV 变化的三维投影图。参数: $T_s = 7.5 + \Delta T$, $T_g = 7.5 - \Delta T$, $q^2/C = 50\hbar\gamma$, $q^2/C_\alpha = 20\hbar\gamma$ 。

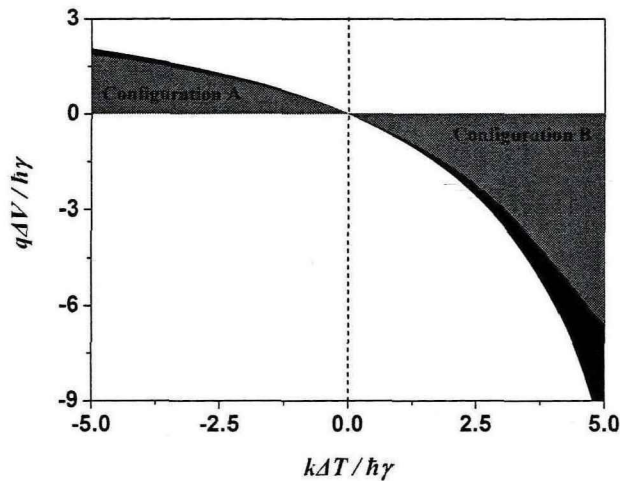


图 3.2 两种不同配置下热机的工作区间。

图 3.2 给出了库仑耦合量子点热机的工作区间, 如图中红色区域所示。可以发现热机的工作区间分布在两个不同的区域, 具有不同的系统配置。当热机工作

在配置 A(Configuration A)区间时, 温度 $T_g > T_s$, 在温度梯度的驱动下, 高温端(子系统 g)热流 J_g^A 通过库仑相互作用驱动电子流 $I(= I_r)$ 由左侧电子库流向右侧电子库。同时克服外界偏压 $q\Delta V_A = \mu_r - \mu_l$ 实现对外做功, 如图 3.3 左图所示。

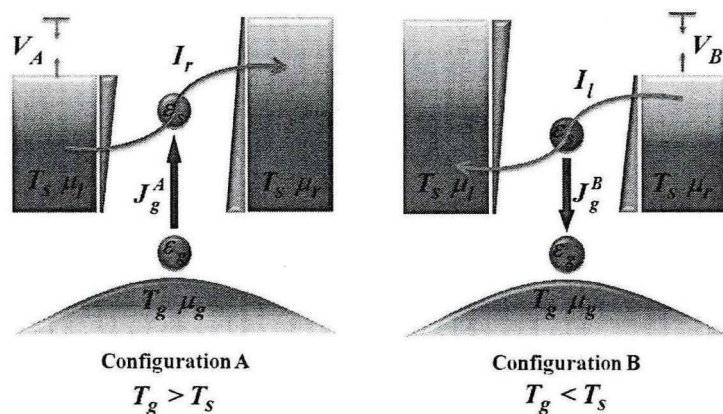


图 3.3 热机的两种工作模式。

因此功率表示为

$$P_A = I_r \Delta V_A = I \Delta V. \quad (3.1)$$

剩余的热量被释放到低温库(子系统 s)。根据热力学第一定律, 配置 A 的效率定义为

$$\eta_A = \frac{P_A}{J_g^A}. \quad (3.2)$$

当热机工作在配置 B (Configuration B)时, 系统温度 $T_g < T_s$ 。子系统 s 中的高能电子从右侧库隧穿到量子点 QDs , 通过库仑相互作用将一部分能量 J_g^B 通过量子点 QDg 传输到低温库(子系统 g), 在非对称能量依赖隧穿势垒的帮助下, 最终低能电子隧穿到左侧电子库, 同时克服偏压 $q\Delta V_B = \mu_l - \mu_r$ 对外做功, 如图 3.3 所示。因此, 配置 B 的功率和效率分别定义为

$$P_B = I_l \Delta V_B = I \Delta V, \quad (3.3)$$

$$\eta_B = \frac{P_B}{J_s} = \frac{P_B}{P_B - J_g^B}, \quad (3.4)$$

其中 $J_s = P_B - J_g^B$ 满足热力学第一定律。

根据热力学理论，系统的熵流定义为

$$J_s = \frac{J_l}{T_l} + \frac{J_r}{T_r} + \frac{-J_g}{T_g}. \quad (3.5)$$

图 3.4 给出了不同耗散因子 λ 情况下，系统熵流随温差 ΔT 和偏压 ΔV 变化的三维曲线。可以发现，非平衡态下 ($\Delta T \neq 0$, $\Delta V \neq 0$)，系统的熵随耗散因子 λ 的增加而增加。并且在 $\lambda \neq 0$ 的情况下，系统的熵变始终大于零。特别的，在 $\lambda = 0$ 的情况下，热机能够实现可逆，此时系统的熵变为零，即 $J_s = 0$ 。

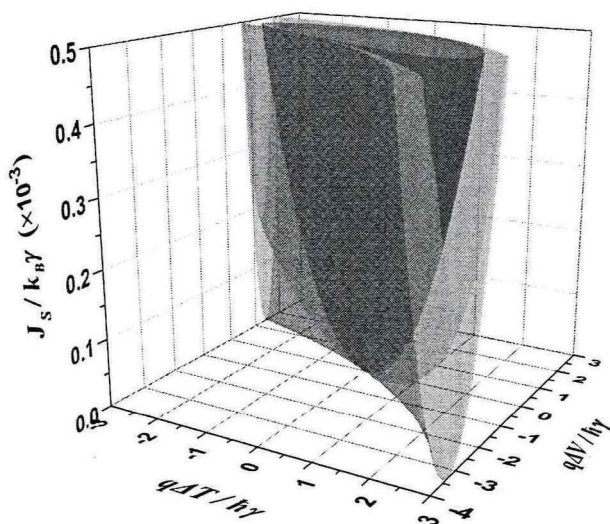


图 3.4 熵流随温差 ΔT 和偏压 ΔV 变化的三维曲线。蓝色对应 $\lambda = 0$ ，绿色对应 $\lambda = 0.01$ ，红色对应 $\lambda = 0.05$ 。参数： $T_s = 7.5 + \Delta T$ ， $T_g = 7.5 - \Delta T$ ， $q^2/C = 50\hbar\gamma$ ，

$$q^2/C_a = 20\hbar\gamma \text{ (即 } U = 2.5\hbar\gamma \text{)}.$$

根据式(2.22)-(2.24)和(3.5)可以得到系统可逆时满足

$$q\Delta V \equiv \mu_r - \mu_l = U \left(1 - \frac{T_s}{T_g} \right). \quad (3.6)$$

即图 3.4 中蓝色曲线与 $\Delta T \sim \Delta V$ 平面的交线满足的关系式。根据式(2.21)与(2.24)可以得到在 $\lambda = 0$ 的情况下, 电子流与热流满足如下量子化关系

$$\frac{I}{J_g} = \frac{q}{U}. \quad (3.7)$$

式(3.7)表明, 在 $\lambda = 0$ 的情况下, 高温端向低温端每传输一个量子化能量 U , 都可以驱动一个电子克服偏压做功。将式(3.6)和(3.7)分别带入效率表达式(3.2)和(3.4)可得到在 $\lambda = 0$ 的情况下, 两种不同配置下热机能够达到各自的卡诺效率 (Carnot efficiency), 分别为: $\eta_A^{Carnot} = 1 - T_s/T_g$ 和 $\eta_B^{Carnot} = 1 - T_g/T_s$ 。

§ 3.2 配置 A 下热机的性能

在本节中, 我们以配置 A 下的热机作为研究目标, 具体阐明库仑耦合量子点热机的性能特性及优化。因此, 在本节中略去角标 “A”。

图 3.5 给出了热机在不同耗散因子 λ 下的性能特性曲线, 其中图 3.5(a)和 3.5(b)分别为功率和效率随偏压的变化曲线。可以发现, 当 $\lambda = 0$ 时, 热机的效率可以达到卡诺效率($\eta_A^{Carnot} = 1 - T_s/T_g = 0.5$), 然而对应的功率为零。在这一点系统的熵为零, 热机实现可逆。当 $\lambda \neq 0$ 时, 系统的内部耗散增加, 导致热机工作在非可逆情况下, 此时功率和效率随着偏压的增加先增加后减小, 偏压等于开路电压 V_{open} 时, 功率和效率同时为零。因此, 热机的功率和效率都存在最大值分别为 P_{max} 和 η_{max} , 对应的优化偏压分别为 ΔV_p 和 ΔV_η 。并且热机的功率和效率随着 λ 的增加逐减小。由图 3.5(a)和(b), 可以得到热机的功率随效率的变化曲线, 也称为 $P \sim \eta$ 特征曲线, 如图 3.5(c)所示。理想情况下($\lambda = 0$), $P \sim \eta$ 特征曲线为抛物线形, 热机的效率能够达到卡诺效率。而非理想情况下($\lambda \neq 0$), $P \sim \eta$ 特征曲线是闭合曲线。最大功率点与最大效率点将曲线分为三段, 其中两段斜率为正, 另一段斜率为负。可以发现在最大功率点两侧, 斜率为正的区域效率随功率的减小而减小, 在斜率为负的区域效率随功率的减小而增大。在最大效率点两侧, 斜率为正的区域功率随效率的减小而减小, 在斜率为负的区域功率随效率的减小而增大。因此, 综合上述分析可知, 热机的优化区间应位于特征曲线的负斜率区域,

如图 3.6(c)灰色区域所示。

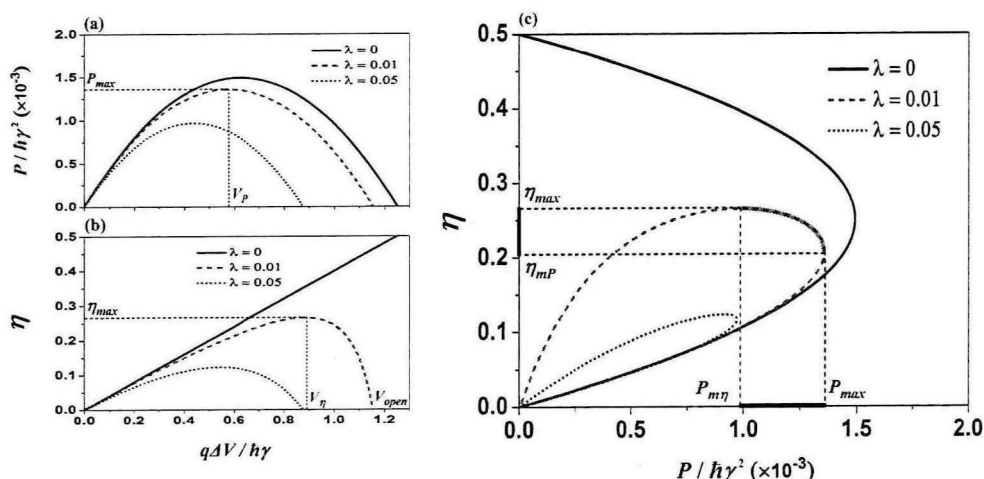


图 3.5 不同耗散因子 λ 下热机的性能特性曲线。参数: $k_B T_s = 5\hbar\gamma$, $k_B T_g = 10\hbar\gamma$,

$$q^2/C = 50\hbar\gamma, \quad q^2/C_\alpha = 20\hbar\gamma.$$

在优化区间可以确定描述热机优化区间的四个重要的参数, 分别为: 最大效率 η_{max} 、最大功率下效率 η_{mP} 、最大功率 P_{max} 和最大效率下功率 $P_{m\eta}$ 。可得热机工作在优化区间时, 功率和效率满足

$$P_{m\eta} \leq P \leq P_{max}, \quad (3.8)$$

$$\eta_{mP} \leq \eta \leq \eta_{max}. \quad (3.9)$$

由图 3.5(a)和(b)可得, 为使热机工作在优化区间, 偏压应满足

$$\Delta V_p \leq \Delta V \leq \Delta V_\eta. \quad (3.10)$$

ΔV_p 和 ΔV_η 也是两个重要的参数, 确定了库仑耦合量子点热机在实际的应用中外部偏压的上下限。图 3.6 给出了开路电压 ΔV_{open} , 最大功率下电压 ΔV_p 和最大效率下电压 ΔV_η 随耗散因子 λ 的变化曲线。电压 ΔV_η 和 ΔV_p 所包围的区域即是热机的优化区域, 如图 3.6(c)灰色区域所示。在这个区域中, 热机始终工作在 $P \sim \eta$ 特征曲线的负斜率区域, 并且随着 λ 的增大热机的优化区间急剧减小。

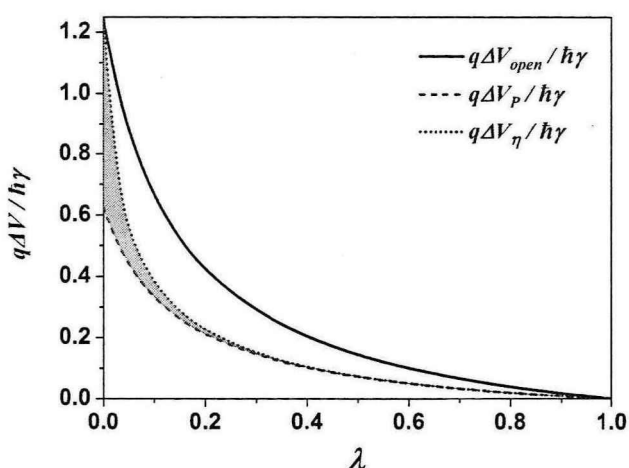


图 3.6 开路电压 ΔV_{open} , 最大功率下电压 ΔV_p 和最大效率下电压 ΔV_η 随耗散因子 λ 的变化曲线。阴影区域为热机的优化区间。

图 3.7 给出了热机最大功率 P_{max} 和最大功率下效率 η_{mP} 随耗散因子 λ 的变化曲线。

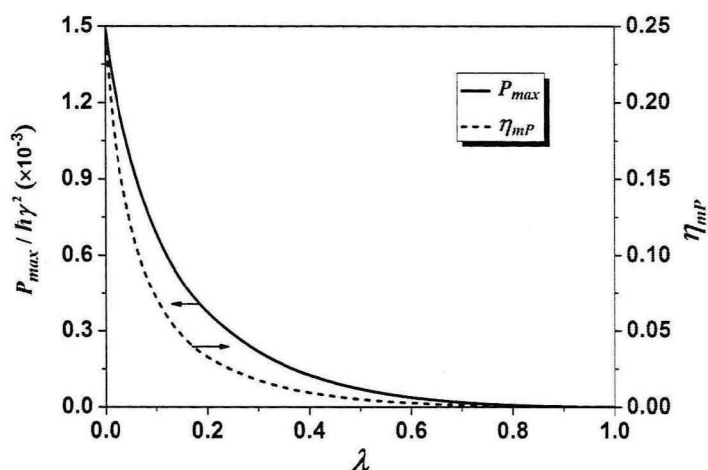


图 3.7 热机最大功率 P_{max} 和最大功率下效率 η_{mP} 随耗散因子 λ 的变化曲线。

可以发现, 最大功率 P_{max} 和最大功率下效率 η_{mP} 随耗散因子 λ 的增加急剧的减小。这是因为, 随着 λ 的增加, 电子由 γ_{l1} 和 γ_{r0} 决定的输运过程逐渐增强。由图 2.5

的分析可知，在热机配置 A 下，电子的输运过程 γ_{l1} 和 γ_{r0} 表示在偏压的驱动下低能电子由右侧电子库隧穿，获得能量后隧穿到左侧电子库。这个过程只是一般的传输过程，并没有对外输出功。由高温端吸收的热量完全耗散到了低温端，因此我们称 λ 为耗散因子。这个耗散过程的增强使得电子克服偏压由左侧电子库隧穿到右侧电子库的净流迅速减小，导致功率和效率也随之减小。因此，抑制隧穿过程 γ_{l1} 和 γ_{r0} ，能够提高克服偏压对外做功的净流，从而提高热机性能。因此在库仑耦合量子点热机模型中，采用了非对称的能量依赖隧穿。

对于热机在最大功率的优化情况下，耗散因子 λ 越小，热机的性能越好。但是，在最大效率优化的情况下，为了兼顾功率和效率，耗散因子 λ 并非越小越好。图 3.8 给出了热机最大效率 η_{max} 和最大效率下功率 $P_{m\eta}$ 随耗散因子 λ 的变化曲线。

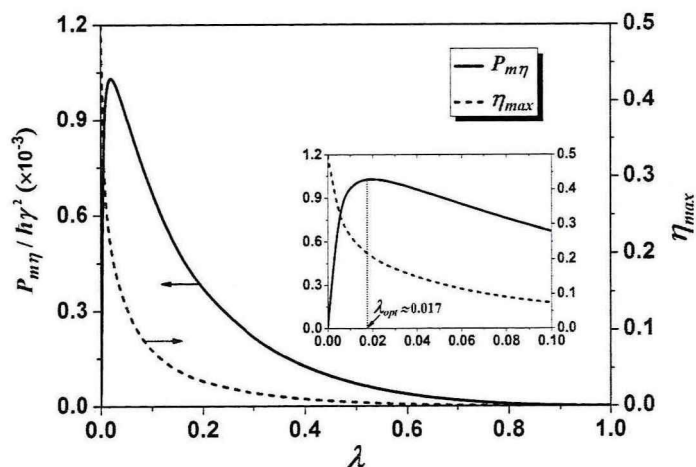


图 3.8 热机最大效率 η_{max} 和最大效率下功率 $P_{m\eta}$ 随耗散因子 λ 的变化曲线。内插图为局部放大图。

可以发现，最大效率 η_{max} 随耗散因子 λ 的增加急剧减小。但最大效率下功率 $P_{m\eta}$ 随耗散因子 λ 的增加呈现先增后减的变化。当 $\lambda_{opt} \approx 0.017$ 时最大效率下功率 $P_{m\eta}$ 达到最大值，如图 3.8 内插图所示。这是由于，当 $\lambda = 0$ 时热机实现可逆操作，此时效率达到卡诺效率，然而功率为零。在 $\lambda < \lambda_{opt}$ 区间时，虽然随着 λ 的增加，

耗散过程 γ_{l1} 和 γ_{r0} 逐渐增强，但做功过程 γ_{l0} 和 γ_{r1} 的增加明显优于耗散过程，因此在这个区间系统克服偏压做功的净电子流逐渐增加的。而在 $\lambda > \lambda_{opt}$ 区间时，耗散过程的增加更加明显，使得克服偏压做功的净电子流逐渐减小，因此导致功率逐渐减小。

综合上述分析可知，为了使得热机无论在什么情况下都具有较好的性能，耗散因子 λ 因满足 $0 < \lambda < \lambda_{opt}$ 。

§ 3.3 两种配置下的性能比较

实际的热机不可避免的由于耗散等因素导致不可逆损失。在这一节中，我们将模拟实际的量子点热机，因此，我们给定相同的耗散因子 $\lambda = 0.01$ 。并且比较两种不同配置下热机的性能特性。

两种不同配置下热机的功率和效率随偏压的变化曲线，如图 3.9(a) 和 3.9(b) 所示。可以发现，热机在两种不同配置下的功率和效率都随着偏压的增加呈现先增后减的变化。因此，存在两个优化偏压 V_p 和 V_η 分别给出热机在给定库仑相互作用 ($U = 2.5\hbar\gamma$) 下优化偏压对应的最大功率 $P_{max,V}$ 和最大效率 $\eta_{max,V}$ 。图 3.9(c) 给出了不同偏压下两种配置热机的特征曲线。

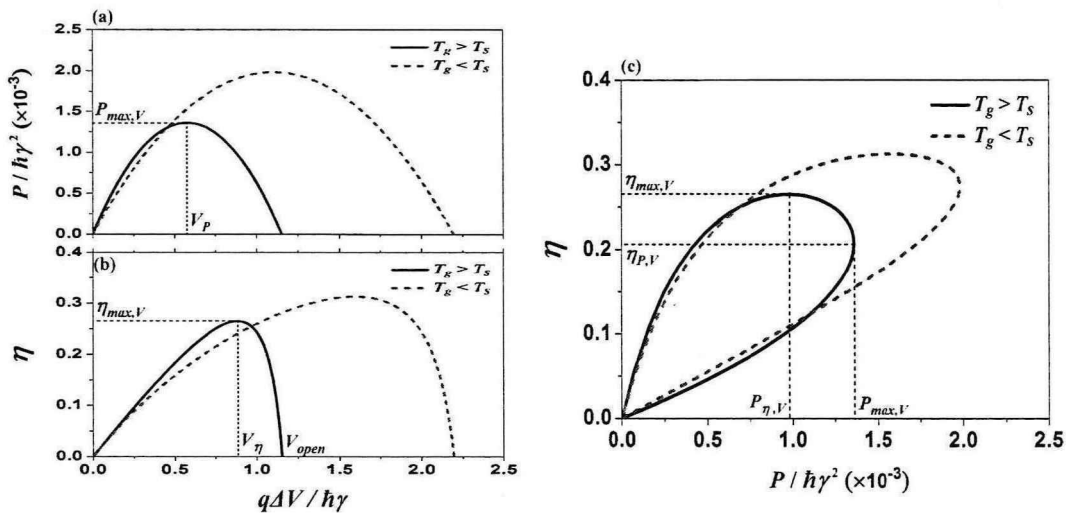


图 3.9 两种不同配置下热机的性能特性随偏压 ΔV 的变化曲线。

由上一节的分析可知，热机的优化区间应位于特征曲线的负斜率区域，在优化区间内热机在给定库仑相互作用下的优化功率和优化效率分别满足 $P_{\eta,V} \leq P \leq P_{max,V}$ 和 $\eta_{P,V} \leq \eta \leq \eta_{max,V}$ 。其中 $P_{\eta,V}$ 是给定库仑相互作用下优化偏压得到的最大效率对应的功率， $\eta_{P,V}$ 是给定库仑相互作用下优化偏压得到的最大功率对应的效率。优化区间的两个端点分别对应优化偏压 V_P 和 V_η ，因此 V_P 和 V_η 给出了优化偏压的上限和下限。比较热机在两种不同配置下的优化性能可以发现，在优化区间内热机配置 B($T_g < T_s$) 的性能明显优于配置 A($T_g > T_s$) 的性能。

图 3.10 给出了热机在给定偏压 $q\Delta V = 2\hbar\gamma$ 情况下，不同配置下性能特性随库仑相互作用 U 的变化曲线。由图 3.10(a) 和 3.10(b) 可知，为了保证库仑耦合量子点系统作为热机能够正常工作，库仑相互作用必须满足 $U_{min} \leq U \leq U_{max}$ ，其中 U_{min} 和 U_{max} 分别为库仑相互作用的最小值和最大值。这是因为，量子点之间电子的库仑相互作用的大小 U ，决定了系统作为热机在每一个系统量子态的循环过程中由高温端向低温端转移的能量，库仑相互作用的能量由高温端提供，并用来驱动低温端电子克服偏压实现对外做功。因此， U_{min} 表明低温端电子克服偏压所需要的最小库仑相互作用能量，以保证传导子系统的电子能够由低化学势的一端隧穿到高化学势的一端。 U_{max} 表明高温端电子隧穿到量子点所能够克服的最大库仑相互作用，也就是低温端的量子点被占据时，高温端的电子隧穿到量子点所能够克服的最大能量。在热机的工作范围内，功率和效率随库仑相互作用 U 的增加先增加后减小，因此，存在两个优化值 U_P 和 U_η 分别给出热机在给定偏压的情况下的最大功率 $P_{max,U}$ 和最大效率 $\eta_{max,U}$ 。而在库仑相互作用的优化范围内，即 $U_\eta \leq U \leq U_P$ ，热机工作在特征曲线的负斜率区域，在优化区间内热机在给定偏压下的优化功率和优化效率分别满足 $P_{\eta,U} \leq P \leq P_{max,U}$ 和 $\eta_{P,U} \leq \eta \leq \eta_{max,U}$ 。其中 $P_{\eta,U}$ 是给定偏压下优化库仑相互作用得到的最大效率对应的功率， $\eta_{P,U}$ 是给定偏压下

