



GÜÇLÜ KORELASYONLU PLEGZİTONİK BİR SİSTEMDE FANO REZONANSININ ELEKTRON-FONON EŞLEŞMESİ YOLUYLA BASTIRILMASI

Ali İhsan GÖKER¹, Arslan ÜNAL¹

Fizik Bölümü, Fen-Edebiyat Fakültesi, Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Bilecik, Türkiye aihsan.goker@bilecik.edu.tr, arslan.unal@bilecik.edu.tr

Geliş Tarihi: 09.05.2017

Kabul Tarihi: 30.10.2017

ÖZ

Plazmon rezonanslarına sahip metal nanoparçacıklarla eşleşmiş güçlü elektron korelasyonlarına ve elektron-fonon eşleşmesine sahip iki düzeyli bir kuantum emitörden oluşan bir nano bağlantı noktasının optik emilme spektrumunu Dyson denklemlerini kesişmeme yaklaşımıyla çözerek inceledik. İki kesik düzey de Coulomb blokajındayken plazmon-egziton eşleşmesinden doğan Fano rezonansının evrimini değişik ortam sıcaklığı, plazmon-egziton eşleşmesi ve elektron-fonon eşleşmesi değerleri için araştırdık. Bulgularımız elektron-fonon eşleşmesini artırmanın bütün ortam sıcaklıklarında Fano rezonansının bastırılmasına yol açtığını göstermektedir. Plazmon-egziton eşleşme değerini artırmak bu bastırılmayı azaltmaya olanak sağlamaktadır. Fano rezonansının oluşumu Kondo rezonansının oluşumu ile bağlantılı olduğundan, bu durumu elektron-fonon eşleşmesinden ötürü Kondo rezonansının giderek yok olmasına bağladık.

Anahtar Kelimeler: Fano rezonansı, Plazmon, Kondo etkisi, Egzitonlar

FANO RESONANCE QUENCH IN A STRONGLY CORRELATED PLEXCITONIC SYSTEM VIA ELECTRON-PHONON COUPLING

ABSTRACT

We investigated the optical absorption of a nanojunction comprised of two level quantum emitter coupled to metal nanoparticles possessing plasmon resonances and electron-phonon coupling by solving the Dyson equations invoking the non-crossing approximation. We explored the evolution of the Fano resonance arising due to plasmon-exciton coupling for different ambient temperature, plasmon-exciton coupling and electron-phonon coupling values when both levels are in Coulomb blockade. Our findings indicate that boosting electron-phonon coupling cause a suppression of the Fano resonance for all ambient temperature values. Increasing the plasmon-exciton coupling value enables to reduce this suppression. Since the formation of the Fano resonance is related to the formation of the Kondo resonance, we attributed this situation to the gradual disappearance of the Kondo resonance arising from the electron-phonon coupling.

Keywords: Fano resonance, Plasmon, Kondo effect, Excitons

1. GİRİŞ

İleri teknoloji ürünü elektronik cihazların giderek küçülen boyutlarına yetişebilmek için optik enerjiyi ışığın dalgaboyundan çok daha küçük bölgelere odaklayabilecek lens benzeri cihazlara uzun zamandır gerek duyulmaktadır. Yakın zamanda nano üretim tekniklerinde ve lazer teknolojilerindeki ilerlemeler sonucu da nanoyapılarda plazmon rezonanslarının araştırılması ivme kazanmıştır [1]. Metal nanoyapılar optik enerjiyi ışığın dalgaboyunun altındaki uzay bölgelerinde odaklama ve hapsedme özelliklerinden dolayı plazmon rezonanslarının çalışılması için ideal platformları oluşturmaktadır [2]. Optik uyarılmalar aracılığıyla metal nanoparçacıklarda ayarlanabilir plazmon rezonanslarının elde edilmesi [3] gelecekteki yüksek performanslı minyatür optoelektronik bileşenlerin tasarlanması için önemli bir ilk adım olmuştur. Nanoplazmonik olarak adlandırılan bu alan optik cihazlar [4], fotovoltaik [5] ve biyolojik [6] gibi birçok alanda pratik uygulamalar içermektedir. Plazmon rezonansları metal nanoparçacıklar etrafında önemli ölçüde elektrik alan artışlarına yol açmaktadır [4]. İki plazmonik nanoparçacığın arasına yerleştirilmiş dolaşık iki düzeyli bir kuantum emitör iki kübitli bir kuantum bilgisayar için bir prototip olarak düşünülebilir [7]. Kuantum emitördeki egzitonik uyarılmaların metal nanoparçacıklardaki plazmonlarla eşleşmesi ise plegzitonik [8] denilen bir araştırma alanı tarafından incelenmektedir. Bu tür eşleşmeler moleküler sistemlerin eşvreli kontrolüne [9] ve moleküler fotocihazların [10] tasarlanmasına imkan sağlar.

Deneysel tekniklerdeki gelişmeler nanoplazmonik ve plegzitonik alanlarındaki teorik araştırmalarda büyük bir artışa yol açmıştır. Genelde plazmon uyarılmaları Maxwell denklemlerinin numerik çözümünü içeren klasik elektrodinamik kanunlarıyla [11], kuantum emitör ise kuantum mekanik kanunlarıyla [12] tarif edilmektedir. Fakat bu reçete plazmonlar ve egzitonlar gibi kuazi-parçacıkların eşleşmesi ve girişimini tarif etmekte yetersizdir. Plazmonik nanoyapılarda Fano rezonansının gözlenmesi [13] bu sistemdeki uyarılmaların tamamen kuantum kanunlarına göre modellenmesi için çalışmaları hızlandırmıştır. Kuantum kanunlarına göre yapılan modellemeler arasında kullanılan teknikler zamana bağlı yoğunluk fonksiyonu teorisi [14], kuantum esas denklemi [15] ve orta alanda denge dışı Green fonksiyonları [16] olarak sayılabilir. Orta alanda Green fonksiyonları tekniğinin güçlü plazmon-egziton eşleşmesinde yetersiz kaldığı tespit edilmiş olup bunun yerine hayali parçacık denge dışı Green fonksiyonları [17] kullanılmıştır. Bu son teknikle ise halen elektron spini tamamen ihmal edilmekte olup güçlü Coulomb etkileşimleri gözönüne alınamamaktadır.

Elektrotların arasına yerleştirilmiş kuantum emitördeki elektronlar arası Coulomb etkileşiminin gözönüne alınması için ilk girişim Philip Anderson'un ortaya attığı model Hamiltonyan'a dayanır [18]. Japon fizikçi Jun Kondo bu modeli manyetik katışıklıklar içeren metaller için pertürbasyon teorisi ile çözerken seri açılımında ikinci terimin birinciden büyük dolayısıyla serinin iraksak olduğunu farketmiştir [19]. Bu hesaplamaların sonucu metallerin dirençlerinin düşük sıcaklıklarda artmasıdır. Bu olaya Kondo etkisi ve artışın başladığı sıcaklığa da Kondo sıcaklığı adı verilmiştir. Elektrotlar arasına hapsedilen moleküller ve kuantum noktacıklarında ise taşınan elektronlar metallerde olduğu gibi katışıklık tarafından saçılmaz. Bunun yerine bütün elektronlar katışıklık üzerinden geçmek zorunda olduğundan yeni bir taşınım kanalı açılır. Bu da direnç yerine iletkenliğin artmasına yol açar.

