



论文

基于理想共振隧穿的三端量子点热机

苏豪, 王家伟, 赵沁园, 何济洲*

南昌大学物理系, 南昌 330031

* E-mail: hjzhou@ncu.edu.cn

收稿日期: 2016-07-08; 接受日期: 2016-10-12; 网络出版日期: 2016-11-25

国家自然科学基金(批准号: 11365015)资助项目

摘要 由两个单能级量子点、一个腔和两个电子库耦合形成三端量子点热机模型. 通过 Landauer 公式导出了热机的输出功率以及效率表达式, 数值模拟出该热机功率与效率之间的性能特征图, 确定了热机性能的优化范围. 之后, 在最大功率与最大效率作为优化目标下, 分析了热漏和能级宽度对热机性能的影响. 最后, 讨论了在最大功率下对应的效率随卡诺效率变化的关系并且与 CA 效率进行了比较. 研究表明: 由于能级宽度和热漏的存在, 该热机为一个不可逆热机, 热机的效率和功率的特性为一个闭合曲线; 由于存在热漏, 热机效率和能级宽度的特性为非单调曲线; 不考虑热漏和能级宽度, 最大功率下的效率将大于 CA 效率.

关键词 三端量子点热机, 电子传输, 热电器件, 热力学性能

1 引言

纳米结构热电装置由两种不同的热电材料构成, 它能够实现热能与电能的相互转化, 可以应用于热机或制冷机模型. 相对于其他传统的热机和制冷机, 纳米结构的热电装置具有高可靠性、长寿命、无运动部件、维护成本低、小型化等优点^[1,2]. 随着纳米技术发展, 越来越多的纳米结构被研制出来, 例如: 超晶格^[3,4]、纳米线^[5,6]、纳米管^[7]、分子结^[8,9]等. 但是, 目前纳米热电装置的效率较低, 还不能够被广泛的应用.

根据经典热力学理论, 卡诺定理给出了任何工作在两个热源之间的热机最大效率为卡诺效率 $\eta_C=1-T_c/T_h$, T_h 和 T_c 分别为高温和低温热源的温度.

然而, 卡诺效率只有当热机循环过程进行的无限缓慢, 实现可逆运行时才能达到, 这时热机的输出功率为零. 对于任何实际热机来说, 由于不可逆的有限时间过程, 其效率低于卡诺效率. 为此, Curzon 和 Ahlborn^[10]提出了内可逆卡诺热机模型, 认为工质与热源之间的热交换是在有限时间内进行的, 获得了内卡诺热机在最大功率输出下的效率为 $\eta_{CA}=1-\sqrt{1-\eta_C}$. 随后, 许多学者应用有限时间热力学来研究各种实际热机性能优化问题. 由于实际的热力学循环过程中存在许多不可逆的因素, 例如热漏、有限热容、内部耗散、有限时间等, 因此通过热力学优化为获得热机的最优性能, 分析各不可逆因素对其性能的影响, 对实现热机的最佳操作作用重大^[11~14].

引用格式: 苏豪, 王家伟, 赵沁园, 等. 基于理想共振隧穿的三端量子点热机. 中国科学: 技术科学, 2016, 46: 1296~1302

Su H, Wang J W, Zhao Q Y, et al. A three-terminal quantum dot heat engine based on ideal resonant tunneling (in Chinese). Sci Sin Tech, 2016, 46: 1296~1302, doi: 10.1360/N092015-00219