优化库仑相互作用得到的最大功率对应的效率。如图 3.10(c)所示。并且配置 B($T_g < T_s$)的性能明显优于配置 A($T_g > T_s$)的性能。

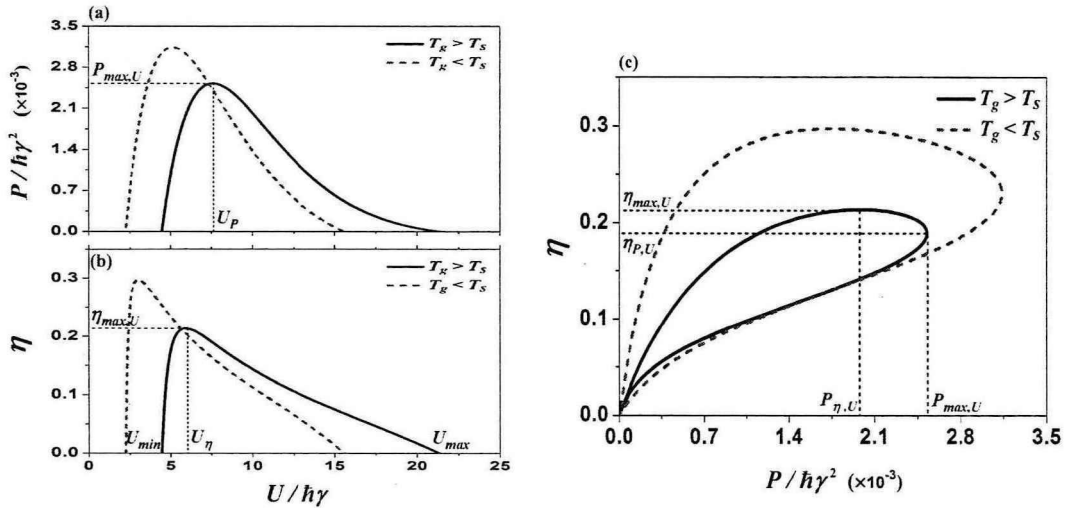


图 3.10 两种不同配置下热机的性能特性随库仑相互作用 U 的变化曲线。

由上述的分析可知，为使热机工作在优化区间(负斜率区间)，热机的偏压和库仑相互作用应满足 $V_p \leq V \leq V_\eta$ 和 $U_\eta \leq U \leq U_p$ 。图 3.11 分别给出了不同配置下优化偏压 V_p 和 V_η 随库仑相互作用 U 的变化曲线和优化库仑相互作用 U_p 和 U_η 随偏压 ΔV 的变化曲线。可以发现，在 $\Delta V \sim U$ 参数空间中，偏压的优化区间为红色所覆盖的区域，而库仑相互作用的优化区间为蓝色区域。两个区域重叠的区间既满足优化偏压又满足优化库仑相互作用。因此图 3.11 中的重叠区域是热机在全参数空间下的优化区间。区间的端点 A 和 B 给出了两种配置县优化库仑相互作用的阈值分别为 $V_{opt,thr}$ 和 $V_{opt,thr}$ 。两个优化区域边界的另一个焦点对应最大功率点，此时的优化偏压和库仑相互作用分别为 $\Delta V_{P_{max}}$ 和 $U_{P_{max}}$ 。图 3.12 给出了更加直观的展示。

两种不同配置下热机的功率随库仑相互作用 U 和偏压 ΔV 的变化曲线，如图 3.12 所示。三维投影图的边界确定任意库仑相互作用 U 下的开路电压 ΔV_{open} 和任意电压 ΔV 下库仑相互作用的最大值 U_{max} 和最小值 U_{min} 。图中的黑色实线给出任

意库仑相互作用 U 下优化偏压所得到的最大功率 $P_{\max,V}$ 。而黑色虚线对应于任意偏压 ΔV 下优化库仑相互作用 U 所得到的最大功率 $P_{\max,U}$ 。沿着两条曲线在三维投影图上的轨迹可以发现, $P_{\max,V}$ 随 U 的增加先增加后减小, $P_{\max,U}$ 随着 ΔV 的增加也是先增加后减小。因此两条曲线的焦点给出了热机在整个参数空间的最大功率 P_{\max} , 焦点所给出的偏压及库仑相互作用即对应的最优化偏压 $\Delta V_{P_{\max}}$ 和最优化库仑相互作用 $U_{P_{\max}}$ 。

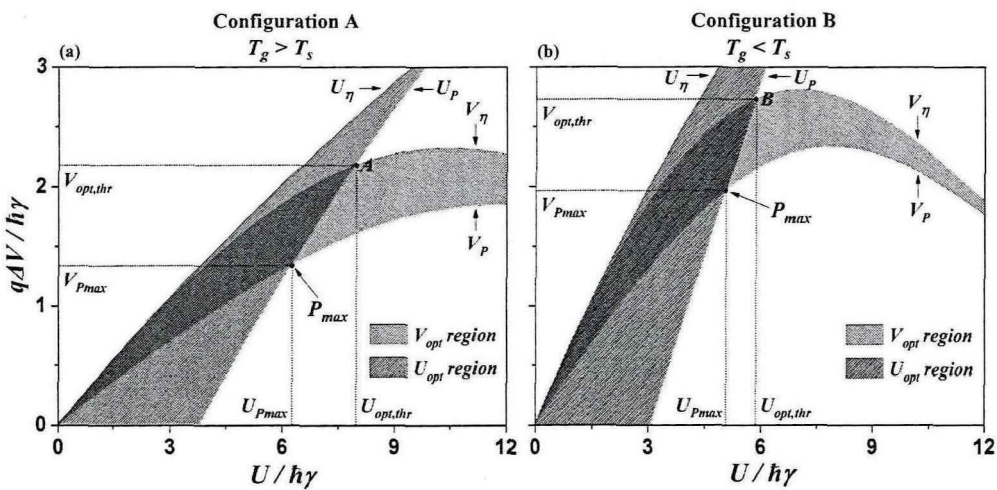


图 3.11 两种不同配置下偏压 ΔV 和库仑相互作用 U 的优化区间。

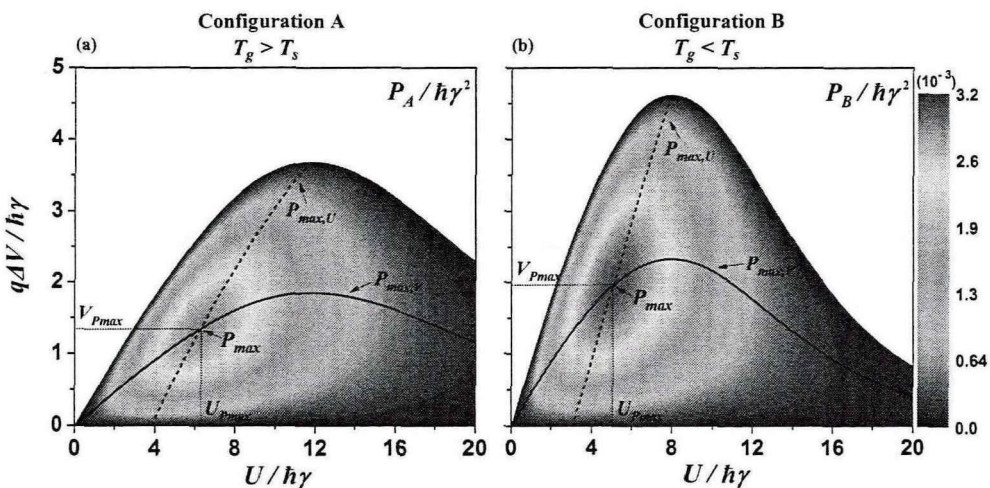


图 3.12 两种配置下功率随库仑相互作用 U 和偏压 ΔV 变化的三维投影图。

图 3.13 给出了两种不同配置下效率随库仑相互作用 U 和偏压 ΔV 变化的三维投影图。可以发现，虽然效率随偏压 ΔV 和库仑相互作用 U 分别存在最大值 $\eta_{\max,V}$ $\eta_{\max,U}$ ，如图中黑色实线和虚线所示。但是 $\eta_{\max,V}$ 随 U 的增加单调减小，并且 $\eta_{\max,U}$ 随 ΔV 的增加也是单调减小的。因此两条曲线的焦点在零点处，此时热机在全参数空间中达到最大效率 η_{\max} ，但功率为零。

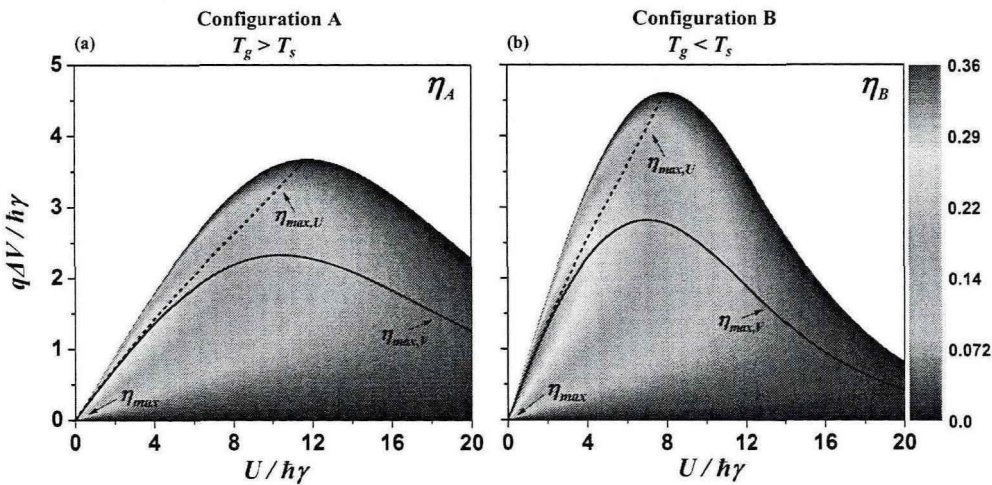


图 3.13 两种配置下效率随库仑相互作用 U 和偏压 ΔV 变化的三维投影图。

由图 3.12 可知，两种不同配置下热机的功率存在最大值 P_{\max} ，此时的最优化偏压和最优化库仑相互作用分别为 $\Delta V_{P_{\max}}$ 和 $U_{P_{\max}}$ 。根据有限时间热力学理论，研究热机最大功率下的效率是更加具有实际意义的。因此，图 3.14 和图 3.15 给出了两种不同配置下热机最优化偏压 $\Delta V_{P_{\max}}$ 和最优化库仑相互作用 $U_{P_{\max}}$ 以及最大功率和对应的效率随卡诺效率的变化曲线。可以发现，热机在配置 B 下的最大功率和对应的效率始终大于配置 A。在线性范围内 (η_C 很小时) 热机最大功率下的效率无论对于配置 A 还是配置 B 都小于 $\eta_C/2$ ，这是由热机的内部耗散过程 (γ_{11} 和 γ_{r0}) 导致系统内部不可逆损失所致。当不考虑内耗散过程，热机最大功率下的效率等于 $\eta_C/2$ [29]。特别地，在远离线性范围时，热机在配置 B 下的最大功率下的效率远大于配置 A 时热机的最大功率下的效率，甚至会超过 CA 效率。

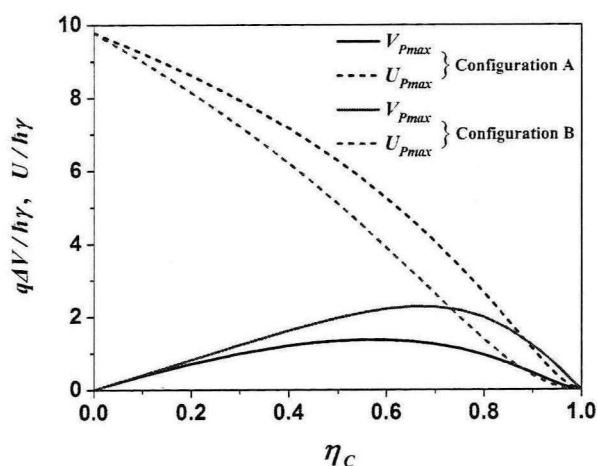


图 3.14 最大功率优化下库仑相互作用 U 和偏压 ΔV 随卡诺效率的变化曲线。

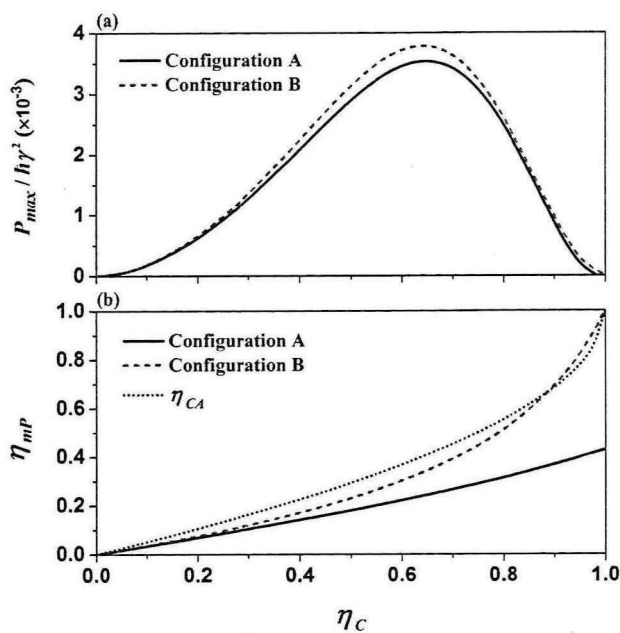


图 3.15 最大功率与最大功率下效率随卡诺效率的变化曲线。

§ 3.4 本章小结

本章系统的分析了由两个量子点通过电容耦合的方式构造的三端量子点热机的性能特性及优化。提出了两种不同的热机工作方式。两种不同的热机具有不同的系统参数配置，能够实现不同的热流与电流输运及热电转换。通过详细的热力学分析可以发现，在理想情况下两种配置的热机的性能特性曲线是抛物线形。

热机能够工作在可逆情况，最大效率能够达到卡诺效率。然而，对于实际的热机系统，由于耗散等因素导致的不可逆损失是不可避免的。因此本章重点讨论了三端量子点热机由于非对称能量依赖隧穿引起的内耗散对热机的影响。研究发现，由于内耗散的影响，热机的性能特性曲线是闭合曲线。在这种情况下，为实际的热机提供了最佳的优化区间。分析表明，对于实际的热机系统优化区间应位于热机特征曲线的负斜率区间。并且进一步讨论了耗散因子对热机在优化区间内的优化性能的影响。对热机不可逆损失的研究有助于寻找降低不可逆损失的途径，提供优化参数的设计准则以及确定器件的最佳运行方案。在此基础上，进一步模拟实际的热机并且比较了两种不同配置下热机的性能特性及优化性能。确定了两种不同配置下热机两个最主要的参数库仑相互作用 U 和偏压 ΔV 的优化区间的重叠区域是热机在全参数空间下的优化区间。进而比较了两种配置下热机最大功率优化下的性能。研究表明热机在配置 B 下的最大功率下的效率远大于配置 A 时热机的最大功率下的效率，甚至会超过 CA 效率。本章的研究阐明了三端库仑耦合量子点热机内部不可逆损失对热机性能的影响，为实际模型如何提高热机效率，如何设计实际器件的结构及参数选择提供了理论指导。

第四章 三端库仑耦合量子点制冷机

本章首先提出基于库仑耦合量子点模型构造三端库仑耦合量子点制冷机。该制冷机模型与第三章所讨论的热机模型相比较并非简单的电子流与热流反向输运。为了得到良好的制冷效果，制冷机具有与热机不同的系统结构，因此使得制冷机具有与热机不同的内部不可逆损失。在实验或应用中，三端库仑耦合量子点制冷机应与热机分开为独立的系统进行研究。在本章中同样给出制冷机两种不同的系统配置。两种不同配置下的制冷机具有完全不同的性能特性。本章旨在确定实现三端库仑耦合量子点制冷机的可行性，进而详细研究系统内部不可逆损失对制冷机性能特性及优化性能的影响。

§ 4.1 制冷机的热力学描述

在本章的研究中，采用与热机相同的外界参数，即 $T_l = T_r \equiv T_s$ ， $q\Delta V = \mu_r - \mu_l$ 。 $\varepsilon_s = \varepsilon_g = 0$ 。但是对于制冷机，我们定义稳态下的电子流定义为 $I \equiv I_l = -I_r$ ，系统结构的非对称能量依赖隧穿表示为 $\gamma_{l0} = \gamma_{r1} = \lambda\gamma$ ($0 \leq \lambda \leq 1$)。根据方程 (2.20)-(2.26)，可以得到电子流 I ，子系统 s 端热流 J_s 和子系统 g 端 J_g 随温差 ΔT 和偏压 ΔV 变化的曲线，如图 4.1 所示。其中 $J_s = -J_l - J_r$ 表示由左侧库和右侧库流出的净热流。

具体分析图 4.1 可知库仑耦合量子点模型作为制冷机的工作区间，如图 4.2 所示。图 4.2 中红色区域为两种不同配置下制冷机的工作区间。由于两种配置下制冷机对不同的子系统实现制冷效果。因此两种配置下的工作区间由不同的条件确定。其中配置 A 对子系统 s 制冷，因此配置 A 的红色区域的边界由 $J_s = 0$ 确定，而配置 B 对子系统 g 制冷，因此它的红色区域的边界由 $J_g = 0$ 确定。图 4.2 中的黑色区域表示外部对系统的输入功率 $I\Delta V > 0$ 的区域，其边界由 $I = 0$ 确定。并且图中的黑色区域会随着耗散因子 λ 的增大而增大，并且不断压缩制冷机的工作区

间。

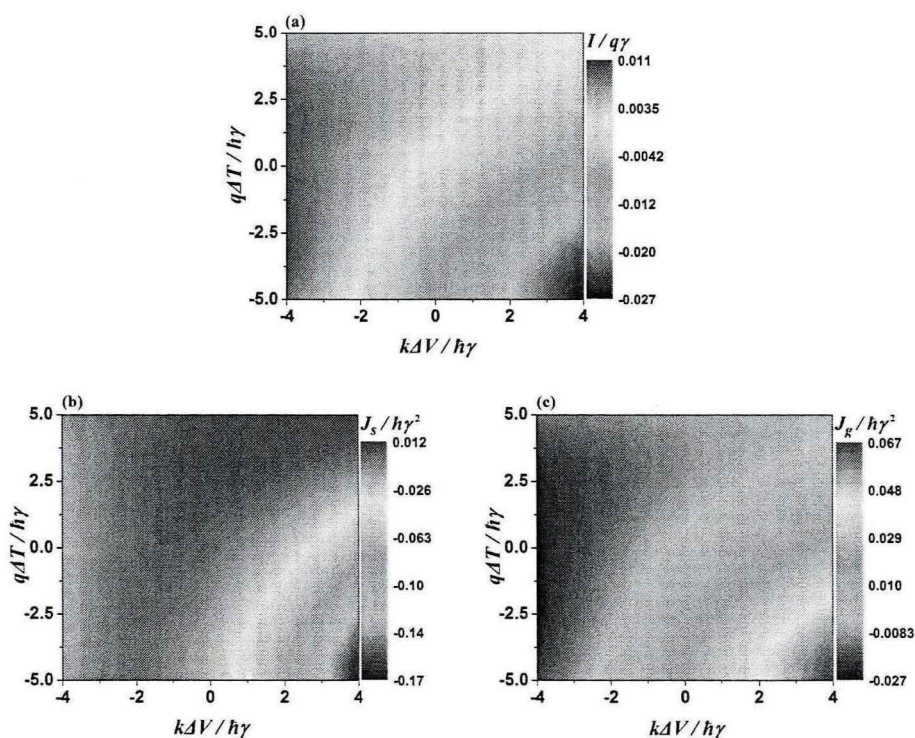


图 4.1 电子流 I ，热流 J_s 和 J_g 随温差 ΔT 和偏压 ΔV 变化的三维投影图。参数：

$$\lambda = 0.005, T_s = 7.5 + \Delta T, T_g = 7.5 - \Delta T, q^2/C = 50\hbar\gamma, q^2/C_\alpha = 20\hbar\gamma.$$

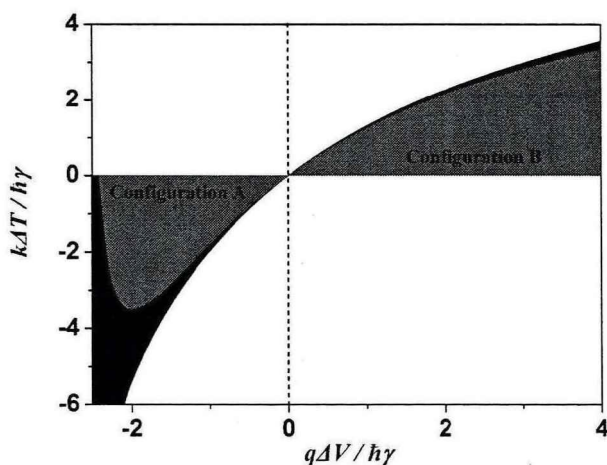


图 4.2 两种不同配置下制冷机的工作区间。参数与图 4.1 的相同。

图 4.2 虚线左侧红色区域为制冷机在配置 A 下的工作区间。在这个区间中，温度 $T_g > T_s$ ，化学势 $\mu_r < \mu_l$ 。如图 4.3 左图所示。在配置 A 的系统参数下，库仑耦合量子点模型作为制冷机的工作过程可以定性的描述为，由于非对称能量依赖隧穿势垒的作用，左侧电子库高能电子容易隧穿，而右侧电子库低能电子容易隧穿。因此，偏压 $qV_A = \mu_l - \mu_r = -q\Delta V$ 的作用下，高能电子由左侧库隧穿到量子点 QDs，通过量子点 QDs 与 QDg 之间的库仑相互作用将能量 U 释放到高温库 g ，此时量子点 QDs 上的电子能量降低，最后低能电子隧穿到右侧电子库。稳态情况下，电子流 I_r 由左侧流向右侧，热流 J_g^A 由子系统 s 流入子系统 g 。最终实现在偏压 qV_A 的驱动下，实现对子系统 s 的制冷效果。这个过程中，从子系统 s 吸热的净热流为 J_s 。根据热力学第一定律得到 $-J_g^A = J_s + P$ ，其中 $P = I_r \Delta V_A = I \Delta V$ 为输入功率。因此，配置 A 下制冷机的制冷率定义为

$$CP_A = J_s, \quad (4.1)$$

制冷系数定义为

$$\varepsilon_A = \frac{J_s}{P} = \frac{-J_g^A - P}{P}. \quad (4.2)$$

根据方程式(2.22)和(2.24)可得，在 $\lambda = 0$ 的情况下，电子流 I 与热流 J_g^A 满足量子化关系 $I / -J_g^A = q/U$ 。因此(4.2)式可化简为

$$\varepsilon_A = \frac{U - q\Delta V}{q\Delta V}. \quad (4.3)$$

当偏压等于阈值偏压时，即 $\Delta V = \Delta V_0 = U/[q(\varepsilon_c + 1)]$ 。制冷机得制冷系数达到卡诺制冷系数 $\varepsilon_A^{Carnot} = T_s/(T_g - T_s)$ 。并且在偏压等于截止偏压 $\Delta V_{stop} = U/q$ 时，制冷系数为零。图 4.3 左图所示配置 A 下制冷机的工作区间的边界分别对应阈值偏压和截止电压。因此配置 A 下制冷机的工作偏压应满足

$$U/[q(\varepsilon_c + 1)] \equiv \Delta V_0 < \Delta V < \Delta V_{stop} \equiv U/q. \quad (4.4)$$

