arXiv:2305.05582v1 [cond-mat.mes-hall] 9 May 2023

反铁磁螺旋中的热电现象：电场的作用

Kallol Mondal,[1,*] Sudin Ganguly,[2,†] 和 Santanu K. Maiti[3,‡]
[1] *School of Physical Sciences, National Institute of Science Education and Research Bhubaneswar, HBNI, Jatni, Odisha-752050, India*
[2] *Department of Physics, School of Applied Sciences, University of Science and Technology Meghalaya, Ri-Bhoi-793101, India*
[3] *Physics and Applied Mathematics Unit, Indian Statistical Institute, 203 Barrackpore Trunk Road, Kolkata-700108, India*（日期：2023年5月10日）

本文研究了存在横向电场时，具有共线反铁磁自旋排列且净磁化强度为零的单螺旋分子中的电荷和自旋依赖的热电响应。研究考虑了短程和长程跃迁两种情形，分别模拟单链DNA和 α-蛋白质分子等生物系统。本文依据朗道尔-比特克尔处方，采用非平衡格林函数形式主义研究热电现象。详细阐述了基本热电量对螺旋性、电场、温度等因素的依赖关系，并据此解释其背后的物理机制。本文计算并严格比较了电荷和自旋 *figure of merits* 。为更准确地估算热导，还纳入了声子贡献。与电荷响应相比，本文提出的方案表现出更有利的自旋依赖热电响应。

I. 引言

在材料科学领域，实现良好的热电（TE）响应一直是人们长期追求的目标，以克服全球能源危机的困境。这是因为，通过开发高效器件，热能转换有望成为回收废热的有效机制[1,2] 。尽管人们持续投入努力与资金，热电材料的高效设计却已渐近瓶颈。现有的效率仍不尽如人意，因此距离商业化还很遥远。热电材料的效率由一个无量纲参数——品质因数（FOM）来表征，记为 ZT；该参数明确取决于塞贝克系数、电导、温度和总热导[3]。对于块体系统，电导与热导遵循 Wiedemann-Franz（W-F）定律[4,]，这在很大程度上限制了实现高效能量转换的可能性。然而，与块体材料相比，纳米尺度领域有望实现更优异的热电性能，从而突破 W-F 定律的限制[3,5,6]。人们已开展大量研究，在纳米尺度领域探索电荷自由度所引发的热电现象，研究对象包括量子点[7–11]、纳米线[12–15]、拓扑绝缘体[16,17], 以及有机分子结[18–21] ，还包括 DNA 、蛋白质 [22–26] 等。

另一方面，与基于电荷的器件相比，自旋电子器件通常速度更快、效率更高、尺寸更小；电子自旋使我们能够以更少的付出完成更多工作[27–31]。热电领域近期的一项进展是引入了自旋自由度，而磁序则提供了一种“绿色”策略来提升热电品质因数[32]。这是因为热电效率与塞贝克系数的平方成正比[33], ；对于自旋热电而言，它定义为自旋向上和自旋向下所作贡献之差。有趣的是，在自旋热电情况下，自旋塞贝克系数可以呈现不同的符号，这些贡献相加后能够产生有利的热电响应。具体而言，自旋塞贝克效应（SSE）[34,35] 是塞贝克效应的电荷对应形式：它可以利用温度梯度产生净自旋流，并有望减少总电荷流引起的热耗散[36–38]。自旋塞贝克器件的一项显著特点是，其可扩展性有别于常规的基于电荷的塞贝克器件；后者的输出功率与垂直于温度梯度的长度成正比。此外，与基于电荷的塞贝克器件相比，自旋热电器件中的热流和电荷流沿不同路径传输，这使我们想到，自旋塞贝克器件或许是提升热电品质因数的一种可行途径[39]。这些突出特点推动了自旋电子学研究，促使人们开发自旋热电器件[40–42]。

自旋电子器件的首要要求是寻找一种高效机制，依据电荷载流子的自旋量子数将其区分开来；这本质上意味着从完全非极化电子束中获得极化自旋流。在多种方案中[43–45]，研究最多的是将铁磁材料用作功能元件[46]。然而，这种方案仍有若干局限需要克服，例如，铁磁材料与非磁性材料形成的结两侧会产生较大的电阻率失配，阻碍注入电子的流动[46,47]。另一个主要问题是，在外加磁场作用下调节自旋选择性结电流。实验上，很难在

量子尺度下实现如此强的磁场约束。由于上述局限，近年来研究重点已转向自旋轨道（SO）耦合系统，而非铁磁材料。相关研究主要集中于 Rashba 自旋轨道耦合系统，而非 Dresselhaus 系统，因为前者的强度可通过适当的装置进行外部调节[48,49]。为此，人们已投入大量精力，利用无机和有机分子探索各种不同的几何结构[50–52]。然而，事实证明，尤其是在分子系统中，自旋轨道耦合强度明显弱于跃迁强度，二者相差一个数量级[53]。此外，自旋轨道耦合强度也难以通过外部手段调节。因此，在这类自旋轨道耦合系统中，难以实现高度自旋分离，也难以在较大范围内对其进行调节。

鉴于上述铁磁系统存在的问题，未来自旋电子学应用正日益倾向于采用反铁磁材料[54–56]。反铁磁体具有磁有序结构，其中最近邻自旋方向相反排列，因此净磁矩为零。因此，这类磁结构能够抵御磁场等外部扰动，不会产生杂散场，具有超快动力学特性，并能产生显著的磁输运效应[57]。人们已投入大量努力，试图揭示反铁磁材料中的自旋输运特性，而反铁磁自旋电子学仍是前沿研究的活跃领域[58–61]。

近期实验在这一方向取得了显著进展，研究范围还包括生物系统；实验发现，双链DNA（dsDNA）分子是高效的自旋过滤器[62]。这一结果令人瞩目，因为DNA分子是非磁性的，而且现有的自旋轨道耦合（SOCs）过弱，无法产生手性诱导自旋选择性（CISS）效应。有趣的是，这种CISS效应促使我们思考在自旋电子学应用中探索手性分子的可能性，也可能有助于阐明生物系统中的自旋效应[63–68]。基于上述原因，具有螺旋几何结构的生物系统，如双链DNA、单链DNA、 α-蛋白质，尤其值得关注。

在本文中，我们提出了一种新的方案，以实现高效的热电响应；该方案考虑在横向电场作用下将反铁磁螺旋作为功能元件。据我们所知，尚无人致力于理解此类系统中的热电物理，这正是本研究的主要动因。我们深入研究了单股反铁磁螺旋系统中的电荷和自旋依赖热电响应。该系统在横向电场作用下由两条一维（1D）非磁性、无反射的半无限引线连接（见图1）。我们采用紧束缚框架对整个系统进行模拟，并使用非平衡格林函数（NEGF）

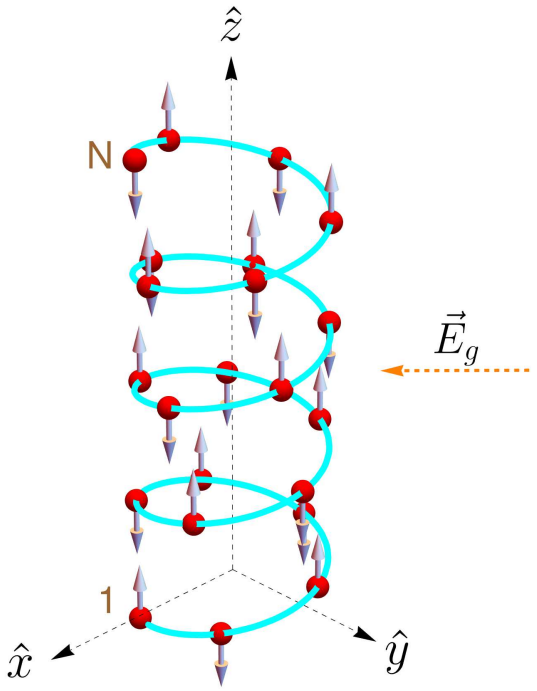


图 1。（网络版彩色图）。反铁磁右手螺旋链的示意图。每个红球代表一个磁性位点，球上的箭头表示磁矩方向。垂直于螺旋链轴施加了外电场，这在我们的研究中发挥着核心作用。