如今, 纳米结构量子点热电装置的热力学性能研究吸引了许多科研人员的兴趣, 特别是三端量子点的纳米热电结构. 相对于两端结构, 三端结构的好处是可以将热流和粒子流分开, 这样可以方便收集能量. 在 1993 年, Edwards 等人^[15,16]首次提出三端量子点模型. 使用了两个库伦耦合的量子点, 理论上探究了三端量子点制冷机的性能. 通过实验技术, 发现量子点可以达到较好的制冷效率. 之后, Prance 等人^[17]提出了一种三端量子点制冷机的模型, 来冷却 $6 \mu\text{m}^2$ 范围的二维电子气. 作为热机, Sánchez 和 Büttiker^[18], Sothmann 等人^[19]依据库伦阻塞机制, 建立了电容耦合量子点模型, 低温热源和高温热源之间用电容作为桥梁, 彼此之间仅仅传递热量, 不存在粒子流, 理论上探究了三端量子点热机的性能. Jordan 等人^[20]和 Sothmann 等人^[21]提出了基于共振隧穿量子点和量子阱的三端能量收集器, 分析了该收集器的效率和功率、优化了其性能, 以及实验上可能实现的分案. 但是, 他们没有考虑系统中存在的热漏. 越来越多的学者进行三端量子点的纳米热电结构的研究^[22~30]. 另外, He 等人^[31]和 Wang 等人^[32]在对两端能量选择性共振通道量子点制冷机的热力学性能进行优化分析时, 考虑了多共振通道和热漏等不可逆因素对其性能的影响.

本文在前人工作基础上, 将建立一个理想共振隧穿三端量子点热机, 通过 Landauer 公式, 并且考虑声子热漏以及能级宽度的影响, 对该热机的性能进行分析和优化.

2 模型与理论分析

三端量子点热机模型如图 1 所示, 它由左右两个量子点、一个腔与两个电子库相互耦合形成的. 每个量子点各含有一个能级 E_L 和 E_R , 并且具有相同的能级宽度 δE , 分别分布在左右两个库的费米能级附近, 这里 $E_L < E_R$, 相应的能级差 $\Delta E = E_R - E_L$. 左右两边电子库作为低温热源, 具有相同的温度 T , 但两库化学势不同, 分别为 μ_L 和 μ_R , 并且 $\mu_L < \mu_R$, 两边的低温热源仅与对应的量子点进行能量和电子的交换. 中间部分可以看成是一个腔, 与高温热源到达平衡, 其化学势和温度分别为 μ_C 和 T_C , 且满足 $\mu_L < \mu_C < \mu_R$ 和 $T_C > T$. 由于系统中同时存在着电势差 ($eV = \mu_R - \mu_L$) 和温度差 ($\Delta T = T_C - T$), 因此会产生两种方向相反的电子流, 到

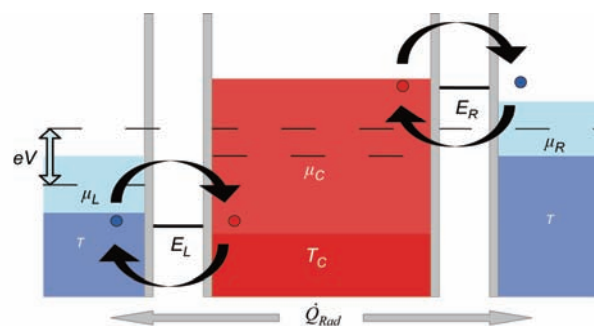


图 1 (网络版彩图)三端量子点热机模型图

达平衡时, 系统中会形成一个稳定的净电子流. 当电子从左边低温热源传输到右边低温热源时, 从高温热源中吸收热量, 并分别向左右低温热源中释放热量. 在考虑电子与电子之间强耦合以及电子与声子之间强相互作用的情况下, 电子占有几率满足费米分布, 即 $f(E - \mu) = 1 / (1 + \exp[(E - \mu) / k_B T])$, k_B 代表玻尔兹曼常数. 为了满足热机的要求, 必须保证 $E_R > \mu_R$ 和 $E_L < \mu_L$.

如图 1 所示, 灰色竖直线代表能级势垒, 左右两侧的电子库代表两个低温热源, 中间的部分代表腔和高温热源, 左右两边的横杠代表两个能级 E_L 和 E_R , 下方的灰色箭头代表热漏的方向. 黑色箭头代表电子传输的方向, 伴随着电子的传输, 热量将会在 3 个热源中进行交换. 当达到稳态时, 电子流与能量流满足守恒方程, 即电子流守恒和能量流守恒:

$$I_L + I_R = 0, \quad (1)$$

$$J_L + J_R + J = 0, \quad (2)$$

式中, I_L , I_R 和 J_L , J_R 分别代表着从两侧低温热源流出的电子流和能量流. 式(2)中的 J 代表的是从高温热源中流出的热流, 即电子从热源中单位时间内吸收的总的热量. 根据 Landauer 公式, 电子流和热流可以得到:

$$I_j = (2e/h) \int T_j(E) (f_j - f_c) dE, \quad (3)$$

$$J_j = (2/h) \int T_j(E) E (f_j - f_c) dE, \quad (4)$$

式中, $j=L$ 或者 R , h 为普朗克常数, 其中 $T_j(E)$ 代表隧穿几率, $f_j = f(E - \mu_j, T)$ 和 $f_c = f(E - \mu_C, T_C)$ 代表左右电子库和腔的费米分布. 为了简单起见, 仅考虑在一定能级宽度 δE 的范围内电子隧穿几率为 1, 而其他范围的几率为 0, 即:

$$T_j(E) = \begin{cases} 1, & E_j < E < E_j + \delta E, \\ 0, & \text{其他.} \end{cases} \quad (5)$$

通过式(1)~(5), 可以写出从高温热源中吸收的热量 J 和输出功率 P 的表达式:

$$J = \frac{2}{h} \int_{E_L}^{E_L+\delta E} E (f_C - f_L) dE + \frac{2}{h} \int_{E_R}^{E_R+\delta E} E (f_C - f_R) dE, \quad (6)$$

和

$$P = V \times I = \frac{2}{h} (\mu_R - \mu_L) \int_{E_L}^{E_L+\delta E} (f_L - f_C) dE. \quad (7)$$

由于高温热源和低温热源存在着温度差, 因此在能量传输过程中会产生声子热漏^[15,16]:

$$\dot{Q}_{\text{Rad}} = k_R (T_C^5 - T^5), \quad (8)$$

式中, k_R 定义为热漏系数. 热机的效率为

$$\eta = \frac{P}{J}$$

$$= \frac{(\mu_R - \mu_L) \int_{E_L}^{E_L+\delta E} (f_L - f_C) dE}{\int_{E_L}^{E_L+\delta E} E (f_C - f_L) dE + \int_{E_R}^{E_R+\delta E} E (f_C - f_R) dE + \dot{Q}_{\text{Rad}}}. \quad (9)$$

从上可知, 热机的输出功率和效率与能级 E_L 和 E_R 、宽度 δE 、温度 T 和 T_C 、化学势 μ_L , μ_R 和 μ_C 有关. 通过控制这些参数, 可以对该热机进行热力学分析和优化.

3 性能特征分析

根据式(6)~(9), 电子流守恒和能量守恒方程式(1)和(2), 通过数值模拟, 可以分析三端量子点热机的性能特征. 为方便起见, 选择如下参数: $T_C=2$ K, $T=1$ K, $E_R/k_B=4$ K, $E_L/k_B=-4$ K, $\mu_L=-\mu_R$, μ_C 由电子流守恒方程确定. 输出功率 P 和效率 η 随着化学势 μ_R 变化关系如图 2~4 所示.

从图 2 中发现, 随着右电子库化学势 μ_R 的增大, 输出功率 P 先增大后减小, 因此 μ_R 存在一个最优的值 μ_{RP} , 使得输出功率达到最大. 同时, 随着能级宽度 δE 的变化输出功率也随之改变, 而热漏系数的改变对输出功率没有影响. 热机效率的变化与输出功率类似, 随着右电子库化学势 μ_R 的增大, 先增大后减小, 也将存在一个最优的 $\mu_{R\eta}$ 使得热机效率达到最高. 从图 3 可以看到随着能级宽度 δE 的减小, 其效率将不断地趋近卡诺效率. 在不考虑热漏的情况下, 当 $\delta E \rightarrow 0$, 随着化学势增加, 热机效率呈线性增加. 当 $\mu_{R0}/k_B \approx 2$ 时, 效率将达到卡诺效率, 相应的输出功率将会趋近于 0, 热机达到可逆情况. 从图 4 中可