Anderson Hamiltonyan'ını çözmek için bilinen en etkili metotlardan birisi denge dışı Green fonksiyonlarıdır. Bunlar ilk olarak Kadanoff ve Baym tarafından geliştirilmiş [20] ve Langreth tarafından lineer olmayan tepki problemlerine genellenmiştir [21]. Kondo probleminde denge dışı Green fonksiyonlarının uygulanabilmesi için elektronun kendisiyle etkileşiminden doğan enerjisinin tespit edilmesi şarttır. Bunun için Coleman Anderson modelinin köle bozonlar yardımıyla dönüşümünü ortaya atmıştır [22]. Köle bozon Hamiltonyan'ına karşılık gelen Kadanoff-Baym denklemlerinin elektronun kendisiyle etkileşiminde kesişmeme yaklaşımını kullanarak ilk çözümü ise Nordlander ve çalışma arkadaşları tarafından gerçekleştirilmiştir [23-24].

Daha önceki çalışmada plazmon-egziton eşleşmesi sonucu optik emilme spektrumunda ortaya çıkan Fano rezonansının Kondo sıcaklığının altındaki ortam sıcaklığında giderek yok olduğu gösterilmiştir [25]. Öte yandan kuantum emitörün kesik enerji düzeylerindeki güçlü elektron-fonon eşleşmesinin de Kondo rezonansını bastırıldığı bilinmektedir [26]. Bu çalışmada ise ilk defa güçlü elektron-fonon eşleşmesi sonucunda Fano rezonansının ortam sıcaklığına bağlı olarak nasıl evrildiği incelenecektir.

2. MATERYAL VE METOT

Plazmon rezonanslarına sahip iki metal nanoparçacık arasına yerleştirilmiş güçlü elektron korelasyonlarına ve elektron-fonon eşleşmesine sahip iki kesik düzeyden oluşan bir kuantum emitörden oluşan bir sistemi göz önüne alacağız. Bu kuantum emitör gerçekte paralel bağlı çift kuantum noktacığa karşılık gelir. Bu sistemi

$$H = H_N + H_{EN} \sum_{\alpha \in \{E, rad\}} (H_\alpha + V_\alpha)$$

Hamiltonyan'ı ile gösterebiliriz. Burada

$$H_N = \sum_{K \in \{L, R\}, \sigma} \varepsilon_{K\sigma} c_{K\sigma}^\dagger c_{K\sigma} + \sum_{K \in \{L, R\}} \varepsilon_{pK} b_K^\dagger b_K \quad (2)$$

şeklinde verilen H_N metal nanoparçacıkları modellerken,

$$H_{EN} = \sum_{K \in \{L, R\}, \sigma} (\Delta_K x_\sigma^\dagger b_K + h.c.) \quad (3)$$

ile verilen H_{EN} ise plazmon-egziton eşleşmesine karşılık gelir. Kuantum emitör

$$H_E = \sum_{s \in \{g, e\}, \sigma} [\varepsilon_s + \lambda(d + d')] c_{s\sigma}^\dagger c_{s\sigma} + \omega_0 d^\dagger d + J \sum_{\sigma} (c_{g\sigma}^\dagger c_{e\sigma} + h.c.) + \frac{U}{2} \sum_{s \in \{g, e\}} n_{s\sigma} n_{s\sigma} \quad (4)$$

ile tasvir edilirken metal nanoparçacıklar ve kuantum emitör arasındaki elektron tünellemesi

$$V_E = \sum_{K \in \{L, R\}, \sigma} (V_{K, g(e)} c_{K\sigma}^\dagger c_{g(e)\sigma} + h.c.) \quad (5)$$

şeklinde ifade edilir. Radyasyon alanı

$$H_{rad} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^\dagger a_{\alpha} \quad (6)$$

olarak verilirken

$$V_{rad} = \sum_{K \in \{L, R\}, \alpha} (W_{\alpha, K} a_{\alpha}^\dagger b_K + h.c.) \quad (7)$$

terimi her nanoparçacığın dipolar plazmonları ve radyasyon alanı arasındaki eşleşmeyi ifade eder.

Bu Hamiltonyan'da $c_{k\sigma}^\dagger(c_{k\sigma})$, metal nano parçacık içerisinde ve $c_{s\sigma}^\dagger(c_{s\sigma})$ ise moleküldeki her bir kesik düzey içerisinde σ spine sahip bir elektron yaratan (yok eden) bir operatördür. Bu farklı kesik düzeyleri $|g\rangle$ ve $|e\rangle$ ile gösterdik. λ kesik düzeylerdeki elektron-fonon eşleşme şiddetini ve ω_0 fonon enerjisini temsil eder. \mathcal{E}_α radyasyon alan enerjisini gösterirken \mathcal{E}_{pK} ise sol ve sağ nano parçacıklardaki dipolar plazmon enerjisini temsil etmektedir. J ve $V_{K,g(e)}$ ise sırasıyla $|g\rangle$ ve $|e\rangle$ durumları arasındaki ve metal nano parçacık ile farklı durumlar ($|g\rangle$ veya $|e\rangle$) arasındaki elektron tünelleme genliklerini göstermektedir. Son olarak, $W_{\alpha,K}$ radyasyon alanı ile her bir nano parçacıktaki dipolar plazmon arasındaki etkileşim katsayısını ve Δ_K ise oluşan ekziton ile aynı dipolar plazmon kipi arasındaki etkileşim ifade eden katsayıdır.

Eğer elektron-fonon eşleşmesi zayıfsa, elektron-fonon eşleşmesi pertürbasyon teorisiyle ele alınabilir. Bu makalede, elektron-fonon eşleşme şiddetinin elektron tünelleme şiddetine göre güçlü olduğu durumu ele alacağız. Bu rejimde, pertürbasyon teorisi iş görmez ve elektron-fonon eşleşme terimini elimine etmek için uygun bir kanonik dönüşüm bulunmalıdır. Bu durumdaki en uygun seçenek olan Lang-Firsov kanonik dönüşümü [27]

$$S = \exp \left[\frac{\lambda}{\omega_0} \sum_{s,\sigma} c_{s\sigma}^\dagger c_{s\sigma} (d^\dagger - d) \right]$$

ile verilir. Bu dönüşüm sonucunda

$$SdS^\dagger = d - \frac{\lambda}{\omega_0} \sum_{s,\sigma} c_{s\sigma}^\dagger c_{s\sigma} \quad (9)$$

$$Sc_{s\sigma}S^\dagger = c_{s\sigma}X \quad (10)$$

haline gelir. Bu ifadelerdeki X operatörü

$$X = \exp \left[-\frac{\lambda}{\omega_0} (a^\dagger - a) \right] \quad (11)$$

ile verilir. Bu dönüşüm sonucunda kesik düzeylerdeki elektron operatörleri $c_{s\sigma}(c_{s\sigma}^\dagger) X(X^\dagger)$ faktörleri ile çarpılır. Bunun anlamı tünelleyen elektronların fonon bulutu oluşturup yok ettiğidir. Bu da bağlantı noktasında polaron oluşmasına yol açar. Bu kanonik dönüşüm sonucunda kuantum emitörü tarif eden kısım

$$\begin{aligned} \bar{H}_E = SH_E S^\dagger = & \sum_{s \in \{g,e\}, \sigma} \left(\mathcal{E}_s - \frac{\lambda^2}{\omega_0} \right) c_{s\sigma}^\dagger c_{s\sigma} + \omega_0 d^\dagger d \\ & + J \sum_{\sigma} (c_{g\sigma}^\dagger c_{e\sigma} + h.c.) + \left(\frac{U}{2} - \frac{2\lambda^2}{\omega_0} \right) \sum_{s \in \{g,e\}} n_{s\sigma} n_{s\sigma'} \end{aligned} \quad (12)$$

haline gelir. Buradan görüldüğü üzere elektron-fonon etkileşimi elimine olmuştur. Buna karşılık Hubbard etkileşim gücü ve emitörün kesik enerji düzeyleri renormalize olmuştur.