形式，遵循Landauer-Buttiker处方研究热电现象[69–72]。众所周知，对于净磁化强度为零的反铁磁系统，不可能实现自旋分离，但施加横向电场后则可以实现自旋过滤。自旋过滤的物理机制围绕反铁磁螺旋（AFH）的螺旋性与外加电场之间的相互作用展开。为切实估算热电响应，我们还将声子贡献纳入本研究。此外，为使研究更加完整，我们还考察了不同温度下的热电响应。与电荷响应相比，我们提出的方案在室温下表现出更优异的自旋依赖热电响应。

本文其余部分安排如下。第二节讨论所研究的系统及模型中考虑的相关相互作用，并介绍理论框架。第三节将对电场作用下短程和长程相互作用的所有结果进行深入考察。最后，第四节总结主要研究发现。

II. 理论 formul

A. 系统描述

我们先介绍用于研究热电现象的系统。图 1 展示了所提出装置的示意图：一条含有 N 个磁性位点的单股反铁磁螺旋链连接到两条一维、非磁性、无反射的半无限引线上，即源端（S）和漏端（D）（图中未示出），分别连接在位点 1 和位点 N 处。这两条引线的工作温度分别为 $T+\Delta T$ 和 $T-\Delta T$，其中 T 为平衡温度，ΔT 为无穷小量。因此，整个分析均局限在线性响应范围内。

我们采用螺旋系统作为研究热电响应的功能元件。一般而言，螺旋系统由堆叠距离和扭转角这两个重要参数描述，分别记为 Δz 和 $\Delta\phi$ [63,64]。这两个参数在决定跃迁属于短程还是长程方面发挥着关键作用，同时也决定磁性螺旋的结构。当 Δz非常小时，原子位点彼此靠近，电子可以跃迁至更高阶的相邻位点，从而形成长程跃迁（LRH）螺旋。另一方面，当 Δz 相当大时，电子的跃迁主要受限于少数几个相邻位点，此时形成短程跃迁（SRH）螺旋。这里，我们在表 I 中以表格形式给出了典型 SRH 和 LRH 情况下的参数值。（关于螺旋几何结构及相关参数的详细信息，可参阅一些先驱性研究[67,68]。）这些数值

系统类型	半径（R）	堆叠扭转衰减 距离（Δz）	角度（$\Delta\phi$）	常数（l_c）
SRH	7 Å	3.4 Å	$\pi/5$ 弧度	0.9 Å
LRH	2.5 Å	1.5 Å	$5\pi/9$ 弧度	0.9 Å

表 I. 螺旋系统的几何参数。

模拟单链DNA和α-蛋白质分子等生物系统；它们分别是研究短程跃迁和长程跃迁最合适的例子。

在我们选定的反铁磁螺旋系统中，相邻磁矩依次沿 $\pm z$ 方向排列，因此合磁化强度为零。每个磁性位点 i 均对应一个净自旋 $\langle \mathbf{S}_i\rangle$。任意此类自旋矢量的整体取向均可用通常的极角 θ_i 和方位角 ϕ_i 来描述。此时，入射电子将通过常规的自旋-磁矩交换相互作用 J与这些局域磁矩发生相互作用。为纳入这种相互作用，我们在每个位点 i 引入一个自旋依赖散射（SDS）参数 $\mathbf{h}_i = J\langle \mathbf{S}_i\rangle$[53]。假设 SDS 参数 $|\mathbf{h}|$ 的强度具有各向同性，即，$\mathbf{h}_i = h\ \forall\, i$。在本研究中，我们忽略了相邻磁矩之间的相互作用，这将作为未来的研究课题。

如图 1 所示，中心区域，即反铁磁螺旋，受到强度为 E_g的电场作用，该电场垂直于螺旋轴（$\hat{z}$）。在下文的小节中，我们将介绍如何在理论形式体系中引入电场。

B. 模型哈密顿量

表示整个系统的紧束缚哈密顿量由四部分组成，分别为[73–76]

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\rm AFH} + \mathcal{H}_{\rm S} + \mathcal{H}_{\rm D} + \mathcal{H}_{\rm C}, \tag{1}$$

其中，$\mathcal{H}_{\rm AFH}$、$\mathcal{H}_{\rm S}$、$\mathcal{H}_{\rm D}$和 $\mathcal{H}_{\rm C}$ 分别表示哈密顿量的各个子部分，它们分别对应反铁磁螺旋、源极、漏极以及引线与反铁磁螺旋之间的耦合。

反铁磁螺旋的哈密顿量为[68,77]

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\rm AFH} = &\sum_n \mathbf{c}_n^\dagger \left(\boldsymbol{\epsilon}_n - \mathbf{h}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)\mathbf{c}_n \\ &+ \sum_n^{N-1}\sum_m^{N-n}\left(\mathbf{c}_n^\dagger \boldsymbol{t}_n \mathbf{c}_{n+m} + h.c.\right),\end{aligned} \tag{2}$$

其中，$\mathbf{c}_n$表示位点 n处的双分量费米子湮灭算符，定义为$\mathbf{c}_n = \begin{pmatrix} c_{n\uparrow} \\ c_{n\downarrow}\end{pmatrix}$，其厄米共轭算符$\mathbf{c}_n^\dagger$ 相应定义。 $\boldsymbol{\sigma}$ 为众所周知的泡利矩阵， $\boldsymbol{t}_n$和 $\boldsymbol{\epsilon}_n$为 2×2对角矩阵，定义如下

$$\boldsymbol{t}_n = \begin{pmatrix} t_n & 0 \\ 0 & t_n\end{pmatrix} \quad \text{and} \quad \boldsymbol{\epsilon}_n = \begin{pmatrix} \epsilon_n & 0 \\ 0 & \epsilon_n\end{pmatrix}, \tag{3}$$

其中， ϵ_n 是不存在任何自旋相关散射时的位点能量，t_n 表示从位点 n 到 $n+m$的跃迁振幅。引入 SDS 后，得到有效位点能量矩阵（$\boldsymbol{\epsilon}_n$ –$\mathbf{h}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}$）。此时，垂直于螺旋链轴的外加电场 E_g会以下列方式改变位点能量[68,77]

$$\epsilon_n^{\rm eff} = \epsilon_n + e v_g \cos(n\Delta\phi - \beta), \tag{4}$$

其中， e 是电子电荷， v_g（$=2E_gR$）是外加栅极电压，β是入射电场与正向 $\hat{x}$ 轴之间的角度， R 是螺旋链的半径。

由于物理系统呈螺旋形，跃迁项变得相当复杂，不同于通常的最近邻跃迁（NNH）情形。对格点指标求和时必须格外谨慎。跃迁积分 t_n 的表达式为

$$t_n = t_1 \exp\left[-(l_n - l_1)/l_c\right], \tag{5}$$

其中， t_1 和 l_1 分别是最近邻跃迁振幅和最近邻位点之间的距离。 l_c 是衰减常数， l_n 是位点 n 和 $n+m$ 之间的空间间距。 l_n 的表达式为

$$l_n = \left[(2R\sin(n\Delta\phi/2))^2 + (n\Delta z)^2\right]^{1/2}, \tag{6}$$

其中， Δz 和 $\Delta\phi$ 分别为堆叠距离和扭转角。

引线的贡献以及引线与中心区域之间的耦合对总哈密顿量的贡献分别写作

$$\mathcal{H}_{\rm S} = \sum_{m<1} \boldsymbol{a}_m^\dagger \boldsymbol{\epsilon}_0 \boldsymbol{a}_m + \sum_{m<1} \left(\boldsymbol{a}_m^\dagger \boldsymbol{t}_0 \boldsymbol{a}_{m-1} + h.c.\right) \tag{7a}$$

$$\mathcal{H}_{\rm D} = \sum_{m>N} \boldsymbol{b}_m^\dagger \boldsymbol{\epsilon}_0 \boldsymbol{b}_m + \sum_{m>N} \left(\boldsymbol{b}_m^\dagger \boldsymbol{t}_0 \boldsymbol{b}_{m+1} + h.c.\right) \tag{7b}$$

$$\mathcal{H}_{\rm C} = \boldsymbol{a}_0^\dagger \boldsymbol{\tau}_{\rm S} \boldsymbol{c}_1 + \boldsymbol{c}_N^\dagger \boldsymbol{\tau}_{\rm D} \boldsymbol{b}_{N+1} + h.c. \tag{7c}$$