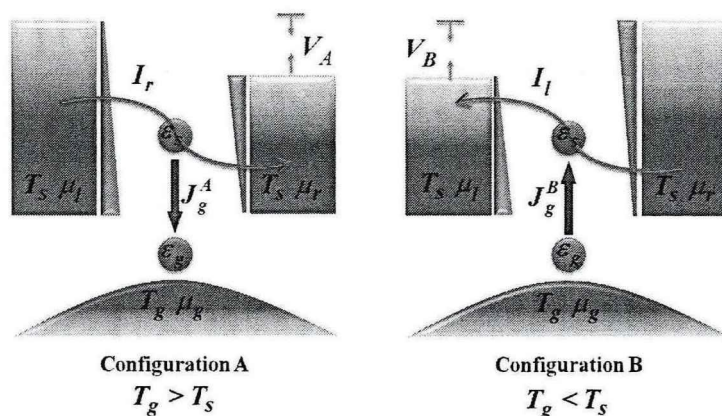


图 4.3 制冷机的两种工作模式。

当温度 $T_g < T_s$ ，并且 $\mu_r > \mu_l$ 的情况下，系统能够在这种配置下同样实现制冷机工作，如图 4.3 虚线右侧红色区域为制冷机在配置 B 下的工作区间。这种配置下，右侧电子库的低能电子在偏压 $qV_B = \mu_r - \mu_l = q\Delta V$ 的驱动下隧穿到量子点 QDs，在子系统 g 的作用下吸收能量 U 后隧穿到左侧电子库。稳态下，电子流 I_l 由右侧电子库流向左侧电子库，热流 J_g^B 由子系统 g 流入子系统 s 。最终实现对子系统 g 的制冷。因此制冷率为

$$CP_B = J_g^B, \quad (4.5)$$

制冷系数定义为

$$\varepsilon_B = \frac{J_g^B}{P}, \quad (4.6)$$

其中 $P = I_l V_B = I \Delta V$ 为输入功率。在 $\lambda = 0$ 的情况下，有 $I/J_g^B = q/U$ 。(4.6)式化简为

$$\varepsilon_B = \frac{U}{q\Delta V}. \quad (4.7)$$

这表明制冷系数反比于偏压。在偏压等于阈值偏压 $\Delta V = \Delta V_0 = U/(q\varepsilon_c)$ 时，制冷机的制冷系数达到卡诺制冷系数。

制冷机系统的热力学熵流由(3.5)给出。图 4.4 给出了不同 λ 下，熵流随温差

ΔT 和偏压 ΔV 变化的三维曲线。可以发现在 $\lambda = 0$ 的情况下,蓝色曲线与 $\Delta T \sim \Delta V$ 平面存在一条交线,沿着这条交线系统的熵为零,即 $J_S = 0$ 。此时制冷机工作在可逆情况下,因此制冷机能够达到卡诺制冷系数,对于配置 A 卡诺制冷系数为 $\varepsilon_A^{Carnot} = T_s / (T_g - T_s)$,对于配置 B 为 $\varepsilon_B^{Carnot} = T_g / (T_s - T_g)$ 。根据(3.5)式,在 $J_S = 0$ 的情况下同样可以得到(3.6)式。(3.6)式给出了可逆情况下温差与偏压满足的关系。随着 λ 的增加系统的熵逐渐增加,并且在非平衡态($\Delta T \neq 0, \Delta V \neq 0$)下,系统的熵始终大于零。

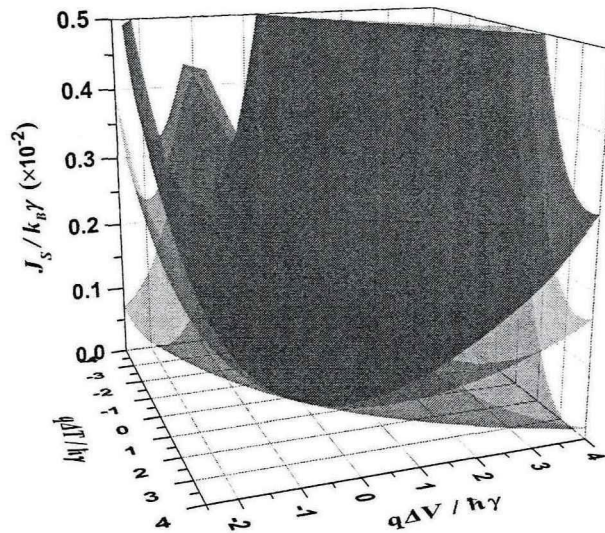


图 4.4 熵流随温差 ΔT 和偏压 ΔV 变化的三维曲线。蓝色对应 $\lambda = 0$, 绿色对应 $\lambda = 0.05$, 红色对应 $\lambda = 0.1$ 。其他参数与图 4.1 的相同。

§ 4.2 配置 B 下制冷机的性能

本节主要讨论配置 B 下制冷机的性能特性,因此在本节的参数中略去角标“B”。

§ 4.2.1 电子流与热流

根据电子流的表达式(2.20)和(2.21),电子流 $I (= I_l = -I_r)$ 可以表达为

$$I = \frac{I_{abs} + I_{rej}}{2}, \quad (4.8)$$

其中 I_{abs} 和 I_{rej} 表示电子的传输分别伴随着从电子库 g 吸热和向电子库 g 放热的过程，两个过程的电荷流分别表示为

$$I_{abs} = q(\Gamma_{r0}^+ p_{00} - \Gamma_{r0}^- p_{10} + \Gamma_{l1}^- p_{11} - \Gamma_{l1}^+ p_{01}) \quad (4.9)$$

和

$$I_{rej} = q(\Gamma_{l0}^- p_{10} - \Gamma_{l0}^+ p_{00} + \Gamma_{r1}^+ p_{01} - \Gamma_{r1}^- p_{11}). \quad (4.10)$$

因为电子的传输过程 Γ_{r0}^\pm 和 Γ_{l0}^\pm 并不涉及在两个子系统 s 和 g 之间能量的交换，而传输过程 Γ_{l1}^\pm 和 Γ_{r1}^\pm 在稳态的电荷输运过程中涉及到两个子系统之间交换能量 U 。考虑电子由右侧电子库到左侧电子库的过程可以得到，这个过程中从电子库 g 的吸热流为

$$J_{abs} = U(\Gamma_{l1}^- p_{11} - \Gamma_{l1}^+ p_{01}), \quad (4.11)$$

而这个过程向电子库 g 放热流表达为

$$J_{rej} = U(\Gamma_{r1}^+ p_{01} - \Gamma_{r1}^- p_{11}). \quad (4.12)$$

因此，这个过程净的吸热流为

$$J_g = J_{abs} - J_{rej}, \quad (4.13)$$

稳态情况下，上式与(2.24)式相等。为制冷机在配置 B 下的制冷率。

电子流 I (I , I_{abs} 和 I_{rej}) 与热流 J (J_g , J_{abs} 和 J_{rej}) 随偏压 ΔV 的变化曲线如图 4.5 所示。在 $\Delta V = V_0$ ，可得 $I_{abs} = I_{rej}$ 并且 $J_{abs} = J_{rej}$ 。此时，吸热热流等于放热热流，净热流即制冷率 $J_g = 0$ 。当 $\Delta V > V_0$ 时，电子流始终保持 $I_{abs} > I_{rej}$ ，并且吸热热流大于放热热流 $J_{abs} > J_{rej}$ 。制冷率 $J_g > 0$ ，表明在偏压的驱动下热流由低温库流向高温库，实现制冷机操作。在 $\Delta V \gg 0$ 极限情况下，电子流 I_{abs} 和 I_{rej} 趋于相等并保持恒定。这是因为，随着偏压的增大右侧电子库的高能电子隧穿几率增大，因此非对称能量依赖隧穿势垒对于电子的筛选被弱化。子系统 g 对电子运输的辅

助作用越来越不明显，而偏压主导电子的输运。这种情况下，吸热热流 J_{abs} 与放热热流 J_{rej} 逐渐趋于零，因此制冷率 $J_g \rightarrow 0$ 。

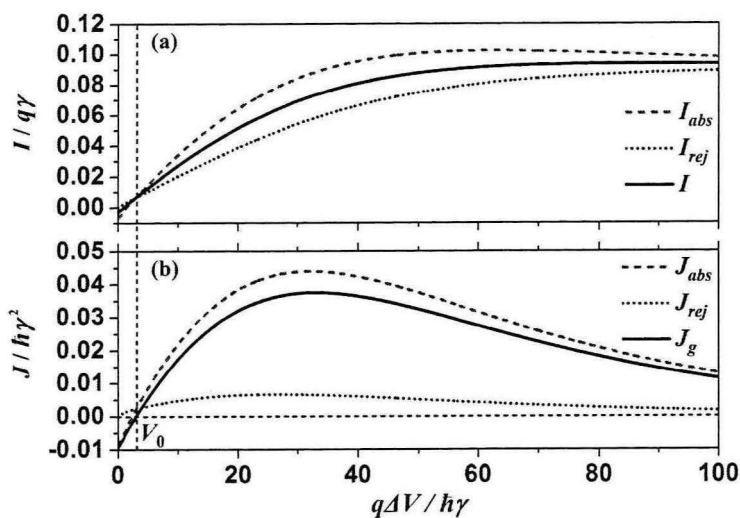


图 4.5 电子流 I 与热流 J 随偏压 ΔV 的变化曲线。参数： $\lambda=0.1$ ， $k_B T_s = 10\hbar\gamma$ ，

$$k_B T_g = 5\hbar\gamma, \quad q^2/C = 50\hbar\gamma, \quad q^2/C_\alpha = 20\hbar\gamma。$$

图 4.6 给出了电子流 I (I , I_{abs} 和 I_{rej}) 与热流 J (J_g , J_{abs} 和 J_{rej}) 随耗散因子 λ 的变化曲线。可以发现，当 $\lambda=0$ 时， $I_{rej}=0$ ， $J_{rej}=0$ ，制冷率 $J_g = J_{abs}$ 。此时系统内部的吸热热流 J_{abs} 完全作为制冷率输出，系统内部耗散为零，因此制冷机工作在理想情况下，能够实现可逆。随着 λ 的增加吸热热流 J_{abs} 与放热热流 J_{rej} 随 λ 的增加而增加，然而由于放热热流 J_{rej} 增加的更明显，从而导致制冷率 J_g 逐渐减小。并且在 $\lambda = \lambda_{hr}$ 时，得到 $I_{abs} = I_{rej}$ 并且吸热热流等于放热热流 $J_{abs} = J_{rej}$ ，导致系统的制冷率 $J_g = 0$ 。此时制冷机的制冷率和制冷系数为零。在 $\lambda > \lambda_{hr}$ 的情况时，制冷率 J_g 小于零，此时系统失去制冷效果。上述分析表明，随着 λ 的增加制冷机系统的内部耗散增大，导致制冷机的性能逐渐下降。因此称参数 λ 为耗散因子。

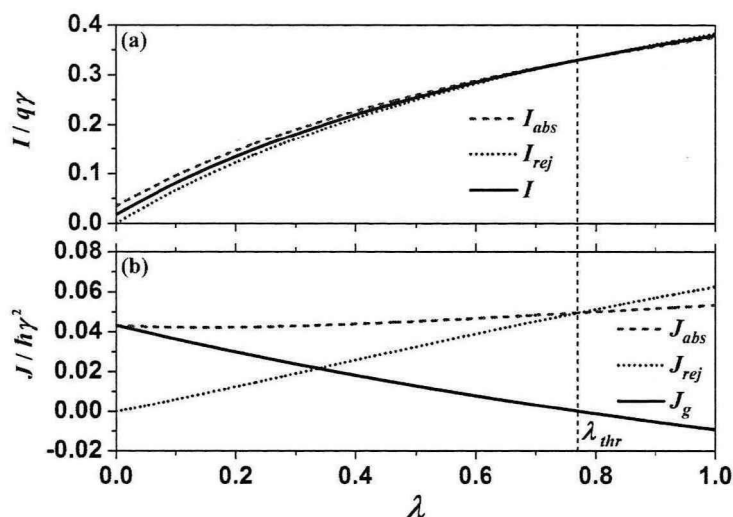


图4.6 电子流 I 与热流 J 随耗散因子 λ 的变化曲线。参数: $q\Delta V = 40\hbar\gamma$,

$$k_B T_s = 10\hbar\gamma, \quad k_B T_g = 5\hbar\gamma, \quad q^2/C = 50\hbar\gamma, \quad q^2/C_\alpha = 20\hbar\gamma.$$

§ 4.2.2 性能特性

制冷机实现制冷过程是由偏压 ΔV 与库仑相互作用 U 协同作用的结果。偏压决定了电子输运过程，而库仑相互作用决定了电子输运过程所能够携带的热量。因此，两个参量对制冷机的性能有决定性的影响。图 4.7 给出了制冷机的制冷率和制冷系数随库仑相互作用 U 和偏压 ΔV 的变化曲线。可以发现，当库仑相互作用增大时，为保证制冷机能够工作则偏压也需同时增大，以保证足够大的输入功率驱动电子将从低温库吸收的热量及时提取出来。并且可以发现制冷率与制冷系数之间的制约关系：即为了得到较大的制冷率则不得不牺牲制冷系数，反之亦然。

配置 B 下制冷机的制冷率与制冷系数随偏压的变化曲线如图 4.8(a)和(b)所示。当制冷机开始工作时的电压称为开路电压 ΔV_{open} 。在理想情况下($\lambda = 0$)，制冷机在开路电压时制冷系数达到卡诺制冷系数，而此时制冷率为零。在考虑系统内部耗散时($\lambda \neq 0$)，由于不可逆因素导致制冷率和制冷系数下降。并且在开路电压时制冷率和制冷系数同时为零。随着偏压的增大，制冷率和制冷系数逐渐增大。当偏压为 ΔV_ϵ 时，制冷系数达到极大值 $\epsilon_{max,r}$ 。继续增大偏压制冷系数逐渐减小，

而制冷率继续增大并在偏压为 ΔV_{CP} 时达到极大值 $CP_{max,V}$ 。图 4.8(c)给出了制冷机随偏压变化得到的特征曲线。由此可以发现，在理想情况下，制冷机的特征曲线是抛物线形的。非理想情况下，特征曲线是闭合曲线。根据上一章对热机特征曲线的分析可以得到，制冷机的优化区间也应位于特征曲线的负斜率范围。在优化范围内制冷机的制冷率 $CP_{\epsilon,V} \leq CP \leq CP_{max,V}$ ，制冷系数 $\epsilon_{CP,V} \leq \epsilon \leq \epsilon_{max,V}$ 。为使得制冷机工作在优化区间内，则偏压的范围应位于 $\Delta V_{\epsilon} \leq \Delta V \leq \Delta V_{CP}$ 。

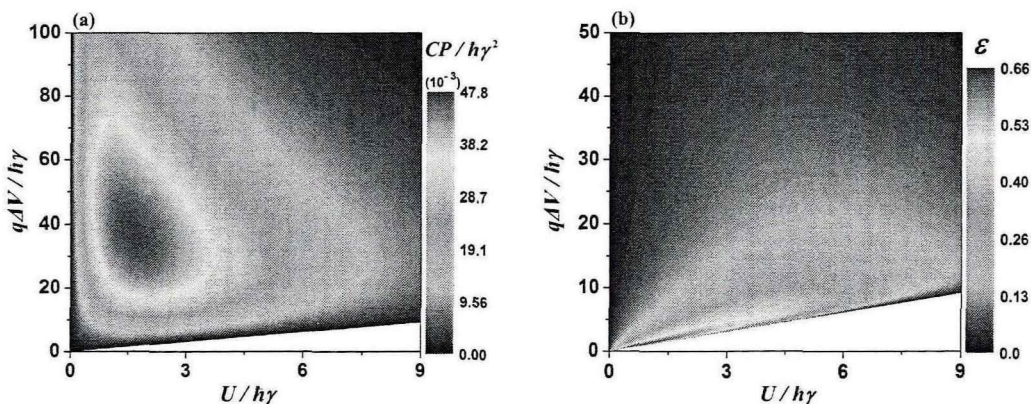


图 4.7 配置 B 下制冷率(a)与制冷系数(b)随库仑相互作用 U 和偏压 ΔV 变化的三维投影图。参数： $\gamma = 0.005$ ， $k_B T_s = 10\hbar\gamma$ ， $k_B T_g = 5\hbar\gamma$ ， $q^2/C = 50\hbar\gamma$ 。

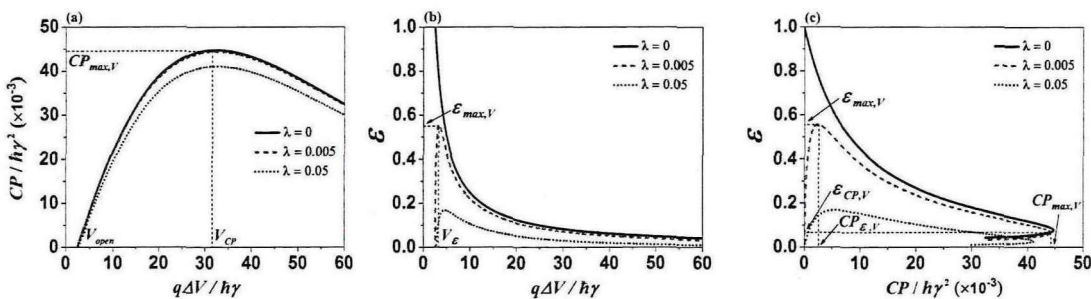


图 4.8 配置 B 下制冷率(a)与制冷系数(b)随偏压 ΔV 的变化曲线及特征曲线(c)。

参数： $k_B T_s = 10\hbar\gamma$ ， $k_B T_g = 5\hbar\gamma$ ， $q^2/C = 50\hbar\gamma$ ， $q^2/C_{\alpha} = 20\hbar\gamma$ 。

图 4.9 给出了开路电压 ΔV_{open} ，最大制冷率下电压 ΔV_{CP} 和最大制冷系数下电压 ΔV_{ϵ} 随耗散因子 λ 的变化曲线。开路电压曲线上方区域是制冷机的

工作区间。并且当耗散因子 $\lambda > \lambda_{max}$ 时，配置 B 下系统失去制冷效果。而由最大制冷率下电压 ΔV_{CP} 和最大制冷系数下电压 ΔV_{ϵ} 所包围的阴影区域是制冷机的优化区间。随着耗散因子的增加，制冷机的优化区间逐渐缩小。

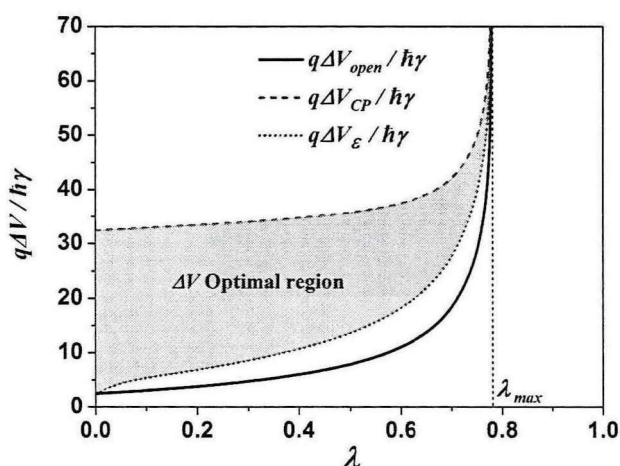


图 4.9 开路电压 ΔV_{open} ，最大制冷率下电压 ΔV_{CP} 和最大制冷系数下电压 ΔV_{ϵ} 随耗散因子 λ 的变化曲线。阴影区域为制冷机偏压的优化区间。参数与图 4.8 的相同。

制冷机的制冷率和制冷系数随库仑相互作用 U 的变化曲线以及相应的特征曲线如图 4.10 所示。当库仑相互作用为零时，量子点系统不交换任何能量，因此制冷率与制冷系数都为零。当库仑相互作用达到最大 U_{max} 时，理想情况下，制冷机在库仑相互作用与偏压的协同作用下达到可逆状态，此时制冷系数达到卡诺制冷系数。而非理想情况下，当库仑相互作用达到最大 U_{max} 时制冷率和制冷系数为零。因此，非理想情况下制冷率和制冷系数都存在极大值。由特征曲线可知，在库仑相互作用下，制冷机的优化区间应满足： $CP_{\epsilon,U} \leq CP \leq CP_{max,U}$ ， $\epsilon_{CP,U} \leq \epsilon \leq \epsilon_{max,U}$ 。而对应的库仑相互作用范围应位于 $U_{CP} \leq U \leq U_{\epsilon}$ 。

图 4.11 给出了最大库仑相互作用 U_{max} ，最大制冷率下 U_{CP} 和最大制冷系数下 U_{ϵ} 随耗散因子 λ 的变化曲线。最大库仑相互作用 U_{max} 曲线下方的区域是制冷机

的工作区间。随着耗散因子的增加制冷机的工作区间逐渐减小。在制冷机的工作区间由阴影区域给出的范围是制冷机的优化区间。在这个区间内制冷机工作在特征曲线的负斜率范围。该优化区间的上下限分别由最大制冷系数下 U_ε 和最大制冷率下 U_{CP} 给出。随着耗散因子的增加优化区间迅速缩小。因此，对于实际的制冷机，为使制冷机以最优的方式工作应尽可能减小耗散并且严格限制库仑相互作用的大小。

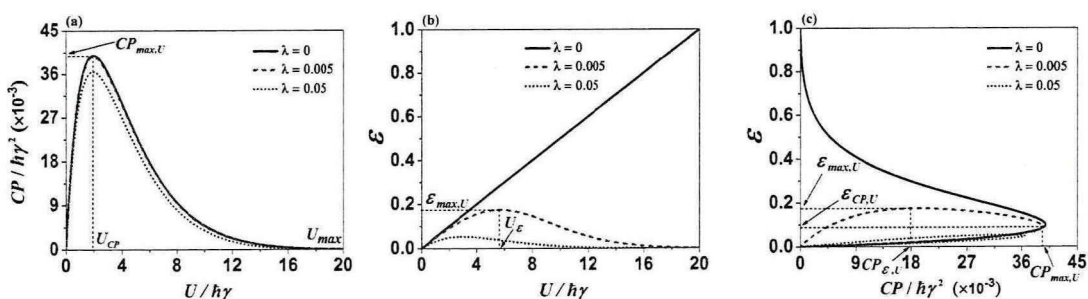


图 4.10 配置 B 下制冷率(a)与制冷系数(b)随库仑相互作用 U 的变化曲线及特征曲线(c)。参数: $q\Delta V = 20\hbar\gamma$, $k_B T_s = 10\hbar\gamma$, $k_B T_g = 5\hbar\gamma$, $q^2/C = 50\hbar\gamma$ 。

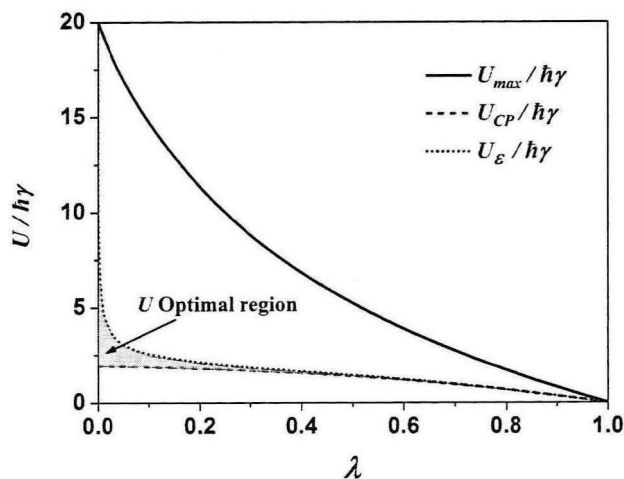


图 4.11 最大库仑相互作用 U_{max} , 最大制冷率下 U_{CP} 和最大制冷系数下 U_ε 随耗散因子 λ 的变化曲线。阴影区域为制冷机库仑相互作用的优化区间。参数与图 4.10 的相同。