Güçlü elektron-fonon etkileşimi rejiminde bağlantı noktasında polaron oluştuğu durumda ortalama alan teorisi uygulanabilir ve X operatörünün beklenen değeri $\langle X \rangle = \exp\left[-\frac{\lambda^2}{\omega_0^2}\left(N_{ph} + \frac{1}{2}\right)\right]$ olarak ifade edilebilir ve beklenen değer operatörün yerine kullanılabilir. Burada N_{ph} , T sıcaklığındaki ortalama fonon sayısını göstermektedir ve $N_{ph} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}} - 1}$ dağılım fonksiyonuyla verilir.

Hubbard terimi $\bar{U} = \frac{U}{2} - \frac{2\lambda^2}{\omega_0}$ renormalize olmuş olmasına rağmen hala pozitifdir ve her kesik düzeyde elektronların

dar bir alanda hapsolmesinden dolayı tünelleme genliklerinden çok büyüktür. Böyle bir durumda $\bar{U} \rightarrow \infty$ alınarak kesik enerji düzeylerinin aynı anda birden fazla elektron tarafından işgali önlenmiş olur. Bunun en önemli dezavantajı ise standart diyagram tekniklerinin uygulanamamasıdır. Bu sorun kesik düzeylerde kütsüz bir bozon ve bir yalancı fermiyon operatörü tanıtarak aşılabılır. Bu durumda orijinal elektron operatörleri

$$c_{g(e)\sigma} = b_{g(e)}^\dagger f_{g(e)\sigma} \quad (13)$$

$$c_{g(e)\sigma}^\dagger = f_{g(e)\sigma}^\dagger b_{g(e)} \quad (14)$$

olarak ve

$$Q_{B,g(e)} = b_{g(e)}^\dagger b_{g(e)} + \sum_{\sigma} f_{g(e)\sigma}^\dagger f_{g(e)\sigma} = 1 \quad (15)$$

şartını sağlamak kaydıyla yeniden yazılabilir. Bunun sonucunda kuantum emitörü tasvir eden kısım

$$\bar{H}_E = \sum_{s \in \{g,e\}, \sigma} \bar{\varepsilon}_s c_{s\sigma}^\dagger c_{s\sigma} + \omega_0 d^\dagger d + J \sum_{\sigma} (c_{g\sigma}^\dagger c_{e\sigma} + h.c.) \quad (16)$$

haline gelirken, metal nanoparçacıklar ve kuantum emitör arasındaki tünellemeyi tarif eden kısım

$$V_E = \sum_{K \in \{L,R\}, \sigma} (\tilde{V}_{K,g(e)} c_{K\sigma}^\dagger b_{g(e)}^\dagger f_{g(e)\sigma} + h.c.) \quad (17)$$

şekline dönüşür. Bu terimlerde tünel eşleşmesi ve kesik enerji düzeyleri $\tilde{V}_{K,g(e)} = V_{K,g(e)} / \langle X \rangle$ ve $\bar{\varepsilon}_s = \varepsilon_s - \lambda^2 / \omega_0$ şeklinde renormalize olur.

Bu sistemin denge dışı dinamiklerini araştırmak için çift zamanlı Green fonksiyonlarını kullanacağız. Küçüktür yalancı fermiyon ve köle bozon Green fonksiyonlar $G_{g(e)}^<(t, t') = \langle f_{g(e)\sigma}^t(t') f_{g(e)\sigma}^t(t) \rangle e^{\phi(t-t')}$ ve $B_{g(e)}^<(t, t') = \langle b_{g(e)\sigma}^t(t') b_{g(e)\sigma}^t(t) \rangle$ şeklinde verilirken, büyüktür yalancı fermiyon ve köle bozon Green fonksiyonları ise $G_{g(e)}^>(t, t') = \langle f_{g(e)\sigma}^t(t) f_{g(e)\sigma}^t(t') \rangle e^{\phi(t'-t)}$ ve $B_{g(e)}^>(t, t') = \langle b_{g(e)\sigma}^t(t) b_{g(e)\sigma}^t(t') \rangle$ olarak ifade edilir. Bu ifadelerde faz faktörleri elektron-fonon eşleşmesini düzgün olarak yansıtabilme için yalancı fermiyon Green fonksiyonlarına çarpan olarak eklenmiştir [28]. Faz faktörlerinde yer alan $\phi(t'-t) = -g [N_{ph} (1 - e^{-i\omega_0(t'-t)}) + (N_{ph} + 1) (1 - e^{i\omega_0(t'-t)})]$ ile verilirken [29], $g = \lambda^2 / \omega_0^2$ olarak tanımlanır. Bu analitik parçaları kullanarak geri yalancı fermiyon ve köle bozon Green fonksiyonları

$$B_{g(e)}^r(t, t') = -i\theta(t-t') [B_{g(e)}^>(t, t') - B_{g(e)}^<(t, t')] := -i\theta(t-t') b_{g(e)}(t, t') \quad (18)$$

ve

$$G_{g(e)}^r = -i\theta(t-t') [G_{g(e)}^>(t, t') e^{\phi(t'-t)} + G_{g(e)}^<(t, t') e^{\phi(t-t')}] := -i\theta(t-t') g_{g(e)}(t, t') \quad (19)$$

şeklinde yazılabilir. Buradan yola çıkarak

$$B_{g(e)}^>(t, t') = b_{g(e)}(t, t') + B_{g(e)}^<(t, t') \quad (20)$$

$$G_{g(e)}^>(t, t') e^{\phi(t'-t)} = g_{g(e)}(t, t') - G_{g(e)}^<(t, t') e^{\phi(t-t')} \quad (21)$$

ifadelerine ulaşılabilir. Ayrıca bozonik yapıysından dolayı plazmon büyüktür ve küçüktür Green fonksiyonları da $P^>(t, t') = \langle D(t) D^t(t') \rangle$ ve $P^<(t, t') = \langle D^t(t') D(t) \rangle$ olarak verilir. Bu ifadelerde $D(t) = b_L(t) + b_R(t)$ olarak sol ve sağ metal nanoparçacıklardaki plazmon operatörlerinin toplamı şeklinde yazılır. $D(t)$ 'nin bu şekilde yazılması metal nano parçacıkların lazerin fotonlarını aynı fazda emmesini gerektirir ve bu da lazerin doğrultusu metal nano parçacıkları birleştiren eksene dikse gerçekleşebilir. Ayrıca, sistemin enerjisi ε_0 olan tek bir lazer moduyla pompalandığını ve bu modun direkt olarak sadece dipolar plazmonla eşleştiğini varsayıyoruz. Bu varsayımlarla molekül lazerden enerji ememeyeceği için \bar{H}_E' 'deki J terimi sıfır alınır. Bunlara dayalı olarak her nano parçacıktaki dipolar plazmon enerjisi $\varepsilon_{pL} = \varepsilon_{pR} = \varepsilon_p$ şeklinde eşit kabul edilir. Bu şartlar altında geri ve ileri plazmon Green fonksiyonları

$$P^r(t, t') = -i\theta(t-t') (P^>(t, t') - P^<(t, t')) := -i\theta(t-t') p(t, t') \quad (22)$$

ve

$$P^a(t, t') = i\theta(t'-t) (P^>(t, t') - P^<(t, t')) := i\theta(t'-t) p(t, t') \quad (23)$$

olarak verilir. Geri ve küçüktür plazmon Green fonksiyonu için Dyson denklemleri [25]