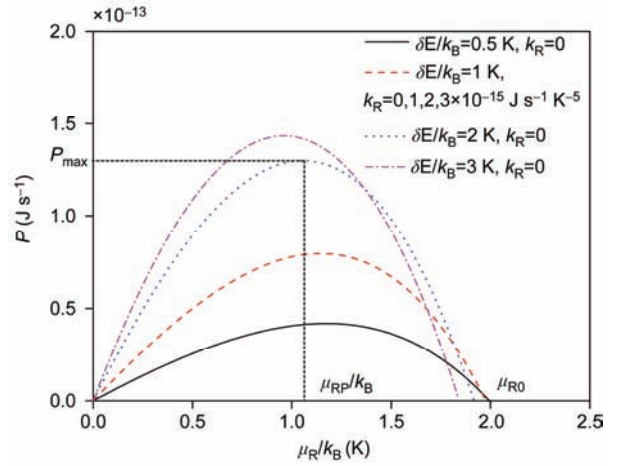


图 2 (网络版彩图)输出功率 P 随着右电子库化学势 μ_R 的变化曲线

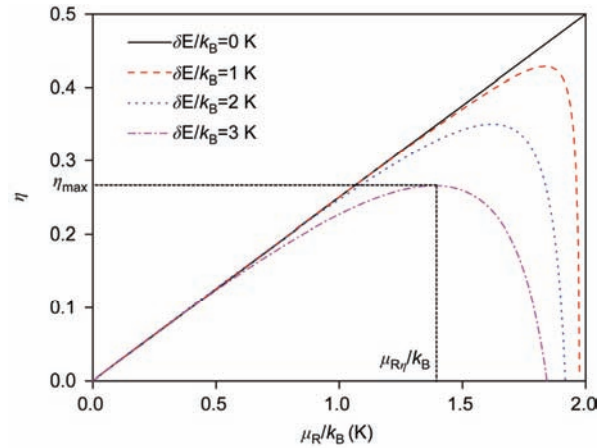


图 3 (网络版彩图) $k_R=0$, 效率 η 随着右电子库化学势 μ_R 的变化曲线

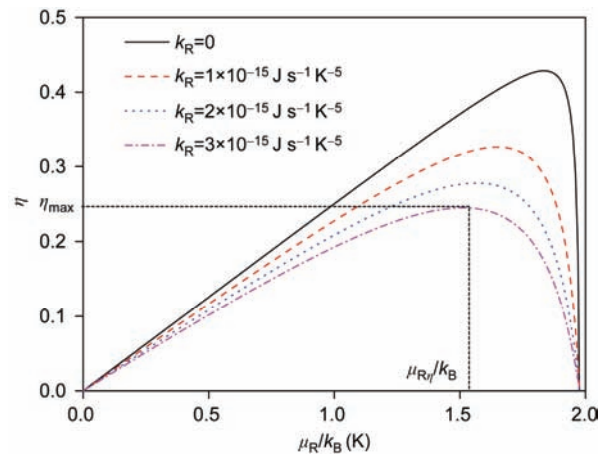


图 4 (网络版彩图) $\delta E/k_B=1$ K, 效率 η 随着右电子库化学势 μ_R 的变化曲线

以看出, 由于热漏的存在, 随着热漏系数的增加, 效率也随着减小, 热机将不可能达到可逆状态.

图 5 和 6 为输出功率和效率的特征曲线, 均是闭合型的曲线, 这就意味着当达到最大热机效率的时候, 其输出功率不会为 0, 反之亦是如此. 图中标出了最大输出功率 $P_{\max}$ 和对应的热机效率 η_P , 以及最大热机效率 $\eta_{\max}$ 和对应的输出功率 P_η . 对于热机来说, 希望能够输出最大功率的同时获得更高的效率, 因此, 热机的优化范围应该在 $P \sim \eta$ 图上的负斜率段, 即:

$$P_\eta \leq P \leq P_{\max}, \quad (10)$$

$$\eta_P \leq \eta \leq \eta_{\max}, \quad (11)$$

式中, $\eta_{\max}$, η_P , $P_{\max}$, P_η 是 4 个十分重要的优化参数, 其决定了优化功率和效率的上下限.