§ 4.3 配置 A 下制冷机的性能

相比较于配置 B 的情况，配置 A 下的三端库仑耦合量子点模型实现制冷的情况更加复杂。主要由于配置 A 下，子系统 s 即是功率输入的驱动端又是制冷的目标。在给定库仑相互作用的情况下，偏压很低时输入的驱动力不足以克服温度梯度，导致热流由高温库流向低温库。而当偏压很大时，传导系统的驱动力足够强，以至于来自左侧库的电子具有足够大的势能并从高温库吸收额外的能量便可以使电子隧穿到右侧库。只有在适当的偏压范围内，由左侧库隧穿到右侧库的电子，通过库仑相互作用释放给高温库一部分能量使自身能量进一步降低后，电子通过非对称能量依赖隧穿势垒的概率增强，更加有利于电子隧穿到右侧库。从而实现制冷效果。而给定偏压也就是给定外部驱动的情况下，对于库仑相互作用同样被限制在有限的区域内。因此，配置 A 下制冷机的制冷率和制冷系数随偏压和库仑相互作用的变化曲线呈现出纺锤的形状，如图 4.12 所示。与配置 B 下的制冷机比较可以发现，虽然配置 A 的制冷率与制冷系数明显要小于配置 B 的。但是，配置 A 下的制冷机工作在更小的偏压和库仑相互作用的情况下，在这个区间配置 B 下的制冷机是没有制冷效果的。因此，配置 A 下的制冷机能够工作在配置 B 无法工作的区间，并且实现完全不同的制冷效果。

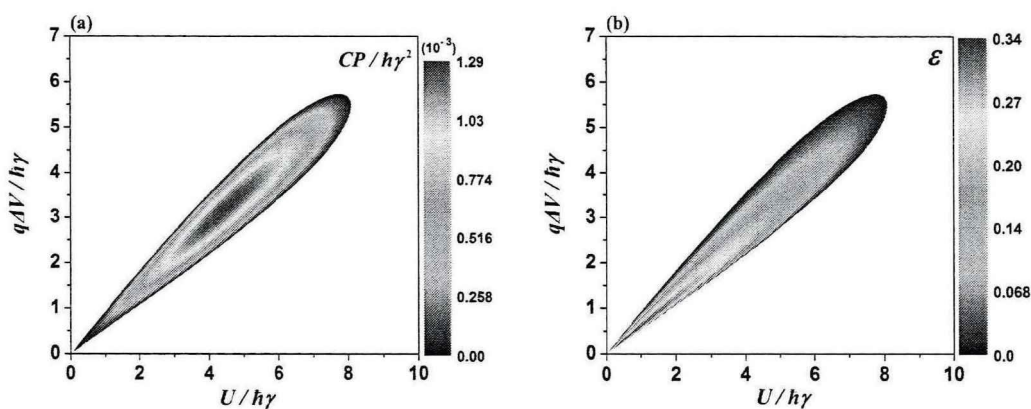


图 4.12 配置 A 下制冷率(a)与制冷系数(b)随库仑相互作用 U 和偏压 ΔV 变化的三维投影图。参数： $\gamma = 0.005$ ， $k_B T_s = 5\hbar\gamma$ ， $k_B T_g = 10\hbar\gamma$ ， $q^2/C = 50\hbar\gamma$ 。

图 4.13 给出了配置 A 下制冷率与制冷系数随偏压变化的曲线及对应的特征

曲线。图 4.14 给出了配置 A 下制冷率与制冷系数随库仑相互作用变化的曲线及对应的特征曲线。在理想情况下，配置 A 下的制冷机同样能够达到卡诺效率。而在非理想情况下，制冷机的特征曲线呈现闭合型，在特征曲线的负斜率范围给出了制冷机的优化区间。在实际的应用中，制冷机的偏压和库仑相互作用的大小应满足： $\Delta V_\varepsilon \leq \Delta V \leq \Delta V_{CP}$ 并且 $U_{CP} \leq U \leq U_\varepsilon$ 。由特征曲线还可以发现，配置 A 下制冷机的性能特性及优化对耗散因子的变化非常敏感。该配置下的制冷机只能工作在非常小的耗散情况下。

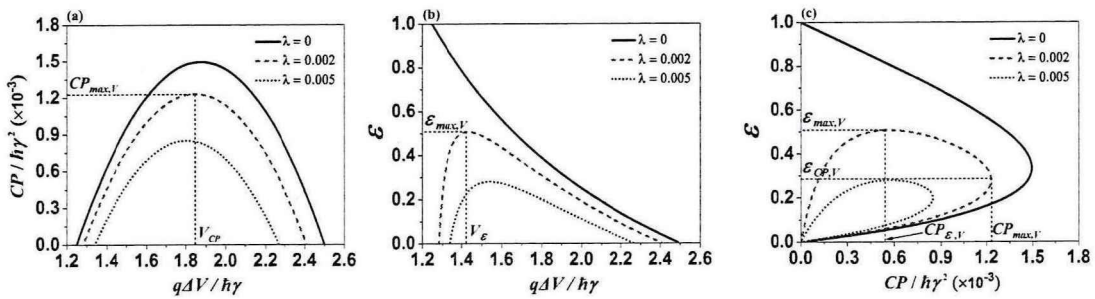


图 4.13 配置 A 下制冷率(a)与制冷系数(b)随偏压 ΔV 的变化曲线及对应的特征曲线(c)。参数： $\gamma = 0.005$ ， $k_B T_s = 5\hbar\gamma$ ， $k_B T_g = 10\hbar\gamma$ ， $q^2/C = 50\hbar\gamma$ ， $q^2/C_\alpha = 20\hbar\gamma$ 。

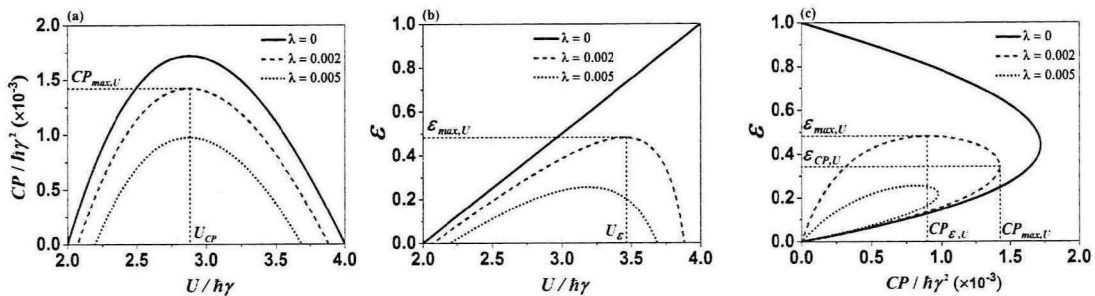


图 4.14 配置 A 下制冷率(a)与制冷系数(b)随库仑相互作用 U 的变化曲线及对应的特征曲线(c)。参数： $q\Delta V = 2\hbar\gamma$ ， $k_B T_s = 5\hbar\gamma$ ， $k_B T_g = 10\hbar\gamma$ ， $q^2/C = 50\hbar\gamma$ 。

§ 4.4 本章小结

本章建立了三端库仑耦合量子点制冷机模型。详细分析了两种不同参数配置下制冷机的工作方式。深入研究了配置 B 下的制冷机的电流及热流特性，明确

了耗散因子对制冷机电流及热流的影响。系统的分析了两种不同配置下制冷机的性能特性及优化性能，给出了两种配置下制冷机的优化区间。研究表明，两种配置下的制冷机在理想情况下都能够实现可逆，达到卡诺效率。在非理想情况下，耗散引起的不可逆损失会对制冷机的性能产生本质的影响。这也是热电器件热力学优化理论建立的前提。对制冷机的优化研究分别给出了偏压与库仑相互作用的优化区间。为实际构建三端库仑耦合量子点制冷机提供了理论指导。

第五章 三个量子点库仑耦合模型

本章提出三个量子点库仑耦合模型。计算该模型不同量子态下的静电能以及不同量子态变化时所需的充电能。进一步得到三个量子点之间库仑相互作用强度的表达式。详细计算该模型的系统动力学，并得到稳态下系统的热流。

§ 5.1 系统静电能

三个量子点库仑耦合模型如图 5.1(a)所示。

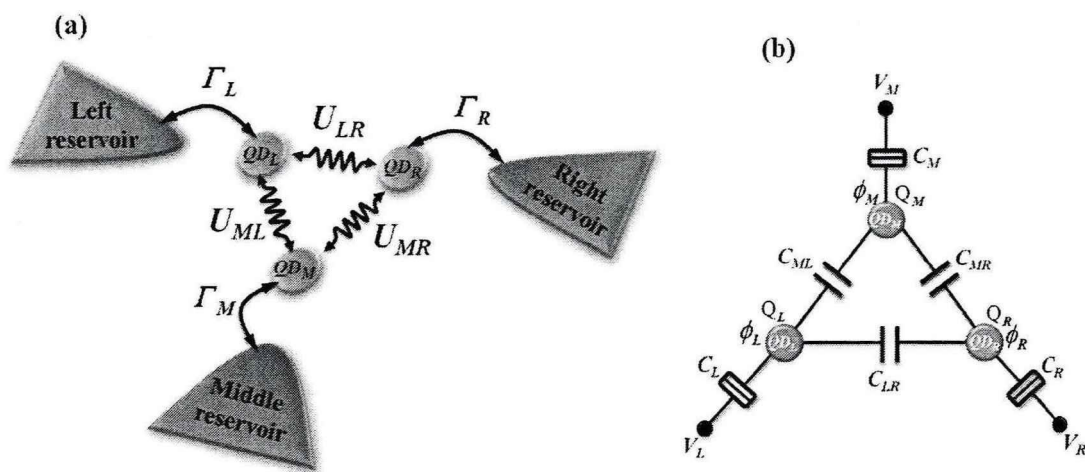


图 5.1 (a)三个量子点库仑耦合模型, (b)模型电容耦合等效电路。

三个量子点 QD_L 、 QD_R 和 QD_M 彼此库仑耦合，只通过长程库仑力相互作用，库仑相互作用分别表示为 U_{ML} 、 U_{MR} 和 U_{LR} 。因此每个量子点之间的电子输运是被禁止的，但是能够通过库仑相互作用交换能量。每个量子点分别与各自的电子库通过隧穿势垒弱耦合，能够交换能量和电子。传输几率 Γ_L 、 Γ_R 和 Γ_M 描述电子在量子点与电子库之间的隧穿过程。三个量子点库仑耦合模型的等效电路如图 5.1(b)所示。每个量子点的电荷量为 Q_α ($\alpha=M, L, R$)，静电势为 ϕ_α 。量子点之间的耦合等效为电容 C_{ML} 、 C_{MR} 和 C_{LR} 。量子点与各自的电压节点 V_α 的耦合等效为

C_α ，包含一个电容并联一个电阻。因此，每个量子点的总电荷量为

$$Q_L = C_L(\phi_L - V_L) + C_{LR}(\phi_L - \phi_R) + C_{ML}(\phi_L - \phi_M), \quad (5.1a)$$

$$Q_R = C_R(\phi_R - V_R) + C_{LR}(\phi_R - \phi_L) + C_{MR}(\phi_R - \phi_M), \quad (5.1b)$$

$$Q_M = C_M(\phi_M - V_M) + C_{ML}(\phi_M - \phi_L) + C_{MR}(\phi_M - \phi_R). \quad (5.1c)$$

将(5.1)式写成矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} Q_L + C_L V_L \\ Q_R + C_R V_R \\ Q_M + C_M V_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{LL} & -C_{LR} & -C_{ML} \\ -C_{LR} & C_{RR} & -C_{MR} \\ -C_{ML} & -C_{MR} & C_{MM} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_L \\ \phi_R \\ \phi_M \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

其中 $C_{LL} = C_L + C_{LR} + C_{ML}$ ， $C_{RR} = C_R + C_{LR} + C_{MR}$ ， $C_{MM} = C_M + C_{ML} + C_{MR}$ 。进一步由(5.2)式可以得到

$$\begin{pmatrix} \phi_L \\ \phi_R \\ \phi_M \end{pmatrix} = \frac{1}{\Pi} \begin{pmatrix} C_{MM}C_{RR} - C_{MR}^2 & C_{MM}C_{LR} + C_{ML}C_{MR} & C_{RR}C_{ML} + C_{LR}C_{MR} \\ C_{MM}C_{LR} + C_{ML}C_{MR} & C_{LL}C_{MM} - C_{ML}^2 & C_{LL}C_{MR} + C_{LR}C_{ML} \\ C_{RR}C_{ML} + C_{LR}C_{MR} & C_{LL}C_{MR} + C_{LR}C_{ML} & C_{LL}C_{RR} - C_{LR}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_L + C_L V_L \\ Q_R + C_R V_R \\ Q_M + C_M V_M \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

其中 $\Pi = C_{LL}C_{RR}C_{MM} - C_{LL}C_{MR}^2 - C_{RR}C_{ML}^2 - C_{MM}C_{LR}^2 - 2C_{LR}C_{ML}C_{MR}$ 。可以得到量子点系统的静电能为

$$U(n_L, n_R, n_M) = \frac{1}{2\Pi} \left[\begin{aligned} & n_L^2 q^2 (C_{MM}C_{RR} - C_{MR}^2) + 2n_L n_M q^2 (C_{LR}C_{MR} + C_{ML}C_{RR}) \\ & + n_R^2 q^2 (C_{LL}C_{MM} - C_{ML}^2) + 2n_R n_M q^2 (C_{LR}C_{ML} + C_{MR}C_{LL}) \\ & + n_M^2 q^2 (C_{LL}C_{RR} - C_{LR}^2) + 2n_L n_R q^2 (C_{ML}C_{MR} + C_{LR}C_{MM}) \\ & + 2qC_L [n_R (C_{ML}C_{MR} + C_{LR}C_{MM}) + n_M (C_{LR}C_{MR} + C_{ML}C_{RR}) + n_L (C_{MM}C_{RR} - C_{MR}^2)] V_L \\ & + 2qC_R [n_L (C_{ML}C_{MR} + C_{LR}C_{MM}) + n_M (C_{LR}C_{ML} + C_{MR}C_{LL}) + n_R (C_{LL}C_{MM} - C_{ML}^2)] V_R \\ & + 2qC_M [n_L (C_{LR}C_{MR} + C_{ML}C_{RR}) + n_R (C_{LR}C_{ML} + C_{MR}C_{LL}) + n_M (C_{LL}C_{RR} - C_{LR}^2)] V_M \\ & + C_L^2 (C_{MM}C_{RR} - C_{MR}^2) V_L^2 + C_R^2 (C_{LL}C_{MM} - C_{ML}^2) V_R^2 + C_M^2 (C_{LL}C_{RR} - C_{LR}^2) V_M^2 \\ & + 2C_L C_M (C_{LR}C_{MR} + C_{ML}C_{RR}) V_L V_M + 2C_R C_M (C_{LR}C_{ML} + C_{MR}C_{LL}) V_R V_M \\ & + 2C_L C_R (C_{ML}C_{MR} + C_{LR}C_{MM}) V_L V_R \end{aligned} \right], \quad (5.4)$$

式中 n_L 、 n_R 和 n_M 分别为各自量子点的电子数。库仑阻塞情况下，每个量子点最多只能占据一个电子。因此，由(5.4)式可得到系统在不同电荷态下的静电能，如图 5.2 所示。

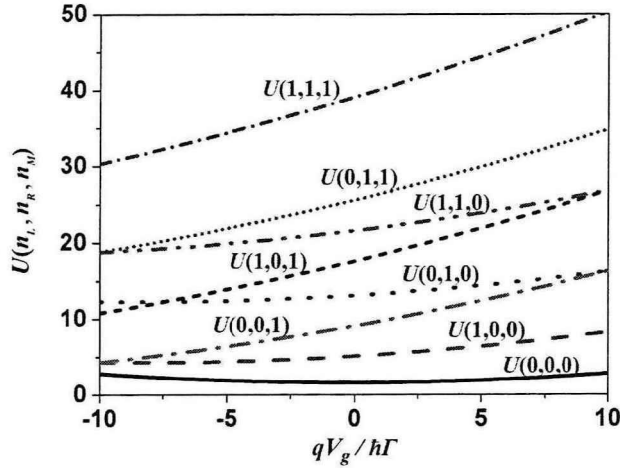


图 5.2 三个量子点库仑耦合系统的静电能。参数： $C_L = C_L = C_M = q^2/(25\hbar\Gamma)$,

$$C_{ML} = C_{MR} = C_{LR} = q^2/(50\hbar\Gamma), \quad V_L = -10\hbar\Gamma/q, \quad V_R = 10\hbar\Gamma/q.$$

由图 5.2 可以发现，系统不同的量子态具有不同的静电能。量子态为空态时具有最低的静电能，量子态完全被电子占据时具有最大的静电能。系统量子态的改变需要额外的能量，称之为充电能(Charging energy)。由(5.4)式可以得到当量子点系统的初始状态为空态时，一个电子由电子库隧穿进入量子点的充电能为

$$U_{L00} = U(1,0,0) - U(0,0,0), \quad (5.5a)$$

$$U_{0R0} = U(0,1,0) - U(0,0,0), \quad (5.5b)$$

$$U_{00M} = U(0,0,1) - U(0,0,0). \quad (5.5c)$$

当量子点系统有一个电子占据时，另一个电子隧穿进入量子点所需的充电能为

$$U_{L10} = U(1,1,0) - U(0,1,0) = U_{L00} + U_{LR}, \quad (5.6a)$$

$$U_{L01} = U(1,0,1) - U(0,0,1) = U_{L00} + U_{ML}, \quad (5.6b)$$

$$U_{1R0} = U(1,1,0) - U(1,0,0) = U_{0R0} + U_{LR}, \quad (5.6c)$$

$$U_{0R1} = U(0,1,1) - U(0,0,1) = U_{0R0} + U_{MR}, \quad (5.6d)$$

$$U_{10M} = U(1,0,1) - U(1,0,0) = U_{00M} + U_{ML}, \quad (5.6e)$$

$$U_{01M} = U(0,1,1) - U(0,1,0) = U_{00M} + U_{MR}. \quad (5.6f)$$

当量子点系统已经有两个电子占据时，再增加一个电子所需要的充电能为

$$U_{L11} = U(1,1,1) - U(0,1,1) = U_{L00} + U_{LR} + U_{ML}, \quad (5.7a)$$

$$U_{1R1} = U(1,1,1) - U(1,0,1) = U_{0R0} + U_{LR} + U_{MR}, \quad (5.7b)$$

$$U_{11M} = U(1,1,1) - U(1,1,0) = U_{00M} + U_{ML} + U_{MR}. \quad (5.7c)$$

最终可以得到，量子点之间的库仑相互作用能为

$$U_{LR} = \frac{1}{\Pi} q^2 (C_{LR} C_{MM} + C_{ML} C_{MR}), \quad (5.8a)$$

$$U_{ML} = \frac{1}{\Pi} q^2 (C_{LR} C_{MR} + C_{ML} C_{RR}), \quad (5.8b)$$

$$U_{MR} = \frac{1}{\Pi} q^2 (C_{LR} C_{ML} + C_{LL} C_{MR}). \quad (5.8c)$$

图 5.3 给出系统的充电能的能量分布。可以发现对于每一个量子点不同电荷态的充电能是等间距分布的，间距的大小对应于量子点间的库仑相互作用的大小 U_{ML} ， U_{MR} ， U_{LR} 。在对称情况下 ($C_L = C_L = C_M$ ， $C_{ML} = C_{MR} = C_{LR}$)，量子点间的库仑相互作用相同，即 $U_{ML} = U_{MR} = U_{LR}$ 。

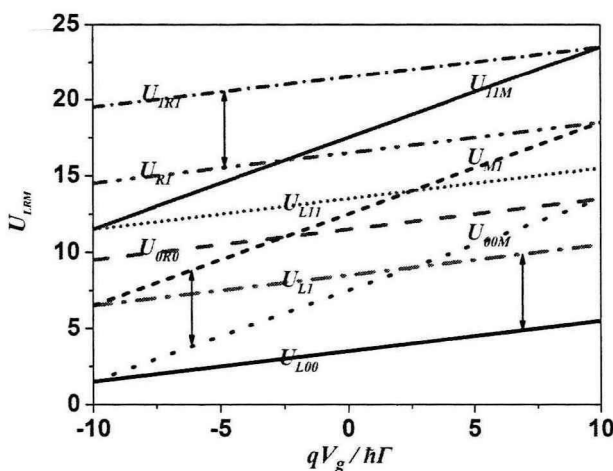


图 5.3 三个量子点库仑耦合系统的充电能。参数与图 5.2 的相同。

§ 5.2 系统动力学

本文研究的三个量子点库仑耦合系统如图(5.1a)所示。系统总的哈密顿量可以写为

$$H = H_D + H_R + H_T, \quad (5.9)$$

其中 H_D , H_R 和 H_T 分别为库仑耦合量子点, 电子库和隧穿耦合哈密顿量。

考虑库仑耦合量子点系统每个量子点具有单一能级, 因此其哈密顿量表示为

$$H_D = \sum_{\alpha=M,L,R} \varepsilon_{\alpha} d_{\alpha}^{\dagger} d_{\alpha} + \sum_{\alpha,\beta=M,L,R} U_{\alpha\beta} d_{\alpha}^{\dagger} d_{\alpha} d_{\beta}^{\dagger} d_{\beta}, \quad (5.10)$$

其中 (d^{\dagger}, d) 为量子点的产生/湮灭算符。库仑阻塞情况下, 每个电子最多只能有一个电子占据, 因此不考虑量子点内的自旋相互作用。则 $U_{\alpha\beta}$ 表示不同量子点之间的库仑相互作用。

每个热库为无相互作用的电子库, 因此哈密顿量描述为

$$H_R = \sum_k \sum_{\alpha=M,L,R} \varepsilon_{\alpha k} c_{\alpha k}^{\dagger} c_{\alpha k}, \quad (5.11)$$

其中 $\varepsilon_{\alpha k}$ 是波矢为 k 的无相互作用电子的能量, (c^{\dagger}, c) 表示电子库的产生/湮灭算符,

$$H_T = \sum_k \sum_{\alpha=M,L,R} (t_{\alpha k} c_{\alpha k}^{\dagger} d_{\alpha} + t_{\alpha k}^* d_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha k}), \quad (5.12)$$

表示量子点与电子库之间的隧穿耦合哈密顿量, $t_{\alpha k}$ 及其共轭 $t_{\alpha k}^*$ 为隧穿振幅。

三个量子点库仑耦合系统的量子态可以表示为 $|n_M, n_L, n_R\rangle$, 其中 n_{α} 是量子点 α 的电子占有数。在库仑阻塞的情况下, 每一个量子点的电子占有数只能是 0 或者 1 ($n_{\alpha} = 0, 1$)。因此三个量子点库仑耦合系统共有八个量子态, 分别为:

$|1\rangle = |0, 0, 0\rangle$ 、 $|2\rangle = |1, 0, 0\rangle$ 、 $|3\rangle = |0, 1, 0\rangle$ 、 $|4\rangle = |0, 0, 1\rangle$ 、 $|5\rangle = |1, 1, 0\rangle$ 、 $|6\rangle = |1, 0, 1\rangle$ 、 $|7\rangle = |0, 1, 1\rangle$ 和 $|8\rangle = |1, 1, 1\rangle$ 。量子态的动力学过程如图 5.4 所示。由左侧 ($\alpha = L$) 电子库诱导的量子态的传输包括 $|1\rangle \leftrightarrow |3\rangle$ 、 $|2\rangle \leftrightarrow |5\rangle$ 、 $|4\rangle \leftrightarrow |7\rangle$ 和 $|6\rangle \leftrightarrow |8\rangle$, 由右侧 ($\alpha = R$) 电子库激发的量子态的变化包括 $|1\rangle \leftrightarrow |4\rangle$ 、 $|2\rangle \leftrightarrow |6\rangle$ 、