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_p \right] P^r(t, t') = \delta(t-t') + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \xi^r(t, t_1) P^r(t_1, t') \quad (24)$$

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_p \right] P^>(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \xi^r(t, t_1) P^>(t_1, t') + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \xi^>(t, t_1) P^a(t_1, t') \quad (25)$$

şeklinde. Bu denklemlerde $\xi^r(t, t_1)$ ve $\xi^>(t, t_1)$ geri ve büyüktür plazmon kendi enerjisine karşılık gelmektedir. Plazmon kendi enerjisini plazmon-egziton ve plazmon-lazer eşleşmesinden kaynaklanan terimlerin toplamı olarak alıp [25] Green fonksiyonları için yukarıda tanımlan notasyonu kullanırsak Dyson denklemleri

$$\begin{aligned}
 \left[\frac{\partial}{\partial t} + i\varepsilon_p \right] p(t, t') &= - \int_{t'}^t dt_1 |\Delta|^2 b_g(t, t_1) \left(g_e(t, t_1) - \tilde{G}_e^<(t, t_1) e^{\phi(t-t_1)} \right) \tilde{G}_g^<(t, t_1) e^{\phi(t-t_1)} \tilde{B}_e^<(t_1, t) p(t_1, t') \\
 &+ \int_{t'}^t dt_1 |\Delta|^2 g_e(t, t_1) \left(g_g(t_1, t) - \tilde{G}_g^<(t_1, t) e^{\phi(t_1-t)} \right) \tilde{B}_g^<(t, t_1) \left(b_e(t_1, t) + \tilde{B}_e^<(t_1, t) \right) p(t_1, t') \\
 &- \int_{t'}^t dt_1 |\Delta|^2 \left(g_e(t, t_1) - \tilde{G}_e^<(t, t_1) e^{\phi(t-t_1)} \right) \tilde{B}_g^<(t, t_1) \tilde{G}_g^<(t_1, t) e^{\phi(t_1-t)} b_e^*(t, t_1) p(t_1, t') \\
 &+ \int_{t'}^t dt_1 |\Delta|^2 \tilde{B}_g^<(t, t_1) \left(g_e(t, t_1) - \tilde{G}_e^<(t, t_1) e^{\phi(t-t_1)} \right) g_g^*(t, t_1) \left(b_e(t_1, t) + \tilde{B}_e^<(t_1, t) \right) p(t_1, t') - |W_0|^2 p(t, t')
 \end{aligned} \tag{26}$$

ve

$$\begin{aligned}
 \left[\frac{\partial}{\partial t} + i\varepsilon_p \right] P^>(t, t') &= - \int_{-\infty}^t dt_1 |\Delta|^2 \tilde{G}_g^<(t, t_1) e^{\phi(t-t_1)} b_g(t, t_1) \left(g_e(t, t_1) - \tilde{G}_e^<(t, t_1) e^{\phi(t-t_1)} \right) \tilde{B}_e^<(t_1, t) P^>(t_1, t') \\
 &+ \int_{-\infty}^t dt_1 |\Delta|^2 g_e(t, t_1) \tilde{B}_g^<(t, t_1) \left(g_g(t_1, t) - \tilde{G}_g^<(t_1, t) e^{\phi(t_1-t)} \right) \left(b_e(t_1, t) + \tilde{B}_e^<(t_1, t) \right) P^>(t_1, t') \\
 &+ \int_{-\infty}^t dt_1 |\Delta|^2 \left(g_e(t, t_1) - \tilde{G}_e^<(t, t_1) e^{\phi(t-t_1)} \right) \tilde{B}_g^<(t, t_1) \tilde{G}_g^<(t_1, t) e^{\phi(t_1-t)} b_e^*(t, t_1) P^>(t_1, t') \\
 &- \int_{-\infty}^t dt_1 |\Delta|^2 \left(g_e(t, t_1) - \tilde{G}_e^<(t, t_1) e^{\phi(t-t_1)} \right) \tilde{B}_g^<(t, t_1) g_g^*(t, t_1) \left(b_e(t_1, t) + \tilde{B}_e^<(t_1, t) \right) P^>(t_1, t') - |W_0|^2 P^>(t, t') \\
 &- \int_{-\infty}^{t'} dt_1 |\Delta|^2 \tilde{G}_g^<(t_1, t) \left(g_e(t, t_1) - \tilde{G}_e^<(t, t_1) e^{\phi(t-t_1)} \right) \left(b_g(t, t_1) + \tilde{B}_g^<(t, t_1) \right) \tilde{B}_e^<(t_1, t) p(t_1, t') \\
 &- \int_{-\infty}^{t'} dt_1 |W_0|^2 D^<(t-t_1) p(t_1, t') + |W_0|^2 p(t, t')
 \end{aligned} \tag{27}$$

haline gelir. Bu denklemlerde $D^<(t-t')$,

$$D^<(\varepsilon) = N(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\delta^2}{(\varepsilon - \varepsilon_0)^2} \tag{28}$$

ile verilen lazer tarafından indüklenmiş mod popülasyonunun Fourier dönüşümüdür ve $D^<(t-t') = \mathcal{F}^{-i\varepsilon_0(t-t') - \delta|t-t'|}$

olarak verilir. Burada δ lazerin bant genişliğidir. Bu denklemlerdeki geri yalancı fermiyon ve köle bozon Green fonksiyonları

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + i\varepsilon_{g(e)} \right] g_{g(e)}(t, t') = - \int_{t'}^t dt_1 K_{g(e)}^>(t, t_1) b_{g(e)}(t, t_1) g_{g(e)}(t_1, t') \quad (29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} b_{g(e)}(t, t') = - \int_{t'}^t dt_1 K_{g(e)}^<(t_1, t) g_{g(e)}(t, t_1) b_{g(e)}(t_1, t') \quad (30)$$