这里， $\boldsymbol{a}_n$和 $\boldsymbol{b}_n$ 以与 $\boldsymbol{c}_n$ 算符相同的方式用于源极和漏极。 $\boldsymbol{\epsilon}_0$ 和 $\boldsymbol{t}_0$ 是 2×2 对角矩阵，其中两条引线的现场势 ϵ_0 和跃迁振幅 t_0 取为相同。源极（漏极）与反铁磁螺旋之间的耦合记为 $\boldsymbol{\tau}_S$（$\boldsymbol{\tau}_D$），其定义方式与 $\boldsymbol{t}_0$相同。

C. 两端透射概率

我们采用NEGF形式体系来计算穿过螺旋链系统的两端透射概率。对于当前情形，构造推迟格林函数的标准方法如下:

$$\mathcal{G}^r = \left[(E + i\,0^+)\mathbb{I} - \mathcal{H}_{\rm AFH} - \Sigma_{\sigma S} - \Sigma_{\sigma D}\right]^{-1}, \tag{8}$$

其中， σ和 σ' 为自旋指标， $\Sigma_{\sigma S}$ 和 $\Sigma_{\sigma D}$ 分别表示源极和漏极的接触自能， $\mathbb{I}$ 是维数为 $2N\times 2N$的单位矩阵。其余符号均具有通常的含义。

现在，透射概率可用推迟格林函数（$\mathcal{G}^r$）和超前格林函数 $\left(\mathcal{G}^a(=\mathcal{G}^r)^\dagger\right)$表示为

$$\mathcal{T}_{\sigma\sigma'} = {\rm Tr}\left[\Gamma_{\sigma S}\ \mathcal{G}^r\ \Gamma_{\sigma' D}\ \mathcal{G}^a\right], \tag{9}$$

其中， $\Gamma_{\sigma S}$ 和 $\Gamma_{\sigma D}$ 是耦合矩阵，用于描述粒子在引线与反铁磁螺旋之间散射的速率。 $\mathcal{T}_{\sigma\sigma'}$ 表示自旋为 σ' 、注入自旋为 σ的透射电子的概率。需要指出的是，若 $\sigma=\sigma'$，则得到纯自旋透射；否则，得到自旋翻转透射。我们将净上自旋和下自旋透射概率定义为

$$\mathcal{T}_\sigma = \sum_{\sigma'} \mathcal{T}_{\sigma'\sigma}, \tag{10}$$

其中， σ、 σ' 可以是 $\uparrow$ 或 $\downarrow$。这些是计算不同热电量的基本实体，下一小节将对此进行介绍。

D. 热电量

在线性响应范围内，所有自旋分辨的热电量，如 G_σ、S_σ 和 $k_{\sigma\rm el}$ ，均可通过朗道尔积分提取，如 [78,79]。

$$G_\sigma = \frac{e^2}{h} L_{0\sigma}, \tag{11a}$$

$$S_\sigma = -\frac{1}{eT}\frac{L_{1\sigma}}{L_{0\sigma}}, \tag{11b}$$

$$k_{\sigma\rm el} = \frac{1}{hT}\left(L_{2\sigma} - \frac{L_{1\sigma}^2}{L_{0\sigma}}\right), \tag{11c}$$

wh其中，自旋分辨朗道尔积分定义为 如下

$$L_{n\sigma} = -\int \mathcal{T}_\sigma(E)(E-E_F)^n \frac{\partial f_{\rm FD}}{\partial E}\, dE, \tag{12}$$

其中， h、 $f_{\rm FD}$和 E_F 分别表示普朗克常数、平衡态费米-狄拉克占据概率和费米能。此处， $\mathcal{T}_\sigma(E)$表示前文定义的自旋分辨双端透射概率。

现在，我们按以下方式定义电荷（c）和自旋（s）电导[80]

$$G_c = G_\uparrow + G_\downarrow \quad \text{and} \quad G_s = G_\uparrow - G_\downarrow. \tag{13}$$

电荷和自旋塞贝克系数（热电势）定义为[80,81]

$$S_c = \frac{1}{2}\left(S_\uparrow + S_\downarrow\right) \quad \text{and} \quad S_s = \left(S_\uparrow - S_\downarrow\right). \tag{14}$$

类似地，电荷和自旋热导由[80]给出。

$$k_{c\rm el} = k_{s\rm el} = \left(k_\uparrow + k_\downarrow\right). \tag{15}$$

电荷和自旋优值可用以下压缩形式表示[80]

$$Z_\alpha T = \frac{|G_\alpha| S_\alpha^2\ T}{k_\alpha (= k_{\alpha\rm el} + k_{\rm ph})}, \tag{16}$$

其中， $\alpha(=$ c, s) 表示电荷和自旋自由度， $k_{\rm ph}$ 是总热导中的声子贡献， T 是平衡温度。通常，数量级为 1 的热电响应常被视为有利的热电响应。然而，对于具有经济竞争力的响应，通常规定 $Z_\alpha T \sim 3$[82]。为了精确估算 $Z_\alpha T$，需要考虑 $k_{\rm ph}$ 对热导的贡献。计算 $k_{\rm ph}$ 的方法将在下一小节中给出。

E. 声子热导的计算

当两个接触电极之间的温差无限小时，声子热

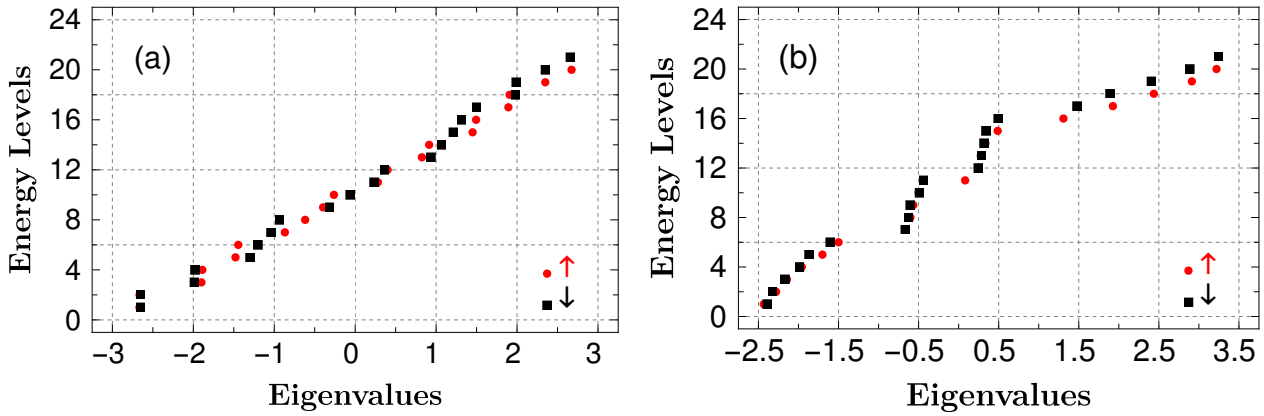


图2。（在线彩色图）。在存在电场的情况下，（a）短程跃迁和（b）长程跃迁对应的本征值谱，其中包含 $h = 0.5$、 $v_g = 1$和 $\beta = 0$。螺旋链中的位点数为 $N = 20$。自旋向上和自旋向下对应的本征值分别以红色和黑色表示。沿 y方向显示了不同的能级。

导率可通过 NEGF形式体系中的表达式计算得出[83–86]

$$k_{\rm ph} = \frac{\hbar}{2\pi}\int_0^{\omega_c} \mathcal{T}_{\rm ph}\frac{\partial f_{BE}}{\partial T}\omega d\omega. \tag{17}$$