$|3\rangle \leftrightarrow |7\rangle$ 和 $|5\rangle \leftrightarrow |8\rangle$, 与中间 ($\alpha = M$) 电子库相关的量子态的输运包括 $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ 、 $|3\rangle \leftrightarrow |5\rangle$ 、 $|4\rangle \leftrightarrow |6\rangle$ 和 $|7\rangle \leftrightarrow |8\rangle$ 。图 5.4 中 $\Gamma_{ji} = \gamma_\alpha f_\alpha(E_{ji})$ ($i, j = 1, 2, \dots, 8$ 并且 $i < j$) 表示由量子态 $|i\rangle$ 到 $|j\rangle$ 的传输几率, 用来描述一个电子由电子库 α 隧穿到量子点 α 的几率。 $\Gamma_{ij} = \gamma_\alpha (1 - f_\alpha(E_{ji}))$ 则表示一个电子由量子点 α 隧穿回电子库 α 的几率。其中 $f_\alpha(x) = \{\exp[(x - \mu_\alpha)/(k_B T_\alpha)] + 1\}^{-1}$ 是费米-狄拉克函数, 描述化学势为 μ_α 、温度为 T_α 的电子库的电子分布。 $E_{ji} = E_j - E_i$, E_i 为量子态 $|i\rangle$ 的能量。 k_B 为玻尔兹曼常数。 $\gamma_\alpha(\varepsilon) = \sum_k (2\pi/\hbar) D_\alpha(\varepsilon) |t_{\alpha k}(\varepsilon)|^2$ 是量子点 α 与态密度为 $D_\alpha(\varepsilon)$ 的电子库的耦合强度, 也可定义为能量依赖裸穿几率。

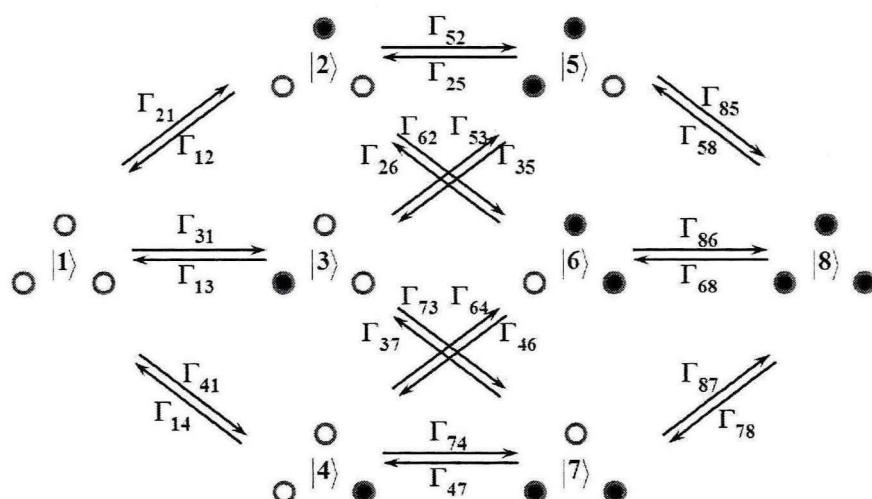


图 5.4 三个量子点库仑耦合系统的量子态与几率传输。

根据量子开放系统理论, 三个量子点库仑耦合系统量子态的占有几率由密度矩阵的对角元分别给出, 即: $\rho = (\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4, \rho_5, \rho_6, \rho_7, \rho_8)^T$ 。在弱耦合情况下 ($\hbar\gamma \ll k_B T$), 量子点能级宽度能够忽略, 电子的输运过程被描述为序贯隧穿。这种情况下, 密度矩阵的非对角元对稳态下的量子态占有几率是没有影响的。因此系统量子态的占有几率随时间的演化由主方程给出。写成密度矩阵的形式为 $d\rho/dt = M\rho$, 其中 M 是传输几率构的矩阵形式, 可写为

$$M = \begin{pmatrix}
 -\Gamma_{21} - \Gamma_{31} - \Gamma_{41} & \Gamma_{12} & \Gamma_{13} & \Gamma_{14} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \Gamma_{21} & -\Gamma_{12} - \Gamma_{32} - \Gamma_{62} & 0 & 0 & \Gamma_{25} & \Gamma_{26} & 0 & 0 \\
 \Gamma_{31} & 0 & -\Gamma_{13} - \Gamma_{53} - \Gamma_{73} & 0 & \Gamma_{35} & 0 & \Gamma_{37} & 0 \\
 \Gamma_{41} & 0 & 0 & -\Gamma_{14} - \Gamma_{64} - \Gamma_{74} & 0 & \Gamma_{46} & \Gamma_{47} & 0 \\
 0 & \Gamma_{32} & \Gamma_{33} & 0 & -\Gamma_{25} - \Gamma_{35} - \Gamma_{85} & 0 & 0 & \Gamma_{58} \\
 0 & \Gamma_{62} & 0 & \Gamma_{64} & 0 & -\Gamma_{26} - \Gamma_{46} - \Gamma_{86} & 0 & \Gamma_{68} \\
 0 & 0 & \Gamma_{73} & \Gamma_{74} & 0 & 0 & -\Gamma_{37} - \Gamma_{47} - \Gamma_{87} & \Gamma_{78} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & \Gamma_{85} & \Gamma_{86} & \Gamma_{87} & -\Gamma_{58} - \Gamma_{68} - \Gamma_{78}
 \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

每个矩阵元由费米黄金律(Fermi's golden rule)给出。系统稳态热流从电子库 α 流进量子点 α 能够通过求解稳态主方程 $M \bar{\rho} = 0$ 得到。由于左侧($\alpha = L$)电子库诱导的量子态的传输包括 $|1\rangle \leftrightarrow |3\rangle$ 、 $|2\rangle \leftrightarrow |5\rangle$ 、 $|4\rangle \leftrightarrow |7\rangle$ 和 $|6\rangle \leftrightarrow |8\rangle$ ，因此左侧($\alpha = L$)电子库产生的热流为

$$J_L = (\varepsilon_L - \mu_L)(\Gamma_{31}\bar{\rho}_1 - \Gamma_{13}\bar{\rho}_3) + (\varepsilon_L + U_{ML} - \mu_L)(\Gamma_{52}\bar{\rho}_2 - \Gamma_{25}\bar{\rho}_5) \\
 + (\varepsilon_L + U_{LR} - \mu_L)(\Gamma_{74}\bar{\rho}_4 - \Gamma_{47}\bar{\rho}_7) + (\varepsilon_L + U_{ML} + U_{LR} - \mu_L)(\Gamma_{86}\bar{\rho}_6 - \Gamma_{68}\bar{\rho}_8). \quad (5.14)$$

由右侧($\alpha = R$)电子库激发的量子态的变化包括 $|1\rangle \leftrightarrow |4\rangle$ 、 $|2\rangle \leftrightarrow |6\rangle$ 、 $|3\rangle \leftrightarrow |7\rangle$ 和 $|5\rangle \leftrightarrow |8\rangle$ ，对应的热流为

$$J_R = (\varepsilon_R - \mu_R)(\Gamma_{41}\bar{\rho}_1 - \Gamma_{14}\bar{\rho}_4) + (\varepsilon_R + U_{MR} - \mu_R)(\Gamma_{62}\bar{\rho}_2 - \Gamma_{26}\bar{\rho}_6) \\
 + (\varepsilon_R + U_{LR} - \mu_R)(\Gamma_{73}\bar{\rho}_3 - \Gamma_{37}\bar{\rho}_7) + (\varepsilon_R + U_{MR} + U_{LR} - \mu_R)(\Gamma_{85}\bar{\rho}_5 - \Gamma_{58}\bar{\rho}_8). \quad (5.15)$$

中间($\alpha = M$)电子库产生的量子态的输运包括 $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ 、 $|3\rangle \leftrightarrow |5\rangle$ 、 $|4\rangle \leftrightarrow |6\rangle$ 和 $|7\rangle \leftrightarrow |8\rangle$ ，热流为

$$J_M = (\varepsilon_M - \mu_M)(\Gamma_{21}\bar{\rho}_1 - \Gamma_{12}\bar{\rho}_2) + (\varepsilon_M + U_{MR} - \mu_M)(\Gamma_{53}\bar{\rho}_3 - \Gamma_{35}\bar{\rho}_5) \\
 + (\varepsilon_M + U_{ML} - \mu_M)(\Gamma_{64}\bar{\rho}_4 - \Gamma_{46}\bar{\rho}_6) + (\varepsilon_M + U_{MR} + U_{ML} - \mu_M)(\Gamma_{87}\bar{\rho}_7 - \Gamma_{78}\bar{\rho}_8) \quad (5.16)$$

在本文的模型中，量子点之间的电子输运是被禁止的。在实验中，通过在量子点之间刻蚀大约 150nm，能够有效地防止电子的输运[165,168]。因此，系统中没有焦耳热的产生。同时，在亚开尔文温度(sub-Kelvin temperature)下，声子热耗散被有效的抑制[171]。根据能量守恒，我们得到(5.14)-(5.16)式的热流满足

$$J_L + J_R + J_M = 0.$$

§ 5.3 本章小结

本章建立了三个量子点库仑耦合模型，每个量子点之间以电容的方式耦合。根据静电学的理论，计算了系统不同量子态下的静电能以及系统量子态变化所需的充电能，由此得到了量子点之间通过库仑相互作用所能交换的能量。库仑阻塞情况下，通过主方程计算得到了系统稳态下每个端的热流。本章的内容作为第六章的数学基础，为第六章进一步基于该模型构造热管理器件提供了理论保证。

第六章 库仑耦合量子点热管理器件

本章将提出一种新型的库仑耦合量子点热管理器件。该器件由三个库仑耦合量子点构成，每个量子点分别与各自的电子库耦合，如图 5.1(a)所示。本章的研究表明，该库仑耦合量子点热管理器件通过调节系统参数能够在同一个系统中实现多种多样的热管理操作。例如，热流交换、热开关和热通路选择。并且该模型还可以构造两个重要的固态热电路元件：热二极管和热三极管。在库仑耦合量子点结构中，系统内的电子输运是被禁止的，然而由于量子点系统的电子波动使得不同电子库之间能够通过库仑相互作用实现热流输运。因此，原则上本章所提出的库仑耦合量子点模型是真正意义的热管理器件。

§ 6.1 基本热管理

第五章建立的三个量子点库仑耦合模型当电子库之间存在温度梯度时，稳态情况下，系统内将维持恒定的热流。在本节中，设定中间电子库 M 为高温库，温度为 T_M 。左侧库 L 与右侧库 R 的温度分别为 T_L 和 T_R ，电子库 L 和电子库 R 具有相同的温度，即 $T_L = T_R$ ，因此电子库 L 和电子库 R 之间不会有热流交换。当 $T_M > T_L = T_R$ 时，在温度梯度的驱动下能够构造两个不同的热通路。如图 6.1 所示。

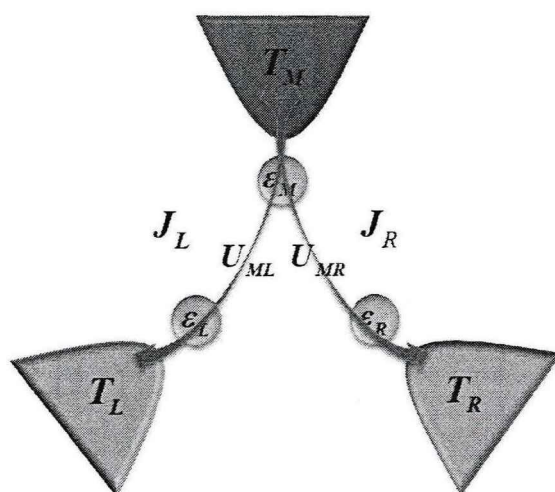


图 6.1 三个量子点库仑耦合模型两个不同的热通路。

通路 L 通过库仑相互作用 U_{ML} 从温度为 T_M 的高温电子库 M 传输热流 J_L 到温度为 T_L 的低温电子库 L ; 通路 R 通过库仑相互作用 U_{MR} 从高温电子库 M 传输热流 J_R 到温度为 T_R 的低温电子库 R 。图 6.2 给出了两个不同通路的热流随量子点能级 ε_L 和 ε_R 的变化曲线。

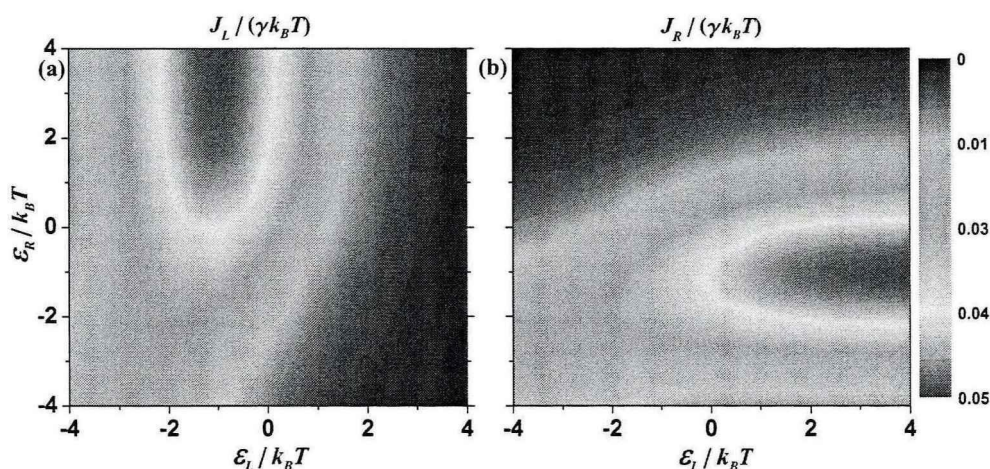


图 6.2 热流(a) J_L 和(b) J_R 随能级 ε_L 和 ε_R 的变化曲线。参数选取为 $\mu_\alpha = 0$, $\varepsilon_M = 0$,

$$U_{\alpha\beta} = 2k_B T, \quad T_L = T_R \equiv T = 200\text{mK}, \quad \text{和} \quad T_M = 400\text{mK}。$$

可以发现, 通过两个不同热通路的热流可以通过量子点能级 ε_L 和 ε_R 来调控。以路径 L 为例, 以量子点系统没有电子占据为初始状态, 热流 J_L 产生的微观过程可以分为四个隧穿过程: (1) 电子由电子库 L 隧穿到能级为 ε_L 的量子点 L 。(2) 电子库 M 中的电子在温度的驱动下隧穿到量子点 M , 电子在这个过程中需要从电子库 M 吸收额外的能量克服库仑相互作用 U_{ML} 。(3) 量子点 L 的电子隧穿回电子库 L , 并将能量为 U_{ML} 的热量释放给电子库 L 。(4) 量子点 M 的电子回到电子库 M , 系统恢复到初始状态。经过这样的过程能量大小为 U_{ML} 的热量由电子库 M 传输到电子库 L 。在这个过程中, 量子点 L 的能级 ε_L 不能太大(相对于电子库 L 的化学势), 以保证电子库 L 能提供足够的热能使得电子能够隧穿到量子点 L 。同时,

能级 ε_L 也不能太小, 否则量子点 L 和 M 间的库仑相互作用能不足以使得量子点 L 上的电子克服势垒隧穿回电子库。并且, 这个过程中量子点 R 辅助调节热通路 L 的热流大小。因为当量子点 R 的能级 ε_R 小于电子库 R 的化学势, 则量子点 R 被占据的几率更大。则电子库 M 的电子隧穿到量子点 M 需克服额外的库仑相互作用 U_{MR} 。因此电子库 M 的电子隧穿到量子点 M 的几率较小。从而导致热通路 L 交换的热量较小。对于热通路 R 具有与热通路 L 相同的物理特性。量化的热流特征如图 6.2 所示。因此通过调节量子点 L 和 R 的能级大小, 能够的到不同形式的热管理操作。

热流交换 首先考虑 $\varepsilon_L = -\varepsilon_R \equiv \varepsilon$ 的情况下, 图 6.3 给出了热流 J_L 和 J_R 随 ε 的变化曲线。可以发现, 在区间 $\varepsilon/k_B T \leq 0$ 内, 热通路 L 的热流 J_L 始终大于热通路 R 的热流 J_R 。此时来自高温库 M 的热流 J_M 主要由热通路 L 输运。并且在 $-4 \ll \varepsilon/k_B T$ 时, 热通路 R 的热流趋于零, 此时热流完全通过热通路 L 来输运, 即 $J_M \approx J_L$, $J_R \rightarrow 0$ 。然而当 $\varepsilon/k_B T > 0$ 时, 热通路 R 的热流 J_R 始终大于热通路 L 的热流 J_L 。并且在 $\varepsilon/k_B T \gg 4$ 时, $J_M \approx J_R$ 而 $J_L \rightarrow 0$ 。在全部的参数区间两个热通路的热流满足 $J_L(\varepsilon_L, -\varepsilon_R) = J_R(-\varepsilon_L, \varepsilon_R)$ 。这意味着, 翻转能级 ε_L 和 ε_R 两个不同通路的热流互换。这个过程称为热流交换。

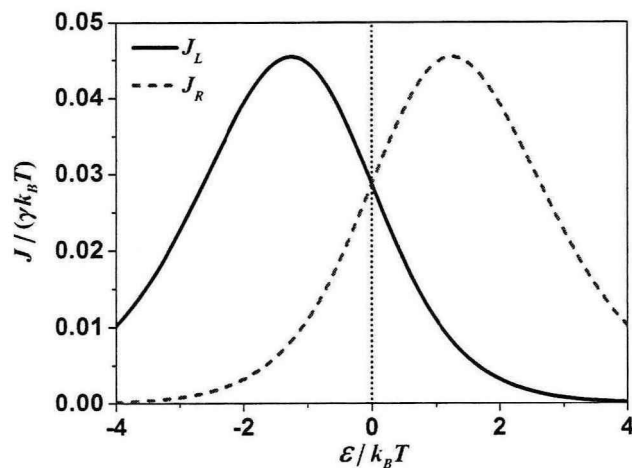


图 6.3 热流交换。参数与图 6.2 的相同。

热开关和热通路选择 考虑 $\varepsilon_L = \varepsilon_M = 0$ 的情况下, 如图 6.4(a) 所示, 热通路 L 表现为热开关特性, 即 $J_L(-\varepsilon_R) = 0$ 然而 $J_L(\varepsilon_R) \neq 0$ 。这表明通过调节 ε_R 能够实现热通路 L 热流导通和断开的操作, 并且当 $|\varepsilon_R| \geq \varepsilon_R^s$ 时, 热通路 L 实现理想的热开关效应。同时可以发现 $\varepsilon_R \geq \varepsilon_R^s$ 的区域满足 $J_L(\varepsilon_R > \varepsilon_R^s, \varepsilon_L = 0) \neq 0$ 并且 $J_R(\varepsilon_R > \varepsilon_R^s, \varepsilon_L = 0) = 0$, 即热通路 L 导通, 但热通路 R 关闭, 这种性质称为热通路选择, 如图 6.4 示意图所示。在图 6.4(b) 考虑 $\varepsilon_R = \varepsilon_M = 0$ 的情况, 通过调节 ε_L 热通路 R 能够实现热开关效应, 即 $J_L(\varepsilon_L > \varepsilon_L^s, \varepsilon_R = 0) = 0$, $J_R(\varepsilon_L > \varepsilon_L^s, \varepsilon_R = 0) \neq 0$ 。并且在 $\varepsilon_L \geq \varepsilon_L^s$ 时, 实现热通路 R 导通, 但热通路 L 关闭的热通路选择。

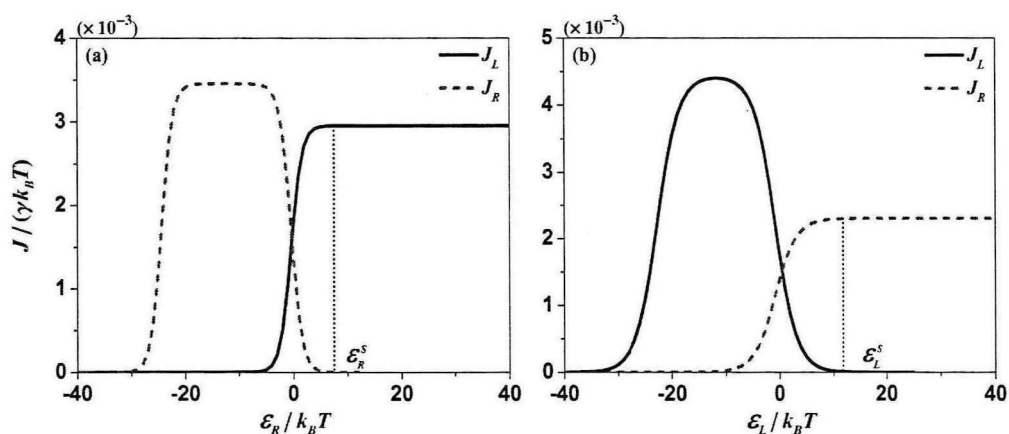


图 6.4 热开关和热通路选择。参数为: $\mu_a = 0$, $U_{LR} = 0$, $U_{ML} = 24k_B T$, $U_{MR} = 25k_B T$, $T_M = 500\text{mK}$, $T_L = 300\text{mK}$, 和 $T_R \equiv T = 150\text{mK}$ 。

§ 6.2 热二极管

最基本最简单的热流控制就是热整流, 这种热整流器件称为热整流器或热二极管。热二极管是类比于电二极管, 能够实现热流在温度梯度的驱动下单向导通, 而当温度梯度反向时则禁止热流输运。通过调节电子库的温度, 可以得到图 6.1 所示的热通路 L 和 R 的热流 J_L 和 J_R 随无量纲温度梯度 Δ 和能级 ε_M 的变化, 如图

6.5 所示。其中电子库的温度分别为 $T_L = T_R \equiv T(1 - \Delta)$, $T_M \equiv T(1 + \Delta)$ 。可以发现, 热流 J_L 和 J_R 随温差 Δ 呈现非对称性, 并且能够通过 ε_M 进行调节。这种特性能够使得通过调节 ε_M 获得热二极管效应。

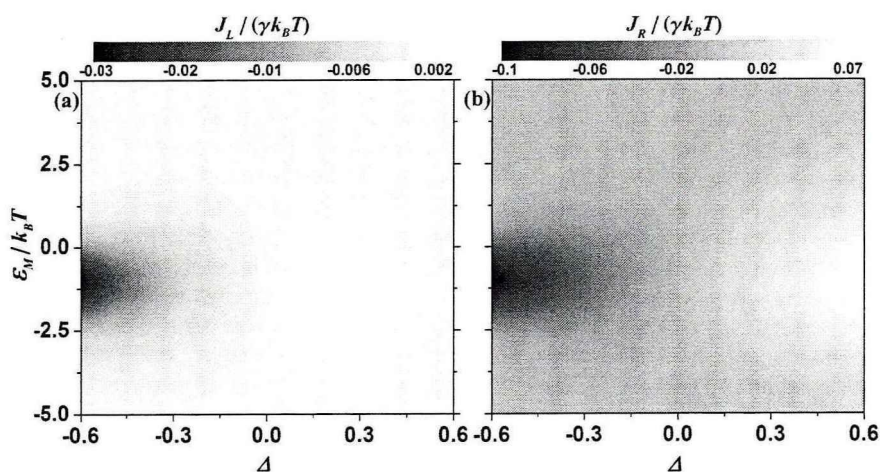


图 6.5 热流(a) J_L 和 (b) J_R 随无量纲温度梯度 Δ 和能级 ε_M 的变化曲线。相关参数

$$\mu_\alpha = 0, U_{\alpha\beta} = 2k_B T, \varepsilon_R = 0, \varepsilon_L = 2.5k_B T, T = 200\text{mK}.$$