Dyson denklemleri çözümlenerek elde edilir. Burada yalnızca fermiyon ve köle bozon kendi enerjileri kesişmeme yaklaşımı ile elde edilir [25]. Bunun sonucunda $K_{g(e)}^<(t, t')$ ve $K_{g(e)}^>(t, t')$ kernelleri

$$K_{g(e)}^>(t, t') = \bar{\Gamma} \int_{-D}^D \frac{d\varepsilon}{2\pi} \rho(\varepsilon) \frac{e^{\beta\varepsilon} e^{i\varepsilon(t-t')}}{1 + e^{\beta\varepsilon}} \quad (31)$$

$$K_{g(e)}^<(t, t') = \bar{\Gamma} \int_{-D}^D \frac{d\varepsilon}{2\pi} \rho(\varepsilon) \frac{e^{i\varepsilon(t-t')}}{1 + e^{\beta\varepsilon}} \quad (32)$$

halinde yazılabilir. Bu ifadelerde $\rho(\varepsilon)$ bant genişliğinin yarısı D olan metal nanoparçacıkların durumlar yoğunluğunu gösterir ve ε_f Fermi düzeyini gösterecek şekilde $\bar{\Gamma} = 2\pi |V_{K,g(e)}(\varepsilon_f)|^2$. Bu makalede simetrik bağlanmış bir moleküllü ele alacağız, dolayısıyla $V_{L,g(e)} = V_{R,g(e)}$. Her kesik düzeyin metal nanoparçacıklarla eşleşmesini de $V_{K,g} = V_{K,e}$ olarak eşit alacağız. Ayrıca $\Gamma(\varepsilon) = \bar{\Gamma} \rho(\varepsilon)$ olacak şekilde $\Gamma = \Gamma(\varepsilon_f)$ şeklinde tanımlanacaktır. Ayrıca, sol ve sağ nano parçacıklar özdeş olarak ele alınacağı için durumlar yoğunlukları ikisi için de eşit kabul edilecektir. Basite indirgemek için, durumlar yoğunluğunu $D = 9\bar{\Gamma}$ olacak şekilde parabolik kabul edeceğiz. Prensip olarak gerçek metallerin durumlar yoğunluğunu hesaba katma imkanımız vardır [30,31] fakat bu ekstra yoğunluk teorisi hesaplaması gerektireceği için bu makalede göz önüne alınmayacaktır.

Geri yalnızca fermiyon ve köle bozon Green fonksiyonlarını bu şekilde elde ettikten sonra küçüktür Green fonksiyonları ise

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + i\varepsilon_{g(e)} \right] G_{g(e)}^<(t, t') e^{\theta(t-t')} = \int_{-\infty}^{t'} dt_1 K_{g(e)}^<(t, t_1) B_{g(e)}^<(t, t_1) g_{g(e)}(t_1, t') - \int_{-\infty}^t dt_1 K_{g(e)}^>(t, t_1) b_{g(e)}(t, t_1) G_{g(e)}^<(t_1, t') e^{\theta(t_1-t')} \quad (33)$$

ve

$$\frac{\partial}{\partial t} B_{g(e)}^<(t, t') = \int_{-\infty}^{t'} dt_1 K_{g(e)}^>(t_1, t) G_{g(e)}^<(t, t_1) e^{\theta(t-t_1)} b_{g(e)}(t_1, t') - \int_{-\infty}^t dt_1 K_{g(e)}^<(t_1, t) g_{g(e)}(t, t_1) B_{g(e)}^<(t_1, t') \quad (34)$$

denklemleri çözümlenerek elde edilir.

Green fonksiyonlarının değerleri bir kare matriste saklanır. Yakınsamanın sağlanabilmesi için matris diyagonal yönde ilerletilir ve matris ebatları gerektiği kadar artırılır. Dyson denklemlerinin kesikleştirilmesi ve numerik çözümü daha önce teferruatlı bir şekilde açıklanmıştır [32].

Kuantum emitörün kesik enerji düzeyleri ε_e ve ε_g , metal nanoparçacıkların Fermi düzeyi ε_f 'den aşağıda konumlandığında, her kesik düzeyin durumlar yoğunluğu düşük sıcaklıklarda iki önemli rezonans içerir. Bunların birincisi her kesik düzeyin etrafında Γ çizgi genişliğine sahip olan geniş rezonanstır. Breit-Wigner rezonansı adı verilen bu oluşum kesik düzeylerin metal nanoparçacıklardaki sürekli düzeylerle hibritleşmesinden ileri gelir. Dolayısıyla, bu rezonans elektron-elektron etkileşimlerinin olmadığı durumda dahi vardır. Diğer oluşum ise metal nanoparçacıkların Fermi düzeyi ε_f 'in biraz üzerinde konumlanan ve çizgi genişliği

$$T_{K,g(e)} \propto \frac{\sqrt{D\Gamma}}{2} \exp\left(-\frac{\pi|\varepsilon_{g(e)}|}{\Gamma}\right) \quad (35)$$

mertebesinde olan rezonanstır. Bu rezonansa Kondo rezonansı çizgi genişliğine karşılık gelen yukarıdaki enerji ölçeği $T_{K,g(e)}$ 'ya ise Kondo sıcaklığı denir. Kondo rezonansının oluşumu, $T_{K,g(e)}$ 'nin altındaki ortam sıcaklıklarında farklı spine sahip iki elektronun aynı anda tünellemesi sonucu kesik enerji düzeyinde efektif spin dönmesinin gerçekleşmesine dayalıdır. Bu rezonans elektron-elektron etkileşimlerinin ihmal edildiği durumda yoktur.

Yalancı fermiyon ve köle bozon Green fonksiyonlarının plazmon Green fonksiyonlarının elde edildiği denklemlerde yerine konulmasında dikkat edilmesi gereken husus küçüktür elektron ve yalancı fermiyon Green fonksiyonlarının elektrotların bant genişliğini geniş bant limitinde $D = 27\bar{\Gamma}$ olarak hesaplanmasıdır. Böylece bu Green fonksiyonlar etkileşimsiz limite karşılık gelirler. Bundan dolayı küçüktür Green fonksiyonlar plazmon Dyson denklemlerinde tepelerine tilde işareti konularak etkileşimli geri Green fonksiyonlarından farkları ayırt edilmiştir.

Bu durum ekstra bir yaklaşım değil $Q_{B,g(e)} = 1$ alt uzayına projeksiyondan ileri gelen bir zorunluluktur. Geri ve küçüktür plazmon Green fonksiyonları $Q_{B,g(e)}^0$ mertebesindedir. Bundan dolayı Dyson denklemlerinde bunları çarpan kendi enerji terimleri de $Q_{B,g(e)}^0$ mertebesinde olmalıdır. Öte yandan, geri yalancı fermiyon ve köle bozon Green fonksiyonları $Q_{B,g(e)}^0$ mertebesindeyken, küçüktür yalancı fermiyon ve köle bozon Green fonksiyonları $Q_{B,g(e)}^1$ mertebesindedir. Plazmon Dyson denklemlerinde eşitliğin her iki tarafının da $Q_{B,g(e)}^0$ mertebesinde olabilmesi için küçüktür yalancı fermiyon ve köle bozon Green fonksiyonları geniş bant limitinde hesaplanmıştır. Bu şekilde onlar da $Q_{B,g(e)}^0$ mertebesine gelir.