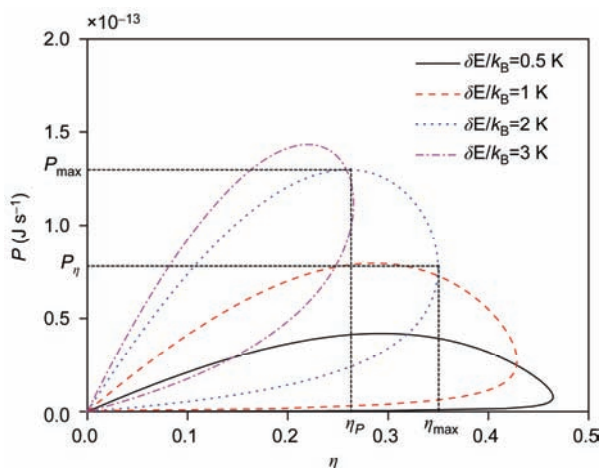


图 5 (网络版彩图) $k_R=0$, 输出功率 P 与效率 η 之间的变化曲线

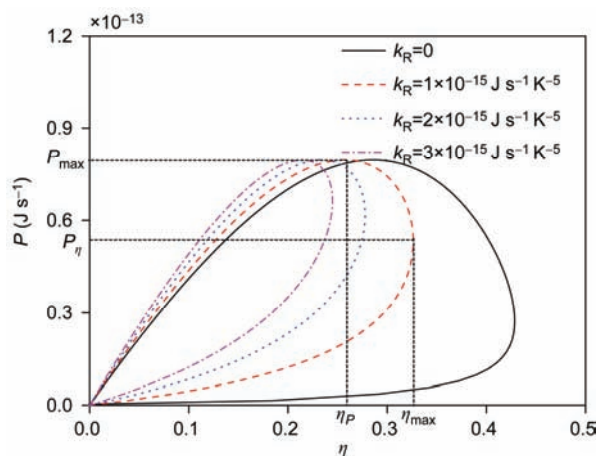


图 6 (网络版彩图) $\delta E/k_B=1$ K, 输出功率 P 与效率 η 之间的变化曲线

4 优化性能分析

为了确定最大输出功率和最大效率条件下, 热机的优化性能. 根据式(7)和(9)以及极值条件:

$$\frac{\partial P}{\partial \mu_R}(\mu_R = \mu_{RP}) = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \mu_R}(\mu_R = \mu_{R\eta}) = 0. \quad (13)$$

可以数值求解出最大输出功率 $P_{\max}$ 和对应的 η_P , 同样地解出最大的热机效率 $\eta_{\max}$ 和相应的 P_η . 因此, 可以得到优化条件下的输出功率和效率随着能级宽度 δE 的变化曲线, 如图 7 和 8 所示.