其中， ω 为声子频率， ω_c 为声子截止频率。这里仅考虑弹性散射。 f_{BE} 表示玻色-爱因斯坦分布函数。 $\mathcal{T}_{\rm ph}$ 为穿过中心区域的声子透射概率，通过NEGF形式体系计算为

$$\mathcal{T}_{\rm ph} = {\rm Tr}\left[\Gamma_S^{\rm ph}\mathcal{G}_{\rm ph}\Gamma_D^{\rm ph}\left(\mathcal{G}_{\rm ph}\right)^\dagger\right] \tag{18}$$

$\Gamma_{S/D}^{\rm ph} = i\left[\widetilde{\Sigma}_{S/D} - \widetilde{\Sigma}_{S/D}^\dagger\right]$ 称为热~展宽。$\Sigma_{S/D}$ 是源极/漏极电极的自能矩阵。AFH的声子格林函数写为

$$\mathcal{G}_{\rm ph} = \left[\mathbb{M}\omega^2 - \mathbb{K} - \widetilde{\Sigma}_S - \widetilde{\Sigma}_D\right] \tag{19}$$

其中， $\mathbb{M}$ 是一个对角矩阵，用于描述螺旋链的质量矩阵。质量矩阵$\mathbb{M}_{nn}$ 的每个元素表示螺旋系统中第 n 个原子的质量， $\mathbb{K}$ 则是弹簧常数矩阵。对角元素 $\mathbb{K}_{nn}$ 表示第 n个原子受到相邻原子作用的回复力，而元素 $\mathbb{K}_{nm}$ 表示第 n个与第 m个相邻原子之间的有效弹簧常数。自能矩阵~ ~ces Σ_S 和 Σ_D 的维度与 $\mathbb{M}$ 和 $\mathbb{K}$相同，可通过计算自能项$\Sigma_{S/D} = -K_{S/D}\exp\left[2i\sin^{-1}\left(\frac{\omega}{\omega_c}\right)\right]$得到，其中 $K_{S/D}$是电极与螺旋链接触界面处的弹簧常数。

弹簧常数由 Harrison原子间势的二阶导数确定[87]。由于一维系统不存在横向相互作用[88]，一维电极的弹簧常数为 $K = 3dc_{11}/16$。对于螺旋链这样的三维系统，弹簧常数为 $K = 3d\left(c_{11} + 2c_{12}\right)/16$。其中， d表示原子间距， c_{11} 和 c_{12} 表示弹性常数。一维电极的截止频率根据关系式 $\omega_c = 2\sqrt{K/M}$确定，该关系式涉及质量和弹簧常数。

III. 数值结果与讨论 ION

横向电场与螺旋性之间的相互作用，是我们将在本节讨论的所选反铁磁螺旋中产生自旋依赖的热电现象的关键。在缺少这两个参数中的任意一个（即螺旋性或电场）的情况下，自旋向上和自旋向下通道之间不会出现失配，因此我们无法期待出现任何自旋依赖的输运现象。其背后的物理机制如下。由于所有磁矩都沿 $\pm\hat{z}$ 方向排列，反铁磁螺旋的哈密顿量可分解为自旋向上和自旋向下哈密顿量之和（即 $H_\uparrow + H_\downarrow$）。在没有电场时，由于相邻磁矩呈反平行构型，这两个子哈密顿量彼此对称，因此能量本征值完全相同。通过在螺旋系统中施加电场，可以轻易打破这种对称性。在这种情况下，两个不同的自旋依赖能量通道之间会出现有限的失配。

在存在横向电场时，如式 4 所述，格点能量以余弦形式受到调制。格点能量的表达式与著名的 Aubrey-Andr´e-Harper（AAH）模型[89]完全相同。在 AAH 模型中，格点项写作 $\epsilon_n = W\cos\left(2\pi bn + \phi_\nu\right)$ (n 为格点索引)，其中 W为 AAH 调制强度， b 为无理数， ϕ_ν 为 AAH 相位。根据式 4，一一映射显而易见，其中可将项 ev_g】【。

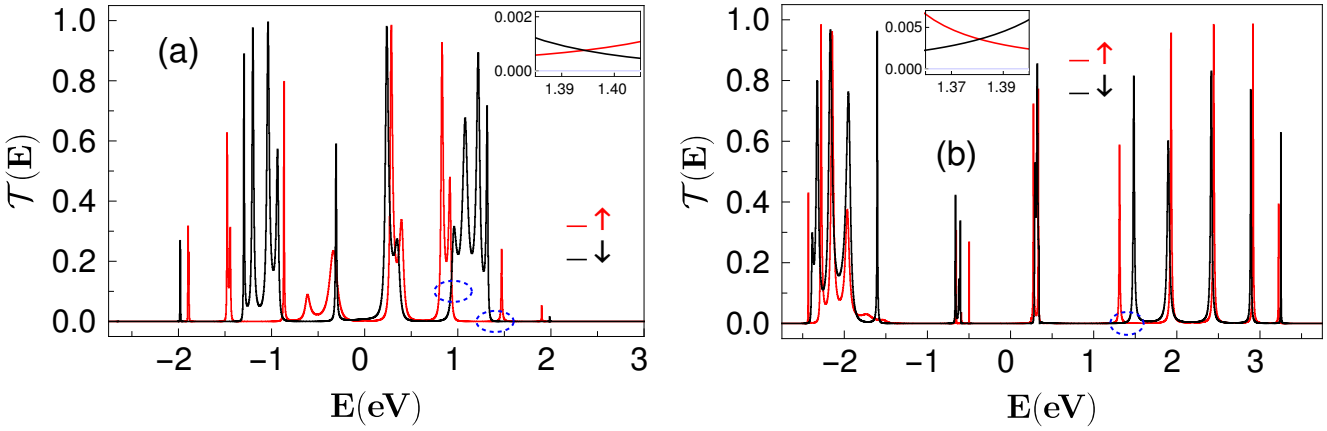


图3。（在线彩色版）。(a) 短程跃迁和 (b) 长程跃迁情况下，自旋分辨透射概率随能量的变化。所有参数和颜色约定均与图2中的说明相同。蓝色虚线椭圆标出了自旋向上与自旋向下透射之间的交叉区域。插图中交叉现象更加明显，同时也显示透射概率虽小但不为零。

作为 AAH 调制强度 W，$2\pi b$ 作为扭转角 $\Delta\phi$，而 β 作为 AAH 相位因子 ϕ_ν。因此，通过上述公式，我们可以利用螺旋系统捕捉 AAH 模型的基本物理特性。

在讨论结果之前，先说明本文重点研究右手螺旋。所有能量均以电子伏特为单位。在引线中，位点能设为零。无电场时，反铁磁螺旋中的位点能 ϵ_n固定为零，并取最近邻跃迁强度 $t_1 = 1$电子伏特；引线中的跃迁强度取为 $t_0 = 2.5$ 电子伏特。为满足宽带极限，我们设定 $t_0 > t_1$。中心区域与源极、漏极电极之间的耦合强度分别由参数 τ_S和 τ_D表征，均固定为 0.8 电子伏特。对于其他参数取值，物理图像在定性上仍保持不变；我们通过详尽的数值计算证实了这一点。

A. 能量本征值和透射谱

首先，我们讨论在电场和自旋依赖散射参数存在时，反铁磁螺旋的谱行为。图2(a)展示了典型短程跃迁反铁磁螺旋的本征谱，其中有 $N = 20$ 个位点，参数为 $h = 0.5$、$v_g = 1$和 $\beta = 0$；红色和黑色分别表示自旋向上和自旋向下的情况。自旋向上和自旋向下的谱彼此非简并。类似地，图 2(b)展示了长程跃迁反铁磁螺旋的本征谱，其参数与 SRH 相同。两种相反自旋情形的谱也彼此非简并。此外，每种谱都有能隙，并分布在多个能带中。因此，我们得到的结论是，在这两种情形下，电场和自旋依赖散射参数存在时都会产生非零自旋分离。这里需要指出的是，当我们将电场强度设为零时，自旋向上和自旋向下的能量本征值之间便会出现这种分离。