Bütün bunlardan sonra, ε_0 lazer enerjisine karşılık gelen durgunluk durumundaki optik emilme spektrumu

$$I_{abs}(\varepsilon_0) = -\int_0^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \gamma(\varepsilon) N(\varepsilon) \text{Im} P^>(\varepsilon) \quad (36)$$

ile verilir [17]. Burada $N(\varepsilon)$ daha önce tanımladığımız lazer tarafından indüklenmiş mod popülasyonu ve

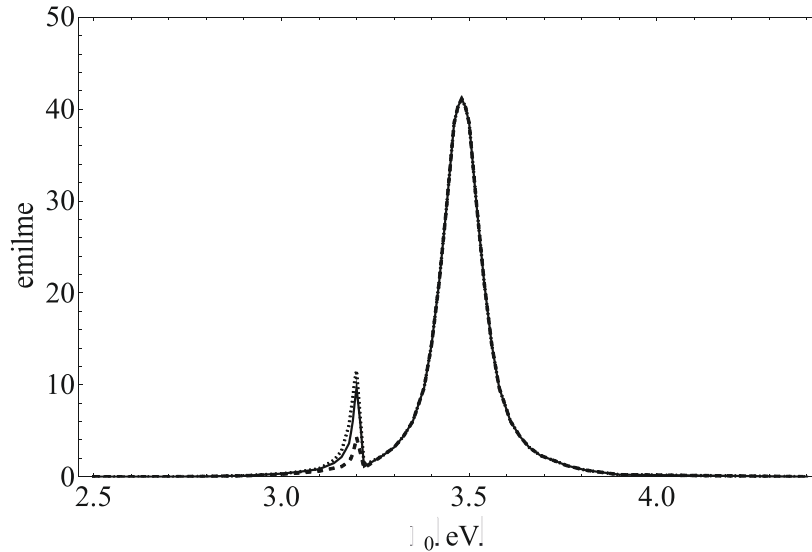
$$\gamma(\varepsilon) = 2\pi \sum_{K \in \{L,R\}} |W_{0,K}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_0) \quad (37)$$

ise toplam plazmon dağılıma oranıdır. $P^>(\varepsilon)$ da büyüktür plazmon Green fonksiyonunun Fourier dönüşümüdür.

3. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

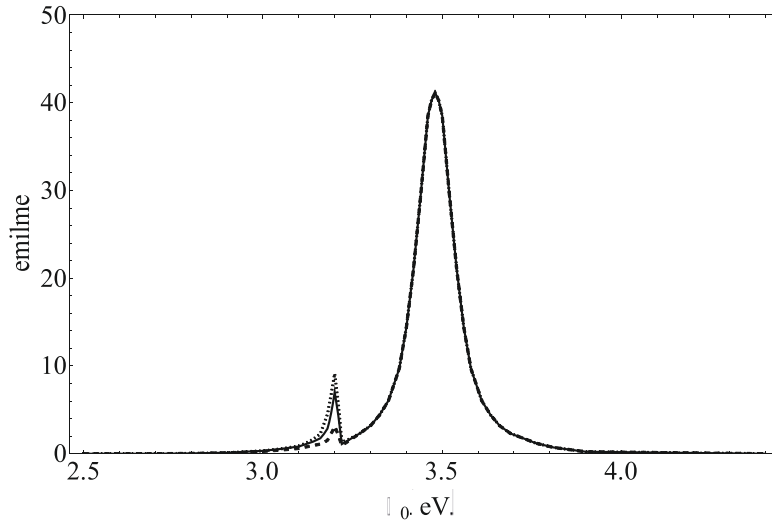
Hesaplamalarımızda dipolar plazmon enerjisini $\varepsilon_p=3.49$ eV, lazer bant genişliğini $\delta=1$ meV, fonon enerjisini $\omega_0=0.06\Gamma$ ve dipolar plazmonun lazerle eşleşmesini $\gamma_{L(R)} = 2\pi |W_{0,L(R)}|^2 = 86$ meV olarak daha önceki çalışmalardaki parametrelerle aynı olarak kullanacağız [25, 29]. Ayrıca, yine aynı şekilde kuantum emitördeki elektronların metal nanoparçacıklarla hibritleşmesini de sabit ve $\bar{\Gamma}=0.2$ eV ve $\Gamma=0.8$ eV olarak alacağız [25]. Parametreleri daha önceki çalışmalarla aynı almaktaki amacımız optik emilme spektrumunda Fano rezonansının elektron-fonon etkileşiminin olmadığı duruma göre değişiminin direk olarak karşılaştırılmasına olanak sağlamaktır.

Hesaplamalarımıza kuantum emitörün kesik enerji düzeyleri $\varepsilon_g=-4.8$ eV ve $\varepsilon_c=-1.6$ eV olan bir sistemi gözönüne alarak başlayacağız. Bu da 3.2 eV değerindeki kuantum emitör rezonaans enerjisine tekabül eder ki bu da kesik enerji düzeyleri arasındaki enerji açıklığına eşittir. Yine ilk etapta plazmon-egziton eşleşmesini daha önceki çalışmalarda olduğu gibi $\Delta=20$ meV olarak sabit kabul edeceğiz [16, 17].



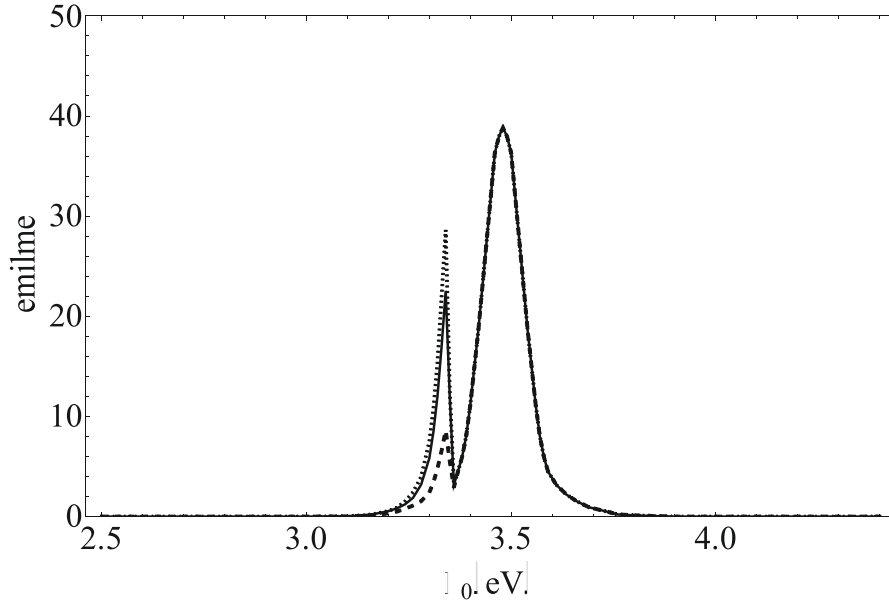
Şekil 1: Kuantum emitör-metal nanoparçacık dimer sisteminin optik emilme spektrumu

Kuantum emitör- metal nanoparçacık dimer sisteminin plazmon-egziton eşleşme şiddetini $\Delta=20$ meV ve $g = \lambda^2 / \omega_0^2 = 2.25$ farz ederek $T=12$ K (kırmızı noktalı), $T=24$ K (yeşil düz), $T=36$ K (siyah kesik çizgili) ortam sıcaklıklarında $\epsilon_g=-4.8$ eV ve $\epsilon_c=-1.6$ eV olarak üzerine düşen lazerin enerjisi olan ϵ_0 'ın fonksiyonu olarak optik emilme spektrumu Şekil 1'de gösterilmiştir. Burada iki önemli özellik göze çarpmaktadır. Birincisi sıcaklığa duyarlı olmayan dipolar plazmon enerjisi etrafında oluşan simetrik plazmon rezonansı ve kuantum emitör enerjisi etrafında oluşup ortam sıcaklığı arttıkça giderek küçülen asimetrik Fano rezonansıdır. Burada dikkat çekmek istediğimiz en önemli husus, elektron-fonon eşleşmesinin Fano rezonansını her ortam sıcaklığında elektron-fonon eşleşmesinin sıfır olduğu duruma göre [25] bir miktar bastırmasıdır. $\epsilon_g=-4.8$ eV ve $\epsilon_c=-1.6$ eV değerleri için ϵ_c 'nin Kondo sıcaklığı 35. denkleme göre yaklaşık 23 K iken ϵ_g 'nin Kondo sıcaklığı neredeyse sıfırdır.