定义电子库 M 的温度大于电子库 L 和 R 的温度, 即 $0 < \Delta < 1$ 为系统的正向配置。系统的反向配置电子库的温度与正向配置相反, 即 $-1 < \Delta < 0$ 。热流 J_L 和 J_R 随无量纲温差 Δ 的变化曲线如图 6.6(a)和(b)所示。在对称情况下 $\varepsilon_L = \varepsilon_R = 0$, 热流 J_L 等于 J_R 。两个热通路同时呈现热二极管效应, 如图 6.7(a)所示。在非对称情况下 $\varepsilon_R = 0$, $\varepsilon_L = 2.5k_B T$, 热通路 R 呈现热二极管效应, 但是热通路 L 则失去整流效果, 如图 6.6(b)所示。并且随着量子点能级 ε_M 的增加, 热二极管效果越明显。产生热二极管效应的物理过程可以定性的解释为: 在正向配置的情况下, 量子点 M 与高温电子库 M 耦合, 电子库 M 的电子能够获得足够的热能使得电子隧穿到量子点 M 。并且与量子点 L 或 R 的电子相互作用实现热量交换。因为量子点 L 或 R 的能级在电子库的化学势附近, 所以能够有效地将交换的能量导出, 从而形成较大的热流。而当温度梯度反向时, 虽然高温库 L 或 R 能够加剧与量

子点 L 或 R 的电子隧穿过程, 但由于低温电子库 M 的电子与量子点 M 的隧穿过程被大大抑制, 所以电子库 M 的电子不能有效的导来自高温库 L 或 R 的热量, 因此导致在反向配置下, 系统的热流被抑制。

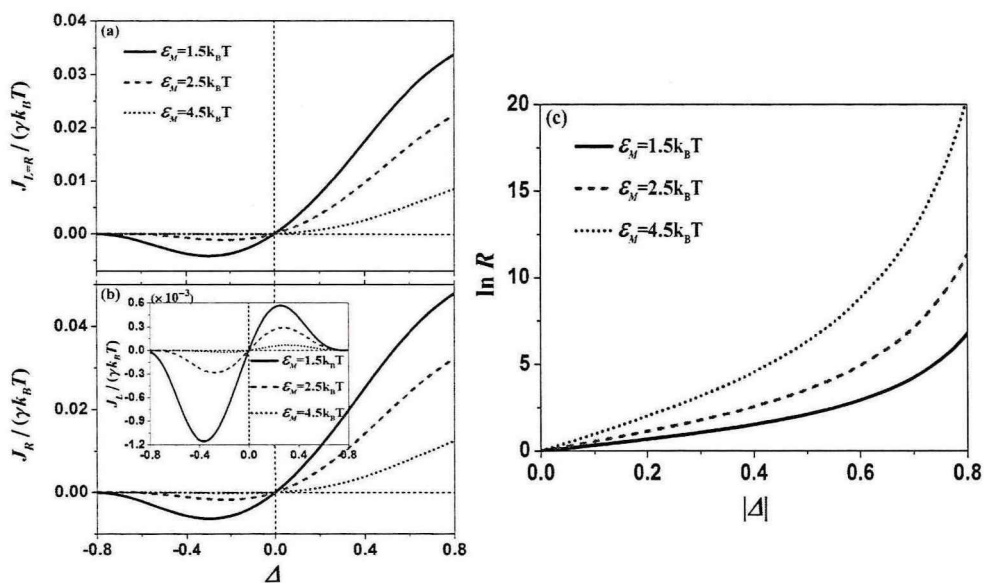


图 6.6 热二极管效应。(a)对称情况 $\varepsilon_L = \varepsilon_R = 0$, (b)非对称情况 $\varepsilon_R = 0$, $\varepsilon_L = 2.5k_B T$ 。(c)对称情况下的热整流系数。

这表明, 量子点能级 ε_M 与 ε_L 或 ε_R 之间非对称的能量配置是导致热二极管的主要原因。并且随着非对称的增加(能级 ε_M 增大), 热二极管效果越显著。热二极管的热整流性能可以通过热整流系数定量描述。热整流系数定义为正向温度配置的热流 $J_{L, fw}$ 与反向配置热流 $J_{L, rev}$ 的比值的绝对值, 即 $R = |J_{L, fw} / J_{L, rev}|$ 。图 6.6(c) 定量的给出了对称情况下不同能级 ε_M 下的热整流系数。特别地, 热二极管效应下, 在温差区间 $\Delta = (-0.8, -0.3)$, 热流随着温差的增大而逐渐减小, 这表明在这个区间存在负微分热阻现象。即 $\partial J / \partial \Delta < 0$ 。研究表明, 负微分热阻是实现热三极管效应的基本要素[88], 因此, 本文的库仑耦合量子点模型能够实现热三极管操作。

§ 6.3 热三极管

在热二极管的基础上，图 5.1(a)的库仑耦合量子点模型能够进一步构造热三极管。量子点热三极管类比于电子三极管由三个端构成：基极(B)、集电极(C) 和发射极(E)。量子点热三极管模型如图 6.7 所示。

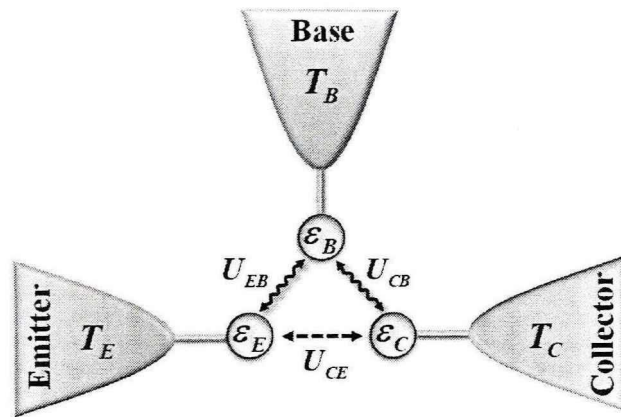


图 6.7 量子点热三极管模型。

图 6.7 中 T_B 、 T_C 、 T_E 分别为每一端电子库的温度， ε_B 、 ε_C 、 ε_E 分别为量子点单粒子能级。量子点与电子库之间通过隧穿势垒弱耦合。电子的隧穿过程由能量依赖隧穿几率描述。三个量子点彼此以电容形式耦合，只通过长程库仑力相互作用，因此量子点之间没有电子输运。 U_{CE} 为集电极与发射极之间的库仑相互作用，本文的研究中作为可调参数。当不同的电子库之间存在温度梯度时，每一端的电子波动(电子隧穿进入或离开量子点)能够在不同的电子库之间交换热量。当恒定的温度梯度施加于发射极与集电极之间，它们之间的热流能够通过基极的温度进行调控。对于理想的热三极管，基极小的热流变化(或小的温度变化)能够调控集电极与发射极更大的热流变化。热放大因子(amplification factor) α_{EC} 用来定量的衡量热三极管放大效应。热放大因子定义为集电极或发射极热流的变化除以基极的热流变化。本文的模型中，给定集电极与发射极的温度 T_C 和 T_E ($T_C < T_E$)。基极温度 T_B ($T_C < T_B < T_E$) 可以调控集电极与发射极热流 J_C 和 J_E 。因此，热放大因子定义为

$$\alpha_{EIC} = \frac{\partial J_{EIC}}{\partial J_B}. \quad (6.1)$$

当 $|\alpha_{EIC}| > 1$ ，呈现热三极管效应。意味着基极小的热流变化引起集电极与发射极大的热流变化。实际的应用中，能够实现对小的热信号的放大。

定义由发射极或基极进入量子点或由量子点进入集电极的热流为正，微分热阻沿着温度梯度增加的方向为正。因此集电极与发射极的微分热阻分别定义为

$$R_E = - \left(\frac{\partial J_E}{\partial T_B} \right)_{T_E}^{-1} \quad (6.2)$$

和

$$R_C = \left(\frac{\partial (-J_C)}{\partial T_B} \right)_{T_C}^{-1}. \quad (6.3)$$

将(6.2)式和(6.3)式代入(6.1)式可得

$$\alpha_{EIC} = - \frac{R_{CIE}}{R_C + R_E}. \quad (6.4)$$

由(6.4)式可知，实现热三极管效应使得 $|\alpha_{EIC}| > 1$ ，意味着存在一个负微分热阻。

图 6.8 给出了集电极与发射极的微分热阻与热流随基极温度 T_B 的变化曲线。

由图 6.8 可以发现，发射极呈现出负微分热阻。这导致在基极温度 T_B 的可调范围内，发射极热流 J_E 随着发射极和基极间温差的减小(即 T_B 增加)而增大。如图 6.8(b)所示。集电极表现为正常的热运输，集电极热流随着基极温度 T_B 的增加而增加。因此，总的效果使得在基极温度 T_B 的调控下发射极与集电极之间实现大的热流运输。这个过程的物理机制可以做如下解释：在我们的模型中，每个电子库的化学势选取为零 $\mu_\alpha = 0$ 作为参考点。集电极量子点能级 $\varepsilon_C = -9.5k_B T$ 小于集电极电子库化学势，发射极与基极量子点能级高于化学势($\varepsilon_E = 5k_B T$ ， $\varepsilon_B = 6k_B T$)。在这个系统配置下，电子在集电极电子库所获得的热能 $k_B T$ ($T_C \equiv T = 200\text{mK}$)明显小于电子隧穿回电子库所需的能量 $\mu_C - \varepsilon_C$ 。但是，集

电极与基极和发射极间的库仑相互 U_{CB} 和 U_{CE} 能够有效的提升集电极量子点的能级,这直接导致集电极电子隧穿几率的增加。从而有效的激励发射极与集电极间的热流输运,通过库仑相互作用 U_{CE} 实现发射极与集电极之间的能量交换。随着基极温度 T_B 的增加,基极电子隧穿几率增加,从而有效的加快发射极与集电极间的能量交换。

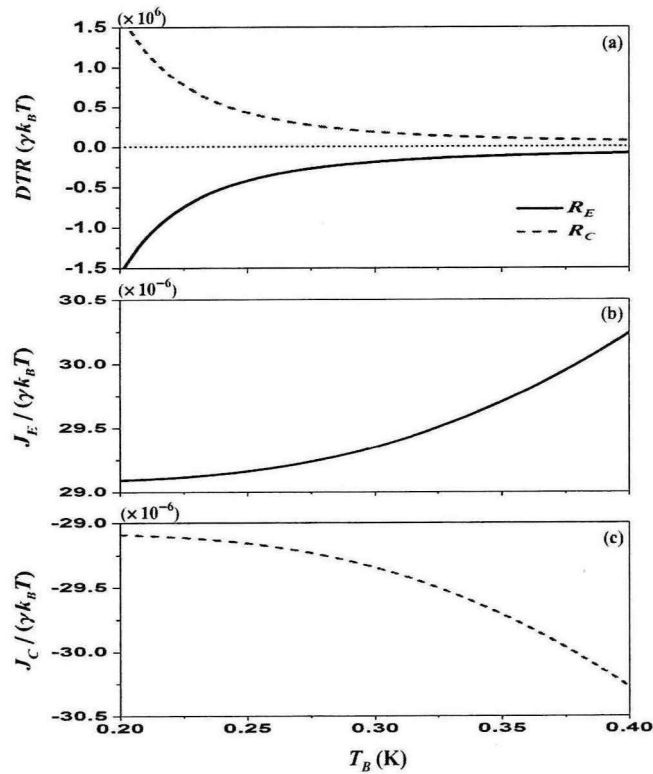


图 6.8 (a) 微分热阻 R_E 和 R_C 、(b) 发射极热流 J_E 和(c)集电极热流 J_C 随基极温度 T_B 的变化。相关参数为： $\gamma_E = \gamma_C \equiv \gamma$ ， $\gamma_B/\gamma = 0.001$ ， $U_{EB} = U_{CB} = U_{CE} = 3k_B T$ ， $\mu_\alpha = 0$ ， $\varepsilon_E = 5k_B T$ ， $\varepsilon_B = 6k_B T$ ， $\varepsilon_C = -9.5k_B T$ ， $T_E = 400\text{mK}$ ， $T_C \equiv T = 200\text{mK}$ 。

基极热流 J_B 随基极温度 T_B 的变化如图 6.9(a)所示。与图 6.8 比较可以发现基极热流 J_B 明显小于发射极与集电极热流 J_E 和 J_C 。基极热流小的变化对应大的发

射极和集电极热流变化。这是明显的热流放大效果。热三极管发射极与集电极的热放大因子 α_E 和 α_C 随基极温度的变化如图 6.9(b)所示。

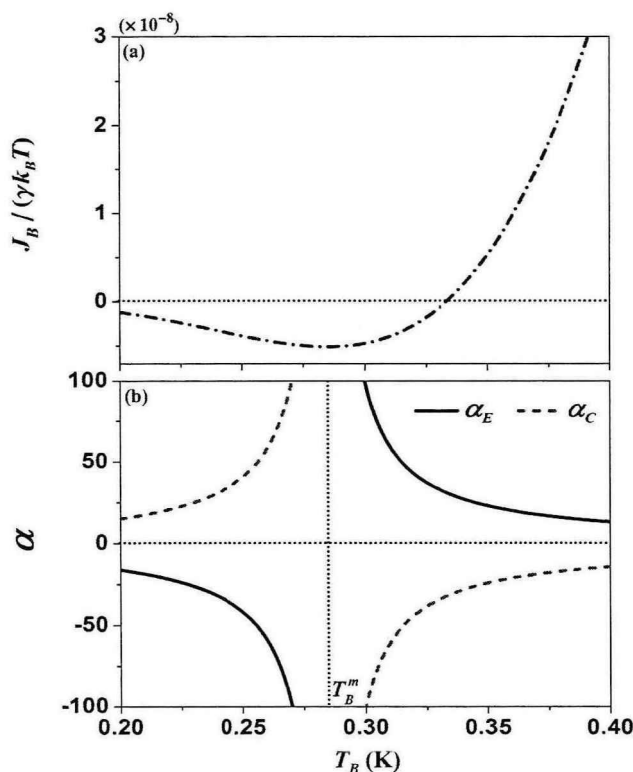


图 6.9 (a)基极热流 J_B , (b) 热放大因子 α_E 和 α_C 随基极温度 T_B 的变化。相关参数与图 6.9 的相同。

可以发现热放大因子 α_E 和 α_C 在 $T_B^m \approx 285$ mK 时发散并趋于无穷。这是由于基极热流在这一点时有一个最小值,此时变化率为零。我们首先强调的是,这种效应是负微分热阻的结果。这种效应可以定性地解释为:基极热流 J_B 来自两个不同的贡献。一部分是当存在温度梯度 $T_E - T_B$ 时,通过库仑相互作用 U_{EB} 从发射极到基极的负的(与正方向相反)热流,另一部分是当存在温度梯度 $T_B - T_C$ 时,通过库仑相互作用 U_{CB} 从基极到集电极的正的热流。起初基极温度与集电极温度相同,因此在基极和集电极之间没有热流。然而,通过库仑相互作用 U_{EB} 发射极将热量传

递到基极，所以此时的基极热流 J_B 是负的。随着基础温度的升高，虽然温度梯度 $T_E - T_B$ 下降，但由于负微分热阻效应，从发射极到基极的热流继续增加。因此，基极热流 J_B 继续减少(绝对值增加)，直到通过库仑相互作用 U_{CB} 使得从基极到集电极的正的热流增加到更高的程度。在这一点上，基极热流 J_B 达到最小值。此后基极热流随着基础温度的增加而增加。在区间 $T_B > T_B^m$ ，热放大因子随着基极温度的增加逐渐减小。特别的，在 $T_B \approx 333\text{mK}$ 时，基极热流为零，此时没有热流流过基极。但是此时热放大因子 $\alpha_E \approx 31$ ， $\alpha_C \approx -32$ 。表明基极热流为零时，系统仍旧表现出很好的热三极管效应。

在这个系统中，为了获得良好的热三极管效应，以下两种可行性方案能够实现。第一，减小基极隧穿几率 γ_B 。第二，调节发射极与集电极之间的库仑相互作用 U_{CE} 。首先讨论第一种方案。通过减小基极隧穿几率 γ_B 能够有效地抑制基极的热流，从而实现更大的热放大因子。图 6.10 给出了热放大因子 α_E 和 α_C 随基极隧穿几率 γ_B/γ 的变化曲线。

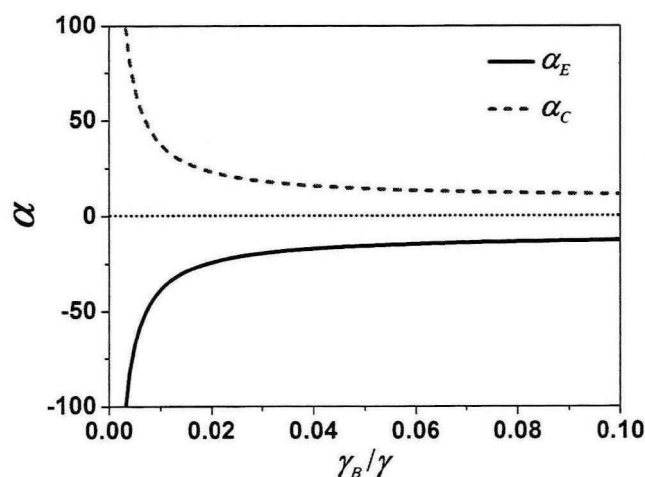


图 6.10 热放大因子 α_E 和 α_C 在 $T_B = 280\text{mK}$ 时随基极隧穿几率 γ_B/γ 的变化曲线。

其他参数与图 6.9 的相同。

可以发现,减小基极隧穿几率能够明显的增大热放大因子。实验上已经确定隧穿几率能够被直接调控[162]。因此,本文中通过这种方案来改善热晶体管的性能是切实可行的。

另一种方案是通过调节发射极与集电极间的库仑相互作用 U_{CE} ,能够直接控制系统发射极到集电极的能量交换。实验上,能够通过静电桥接(electrostatic bridging)两个子系统实现对两个子系统间的库仑相互作用的调节[176, 177]。图 6.11 给出了系统发射极与集电极的微分热阻和热放大因子随库仑相互作用 U_{CE} 的变化曲线。

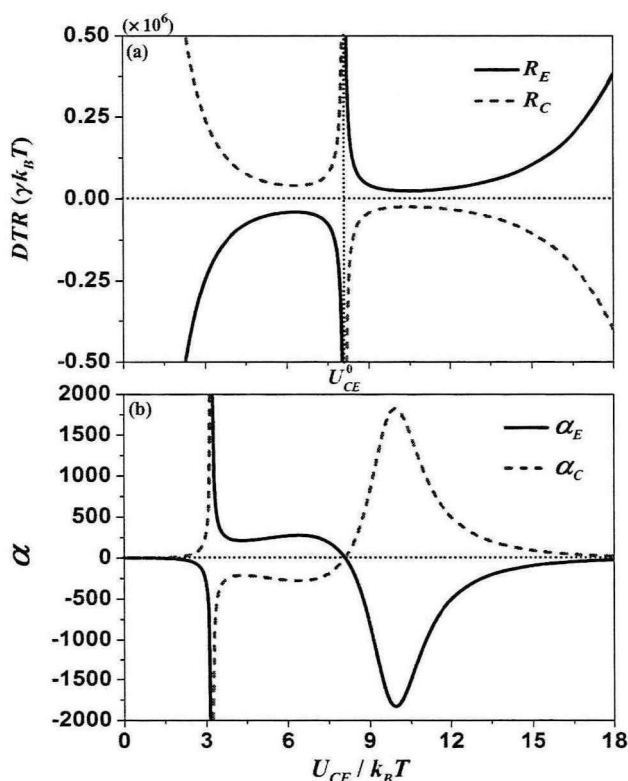


图 6.11 (a)微分热阻 R_E 和 R_C , (b)热放大因子 α_E 和 α_C 在基极温度 $T_B = 280\text{mK}$ 时随库仑相互作用 U_{CE} 的变化曲线。其他参数与图 6.9 的相同。

由图可知,在 $U_{CE}^0 = 8.1k_B T$,微分热阻 R_E 和 R_C 发生分裂,此时热放大因子为零。并且由图 6.11(b)可知,当无库仑相互作用 $U_{CE} = 0$ 时,发射极与集电极间将没有

热流, 此时系统不存在热三极管效应。在 U_{CE} 趋于很大时, 热放大因子随着 U_{CE} 的增加而迅速减小, 最终系统也将失去热放大效果。因此, 库仑相互作用 U_{CE} 存在优化区间, 在这个区间能够得到较大的热放大因子。

在优化情况下, 选取库仑相互作用 $U_{CE} = 10k_B T$, 此时热放大因子 α_E 和 α_C 随基极温度的变化曲线如图 6.12 所示。可以发现, 在基极温度 T_B 的可调范围内, 系统的热放大因子是相当大的。表明通过调节库仑相互作用 U_{CE} 能够明显的改善热三极管效应。最后我们强调, 尽管本文的热三极管与文献[124]基于相同的思路, 但是, 本文的模型与文献[124]根本的微观机理是不同的。并且本文的热三极管模型与近期研究的近场热晶体管(near-field thermal transistor)[118]和量子热晶体管(quantum thermal transistor)[124]比较具有明显的优势。最近, 库仑耦合量子点系统已经在实验上实现并且进行了广泛的研究[162,165,168,169]。因此本文的工作是有足够的意义去激发相关的实验工作。并且可能在纳米尺度低温固态热电路中开拓潜在的应用。

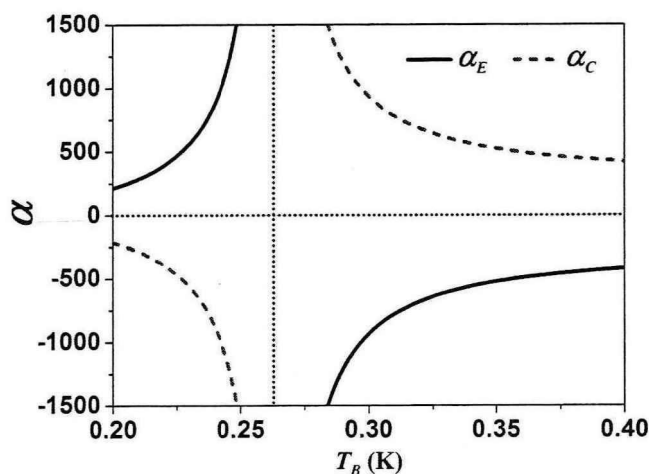


图 6.12 热放大因子 α_E 和 α_C 随基极温度 T_B 的变化曲线。参数 $\gamma_B/\gamma = 0.001$, $U_{CE} = 10k_B T$ 。其他参数与图 6.9 的相同。

§ 6.4 本章小结

本章研究一个由三个库仑耦合量子点分别与各自的热电子库连接构成的三端量子点系统。在这个系统中,量子点之间的电子输运是被禁止的。但是当不同热电子库之间存在温度梯度时,由于库仑相互作用,不同电子库之间能够实现热输运。基于此,这个三端量子点系统能够实现不同形式的热管理,比如热流交换、热开关和热通路选择。该系统还可以构造两个重要的固态热电路元件:热二极管和热三极管。其中热二极管类比于电子二极管,能够实现热流在正向温度梯度下导通,在反向温度梯度下抑制。研究表明,该系统能够在两个不同的热通路分别实现热二极管操作,并且热整流(R)效果明显。另外,该系统的三个端可以构成基极、集电极和发射极,从而实现类比于电子晶体管的热三极管操作。具体分析表明,基极的一个微小的热流变化能够引起集电极和发射极较大的热流变化。这使得量子点热三极管能够放大基极端微小的热信号,并且通过调节集电极和发射极间的库仑相互作用能够获得很大的放大系数(α)。因此,本文提出的量子点热二极管和热三极管在纳米尺度低温固态热电路中具有潜在的应用价值。