通道分离表明，自旋向上和自旋向下的透射概率之间预期存在有限差异（这是获得自旋优值的关键要求）。为揭示这一事实，我们在图 3 中绘制了自旋分辨透射概率随能量的变化。SRH（图3(a)）和 LRH（图3(b)）反铁磁螺旋结构中，自旋向上和自旋向下通道的透射概率分别用红色和黑色表示。系统尺寸及其他参数均与图2相同。

对于 SRH 和 LRH 螺旋结构，上自旋和下自旋透射谱彼此均存在差异。由于电场的存在，两个自旋通道的透射谱都呈现出有带隙的[77,90] 特征；如前所述，电场对系统起到了相关作用。现在，为了获得有利的自旋热电响应，自旋分辨透射谱必须满足两个条件。首先，透射谱应围绕固定能量[91,92]呈现不对称性。其次，上自旋透射谱与下自旋透射谱之间必须存在交叉点。第一个标准是普遍适用的，对于电荷和自旋热电情形均成立；而第二个标准则有利于获得良好的自旋热电响应。在图3(a)和(b)中，透射曲线中的一些此类交叉点用蓝色虚线椭圆标出，并在插图中进一步展示，以便清晰说明。例如，在图3(a)中，在能量 1.4 电子伏特附近，交叉点左侧的下自旋透射中存在一个尖锐峰，而上自旋透射谱在右侧有一个尖锐峰。这种尖锐峰会导致透射函数产生不对称性，而交叉点则确保较大的自旋热电势。下一小节将在热电势的语境下更详细地讨论这一点。

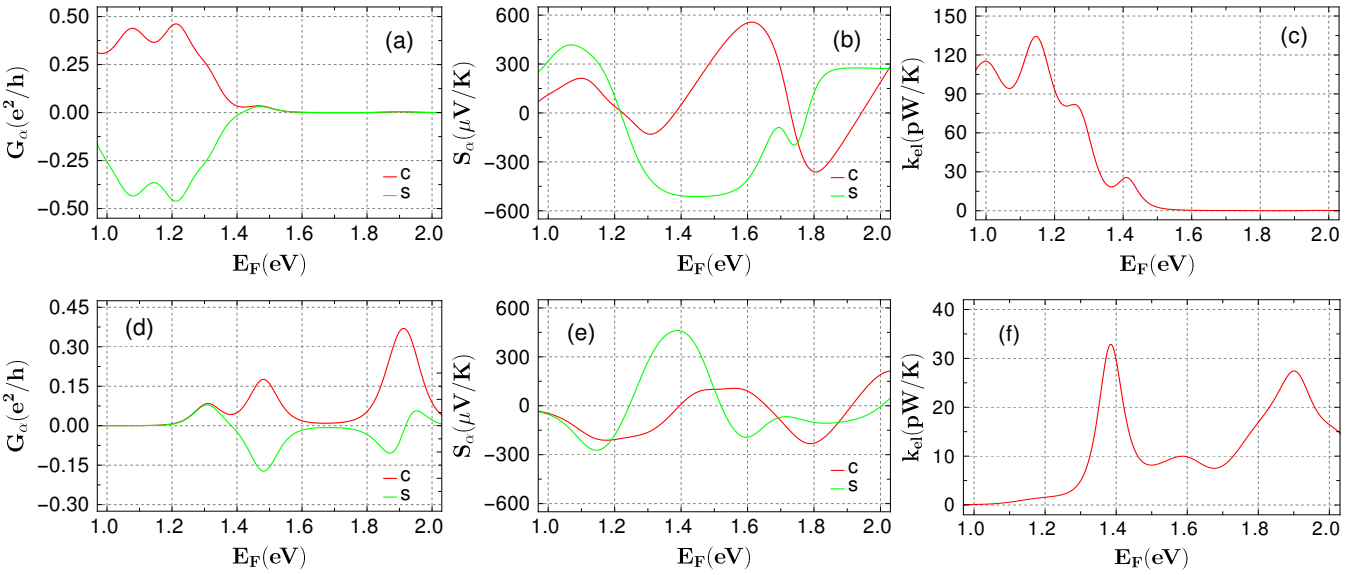


图4.（在线彩色）。室温 $T = 300$K 下，不同热电量随费米能变化的情况。上图显示 SRH 螺旋体的结果，下图显示 LRH 螺旋体的结果。(a) 和 (d) 显示电导（G_α），(b) 和 (e) 显示热电势（S_α），(c) 和 (e) 显示电子导致的热导（$k_{\rm el}$）。所有参数均与图2中所述相同。下标 α 表示电荷（c）和自旋（s）自由度，相应结果分别以红色和绿色曲线表示。

B. 热电量

现在，让我们分析在电场和自旋依赖散射参数存在的情况下，室温（T =300K）下的不同热电量，例如电导、热电势、热导和品质因数。我们分别计算了 SRH 和 LRH 螺旋结构的电荷与自旋热电量。

短程螺旋链（SRH）和长程螺旋链（LRH）情况下，电导 G_α （单位为 e^2/h）随费米能 E_F 的变化分别如图4(a)和(b)所示，其中α 对应电荷和自旋。在图4(a)中可以看到，对于短程螺旋链，电荷和自旋相关的电导（分别以红色和绿色曲线表示）几乎关于 $G_\alpha = 0$ 线对称。 $|G_\alpha|$ 的最大值为 ≈ 0.46，而在超过 $E_F \sim 1.4$电子伏特后会趋近于零。这可以通过 SRH 情况下的透射曲线来解释。请记住，总电荷电导定义为自旋向上和自旋向下通道贡献之和，而自旋电导则是二者之差。由于低于 $E_F \sim 1.4$电子伏特时，电荷和自旋 G_α 符号相反，这意味着自旋向上通道的贡献趋近于零。这是因为在此费米能范围内，如图 3(a)所示，自旋向上的透射概率与自旋向下的透射概率相比小得可以忽略。现在，在费米能介于 ~ 1.4 和 ~ 2之间的范围内，可以看到自旋向上和向下的透射概率都很小，因此 G_α 也趋近于零，如图4(a)所示。

在相同参数下，LRH 螺旋体表现出与图4(d)中观察到的行为有些相似，这反映了前文所示的自旋向上和向下透射谱。

由于热电效率与热电势的平方成正比，因此较大的 S 始终是理想的。此外，在自旋热电的情况下，热电势可能有两种不同的符号，它们在代数相加后可得到较大的 ZT。因此，费米能的选择非常棘手。要获得符号不同的热电势，应在费米能窗口中寻找一个较小区域，其中透射函数是不对称的。不仅如此，自旋向上和自旋向下通道的斜率符号也必须不同。热电势根据方程 11(b) 计算，对应的朗道尔积分 L_1 中，透射函数乘以 $(E-E_F)$ 和 $\frac{\partial f_{\rm FD}}{\partial E}$。后一个项提供热展宽，而两者的乘积围绕所选的$E_F$呈反对称分布。因此，如果透射函数围绕 E_F对称，那么无论透射概率如何，热电势都为零。现在，如果自旋分辨透射函数在所选费米能附近的斜率符号相反，那么由于 $\mathcal{T}(E)$的不对称性，热电势会呈现不同符号且数值较大。这将产生更大的自旋热电势。图4(b)和(e)分别显示了 SRH 和 LRH 情况下，热电势随费米能在与电导讨论相同能量窗口内的变化。从 SRH 螺旋体的透射曲线（见图3(a)）可以看出，在 $E \sim 1.4$附近，自旋向上和自旋向下通道的斜率符号不同