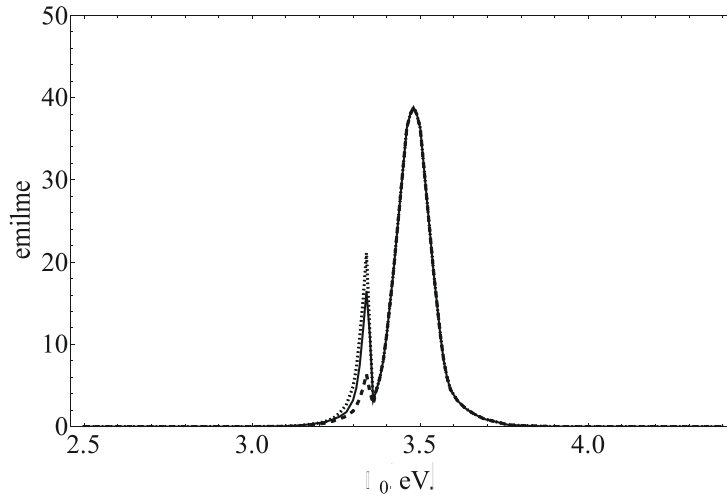
Şekil 2: Kuantum emitör-metal nanoparçacık dimer sisteminin optik emilme spektrumu

Bu durumun artan elektron-fonon eşleşmesiyle nasıl değiştiğini incelemek için diğer parametreleri Şekil 1'deki ile aynı tutup elektron-fonon eşleşmesini $g = \lambda^2 / \omega_0^2 = 3.75$ 'e çıkararak optik emilme spektrumunu Şekil 1'deki ortam sıcaklıkları için tekrar hesapladık. Bunu yaparken bire bir karşılaştırmaya olanak vermek için fonon enerjisini değiştirmeden daha önceki hesaplamadaki gibi $\omega_0=0.06\Gamma$ olarak aldık. Elde ettiğimiz sonuçlar Şekil 2'de görülmektedir. Burada açıkça görüleceği gibi artan elektron-fonon eşleşmesi her ortam sıcaklığında Fano rezonansının daha da bastırılmasına yol açmaktadır. Hatta en yüksek ortam sıcaklığı olan $T=36$ K'de Fano rezonansı neredeyse yok olma noktasına gelmektedir.



Şekil 3: Kuantum emitör-metal nanoparçacık dimer sisteminin optik emilme spektrumu

Bu gözlemlerin farklı kuantum emitör rezonans enerjisinde hala geçerli olup olmadığını test etmek için $\epsilon_g = -4.95$ eV ve $\epsilon_e = -1.6$ eV olarak hesaplamalarımızı yine aynı ortam sıcaklıklarında ve $g = \lambda^2 / \omega_0^2 = 2.25$ elektron-fonon eşleşmesini kullanarak tekrarladık. Elde ettiğimiz sonuçlar $\Delta = 20$ meV ve $T = 12$ K (kırmızı noktalı), $T = 24$ K (yeşil düz), $T = 36$ K (siyah kesik çizgili) ortam sıcaklıkları için Şekil 3'te görülmektedir. Kuantum emitörün rezonans enerjisi 3.35 eV değerine çıktığı için Fano rezonansı daha önceki duruma göre bir miktar daha sağa kaymış ve plazmon rezonansına yaklaşmıştır. Buna rağmen Fano rezonansının bütün sıcaklık değerleri için sıfır elektron-fonon eşleşmesi durumuna göre [25] yine bir miktar bastırılmış olduğu ise açıkça görülmektedir.



Şekil 4: Kuantum emitör-metal nanoparçacık dimer sisteminin optik emilme spektrumu

Daha önceki durumla benzer şekilde artan elektron-fonon eşleşmesinin Fano rezonansının davranışını nasıl etkilediğini görmek için yine $g = \lambda^2 / \omega_0^2 = 3.75$ elektron-fonon eşleşme değerini kullanarak ve Şekil 3'teki diğer parametreleri aynı tutarak optik emilme hesaplamalarını tekrarladık. Şekil 4 elde ettiğimiz sonuçları göstermektedir. Yine artan elektron-fonon etkileşiminin bütün ortam sıcaklıklarında Fano rezonansını bastırmaya devam ettiğini burada çok açıkça görmeye devam etmekteyiz. Keza, yine kullandığımız en yüksek ortam sıcaklığı olan $T=36$ K'de Fano rezonansı sıfır elektron-fonon eşleşmesi durumuna göre çok küçülmüş durumdadır. .

Fano rezonansının sıfır elektron-fonon eşleşmesi durumunda ortam sıcaklığına bağlı olarak gelişimi daha önce mikroskopik bir senaryo ortaya atılarak açıklanmıştır [25]. Bunu burada kısaca özetlemek gerekirse, Fano rezonansının oluşumu ile Kondo rezonansının oluşumu arasında yakın bir ilişki vardır çünkü optik emilme spektrumunda Fano rezonansının gözlenebilmesi plazmon-egziton eşleşmesi ile mümkün hale gelmektedir [13,16,17] ve bu da plazmon yok olduğunda $|g\rangle$ düzeyindeki bir elektronun $|e\rangle$ düzeyine tünellemesini veya tam tersini gerektirir. Bu ise tek elektronun tünelleme yaptığı ardışık tünelleme rejiminde mümkün değildir çünkü güçlü Coulomb etkileşiminden dolayı kesik düzeylerin çift elektron tarafından işgali mümkün değildir. Dolayısıyla Fano rezonansı her halükarda Fermi düzeyine yakın durumdaki kesik enerji düzeyinin Kondo sıcaklığı olan $T_{K,e}$ 'nin üstündeki ortam sıcaklıklarında hızlı bir şekilde küçülmeye başlar. Ortam sıcaklığı bu ölçeğin altına düşmeye başladığında ise $|e\rangle$ düzeyinde aynı anda iki elektronun tünellediği spin dönmesi olayları meydana gelmeye başlar. Bu durumda bu düzeyde bulunan bir elektron metal nanoparçacıklardan birine tünelleleyebilir. Bıraktığı boşluk ise $|g\rangle$ düzeyindeki zıt spine sahip başka bir elektronun $|e\rangle$ düzeyine tünellemesiyle doldurulur. Böylece $|e\rangle$ düzeyindeki elektronun spini dönmüş hale gelir. Bu durum Kondo etkisinin ana mekanizması olduğu için plazmon-egziton eşleşmesi blokajının kırılması da ancak Kondo etkisinin ortaya çıkmasıyla mümkün olmaktadır. Dolayısıyla Coulomb blokajında Fano rezonansının görülebilmesi için Kondo etkisi mutlaka gereklidir. Öte yandan güçlü elektron-fonon etkileşiminin Kondo etkisini bastırdığı daha önce gösterilmiştir [26]. O halde bu çalışmada gözlediğimiz artan elektron-fonon etkileşiminin Fano rezonansını bastırması indirekt olarak Kondo etkisini yok etmesinden kaynaklanmaktadır. Artan elektron-fonon etkileşimiyle spin dönmesi olayları giderek azaldığı için plazmon-egziton eşleşmesi de bloke edilmeye başlanmaktadır. Özetlemek gerekirse, bu çalışmayla ilk defa plazmonik metal nanoparçacıklarla simetrik olarak eşleşmiş Coulomb blokajındaki bir kuantum emitöründe Fano rezonansının artan elektron-fonon etkileşimi şiddetiyle giderek bastırıldığını çok parçacık teorisi kullanarak gerçekçi deneysel parametrelerle kantitatif olarak göstermiş olduk. Böylece, hızla gelişmekte olan bu alanda yeni deneyleri motive edeceğimizi ummaktayız.