第七章 总结与展望

§ 7.1 总结

本文是基于库仑耦合量子点模型开展的关于该量子系统热与电的输运及转化方面的一系列研究工作。主要包括两部分内容,第一部分研究了三端库仑耦合量子点热电器件的性能特性及优化。第二部分建立了三个量子点库仑耦合系统并研究了该系统在热管理方面的应用。本文的研究重点是揭示量子系统的结构及其内部不可逆损失对热流及电流的输运及转化的影响。为新型热电及热管理器件的构造及性能优化提供理论指导。本文的主要研究成果包括:

(1) 三端库仑耦合量子点热电器件(热机和制冷机)存在两种不同的工作方式,能够实现不同的工作要求。理想情况下热机和制冷机在两种不同的配置下都能够实现可逆工作,达到卡诺效率。

(2) 对于三端库仑耦合量子点热电器件,非对称能量依赖隧穿是实现三端量子点热机或制冷机的必要条件,同时也是导致系统内部不可逆损失的关键因素,深刻地影响着系统的电子与热量输运以及热电器件的性能,导致与可逆情况完全不同的性能特点。研究表明,可逆情况下热电器件的特征曲线是抛物线形,热电器件的效率能够达到卡诺效率。非可逆情况下,热电器件的特征曲线是闭合曲线,根据有限时间热力学理论,此时热电器件的优化区间应位于特征曲线的负斜率区间。确定了热电器件工作在优化区间时,系统的两个重要的参数偏压与库仑相互作用的优化区间。

(3) 由三个库仑耦合量子点分别与各自的热电子库连接的三端量子点系统能够调控热流。在这个系统中,量子点之间的电子输运是被禁止的。但不同量子点之间能够通过库仑相互作用交换热量。通过不同的结构设计,该系统能够实现热流交换、热开关和热通路选择基本的热管理。研究系统的热流性质,发现该系统能够在两个不同的热通路实现具有明显整流效果的热二极管效应,并且发现系统内存在反常的热输运现象:负微分热阻,这也成为该系统构造热三极管的先决条件。通过结构调整及参数优化能够获得具有非常明显放大效果的热三极管效应。

§ 7.2 展望

纳米尺度的量子系统都具有明显的量子效应,因此研究量子效应对纳米器件性能的影响具有重要的意义。量子相干是典型的量子效应,能够对纳米尺度下的量子系统产生显著的影响,许多工作已经表明量子相干效应能够提高能量转换器件的性能[52,178-180]。本文的模型中当两个量子点之间以强耦合形成类共价键时,两个量子点之间表现出明显的量子相干效应。因此,在本文的工作基础上进一步研究量子相干对量子点热电器件性能的影响是很有意义的。最近,许多工作研究能量转换器件在与压缩库耦合时,讨论量子压缩对器件性能的影响。相关的研究甚至得出效率大于卡诺效率的结论。这是一个颇具争议的结论同时也激发人们对量子系统的功与热及其转化的研究[53,181-184]。将压缩库引入本文的研究将能够通过与本文的对比明确压缩库对量子系统热电性能的影响。库仑拖拽同样是小尺度下的量子效应,已经在库仑耦合量子点系统中被观察到[185,186]。库仑拖拽效应对库仑耦合量子点热机性能的影响开始引起人们的关注[160,161]。这也将是未来的研究重点。

量子效应同样能够对热管理器件的性能产生影响,相关的研究仍需进一步深入。热逻辑响应器件与热记忆器件同样是热电路两个重要的元件,如何通过库仑耦合量子点系统实现上述功能仍然是未来的研究重点。实现热逻辑响应与热记忆,则能够基于库仑耦合量子点实现热计算。而在量子信息领域,库仑耦合量子点同样为研究具体的量子信息理论提供了好的理论模型[58,187,188]。

三端库仑耦合量子点热机已经在实验上实现[162]。这也进一步证明了库仑耦合量子点热电器件的可行性。相信在不久的将来库仑耦合量子点制冷机甚至库仑耦合量子点热管理器件也能够被实现,并在实际的纳米尺度能量转换与固态热电路中得到应用。

参考文献

- [1] F. J. DiSalvo. Thermoelectric cooling and power generation[J]. *Science*, 1999, 285(5428): 703-706.
- [2] A. F. Ioffe. Semiconductor thermoelements and thermoelectric cooling[M]. Infosearch, London, 1957.
- [3] R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts, and B. O'quinn. Thin-film thermoelectric devices with high room-temperature figures of merit[J]. *Nature*, 2001, 413(6856): 597-602.
- [4] A. Majumdar. Thermoelectricity in semiconductor nanostructures[J]. *Science*, 2004, 303(5659): 777-778.
- [5] L. E. Bell. Cooling, heating, generating power, and recovering waste heat with thermoelectric systems[J]. *Science*, 2008, 321(5895): 1457-1461.
- [6] G. J. Snyder, and E. S. Toberer. Complex thermoelectric materials[J]. *Nat. Mater.*, 2008, 7(2): 105-114.
- [7] T. M. Tritt. Thermoelectric phenomena, materials, and applications[J]. *Annu. Rev. Mater. Res.*, 2011, 41: 433-448.
- [8] J. He, and T. M. Tritt. Advances in thermoelectric materials research: Looking back and moving forward[J]. *Science*, 2017, 357(6358): eaak9997.
- [9] L. D. Hicks, and M. S. Dresselhaus. Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit[J]. *Phys. Rev. B*, 1993, 47(19): 12727-12731.
- [10] L. D. Hicks, and M. S. Dresselhaus. Thermoelectric figure of merit of a one-dimensional conductor[J]. *Phys. Rev. B*, 1993, 47(24): 16631-16634.
- [11] G. D. Mahan, and J. O. Sofo. The best thermoelectric[J]. *Proc. Natl Acad. Sci. USA*, 1996, 93(15): 7436-7439.
- [12] G. D. Mahan. Good thermoelectric[J]. *Solid State Physics*, 1998, 51(51):81-157.

- [13] M. S. Dresselhaus, G. Chen, M. Y. Tang, R. Yang, H. Lee, D. Wang, Z. Ren, J.-P. Fleurial, and P. Gogna. New directions for low-dimensional thermoelectric materials[J]. *Adv. Mater.*, 2007, 19(8): 1043-1053.
- [14] N. Nakpathomkun, H. Q. Xu, and H. Linke. Thermoelectric efficiency at maximum power in low-dimensional systems[J]. *Phys. Rev. B*, 2010, 82(23): 235428.
- [15] T. C. Harman, P. J. Taylor, M. P. Walsh, and B. E. LaForge. Quantum dot superlattice thermoelectric materials and devices[J]. *Science*, 2002, 297(5590): 2229-2232.
- [16] A. I. Boukai, Y. Bunimovich, J. Tahir-Kheli, J. K. Yu, W. A. Goddard Iii, and J. R. Heath. Silicon nanowires as efficient thermoelectric materials[J]. *Nature*, 2008, 451(7175):168-171.
- [17] J. P. Heremans, V. Jovovic, E. S. Toberer, A. Saramat, K. Kurosaki, A. Charoenphakdee, S. Yamanaka, and G. Jeffrey Snyder. Enhancement of thermoelectric efficiency in PbTe by distortion of the electronic density of states[J]. *Science*, 2008, 321(5888): 554-557.
- [18] J. P. Small, K. M. Perez, and P. Kim. Modulation of thermoelectric power of individual carbon nanotubes[J]. *Phys. Rev. Lett.* 2003, 91(25): 256801.
- [19] P. Reddy, S. Y. Jang, R. A. Segalman, and A. Majumdar. Thermoelectricity in molecular junctions[J]. *Science*, 2007, 315(5818): 1568-1571.
- [20] Y. Dubi, and M. Di Ventra. Colloquium: Heat flow and thermoelectricity in atomic and molecular junctions[J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2011, 83(1): 131-155.
- [21] T. E. Humphrey, R. Newbury, R. P. Taylor, and H. Linke. Reversible quantum brownian heat engines for electrons[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, 89(11): 116801.
- [22] T. E. Humphrey, and H. Linke. Reversible thermoelectric nanomaterials[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 94(9): 096601.
- [23] M. F. O'Dwyer, R. A. Lewis, C. Zhang, and T. E. Humphrey. Electronic efficiency in nanostructured thermionic and thermoelectric devices[J]. *Phys. Review B*, 2005, 72(20): 205330.

- [24] M. F. O'Dwyer, T. E. Humphrey, and H. Linke. Concept study for a high-efficiency nanowire based thermoelectric[J]. *Nanotechnology*, 2006, 17(11): S338-S343.
- [25] X. M. Wang, J. Z. He, and W. Tang. Performance characteristics of an energy selective electron refrigerator with double resonances[J]. *Chin. Phys. B*, 2009, 18(3): 984-991.
- [26] S. Su, J. Guo, G. Su, and J. Chen. Performance optimum analysis and load matching of an energy selective electron heat engine[J]. *Energy*, 2012, 44(1): 570-575.
- [27] A. Agarwal, and B. Muralidharan. Power and efficiency analysis of a realistic resonant tunneling diode thermoelectric[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2014, 105(1): 013104.
- [28] Ch. Grenier, A. Georges, and C. Kollath. Peltier cooling of fermionic quantum gases[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2014, 113(20): 200601.
- [29] R. Sánchez, and M. Büttiker. Optimal energy quanta to current conversion[J]. *Phys. Rev. B*, 2011, 83(8): 085428.
- [30] F. Mazza, R. Bosisio, G. Benenti, V. Giovannetti, R. Fazio, and F. Taddei. Thermoelectric efficiency of three-terminal quantum thermal machines[J]. *New J. Phys.*, 2014, 16(8): 085001.
- [31] O. Entin-Wohlman, Y. Imry, and A. Aharony. Enhanced performance of joint cooling and energy production[J]. *Phys. Rev. B*, 2015, 91(5): 054302.
- [32] F. Mazza, S. Valentini, R. Bosisio, G. Benenti, V. Giovannetti, R. Fazio, and F. Taddei. Separation of heat and charge currents for boosted thermoelectric conversion[J]. *Phys. Rev. B*, 2015, 91(24): 245435.
- [33] S. Björn, R. Sánchez, and A. N. Jordan. Thermoelectric energy harvesting with quantum dots[J]. *Nanotechnology*, 2015, 26(3): 032001.
- [34] J. H. Jiang, O. Entin-Wohlman, and Y. Imry. Three-terminal semiconductor junction thermoelectric devices: improving performance[J]. *New J. Phys.*, 2013, 15(7): 075021.

- [35] G. Michałek, M. Urbaniak, B. R. Bułka, T. Domański, and K. I. Wysokiński. Local and nonlocal thermopower in three-terminal nanostructures[J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 93(23): 235440.
- [36] A. N. Jordan, B. Sothmann, R. Sánchez, and M. Büttiker. Powerful and efficient energy harvester with resonant-tunneling quantum dots[J]. *Phys. Rev. B*, 2013, 87(7): 075312.
- [37] B. Sothmann, R. Sánchez, A. N. Jordan, and M. Büttiker. Powerful energy harvester based on resonant-tunneling quantum wells[J]. *New J. Phys.*, 2013, 15(9): 095021.
- [38] J. H. Jiang. Enhancing efficiency and power of quantum-dots resonant tunneling thermoelectrics in three-terminal geometry by cooperative effects[J]. *J. Appl. Phys.*, 2014, 116(19): 194303.
- [39] B. Sothmann, R. Sánchez, A. N. Jordan, and M. Büttiker. Rectification of thermal fluctuations in a chaotic cavity heat engine[J]. *Phys. Rev. B*, 2012, 85(20): 205301.
- [40] B. Roche, P. Roulleau, T. Jullien, Y. Jompol, I. Farrer, D. A. Ritchie, and D. C. Glattli. Harvesting dissipated energy with a mesoscopic ratchet[J]. *Nat. Commun.*, 2015, 6: 6738.
- [41] R. Sánchez, B. Sothmann, and A. N. Jordan. Chiral thermoelectrics with quantum Hall edge states[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2015, 114(14): 146801.
- [42] J. H. Jiang, O. Entin-Wohlman, and Y. Imry. Thermoelectric three-terminal hopping transport through one-dimensional nanosystems[J]. *Phys. Rev. B*, 2012, 85(7): 075412.
- [43] R. Bosisio, C. Gorini, G. Fleury, and J.-L. Pichard. Using activated transport in parallel nanowires for energy harvesting and hot-spot cooling[J]. *Phys. Rev. Applied*, 2015, 3(5): 054002.
- [44] R. Bosisio, G. Fleury, J. L. Pichard, and C. Gorini. Nanowire-based thermoelectric ratchet in the hopping regime[J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 93(16): 165404.

- [45] J. H. Jiang, and Y. Imry. Enhancing thermoelectric performance using nonlinear transport effects[J]. *Phys. Rev. Applied*, 2017, 7(6): 064001.
- [46] B. Rutten, M. Esposito, and B. Cleuren. Reaching optimal efficiencies using nanosized photoelectric devices[J]. *Phys. Rev. B*, 2009, 80(23): 235122.
- [47] B. Cleuren, B. Rutten, and C. Van den Broeck. Cooling by heating: Refrigeration powered by photons[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 108(12): 120603.
- [48] T. Ruokola, and T. Ojanen. Theory of single-electron heat engines coupled to electromagnetic environments[J]. *Phys. Rev. B*, 2012, 86(3): 035454.
- [49] C. Li, Y. Zhang, J. Wang, and J. He. Performance characteristics and optimal analysis of a nanosized quantum dot photoelectric refrigerator[J]. *Phys. Rev. E*, 2013, 88(6): 062120.
- [50] C. Bergenfeldt, P. Samuelsson, B. Sothmann, C. Flindt, and M. Büttiker. Hybrid microwave-cavity heat engine[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2014, 112(7): 076803.
- [51] J. Wang, Y. Lai, Z. Ye, J. He, Y. Ma, and Q. Liao. Four-level refrigerator driven by photons[J]. *Phys. Rev. E*, 2015, 91(5): 050102.
- [52] S. Su, C. Sun, S. Li, and J. Chen. Photoelectric converters with quantum coherence[J]. *Phys. Rev. E*, 2016, 93(5): 052103.
- [53] B. K. Agarwalla, J. H. Jiang, and D. Segal. Quantum efficiency bound for continuous heat engines coupled to noncanonical reservoirs[J]. *Phys. Rev. B*, 2017, 96(10): 104304.
- [54] B. Sothmann, and M. Büttiker. Magnon-driven quantum-dot heat engine[J]. *Europhys. Lett.*, 2012, 99(2): 27001.
- [55] Y. Wang, C. Huang, T. Liao, and J. Chen. Magnon-driven quantum dot refrigerators[J]. *Phys. Lett. A*, 2015, 379(47-48): 3054-3058.
- [56] Ł. Karwacki, P. Trocha, and J. Barnaś. Magnon transport through a quantum dot: Conversion to electronic spin and charge currents[J]. *Phys. Rev. B*, 2015, 92(23): 235449.
- [57] D. Mandal, H. T. Quan, and C. Jarzynski. Maxwell's refrigerator: An exactly solvable model[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, 111(3): 030602.

- [58] J. V. Koski, A. Kutvonen, I. M. Khaymovich, T. Ala-Nissila, and J. P. Pekola. On-chip Maxwell's demon as an information-powered refrigerator[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2015, 115(26): 260602.
- [59] R. S. Whitney. Most efficient quantum thermoelectric at finite power output[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2014, 112(13): 130601.
- [60] R. S. Whitney. Finding the quantum thermoelectric with maximal efficiency and minimal entropy production at given power output[J]. *Phys. Rev. B*, 2015, 91(11): 115425.
- [61] R. Uzdin, A. Levy, and R. Kosloff. Equivalence of quantum heat machines, and quantum-thermodynamic signatures[J]. *Phys. Rev. X*, 2015, 5(3): 031044.
- [62] J. Millen, and A. Xuereb. Perspective on quantum thermodynamics[J]. *New J. Phys.*, 2016, 18(1): 011002.
- [63] G. Bevilacqua, G. Grosso, G. Menichetti, G. P. Parravicini. Thermoelectric efficiency of nanoscale devices in the linear regime[J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 94(24): 245419.
- [64] H. Karbaschi, J. Lovén, K. Courteaut, A. Wacker, and M. Leijnse. Nonlinear thermoelectric efficiency of superlattice-structured nanowires[J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 94(11): 115414.
- [65] G. Benenti, G. Casati, K. Saito, and R. S. Whitney. Fundamental aspects of steady-state conversion of heat to work at the nanoscale[J]. *Phys. Rep.*, 2017, 694: 1-124.
- [66] F. L. Curzon, and B. Ahlborn. Efficiency of a Carnot engine at maximum power output[J]. *Am. J. Phys.*, 1975, 43(1): 22-24.
- [67] H. S. Leff. Thermal efficiency at maximum work output: New results for old heat engines[J]. *Am. J. Phys.*, 1986, 55(7): 602-610.
- [68] L. Chen, and Z. Yan. The effect of heat-transfer law on performance of a two-heat-source endoreversible cycle[J]. *J. Chem. Phys.*, 1989, 90(7): 3740-3743.

- [69] J. Chen. The maximum power output and maximum efficiency of an irreversible Carnot heat engine[J]. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 1994, 27(6): 1144-1149.
- [70] Z. Yan, J. Chen. A class of irreversible Carnot refrigeration cycles with a general heat transfer law[J]. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 1990, 23(2):136-141.
- [71] T. Schmiedl, and U. Seifert. Efficiency at maximum power: An analytically solvable model for stochastic heat engines[J]. *Europhys. Lett.*, 2008, 81(2): 20003.
- [72] Z. C. Tu. Efficiency at maximum power of Feynman's ratchet as a heat engine[J]. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 2008, 41(31): 312003.
- [73] T. Schmiedl, and U. Seifert. Efficiency of molecular motors at maximum power[J]. *Europhys. Lett.*, 2008, 83(3): 30005.
- [74] C. Van den Broeck, N. Kumar, and K. Lindenberg. Efficiency of isothermal molecular machines at maximum power[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 108(21): 210602.
- [75] M. Esposito, K. Lindenberg, and C. Van den Broeck. Thermoelectric efficiency at maximum power in a quantum dot[J]. *Europhys. Lett.*, 2009, 85(6): 60010.
- [76] C. Van den Broeck, and K. Lindenberg. Efficiency at maximum power for classical particle transport [J]. *Phys. Rev. E*, 2012, 86(4): 041144.
- [77] Y. Izumida, and K. Okuda. Efficiency at maximum power of minimally nonlinear irreversible heat engines[J]. *Europhys. Lett.*, 2012, 97(1): 10004.
- [78] Y. Izumida, K. Okuda, A. Calvo Hernández, and J. M. M. Roco. Coefficient of performance under optimized figure of merit in minimally nonlinear irreversible refrigerator[J]. *Europhys. Lett.*, 2013, 101(1): 10005.
- [79] M. Esposito, R. Kawai, K. Lindenberg, and C. Van den Broeck. Efficiency at maximum power of low-dissipation Carnot engines[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 105(15): 150603.
- [80] G. Benenti, K. Saito, and G. Casati. Thermodynamic bounds on efficiency for systems with broken time-reversal symmetry[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 106(23): 230602.

- [81] K. Brandner, K. Saito, and U. Seifert. Strong bounds on Onsager coefficients and efficiency for three-terminal thermoelectric transport in a magnetic field[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, 110(7): 070603.
- [82] B. Andresen. *Finite-time thermodynamics*[M]. Copenhagen: University of Copenhagen, 1983.
- [83] B. Andresen, P. Salamon, and R. S. Berry. Thermodynamics in finite time[J]. *Phys. Today*, 1984, 37(9): 62-70.
- [84] R. S. Berry. *Thermodynamics optimization of finite-time processes*[M]. Chichester: John Wiley and Sons, 2000.
- [85] C. Van den Broeck. Thermodynamic efficiency at maximum power[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95(19): 190602.
- [86] M. Esposito, and K. Lindenberg. Universality of efficiency at maximum power[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 102(13): 130602.
- [87] L. Wang, and B. Li. Phononics gets hot[J]. *Phys. World*, 2008, 21(3): 27-29.
- [88] N. Li, J. Ren, L. Wang, G. Zhang, P. Hänggi, and B. Li. Colloquium: Phononics: Manipulating heat flow with electronic analogs and beyond[J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2012, 84(3): 1045-1066.
- [89] F. Giazotto, T. T. Heikkilä, A. Luukanen, A. M. Savin, and J. P. Pekola. Opportunities for mesoscopies in thermometry and refrigeration: Physics and applications[J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2006, 78(1): 217-274.
- [90] C. W. Chang, D. Okawa, A. Majumdar, and A. Zettl. Solid-state thermal rectifier[J]. *Science*, 2006, 314(5802): 1121-1124.
- [91] B. Dutta, J. T. Peltonen, D. S. Antonenko, M. Meschke, M. A. Skvortsov, B. Kubala, J. König, C. B. Winkelmann, H. Courtois, and J. P. Pekola. Thermal conductance of a single-electron transistor[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2017, 119(7): 077701.
- [92] G. Wehmeyer, T. Yabuki, C. Monachon, J. Wu, and C. Dames. Thermal diodes, regulators, and switches: Physical mechanisms and potential applications[J]. *Appl. Phys. Rev.*, 2017, 4(4): 041304.

- [93] M. Terraneo, M. Peyrard, and G. Casati. Controlling the energy flow in nonlinear lattices: A model for a thermal rectifier[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, 88(9): 094302.
- [94] B. Li, L. Wang, and G. Casati. Thermal diode: Rectification of heat flux[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 93(18): 184301.
- [95] B. Li, L. Wang, and G. Casati. Negative differential thermal resistance and thermal transistor[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, 88(14): 143501.
- [96] D. Segal, and A. Nitzan. Spin-boson thermal rectifier[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 94(3): 034301.
- [97] W. Kobayashi, Y. Teraoka, and I. Terasaki, An oxide thermal rectifier[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2009, 95(17): 171905.
- [98] L. Zhang, J. S. Wang, and B. Li. Ballistic thermal rectification in nanoscale three-terminal junctions[J]. *Phys. Rev. B*, 2010, 81(10): 100301(R).
- [99] C. R. Otey, W. T. Lau, and S. Fan. Thermal rectification through vacuum[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 104(15): 154301.
- [100] M. J. Martínez-Pérez, and F. Giazotto. Efficient phase-tunable Josephson thermal rectifier[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2013, 102(18): 182602.
- [101] P. Ben-Abdallah, and S. A. Biehs. Phase-change radiative thermal diode[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2013, 103(19): 191907.
- [102] Z. Chen, C. Wong, S. Lubner, S. Yee, J. Miller, W. Jang, C. Hardin, A. Fong, J. E. Garay, and C. Dames. A photon thermal diode[J]. *Nat. Commun.*, 2014, 5: 5446.
- [103] P. Ben-Abdallah, and S. A. Biehs. Contactless heat flux control with photonic devices[J]. *AIP Advances*, 2015, 5(5): 053502.
- [104] Z. X. Man, N. B. An, and Y. J. Xia. Controlling heat flows among three reservoirs asymmetrically coupled to two two-level systems[J]. *Phys. Rev. E*, 2016, 94(4): 042135.
- [105] R. Scheibner, M. König, D. Reuter, A. D. Wieck, C. Gould, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp. Quantum dot as thermal rectifier[J]. *New J. Phys.*, 2008, 10(8): 083016.