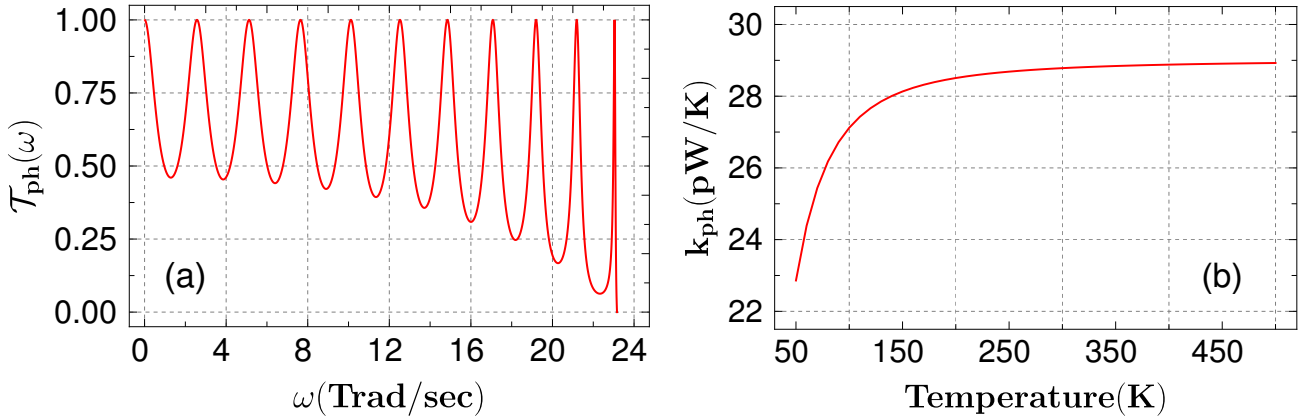


图5。（在线彩色）。(a) 声子透射概率 $\mathcal{T}_{\rm ph}$ 随声子角频率 ω的变化。(b) 声子热导 $k_{\rm ph}$ 随温度 T的变化。

（如图 3 中的蓝色虚线椭圆所示），因此自旋热电势较大，正如图4(b)所示。由于电荷热电势是自旋向上和自旋向下的代数和，因此在该费米能处其值非常小。同理，也可以解释图4(e)所示 LRH 情况下较大的自旋热电势。这里，相应的透射曲线同样表明，在 $E_F \sim 1.38$电子伏特处，自旋向上和自旋向下通道的斜率符号相反，因此与电荷热电势相比，自旋热电势较大。SRH 螺旋体的最大热电势约为 $600\,\mu$V/K，LRH 的最大热电势约为 $550\,\mu$V/K。

图4(c)和(f)分别展示了 SRH 和 LRH 螺旋结构中电子热导随费米能变化的情况。在给定的费米能窗口内，热导最大值为 ~ 135pW/K（见图4(c)），超过 $E_F \sim 1.5$电子伏特后则受到抑制。对于 LRH，热导值低于 SRH。其最大值约为 33 pW/K，出现在 $E_F \sim 1.38$电子伏特附近。

本研究考虑的系统尺寸较小（约为几纳米），因此预计声子热导应低于电子热导。不过，要准确估算品质因数，纳入声子热导十分重要，下面将对此进行讨论。

C. 声子对热导的贡献

在讨论 $k_{\rm ph}$ 的行为之前，需要先说明电极和中心螺旋分子的弹簧常数。一维电极被视为金电极，其弹簧常数为 14.68 N/m[93]。对于螺旋分子，我们取其弹簧常数约为 5.1 N/m，与单晶苯相同[94]。这里假设界面处两种不同的原子彼此相邻，一种原子对应金电极，另一种对应螺旋分子。通过对电极和螺旋分子的弹簧常数及质量取平均值，得到金电极的截止频率为$\omega_c = 13.7$Trad/s。这里需要指出，螺旋分子的弹簧常数是针对轻分子选取的。然而，如果研究重分子，其声子振动将小于我们的情况，因此预计 $k_{\rm ph}$ 会取较低值，进而使 ZT 更大。

在图5(a)中，声子透射概率绘制为声子频率的函数。我们观察到一些类似 Fabry-P´erot 的峰值[85]。声子热导随温度的变化如图5(b)所示。在 50 到$150\,K$的温度范围内，$k_{\rm ph}$ 随温度迅速增加，随后趋于饱和。饱和值约为 29 pW/K。

D. 热电效率

综合所有热电量并考虑声子贡献后，我们最终计算出优值。在室温下，如图6(a)和(b)所示，分别给出了 SRH 和 LRH 螺旋结构中，电荷和自旋 ZT 随费米能变化的关系。SRH 和 LRH 分子均表现出良好的自旋热电响应，并且其自旋热电响应均优于相应的电荷响应。SRH 和 LRH 的最大自旋-ZT 分别约为 7 和 4.5，对应于 $E_F \sim 1.35$电子伏特和 $E_F \sim 1.45$电子伏特。因此，我们的方案确实在室温下表现出良好的自旋热电响应。

E. β 的作用

到目前为止，我们假设电场方向平行于正的 $\hat{x}$ 轴，即 $\beta = 0$。为研究 β 对热电性能的影响，我们考虑

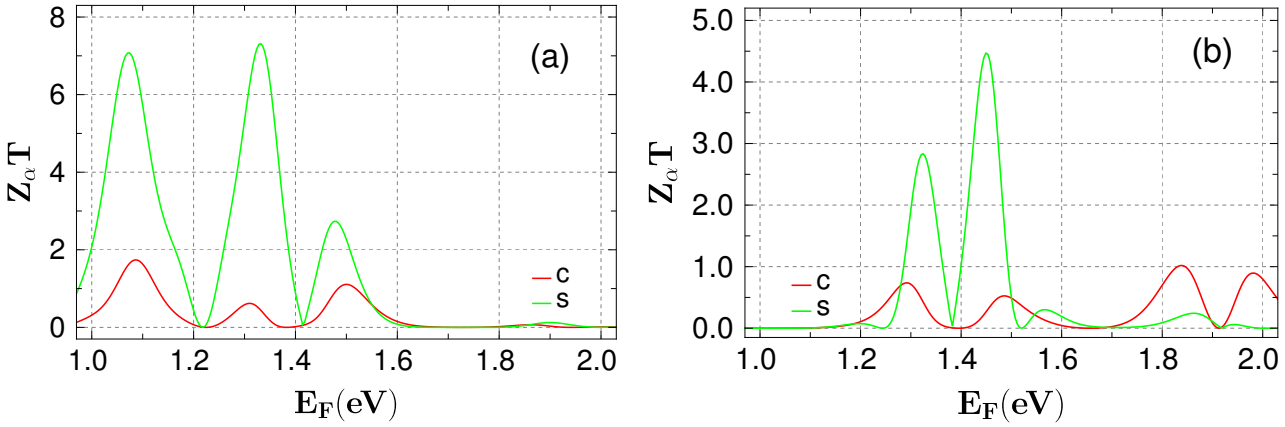


图6。（在线彩色）。室温下， Z_cT 和 Z_sT 随费米能变化的情况：(a) SRH 和 (b) LRH 螺旋结构。所有参数均与图2中的相同。红色和绿色曲线分别表示电荷和自旋优值的结果。

另外三个不同的角度，即 $\beta = \pi/6$、 $\pi/3$ 和$\pi/2$。同时列出 $\beta = 0$的结果以供比较。图7展示了室温下 LRH 的电荷和自旋优值随费米能变化的情况，其中 β取不同值。所有其他参数均保持不变，如前所述。图2所示的完整能量窗口内，费米能从 -2.5变化到 3.5 电子伏特时，$Z_\alpha T$ 的变化情况。在大多数情况下，自旋-ZT 在不同费米能下均表现出良好的响应。对于 $\beta = 0$、 $\pi/6$、 $\pi/3$和 $\pi/2$，自旋-ZT的最大值分别约为 4.5、1.75、0.8 和 6.58。有趣的是，在此考察的所有 β 值下，自旋-ZT 的最大值均高于电荷-ZT 。SRH 中 β 对 $Z_\alpha T$ 的影响具有大致相似的特征，因此为使表述简洁，此处不再列出。