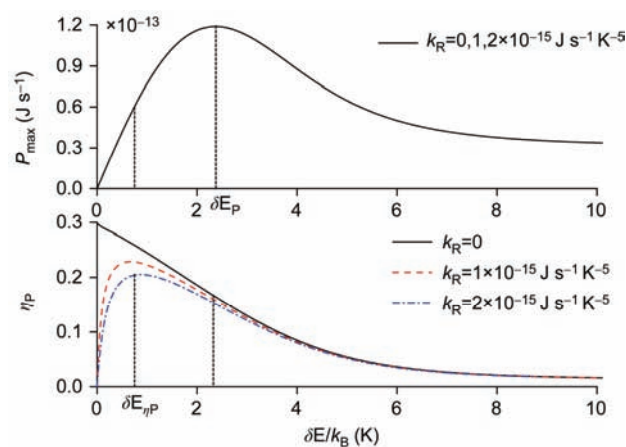


图 7 (网络版彩图) 最大功率 $P_{\max}$ 和对应效率 η_P 随着能级宽度 δE 的关系曲线

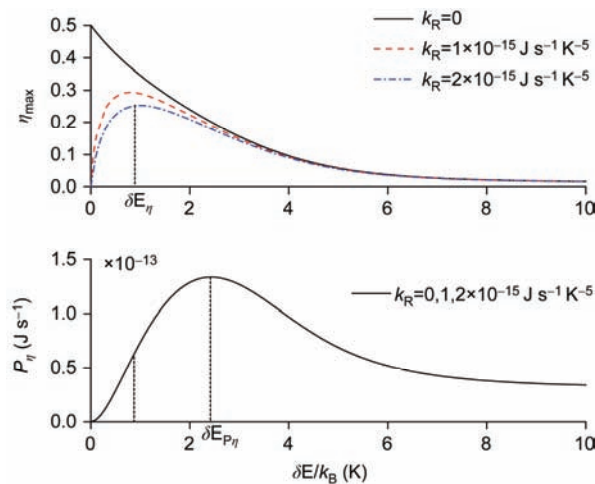


图 8 (网络版彩图) 最大效率 $\eta_{\max}$ 和对应功率 P_η 随着能级宽度 δE 的关系曲线

从图 7 中可以发现, 随着能级宽度的增加, 最大输出功率先增加后减少, 热漏对其没有影响. 当 $\delta E/k_B = \delta E_p/k_B \approx 2.5$ K 时, 最大输出功率达到最大值. 之后, 最大输出功率将会慢慢减小. 这是因为随着宽度的增加, 反向的电子流增加, 净电子流减少, 导致功率的减少. 但是, 最大功率下的效率则不同, 除了不考虑热漏外, 其余情况都呈现非单调递减的趋势, 当 $\delta E/k_B = \delta E_{\eta p}/k_B$, 最大功率下的效率达到最大. 当最大输出功率达到最大时, 对应的效率处于其最大值与最小值之间(中间值), 这个值随热漏的减少而增加. 因此, 在最大功率优化目标下, 应该尽可能调整能级宽度, 使它处在 $\delta E_{\eta p}/k_B < \delta E/k_B < \delta E_p/k_B$ 范围中. 从图 8 中可以看出最大效率和对应的功率随着能级宽度的变化, 最大效率随能级宽度的增加先增加后减少, 当 $\delta E/k_B = \delta E_{\eta}/k_B$ 时, 达到最大值. 随热漏的增加, 这个最大值在减少, 且向右偏移(向能级宽度增加的方向). 而对应的功率也随能级宽度的增加先增加后减少, 当 $\delta E/k_B = \delta E_{p\eta}/k_B$ 时达到最大. 因此, 在最大效率优化目标下, 应该让能级宽度处于 $\delta E_{\eta}/k_B < \delta E/k_B < \delta E_{p\eta}/k_B$ 范围.

接着, 讨论在无热漏下温差对最大输出功率和对应的效率的影响. 选择同样的参数 $T_C = 2$ K, $T = 1$ K, $E_R/k_B = 4$ K, $E_L/k_B = -4$ K, $\mu_L = -\mu_R$, 在数值模拟时, 低温热源的温度 T 改变. 为了与卡诺效率比较, 可以给出最大输出功率和对应的效率随着卡诺效率的变化关系, 如图 9 和 10 所示.

从图 9 和 10 可以看出, 随着低温热源温度的减少, 即卡诺效率的增加, 最大输出功率是单调递增的, 并且能级宽度越大, 最大输出功率也越大. 能级宽度对最大功率下效率 η_p 有较大的影响, 当能级宽度较小时, 才能达到或者超过 CA(Curzon-Ahlborn)效率; 当能级宽度较大时, 效率远低于 CA 效率.