- [106] D. M. T. Kuo, and Y. C. Chang. Thermoelectric and thermal rectification properties of quantum dot junctions[J]. *Phys. Rev. B*, 2010, 81(20): 205321.
- [107] J. H. Jiang, M. Kulkarni, D. Segal, and Y. Imry. Phonon thermoelectric transistors and rectifiers[J]. *Phys. Rev. B*, 2015, 92(4): 045309.
- [108] J. Ren, and J. Zhu. Heat diode effect and negative differential thermal conductance across nanoscale metal-dielectric interfaces[J]. *Phys. Rev. B*, 2013, 87(24): 241412(R) .
- [109] F. Giazotto, and F. S. Bergeret. Thermal rectification of electrons in hybrid normal metal-superconductor nanojunctions[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2013, 103(24): 242602.
- [110] A. Fornieri, M. J. Martínez-Pérez, and F. Giazotto. A normal metal tunnel-junction heat diode[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2014, 104(18): 183108.
- [111] M. J. Martínez-Pérez, A. Fornieri, and F. Giazotto. Rectification of electronic heat current by a hybrid thermal diode[J]. *Nat. nanotechnol.*, 2015, 10(4): 303-307.
- [112] A. Fornieri, G. Timossi, R. Bosisio, P. Solinas, and F. Giazotto. Negative differential thermal conductance and heat amplification in superconducting hybrid devices[J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 93(13): 134508.
- [113] R. Sánchez, B. Sothmann, and A. N. Jordan. Heat diode and engine based on quantum Hall edge states[J]. *New J. Phys.*, 2015, 17(7): 075006.
- [114] J. Ordonez-Miranda, Y. Ezzahri, and K. Joulain. Quantum thermal diode based on two interacting spinlike systems under different excitations[J]. *Phys. Rev. E*, 2017, 95(2): 022128.
- [115] W. Chung Lo, L. Wang, and B. Li. Thermal transistor: Heat flux switching and modulating[J]. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2008, 77(5): 054402.
- [116] O. P. Saira, M. Meschke, F. Giazotto, A. M. Savin, M. Möttönen, and J. P. Pekola. Heat transistor: Demonstration of gate-controlled electronic refrigeration[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 99(2): 027203.

- [117] R. Sánchez. Correlation-induced refrigeration with superconducting single-electron transistors[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2017, 111(22): 223103.
- [118] P. Ben-Abdallah, and S. A. Biehs. Near-field thermal transistor[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2014, 112(4): 044301.
- [119] P. Ben-Abdallah, A. Belarouci, L. Frechette, and S. A. Biehs. Heat flux splitter for near-field thermal radiation[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2015, 107(5): 053109.
- [120] K. Joulain, Y. Ezzahri, J. Drevillon, and P. Ben-Abdallah. Modulation and amplification of radiative far field heat transfer: Towards a simple radiative thermal transistor[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2015, 106(13): 133505.
- [121] J. Ordonez-Miranda, Y. Ezzahri, J. Drevillon, and K. Joulain. Transistorlike device for heating and cooling based on the thermal hysteresis of VO_2 [J]. *Phys. Rev. Applied*, 2016, 6(5): 054003.
- [122] H. Prod'homme, J. Ordonez-Miranda, Y. Ezzahri, J. Drevillon, and K. Joulain. Optimized thermal amplification in a radiative transistor[J]. *J. Appl. Phys.*, 2016, 119(19): 194502.
- [123] J. Ordonez-Miranda, Y. Ezzahri, J. Drevillon, and K. Joulain. Dynamical heat transport amplification in a far-field thermal transistor of VO_2 excited with a laser of modulated intensity[J]. *J. Appl. Phys.*, 2016, 119(20): 203105.
- [124] K. Joulain, J. Drevillon, Y. Ezzahri, and J. Ordonez-Miranda. Quantum thermal transistor[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2016, 116(20): 200601.
- [125] L. Wang, and B. Li. Thermal logic gates: Computation with phonons[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 99(17): 177208.
- [126] P. Ben-Abdallah, and S. A. Biehs. Towards Boolean operations with thermal photons[J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 94(24): 241401(R).
- [127] L. Wang, and B. Li. Thermal memory: A storage of phononic information[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 101(26): 267203.
- [128] V. Kubytzkyi, S. A. Biehs, and P. Ben-Abdallah. Radiative bistability and thermal memory[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2014, 113(7): 074301.

- [129] S. A. Dyakov, J. Dai, M. Yan, and M. Qiu. Near field thermal memory based on radiative phase bistability of VO₂[J]. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2015, 48(30): 305104.
- [130] R. Bosisio, S. Valentini, F. Mazza, G. Benenti, R. Fazio, V. Giovannetti, and F. Taddei, Magnetic thermal switch for heat management at the nanoscale[J]. *Phys. Rev. B*, 2015, 91(20): 205420.
- [131] W. G. Van der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, and S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven. Electron transport through double quantum dots[J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2002, 75(1): 1-22.
- [132] M. A. Kastner. Artificial atoms[J]. *Phys. Today*, 1993, 46: 24-31.
- [133] D. V. Averin, and K. K. Likharev. Coulomb blockade of single-electron tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions[J]. *J. Low Temp. Phys.*, 1986, 62(3-4): 345-373.
- [134] H. Grabert, and M. H. Devoret. (Eds.) Single charge tunneling: Coulomb blockade phenomena in nanostructures[M]. Springer Science & Business Media, 2013.
- [135] C. W. J. Beenakker. Theory of Coulomb-blockade oscillations in the conductance of a quantum dot[J]. *Phys. Rev. B*, 1991, 44(4): 1646-1656.
- [136] C. W. J. Beenakker, and A. A. M. Staring. Theory of the thermopower of a quantum dot[J]. *Phys. Rev. B*, 1992, 46(15): 9667-9676.
- [137] J. Liu, Q. F. Sun, and X. C. Xie. Enhancement of the thermoelectric figure of merit in a quantum dot due to the Coulomb blockade effect[J]. *Phys. Rev. B*, 2010, 81(24): 245323.
- [138] S. F. Godijn, S. Möller, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, and S. A. van Langen. Thermopower of a chaotic quantum dot[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1999, 82(14): 2927-2930.
- [139] M. C. Llaguno, J. E. Fischer, A. T. Johnson, and J. Hone. Observation of thermopower oscillations in the Coulomb blockade regime in a semiconducting carbon nanotube[J]. *Nano Lett.*, 2003, 4(1): 45-49.

- [140] A. A. M. Staring, L. W. Molenkamp, B. W. Alphenaar, H. van Houten, O. J. A. Buyk, M. A. A. Mabeoone, C. W. J. Beenakker, and C. T. Foxon. Coulomb-blockade oscillations in the thermopower of a quantum dot[J]. *Europhys. Lett.*, 1993, 22(1): 57-62.
- [141] L. Molenkamp, A. A. M. Staring, B. W. Alphenaar, H. van Houten, and C. W. J. Beenakker. Sawtooth-like thermopower oscillations of a quantum dot in the Coulomb blockade regime[J]. *Semicond. Sci. Technol.*, 1994, 9(5S): 903-906.
- [142] A. S. Dzurak, C. G. Smith, C. H. W. Barnes, M. Pepper, L. Martín-Moreno, C. T. Liang, D. A. Ritchie, and G. A. C. Jones. Thermoelectric signature of the excitation spectrum of a quantum dot[J]. *Phys. Rev. B*, 1997, 55(16): R10197-R10200.
- [143] Y. Zhang, and J. He. Efficiency at maximum power of a quantum dot heat engine in an external magnetic field[J]. *Chin. Phys. Lett.*, 2013, 30(1): 010501.
- [144] Y. S. Liu, X. F. Yang, X. K. Hong, M. S. Si, F. Chi, and Y. Guo. A high-efficiency double quantum dot heat engine[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2013, 103(9): 093901.
- [145] B. Muralidharan, and M. Grifoni. Performance analysis of an interacting quantum dot thermoelectric setup[J]. *Phys. Rev. B*, 2012, 85(15): 155423.
- [146] B. De, and B. Muralidharan. Thermoelectric study of dissipative quantum-dot heat engines[J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 94(16): 165416.
- [147] P. A. Erdman, F. Mazza, R. Bosisio, G. Benenti, R. Fazio, and F. Taddei. Thermoelectric properties of an interacting quantum dot based heat engine[J]. *Phys. Rev. B*, 2017, 95(24): 245432.
- [148] M. Rey, M. Strass, S. Kohler, P. Hänggi, and F. Sols. Nonadiabatic electron heat pump[J]. *Phys. Rev. B*, 2007, 76(8): 085337.
- [149] S. Juergens, F. Haupt, M. Moskalets, and J. Splettstoesser. Thermoelectric performance of a driven double quantum dot[J]. *Phys. Rev. B*, 2013, 87(24): 245423.

- [150] H. L. Edwards, Q. Niu, and A. L. de Lozanne. A quantum-dot refrigerator[J]. Appl. Phys. Lett., 1993, 63(13): 1815-1817.
- [151] H. L. Edwards, Q. Niu, G. A. Georgakis, and A. L. de Lozanne. Cryogenic cooling using tunneling structures with sharp energy features[J]. Phys. Rev. B, 1995, 52(8): 5714-5736.
- [152] J. R. Prance, C. G. Smith, J. P. Griffiths, S. J. Chorley, D. Anderson, G. A. C. Jones, I. Farrer, and D. A. Ritchie. Electronic refrigeration of a two-dimensional electron gas[J]. Phys. Rev. Lett., 2009, 102(14): 146602.
- [153] Y. Zhang, J. He, X. He, and Y. Xiao. Performance characteristics and optimal analysis of an interacting quantum dot thermoelectric refrigerator[J]. Phys. Scr., 2013, 88(3): 035002.
- [154] R. Sánchez, B. Sothmann, A. N. Jordan, and M. Büttiker. Correlations of heat and charge currents in quantum-dot thermoelectric engines[J]. New J. Phys., 2013, 15(12): 125001.
- [155] J. P. Pekola, J. V. Koski, and D. V. Averin. Refrigerator based on the Coulomb barrier for single-electron tunneling[J]. Phys. Rev. B, 2014, 89(8): 081309(R).
- [156] Y. Zhang, G. Lin, and J. Chen. Three-terminal quantum-dot refrigerators[J]. Phys. Rev. E, 2015, 91(5): 052118.
- [157] Y. Zhang, C. Huang, J. Wang, G. Lin, and J. Chen. Optimum energy conversion strategies of a nano-scaled threeterminal quantum dot thermoelectric device[J]. Energy, 2015, 85: 200-207.
- [158] Y. Zhang, Y. Wang, C. Huang, G. Lin, and J. Chen. Thermoelectric performance and optimization of three-terminal quantum dot nano-devices[J]. Energy, 2016, 95: 593-601.
- [159] H. Thierschmann, R. Sánchez, B. Sothmann, H. Buhmann, and L.W. Molenkamp, Thermoelectrics with Coulomb-coupled quantum dots[J]. C. R. Physique, 2016, 17(10), 1109-1122.
- [160] A. M. Daré, and P. Lombardo. Powerful Coulomb-drag thermoelectric engine[J]. Phys. Rev. B, 2017, 96(11): 115414.

- [161] N. Walldorf, A. P. Jauho, and K. Kaasbjerg. Thermoelectrics in Coulomb-coupled quantum dots: Cotunneling and energy-dependent lead couplings[J]. *Phys. Rev. B*, 2017, 96(11): 115415.
- [162] H. Thierschmann, R. Sánchez, B. Sothmann, F. Arnold, C. Heyn, W. Hansen, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp. Three-terminal energy harvester with coupled quantum dots[J]. *Nat. Nanotechnol.*, 2015, 10(10): 854-858.
- [163] L. W. Molenkamp, H. Van Houten, C. W. J. Beenakker, R. Eppenga, and C. T. Foxon. Quantum oscillations in the transverse voltage of a channel in the nonlinear transport regime[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, 65(8): 1052-1055.
- [164] K. MacLean, S. Amasha, I. P. Radu, D. M. Zumbühl, M. A. Kastner, M. P. Hanson, and A. C. Gossard. Energy-dependent tunneling in a quantum dot[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 98(3): 036802.
- [165] F. Hartmann, P. Pfeffer, S. Höfling, M. Kamp, and L. Worschech. Voltage fluctuation to current converter with Coulomb-coupled quantum dots[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2015, 114(14): 146805.
- [166] R. Sánchez, H. Thierschmann, and L. Molenkamp. All-thermal transistor based on stochastic switching[J]. *Phys. Rev. B*, 2017, 95(24): 241401(R).
- [167] R. Sánchez, H. Thierschmann, and L. W. Molenkamp. Single-electron thermal devices coupled to a mesoscopic gate[J]. *New J. Phys.*, 2017, 19(11): 113040.
- [168] P. Pfeffer, F. Hartmann, S. Höfling, M. Kamp, and L. Worschech. Logical stochastic resonance with a Coulomb-coupled quantum-dot rectifier[J]. *Phys. Rev. Applied*, 2015, 4(1): 014011.
- [169] H. Thierschmann, F. Arnold, M. Mitterüller, L. Maier, C. Heyn, W. Hansen, H. Buhmann, and L.W. Molenkamp. Thermal gating of charge currents with Coulomb coupled quantum dots[J]. *New J. Phys.*, 2015, 17(11): 113003.
- [170] H. Thierschmann, F. Arnold, M. Mittermüller, L. Maier, C. Heyn, W. Hansen, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp. Thermal control and generation of charge currents in coupled quantum dots[J]. *Phys. Status Solidi A*, 2016, 213(3), 582-590.

- [171] T. Ruokola, and T. Ojanen. Single-electron heat diode: Asymmetric heat transport between electronic reservoirs through Coulomb islands[J]. Phys. Rev. B, 2011, 83(24): 241404(R) .
- [172] Y. Zhang, X. Zhang, Z. Ye, G. Lin, and J. Chen. Three-terminal quantum-dot thermal management devices[J]. Appl. Phys. Lett., 2017, 110(15): 153501.
- [173] E. Bonet, M. M. Deshmukh, and D. C. Ralph. Solving rate equations for electron tunneling via discrete quantum states[J]. Phys. Rev. B, 2002, 65(4): 045317.
- [174] U. Harbola, M. Esposito, and S. Mukamel. Quantum master equation for electron transport through quantum dots and single molecules[J]. Phys. Rev. B, 2006, 74(23): 235309.
- [175] G. Schaller. Open quantum systems far from equilibrium[M]. New York: Springer, 2014.
- [176] I. H. Chan, R. M. Westervelt, K. D. Maranowski, and A. C. Gossard. Strongly capacitively coupled quantum dots[J]. Appl. Phys. Lett., 2002, 80(10): 1818-1820.
- [177] A. Hübel, J. Weis, W. Dietsche, and K. v. Klitzing. Two laterally arranged quantum dot systems with strong capacitive interdot coupling[J]. Appl. Phys. Lett., 2007, 91(10): 102101.
- [178] M. O. Scully, M. S. Zubairy, G. S. Agarwal, and H. Walther. Extracting work from a single heat bath via vanishing quantum coherence[J]. Science, 2003, 299(5608): 862-864.
- [179] M. O. Scully, K. R. Chapin, K. E. Dorfman, M. B. Kim, and A. Svidzinsky. Quantum heat engine power can be increased by noise-induced coherence[J]. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 2011, 108(37): 15097-15100.
- [180] O. Karlström, H. Linke, G. Karlström, and A. Wacker. Increasing thermoelectric performance using coherent transport[J]. Phys. Rev. B, 2011, 84(11): 113415.

- [181] X. L. Huang, T. Wang, and X. X. Yi. Effects of reservoir squeezing on quantum systems and work extraction[J]. *Phys. Rev. E*, 2012, 86(5): 051105.
- [182] J. Roßnagel, O. Abah, F. Schmidt-Kaler, K. Singer and E. Lutz. Nanoscale heat engine beyond the carnot limit[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2014, 112(3): 030602.
- [183] G. Manzano, F. Galve, R. Zambrini, and Juan M. R. Parrondo. Entropy production and thermodynamic power of the squeezed thermal reservoir[J]. *Phys. Rev. E*, 2016, 93(5): 052120.
- [184] J. Klaers, S. Faelt, A. Imamoglu, and E. Togan. Squeezed thermal reservoirs as a resource for a nanomechanical engine beyond the carnot limit[J]. *Phys. Rev. X*, 2017, 7(3): 031044.
- [185] A. J. Keller, J. S. Lim, D. Sánchez, R. López, S. Amasha, J. A. Katine, H. Shtrikman, and D. Goldhaber-Gordon. Cotunneling drag effect in Coulomb-coupled quantum dots[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2016, 117(6): 066602.
- [186] K. Kaasbjerg, and A. P. Jauho. Correlated Coulomb drag in capacitively coupled quantum-dot structures[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2016, 116(19): 196801.
- [187] P. Strasberg, G. Schaller, T. Brandes, and M. Esposito. Thermodynamics of a physical model implementing a Maxwell demon[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, 110(4): 040601.
- [188] J. M. Horowitz, and M. Esposito. Thermodynamics with continuous information flow[J]. *Phys. Rev. X*, 2014, 4(3): 031015.

附录

(一) 攻读博士学位期间完成的论文目录

- [1]* **Yanchao Zhang**, Xin Zhang, Zhuolin Ye, Guoxing Lin, and Jincan Chen. Three-terminal quantum-dot thermal management devices. *Applied Physics Letters*, 2017, 110(15): 153501. (IF:3.411)
- [2]* **Yanchao Zhang**, Guoxing Lin, and Jincan Chen. Three-terminal quantum-dot refrigerators. *Physical Review E*, 2015, 91(5): 052118. (IF:2.366)
- [3] **Yanchao Zhang**, Chuankun Huang, Guoxing Lin, and Jincan Chen. Universality of efficiency at unified trade-off optimization. *Physical Review E*, 2016, 93(3): 032152. (IF:2.366)
- [4]* **Yanchao Zhang**, Yuan Wang, Chuankun Huang, Guoxing Lin, and Jincan Chen. Thermoelectric performance and optimization of three-terminal quantum dot nano-devices. *Energy*, 2016, 95: 593-601. (IF:4.520)
- [5]* **Yanchao Zhang**, Chuankun Huang, Junyi Wang, Guoxing Lin, and Jincan Chen. Optimum energy conversion strategies of a nano-scaled three-terminal quantum dot thermoelectric device. *Energy*, 2015, 85: 200-207. (IF:4.520)
- [6] **Yanchao Zhang**, Chuankun Huang, Guoxing Lin, and Jincan Chen. Efficiency bounds of molecular motors under a trade-off figure of merit. *Physica A*, 2017, 474: 230-236. (IF:2.243)
- [7] **Yanchao Zhang**, Juncheng Guo, Guoxing Lin, and Jincan Chen. Universal optimization efficiency for nonlinear irreversible heat engines. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 2017, 42(3): 253-263. (IF:1.714)
- [8]* **Yanchao Zhang**, Zhimin Yang, Xin Zhang, Bihong Lin, Guoxing Lin, and Jincan Chen. Coulomb-coupled quantum-dot thermal transistors. *Europhysics Letters* (Accepted).
- [9] Zhimin Yang, **Yanchao Zhang**, Qingchun Dong, Jian Lin, Guoxing Lin, and Jincan Chen. Maximum power output and parametric choice criteria of a

- thermophotovoltaic cell driven by automobile exhaust. *Renewable Energy*, 2018, 121: 28-35. (IF:4.357)
- [10] Xin Zhang, **Yanchao Zhang**, Zhuolin Ye, Wangyang Li, Tianjun Liao, and Jincan Chen. Graphene-based thermionic solar cells. *IEEE Electron Device Letters*, 2018, 39(2): 383-385. (IF:3.048)
- [11] Shanhe Su, **Yanchao Zhang**, Jincan Chen and Tien-Mo Shih. Thermal electron-tunneling devices as coolers and amplifiers. *Scientific Reports*, 2016, 6: 21425. (IF:4.259)
- [12] Guozhen Su, **Yanchao Zhang**, Ling Cai, Shanhe Su, and Jincan Chen. Conceptual design and simulation investigation of an electronic cooling device powered by hot electrons. *Energy*, 2015, 90: 1842-1847. (IF:4.520)
- [13] Wanli Peng, **Yanchao Zhang**, Zhimin Yang, and Jincan Chen. Performance evaluation and comparison of three-terminal energy selective electron devices with different connective ways and filter configurations. *The European Physical Journal Plus*, 2018, 133(2): 38. (IF:1.753)
- [14] Yuan Wang, **Yanchao Zhang**, Chuankun Huang, and Jincan Chen. Performance analysis of an interacting quantum dot heat engine with an external applied magnetic field. *Physica A*, 2015, 438: 586-594. (IF:2.243)
- [15] Wanli Peng, Tianjun Liao, **Yanchao Zhang**, Guozhen Su, Guoxing Lin, and Jincan Chen. Parametric selection criteria of thermal electron-tunneling amplifiers operating at optimum states. *Energy Conversion and Management*, 2017, 143: 391-398. (IF:5.589)
- [16] Guozhen Su, Yuzhuo Pan, **Yanchao Zhang**, Tien-Mo Shih, and Jincan Chen. An electronic cooling device with multiple energy selective tunnels. *Energy*, 2016, 113: 723-727. (IF:4.520)
- [17] Yuan Wang, Tianjun Liao, **Yanchao Zhang**, Xiaohang Chen, Shanhe Su, and Jincan Chen. Effects of nanoscale vacuum gap on photon-enhanced thermionic emission devices. *Journal of Applied Physics*, 2016, 119(4): 045106. (IF:2.068)

*与博士论文相关的成果

(二) 攻读博士期间所获奖励

1. 2016 年博士研究生国家奖学金
2. 2016 年度厦门大学中国工商银行奖学金

致谢

值此论文完成之际，衷心感谢在学习和生活上给予我关心、帮助、支持和鼓励的老师、同学和亲友们。

首先，感谢我的导师林国星教授。正是林老师无私的支持与帮助，才使得我能够顺利的完成博士阶段的学习。林老师对我的研究工作的认可与鼓励，使我能够全身心的投入到自己的研究工作中。

感谢导师陈金灿教授。博士阶段的学习与科研工作是在陈老师的悉心指导下完成的。陈老师渊博的学识，严谨认真、实事求是的治学态度，精益求精、不断进取的工作作风，诲人不倦、授人以渔的高尚师德，和蔼可亲、平易近人的人格魅力深深的影响着、感染着我。使我对科学研究有了新的认识与思考，对教书育人有了新的体会和感悟。在陈老师的身教言传下，让我获得了丰富的科研、学习和生活的智慧与经验。在陈老师的精心培养下，使我逐步成长为一名合格的科研工作者。也为我以后成为一名教育工作者打下了坚实的基础。与陈老师学习的四年时光是我人生中宝贵的精神财富，也将会深深的影响我以后的工作和生活。使我终生受益。再次向陈老师致以最崇高的敬意和最衷心的感谢。

感谢苏国珍教授，林比宏教授、潘玉灼教授、苏山河副教授、王远博士、徐志超博士、王俊毅博士在我博士期间对我研究工作上的热情指导和帮助。与你们的交流和讨论让我受益匪浅。感谢兰州大学杨孔庆教授。博士期间我担任杨老师的课程助教，有幸聆听杨老师精彩的讲授，实乃人生一大幸事。

感谢热力学理论与新能源应用研究室的廖天军、刘铁、黄传昆、杨智敏、董青春、彭万里、张欣、林健、叶卓林、李汪洋。我们一起营造了轻松活泼、奋发进取的学术氛围。感谢你们在我的学习和生活中给予我的帮助和鼓励。让我每一天的科研和生活都充实快乐。

感谢物理系 2014 级的全体博士研究生同学们，我们一起走过美好、难忘的四年时光，能成为其中的一员，我深感荣幸。

感谢我的父母、两个姐姐，让我生活成长在一个温馨幸福的家庭。感谢你们一直默默地关心、爱护、支持着我。你们是我坚强的后盾，让我有勇气和力量

勇往直前。

最后，特别感谢我的妻子谢珍珍。你的理解与支持，陪伴与坚守，付出与承担，让我成为世上最幸福的人。唯愿执子之手，与子偕老。

再次感谢所有关心和帮助过我的老师、同学和亲友们。

攻读博士学位期间，特别感谢以下基金项目的资助：

1. 国家自然科学基金项目(No. 11175148) “受限量子体系的特征与微循环理论”。
2. 国家自然科学基金面上项目(No. 11675132) “能量选择电子器件的热力学性能与优化理论研究”。