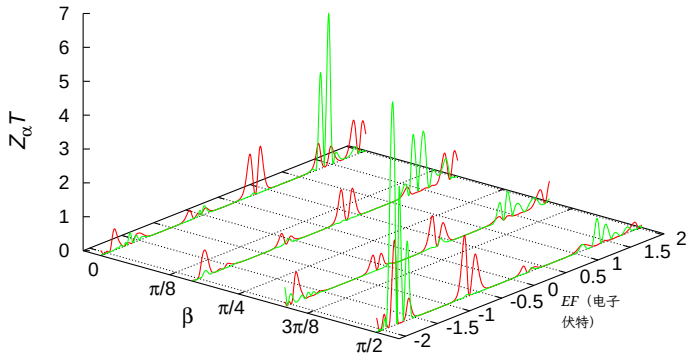


图7。（在线彩色）。对于 LRH 螺旋体，电荷和自旋优值随费米能的变化情况；不同的 β 值分别以红色和绿色表示。所有参数均与图2中的相同。 β值取为 $\beta = \pi/6$、 $\pi/3$和 $\pi/2$。为便于比较，还纳入了 $\beta = 0$ 。

F. 温度的影响

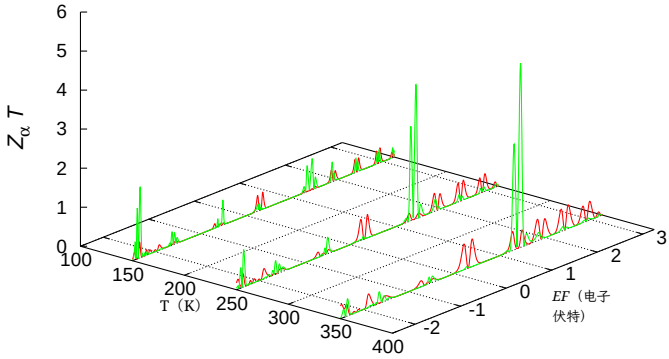


图 8.（在线彩色版）。对于 LRH 螺旋体，电荷和自旋热电优值随费米能变化的关系；红色和绿色分别表示不同温度下的结果。所有参数均与图2相同。

目前讨论的所有结果均是在室温 $T = 300$K 下获得的。为了研究温度的影响，我们绘制了三种其他温度下 $Z_\alpha T$ 随费米能变化的关系，分别为 $T = 150$K、250 K 和 350 K，如图 8 所示，研究对象为 LRH 螺旋体。其他参数保持不变，如图 3 所述。自旋 ZT 和电荷 ZT 分别以绿色和红色表示。温度变化趋势表明，随着工作温度升高，自旋优值的最大值有增大的趋势。在这种情况下，最大 Z_sT约为 4.7，对应温度为 350 K。

IV. 结论

在本研究中，我们提出了一种方案，可在典型的螺旋

结构中实现显著的自旋热电响应，其自旋构型具有反铁磁织构。我们考察了短程和长程跳跃两种情形，它们可能分别模拟单链DNA和 α-蛋白质分子等生物系统。我们研究了自旋相关散射现象，并施加横向电场，以探究螺旋系统中的热电物理。在没有电场或螺旋性的情况下，不再观察到自旋相关现象。我们按照Landauer-Büttiker公式，采用NEGF形式体系研究热电现象，并考察了电荷和自旋热电响应。为了精确估算热电品质因数，我们计算了声子对总热导的贡献。对于 SRH 和 LRH 分子，我们在室温下实现了相较于电荷对应响应极为优异的自旋热电响应。我们还考察了 β 的作用，即 ZT 上电场方向与正 X 轴之间的角度，以及温度的影响。

据我们所知，迄今文献中尚未研究反铁磁螺旋中的自旋相关热电现象。我们的方案为利用类似的奇妙反铁磁系统实现高效能量转换提供了一条新途径。

* 电子邮箱：kallolsankarmondal@gmail.com † 电子邮箱：sudinganguly@gmail.com ‡ 电子邮箱：santanu.maiti@isical.ac.in

[1] G. J. Snyder 和 E. S. Toberer，《Nature Materials》7, 105 (2008)。[2] J. He 和 T. M. Tritt，Science 357, eaak9997 (2017)。[3] L. D. Hicks 和 M. S. Dresselhaus，《物理评论B辑》47, 12727 (1993)。[4] A. Majumdar，Science 303, 777 (2004)。[5] B. Kubala、J. K¨onig 和 J. Pekola，《物理评论快报》100, 066801 (2008)。[6] L. D. Hicks 和 M. S. Dresselhaus，《物理评论B辑》47, 16631 (1993)。[7] Y. Dubi 和 M. Di Ventra，《物理评论B辑》79, 081302 (2009)。[8] R. ´Swirkowicz、M. Wierzbicki 和 J. Barna´s，《物理评论B辑》80, 195409 (2009)。[9] D. M.-T. Kuo 和 Y.-c. Chang，《物理评论B辑》81, 205321 (2010)。[10] M. Wierzbicki 和 R. Swirkowicz，《物理评论B辑》84, 075410 (2011)。[11] P. Trocha 和 J. Barna´s，《物理评论B辑》85, 085408 (2012)。[12] J. E. Cornett 和 O. Rabin，《物理评论B辑》84, 205410 (2011)。[13] V. Balachandran、R. Bosisio 和 G. Benenti，《物理评论 B 辑》 86, 035433 (2012)。[14] Y. Qi 、Z. Wang、M. Zhang、F. Yang 和 X. Wang，J. Mater. Chem. A 1, 6110 (2013)。[15] I.-J. Chen、A. Burke、A. Svilans、H. Linke 和 C. The- lander，《物理评论快报》120, 177703 (2018)。[16] Y. Xu、R.-L. Chu 和 C. Zhang，《物理评论快报》112, 136402 (2014)。[17] N. Xu、Y. Xu 和 J. Zhu，npj Quantum Materials 2, 51 (2017)。[18] D. Segal，《物理评论B辑》72, 165426 (2005)。[19] P. Reddy、S.-Y. Jang、R. A. Segalman 和 A. Majumdar，Science 315, 1568 (2007)。[20] D. Nozaki、H. Sevin¸cli、W. Li、R. Guti´errez 和 G. Cuniberti，《物理评论B辑》81, 235406 (2010)。[21] Y. Dubi 和 M. Di Ventra，《现代物理评论》83, 131 (2011)。[22] E. Maci´a，Nanotechnology 16, S254 (2005)。[23] E. Maci´a，《物理评论B辑》75, 035130 (2007)。[24] E. Maci´a，《物理评论B辑》82, 045431 (2010)。[25] Y.-J. Dong、X.-F. Wang、Y.-S. Liu 和 X.-M. Wu，《有机电子学》26, 176 (2015)。[26] Y. Li、L. Xiang、J. L. Palma、Y. Asai 和 N. Tao，《自然·通讯》7, 11294 (2016)。[27] D. E. Nikonov、G. I. Bourianoff 和 P. A. Gargini，《超导与新磁学杂志》19, 49 7 (2006)。[28] M. Johnson 和 R. H. Silsbee，《物理评论快报》55, 1790（1985）。[29] M. N. Baibich、J. M. Broto、A. Fert、F. N. Van Dau、F. Petroff、P. Etienne、G. Creuzet、A. Friederich 和 J. Chazelas，《物理评论快报》61，2472（1988）。[30] I. ˇZuti´c、J. Fabian 和 S. Das Sarma，《现代物理评论》76，323（2004）。[31] J. P. Lu、J. B. Yau、S. P. Shukla、M. Shayegan、L. Wissinger、U. R¨ossler 和 R. Winkler，《物理评论快报》81，1282（1998）。[32] J. Zheng、F. Chi 和 Y. Guo，《物理学杂志：凝聚态》24, 265301（2012）。[33] H. J. Goldsmid *et al.*, *Introduction to thermoelectricity*，第121卷（施普林格，2010）。[34] M. Johnson 和 R. H. Silsbee，《物理评论B辑》35，4959（1987）。[35] G. E. W. Bauer、E. Saitoh 和 B. J. van Wees，Nature Materials 11，391（2012）。[36] E. Saitoh、M. Ueda、H. Miyajima 和 G. Tatara，《应用物理快报》88，182509（2006）。[37] S. O. Valenzuela 和 M. Tinkham，《自然》442，176（2006）。[38] T. Kimura、Y. Otani、T. Sato、S. Takahashi 和 S. Maekawa，《物理评论快报》98，156601（2007）。[39] H. Adachi、K.-i. Uchida、E. Saitoh 和 S. Maekawa，《物理学进展报告》76，036501（2013）。[40] A. Kirihara、K.-i. Uchida、Y. Kajiwara、M. Ishida、Y. Nakamura、T. Manako、E. Saitoh 和 S. Yorozu，Nature Materials 11，686（2012）。[41] K.-i. Uchida、A. Kirihara、M. Ishida、R. Takahashi 和 E. Saitoh，《日本应用物理学杂志》50，120211（2011）。[42] K.-i. Uchida、T. Nonaka、T. Yoshino、T. Kikkawa、D. Kikuchi 和 E. Saitoh，《应用物理快报》5，093001（2012）。[43] X.-F. Ouyang、Z.-Y. Song 和 Y.-Z. Zhang，《物理评论B辑》98，075435（2018）。[44] J. A. Gauthier、M. Fields、M. Bajdich、L. D. Chen、R. B. Sandberg、K. Chan 和 J. K. Nørskov，《物理化学杂志C辑》123，29278（2019）。