5 结论

本文建立了理想共振隧穿三端量子点热机, 通过 Landauer 公式求出了输出功率和效率的解析表

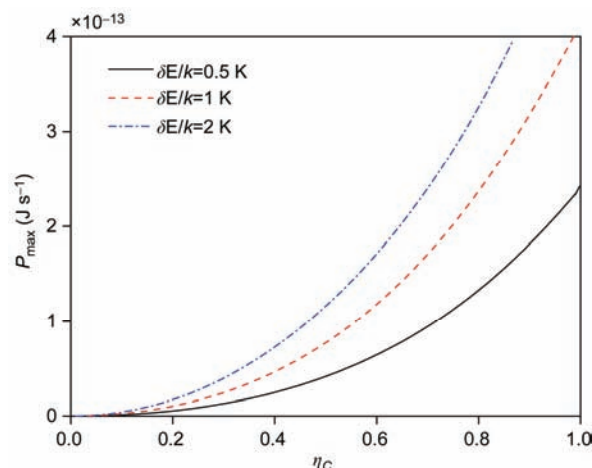


图 9 (网络版彩图)最大输出功率 $P_{\max}$ 随着卡诺效率 η_C 的变化曲线

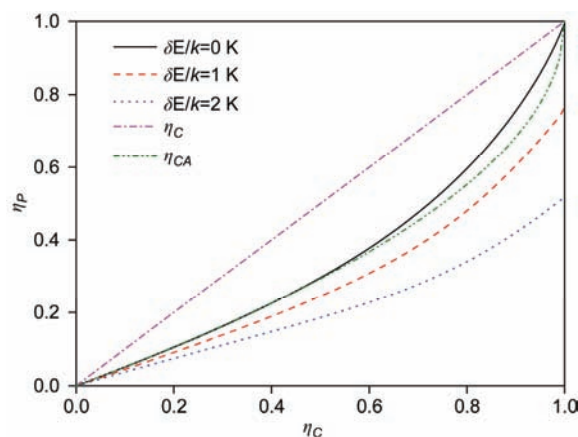


图 10 (网络版彩图)最大功率下效率 η_p 随着卡诺效率的关系

达式, 得到热机的特性曲线, 确定了热机的优化范围. 研究表明: 在考虑能级宽度和热漏的情况下, 热机的效率和功率特性曲线为一个闭合曲线. 能级宽度和热漏对热机优化性能有较大的影响, 在热漏一定时, 通过合适地选择能级宽度, 可以使热机工作在最优运行状态. 本文结果可为实际的三端量子点热机的设计与实验提供理论依据.

参考文献

- 1 Snyder G J, Toberer E S. Complex thermoelectric materials. *Nat Mater*, 2008, 7: 105–114
- 2 Pichanusakorn P, Bandaru P. Nanostructured thermoelectrics. *Mater Sci Eng R*, 2010, 67: 19–63
- 3 Harman T C, Taylor P J, Walsh M P, et al. Quantum dot superlattice thermoelectric materials and devices. *Science*, 2000, 297: 2229–2232
- 4 Venkatasubramanian R, Siivola E, Colpitts T, et al. Thin-film thermoelectric devices with high room-temperature figures of merit. *Nature*,