4. TEŞEKKÜRLER

Dr. Hüseyin Aksu'ya önemli fikir alışverişlerinden dolayı ve Tübitak'a da 114F195 projesi yoluyla finansal desteklerinden ötürü teşekkürü bir borç bilirim.

KAYNAKÇA

- [1] Stockman, M. I. “Nanoplasmonics: Past, present and glimpse into future”, *Optics Express*, 19 (22), 22029-22106 (2011).
- [2] Maier, S. A. “Plasmonics: Fundamentals and applications”, Springer, New York, 1-224 (2007).
- [3] Lal, S, Link S. and Halas, N.J. “Nano-optics from sensing to waveguiding”, *Nature Photonics*, 1(11), 641–648 (2007).
- [4] Schuller, J. A., Barnard E. S., Cai, W., Jun, Y.C., White, J. S. and Brongersma, M. L. “Plasmonics for extreme light concentration and manipulation”, *Nature Materials*, 9 (3), 193–204 (2010).
- [5] Atwater H. A. and Polman A. , “Plasmonics for improved photovoltaic devices”, *Nature Materials*, 9(10), 865 (2010).
- [6] Zheng, Y. B., Kiraly, B., Weiss, P. S. and Huang, T. J. , “Molecular plasmonics for biology and nanomedicine”, *Nanomedicine*, 7 (5), 751-770 (2012).
- [7] Awschalom, D. D., Bassett, L. C., Dzurak, A. S., Hu, E. L. and Petta, J. R., “Quantum spintronics: Engineering and manipulating atom-like spins in semiconductors”, *Science*, 339 (6124), 1174–1179 (2013).
- [8] Fofang, N. T., Park, T. H., Neumann, O., Mirin, N. A., Nordlander P. and Halas N. J., “Plexcitonic nanoparticles: Plasmon–exciton coupling in nanoshell–j-aggregate complexes”, *Nano Letters*, 8(10), 3481–3487 (2008).
- [9] Wiederrecht , G. P., Wurtz, G. A. and Hranisavljevic, J., “Coherent Coupling of molecular excitons to electronic polarizations of nobel metal nanoparticles”, *Nano Letters*, 4(11), 2121-2125 (2004).
- [10] Walker, B. J., Dorn, A., Bulovic, V. and Bawendi, M. G. “Color-selective photocurrent enhancement in coupled j-aggregate/nanowires formed in solution”, *Nano Letters*, 11 (7), 2655-2659 (2011).
- [11] Coomar, A., Arntsen, C, Lopata, K. A., Pistinner, S. and Neuhauser, D. “Near field: A finite-difference time-dependent method for simulation of electrostatics”, *Journal of Chemical Physics*, 135 (8), 084121 (2011).
- [12] Arntsen, C., Lopata, K., Wall, M. R., Bartell, L. and Neuhauser, D. “Modeling molecular effects on plasmon transport: Silver nanoparticles with tartrazine”, *Journal of Chemical Physics*, 134 (8), 084101 (2011).
- [13] Luk'yanchuk, B. Zheludev, N. I., Maier, S. A., Halas, N. J., Nordlander, P., Giessen, H. and Chong, C. T., “The Fano resonance in plasmonic nanostructures and metamaterials”, *Nature Materials*, 9(9), 707-715 (2010).
- [14] Zuloaga, J, Prodan, E. and Nordlander, P. “Quantum description of the plasmon resonances of a nanoparticle dimer”, *Nano Letters*, 9(2), 887-891 (2009).
- [15] Zelinsky, Y. and May, V. “Photoinduced switching of the current through a single molecule: Effects of surface plasmon excitations of the leads”, *Nano Letters*, 12(1), 446-452 (2012).
- [16] Manjavacas, A., Garcia de Abajo, F. J. and Nordlander, P. “Quantum plexcitonics: Strongly interacting plasmons and excitons”, *Nano Letters*, 11(6) , 2318- 2323 (2011).
- [17] White, A. J., Fainberg, B. D. and Galperin, M. “Collective plasmon–molecule excitations in nanojunctions: Quantum consideration”, *Journal of Physical Chemistry Letters*, 3(19), 2738-2743 (2012).
- [18] Anderson, P. W. “Localized magnetic states in metals”, *Physical Review*, 124, 41 (1961).
- [19] Kondo, J. “Resistance minimum in dilute magnetic alloys”, *Progress in Theoretical Physics*, 32(1), 37-49 (1964).
- [20] Kadanoff, L. P. and Baym, G. “Quantum statistical mechanics”, Benjamin, New York, 1-203 (1976).
- [21] D. C. Langreth, “Linear and nonlinear response theory with applications” in *Linear and Nonlinear Electron Transport in Solids*, J. T. Devreese and V. E. van Doren, Plenum, New York, 3-32 (1976).
- [22] Coleman, P. “New approach to the mixed valence problem”, *Physical Review B*, 29(6), 3035-3044 (1984).
- [23] Langreth, D. C. and Nordlander P., “Derivation of a master equation for charge-transfer processes in atom-surface collisions”, *Physical Review B*, 43(4), 2541-2557 (1991).
- [24] Shao, H. X., Langreth, D. C. and Nordlander, P. “Many-body theory for charge-transfer in atom-surface collisions”, *Physical Review B*, 49(19), 13929-13947 (1994).
- [25] Goker, A. “Strongly correlated plexcitonics: Evolution of the Fano resonance in the presence of Kondo correlations”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(17), 11569–11576 (2015).
- [26] Galperin, M., Nitzan, A. and Ratner, M. A. “Inelastic effects in molecular junctions in the Coulomb and Kondo regimes: Nonequilibrium equation-of-motion approach”, *Physical Review B*, 76, 035301 (2007).

- [27] Lang, I. G. and Firsov, Y. A. “Kinetic theory of semiconductors with low mobility”, Soviet Physics-JETP, 16 (5), 1301-1312 (1963).
- [28] Werner, P. and Millis, A. J. “Efficient dynamical mean field simulation of the Holstein-Hubbard model”, Physical Review Letters, 99(14), 146404 (2007).
- [29] Goker, A. “Transient electron dynamics in a vibrating quantum dot in the Kondo regime”, Journal of Physics: Condensed Matter, 23(12), 125302 (2011).
- [30] Goker, A, Zhu, Z. Y., Manchon A. and Schwingenschlogl, U. “Role of the chemical bonding for the time-dependent electron Transport Through an Interacting Quantum Dot”, Chemical Physics Letters, 509 (1-3), 48-50 (2011)
- [31] Goker, A., Zhu, Z. Y., Manchon, A. and Schwingenschlogl, U. “Prediction of Femtosecond Oscillations in the Transient Current of a Quantum Dot in the Kondo Regime”, Physical Review B, 82(16), 161304(R) (2010).
- [32] Izmaylov, A. F., Goker, A., Friedman B. A. and Nordlander, P. “Transient current in a quantum dot subject to a change in coupling to its leads”, Journal of Physics: Condensed Matter, 18 (39), 8995–9006 (2006).