[45] K. Tsukagoshi、B. W. Alphenaar 和 H. Ago，《自然》401，572（1999）。[46] S. Kamboj、D. K. Roy、S. Roy、R. R. Chowd- hury、P. Mandal、M. Kabir 和 G. Sheet，《物理学杂志：凝聚态》31，415601（2019）。[47] E. I. Rashba，《物理评论B辑》62，R16267（2000）。[48] K. Premasiri、S. K. Radha、S. Sucharitakul、U. R. Kumar、R. Sankar、F.-C. Chou、Y.-T. Chen 和 X. P. Gao，《纳米快报》18，4403（2018）。[49] S. Ganguly 和 S. K. Maiti，《应用物理学杂志》129，123902（2021）。[50] B. K. Nikoli´c、L. P. Zˆarbo 和 S. Souma，《物理评论B辑》73，075303（2006）。[51] P. F¨oldi、O. K´alm´an、M. G. Benedict 和 F. M. Peeters，《物理评论B辑》73，155325（2006）。[52] M. Dey、S. K. Maiti、S. Sil 和 S. Karmakar，《应用物理学杂志》114，164318（2013）。[53] Y.-H. Su、S.-H. Chen、C. D. Hu 和 C.-R. Chang，《物理学杂志D：应用物理》49，015305（2015）。[54] V. Baltz、A. Manchon、M. Tsoi、T. Moriyama、T. Ono 和 Y. Tserkovnyak，《现代物理评论》90，015005（2018）。[55] T. Jungwirth、J. Sinova、A. Manchon、X. Marti、J. Wun- derlich 和 C. Felser，《自然·物理》14，200（2018）。[56] M. B. Jungfleisch、W. Zhang 和 A. Hoffmann，《物理快报A辑》382，865（2018）。[57] P. Y. Artemchuk、O. Sulymenko、S. Louis、J. Li、R. Khymyn、E. Bankowski、T. Meitzler、V. Tyberkevych、A. Slavin 和 O. Prokopenko，《应用物理学杂志》127，063905（2020）。[58] P. Wadley、B. Howells、J. ˇZelezn´y、C. Andrews、V. Hills、R. P. Campion、V. Nov´ak、K. Olejn´ık、F. Maccherozzi、S. S. Dhesi、S. Y. Martin、T. Wagner、J. Wunderlich、F. Freimuth、Y. Mokrousov、J. Kuneˇs、J. S. Chauhan、M. J. Grzybowski、A. W. Rushforth、K. W. Edmonds、B. L. Gallagher 和 T. Jungwirth，Science 351，587（2016）。[59] P. Nˇemec、M. Fiebig、T. Kampfrath 和 A. V. Kimel，《自然·物理》14，229（2018）。[60] T. Kosub、M. Kopte、R. H¨uhne、P. Appel、B. Shields、P. Maletinsky、R. H¨ubner、M. O. Liedke、J. Fassbender、O. G. Schmidt 和 D. Makarov，《自然·通讯》8，13985（2017）。[61] D. D. Gupta 和 S. K. Maiti，《物理学杂志：凝-聚态》32，505803（2020）。[62] B. G¨ohler、V. Hamelbeck、T. Z. Markus、M. Kettner、G. F. Hanne、Z. Vager、R. Naaman 和 H. Zacharias，Science 331，894（2011）。[63] A.-M. Guo 和 Q.-f. Sun，《物理评论快报》108，218102（2012）。[64] A.-M. Guo 和 Q.-F. Sun，《美国国家科学院院刊》111，116

[65]D. Mishra, T. Z. Markus, R. Naaman, M. Ket- tner, B. G¨ ohler, H. Zacharias, N. Fried- man, M. Sheves, and C. Fontanesi，《美国国家科学院院刊》110, 148

[66]R. Gutierrez、E. D´ıaz、R. Naaman 和 G. Cuniberti，《物理评论B辑》85, 081404（2012）。

[67] T.-R. Pan, A.-M. Guo, and Q.-F. Sun，《物理评论B辑》92, 115418 (2015). [68] A.-M. Guo and Q.-F. Sun，《物理评论B辑》95, 155411 (2017). [69] S. Datta，*Electronic transport in mesoscopic systems* (剑桥大学出版社，1997). [70] D. S. Fisher and P. A. Lee，《物理评论B辑》23, 6851 (1981). [71] M. Di Ventra，《纳米尺度系统中的电输运》(2008). [72] B. K. Nikolic and P. B. Allen，《物理学杂志：凝聚态》12, 9629 (2000). [73] A. A. Shokri, M. Mardaani, and K. Esfarjani，《物理学E辑：低维系统与纳米结构》27, 325 (20

[74] A. A. Shokri and M. Mardaani, Solid State Communications 137, 53（2006）。[75] M. Dey, S. K. Maiti, and S. Karmakar，《物理快报A辑》374, 1522（2010）。[76] M. Patra and S. K. Maiti, Scientific Reports 7, 14313（2017）。[77] S. Sarkar and S. K. Maiti,《物理评论B辑》100, 205402（2019）。[78] E. Zerah-Harush and Y. Dubi, Phys. Rev. Applied 3, 064017（2015）。[79] C. M. Finch, V. M. Garc´ıa-Su´arez, and C. J. Lambert，《物理评论B辑》79, 033405（2009）。[80] M. Shirdel-Havar and R. Farghadan，《物理评论B辑》97, 235421（2018）。[81] F. Ildarabadi and R. Farghadan，《物理评论B辑》103, 115424（2021）。[82] T. M. Tritt, Annual Review of Materials Research 41, 433（2011）。[83] W. Zhang, T. S. Fisher, and N. Mingo, Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals 51, 333（2007）, https://doi.org/10.1080/10407790601144755。[84] P. E. Hopkins and J. R. Serrano，《物理评论B辑》80, 201408（2009）。[85] P. E. Hopkins, P. M. Norris, M. S. Tsegaye, and A. W. Ghosh，《应用物理学杂志》106, 063503（2009）。[86] K. Mondal, S. Ganguly, and S. K. Maiti, Scientific Reports 11, 17049（2021）。[87] W. A. Harrison，*Electronic Structure and the Properties of Solids: The Physics of the Chemical Bond*（Freeman, 1980）。[88] C. Kittel，*Introduction to solid state physics*（Wiley, 1956）。[89] S. Aubry and G. Andr´e, Ann. Israel Phys. Soc 3, 133（1980）。[90] S. Ganeshan, K. Sun, and S. Das Sarma，《物理评论快报》110, 180403（2013）。[91] G. D. Mahan and J. O. Sofo，《美国国家科学院院刊》93, 7436（1996）。[92] J. M. Cullen and J. M. Allwood, Energy 35, 2059（2010）。[93] J. R. Neighbours and G. A. Alers, Phys. Rev. 111, 707（1958）。[94] J. C. W. Heseltine, D. W. Elliott, and O. B. Wilson, The Journal of Chemical Physics 40, 2584（1964）。

58 (2014)

72 （2013）。