- 2001, 413: 597–602
- 5 Boukai A I, Bunimovich Y, Tahir-Kheli J, et al. Silicon nanowires as efficient thermoelectric materials. *Nature*, 2008, 451: 168–171
 - 6 Heremans J P, Jovovic V, Toberer E S, et al. Enhancement of thermoelectric efficiency in PbTe by distortion of the electronic density of states. *Science*, 2008, 321: 554–557
 - 7 Small J P, Perez K M, Kim P. Modulation of thermoelectric power of individual carbon nanotubes. *Phys Rev Lett*, 2003, 91: 256801
 - 8 Reddy P, Jang S Y, Segalman R A, et al. Thermoelectricity in molecular junctions. *Science*, 2007, 315: 1568–1571
 - 9 Leijnse M, Wegewijs M R, Flensberg K. Nonlinear thermoelectric properties of molecular junctions with vibrational coupling. *Phys Rev B*, 2010, 82: 045412
 - 10 Curzon F L, Ahlborn B. Efficiency of a Carnot engine at maximum power output. *Am J Phys*, 1975, 43: 22–24
 - 11 Berry R S, Kazakov V A, Sieniutycz S, et al. *Thermodynamics Optimization of Finite-Time Processes*. Chichester: John Wiley and Sons, 2000
 - 12 Wu C, Chen L, Chen J. *Advances in Finite-Time Thermodynamics: Analysis and Optimization*. New York: Nova Science, 2004
 - 13 Chen L, Zhou S, Sun F, et al. Optimal configuration and performance of heat engines with heat leak and finite heat capacity. *Open Syst Inf Dyn*, 2002, 9: 85–96
 - 14 Chen L, Sun F, Wu C. Optimal configuration of a two-heat-reservoir heat-engine with heat-leak and finite thermal-capacity. *Appl Energ*, 2006, 83: 71–81
 - 15 Edwards H L, Niu Q, De Lozanne A L. A quantum-dot refrigerator. *Appl Phys Lett*, 1993, 63: 1815–1817
 - 16 Edwards H L, Niu Q, Georgakis G A, et al. Cryogenic cooling using tunneling structures with sharp energy features. *Phys Rev B*, 1995, 52: 5714
 - 17 Prance J R, Smith C G, Griffiths J P, et al. Electronic refrigeration of a two-dimensional electron gas. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 146602
 - 18 Sánchez R, Büttiker M. Optimal energy quanta to current conversion. *Phys Rev B*, 2011, 83: 085428
 - 19 Sothmann B, Sánchez R, Jordan A N, et al. Rectification of thermal fluctuations in a chaotic cavity heat engine. *Phys Rev B*, 2012, 85: 205301
 - 20 Jordan A N, Sothmann B, Sánchez R, et al. Powerful and efficient energy harvester with resonant-tunneling quantum dots. *Phys Rev B*, 2013, 87: 075312
 - 21 Sothmann B, Sánchez R, Jordan A N, et al. Powerful energy harvester based on resonant-tunneling quantum wells. *New J Phys*, 2013, 15: 095021
 - 22 Sothmann B, Büttiker M. Magnon-driven quantum-dot heat engine. *Europhys Lett*, 2012, 99: 27001
 - 23 Entin-Wohlman O, Imry Y, Aharony A. Three-terminal thermoelectric transport through a molecular junction. *Phys Rev B*, 2010, 82: 115314
 - 24 Entin-Wohlman O, Aharony A. Three-terminal thermoelectric transport under broken time-reversal symmetry. *Phys Rev B*, 2012, 85: 085401
 - 25 Jiang J H, Entin-Wohlman O, Imry Y. Thermoelectric three-terminal hopping transport through one-dimensional nanosystems. *Phys Rev B*, 2012, 85: 075412
 - 26 Ruokola T, Ojanen T. Theory of single-electron heat engines coupled to electromagnetic environments. *Phys Rev B*, 2012, 86: 035454
 - 27 Sánchez R, Büttiker M. Detection of single-electron heat transfer statistics. *Europhys Lett*, 2012, 100: 47008
 - 28 Jiang J H, Entin-Wohlman O, Imry Y. Three-terminal semiconductor junction thermoelectric devices: Improving performance. *N J Phys*, 2013, 15: 075021
 - 29 Bergenfeldt C, Samuelsson P, Sothmann B, et al. Hybrid microwave-cavity heat engine. *Phys Rev Lett*, 2014, 112: 076803
 - 30 Rafael S, Jordan A N. Thermoelectric energy harvesting with quantum dots. *Nanotechnology*, 2015, 26: 032001
 - 31 He J, Wang X, Liang H. Optimum performance analysis of an energy selective electron refrigerator affected by heat leaks. *Phys Scr*, 2009, 80: 035701
 - 32 Wang X, He J, Tang W. Performance characteristics of an energy selective electron refrigerator with double resonances. *Chin Phys*, 2009, 18: 984–988

A three-terminal quantum dot heat engine based on ideal resonant tunneling

SU Hao, WANG JiaWei, ZHAO QinYun & HE JiZhou

Department of Physics, Nanchang University, Nanchang 330031, China

In this paper, the model of a three-terminal quantum dot heat engine consists of two quantum dots with a single energy level, a cavity and two electron reservoirs is established. According to Landauer formula the expressions for the heat current, the output power and the efficiency are derived analytically. The performance characteristic curves of the output power versus the efficiency are plotted by numerical calculation. Moreover, the optimal performance parameters are determined. Then we optimize the output power and the efficiency respectively, the influence of the width of energy level and the heat leak on performance of the three-terminal thermoelectric heat engine is discussed. Lastly, the variation of the corresponding efficiency at the maximum power output with the Carnot efficiency between two reservoirs is discussed and the corresponding efficiency is compared with Carnot efficiency and CA efficiency. It is shown that this three-terminal heat engine is irreversible due to the existence of the width of energy level and the heat leak. Thus the curve of the power output versus the efficiency is a loop-shaped one. And due to the heat leak, the characteristics of the efficiency and the width of energy level is a non-monotone curve. The efficiency at the maximum power will be greater than the CA efficiency when the heat leak and the width of energy level are not taken into account.

three-terminal quantum dot heat engine, electronic transport, thermoelectric devices, thermodynamic performance

doi: 10.1360/N092015-00219