

## 第一章 概论

### §1.1 介观体系及其特性

宏观体系由大量微观粒子组成，它的动力学性质是大量微观组态的统计平均。微观体系由于尺寸严重受限，能级完全分立，系统的演化原则上完全服从量子薛定谔方程。而介于此二者之间的就是介观系统。粗略地说，介观物质具有宏观上的无穷小和微观上的无穷大的性质。严格来讲，介观体系是指尺寸小于相位相关长度的体系，因此粒子在传播过程中保持相位相干性从而呈现量子相干行为就成为介观体系的主要特点。正是这一量子相干性，导致了介观体系中许多新奇的现象，例如：固体中的弱局域化现象，AB环中的电导振荡，普适电导涨落，介观环中的持续流，等等。

介观体系尺寸由相位相干长度 $L_\phi$ 决定，而 $L_\phi$ 随着温度的下降而增加，所以在极低温下（几个K），介观体系的尺寸可以很大，正常金属可以达到微米量级，半导体则更长。这也是我们在论文后面的计算中采用极低温或零温的重要原因。目前的微加工技术已经能达到纳米尺度，为研究介观系统提供了理想的实验条件，这也是介观物理自80年代以来长盛不衰的重要原因之一。介观体系的另一个重要特征长度是弹性散射平均自由程 $L_m$ ，即粒子经各种缺陷散射后改变动量态所经过的距离。一般来说， $L_\phi \gg L_m$ ，即，粒子在传播过程中发生弹性散射概率要远大于发生非弹性散射的概率。但是对于一些高迁移率低密度的物质，如半导体异质结二维电子气系统， $L_m$ 却很长，可以超过 $10\mu m$ ，达到 $L_\phi$ 的量级，换句话说，这样的体系的尺寸已经达到甚至还要小于体系的弹性散射平均自由程。在这样的系统中，杂质散射可以忽略，样品边界成为影响电流的重要因素。此时，电导和体系沿所加偏压方向的长度无关，因此不再有局域电导的概念。在论文后面几章就集中讨论这样的半导体异质结二维电子气系统。

对介观体系的研究有很多方面，在这里，我们主要研究介观体系的输运性质[1]。即，把介观体系放在由一些金属导线组成的外接电路中，研究粒子（可以是电子，空穴或者自旋等）从一个电极被传输到另一个电极的输运情况。

### §1.2 自旋轨道相互作用

在输运过程中，有两种典型外加场—电场和磁场。另外，在这里我们主要考虑介观输运中的两种典型载流子—电荷和自旋。载流子和外场之间产生相互作用，有以下几种大家熟知的形式：（1）磁场对自旋（即磁矩）产生力矩作用

(塞曼效应)，(2) 电场对电荷产生库仑力作用，或对电极矩产生力矩的作用，(3) 磁场对运动电荷产生洛伦兹力作用。根据电磁场的对称性，应该还有第四种相互作用，即电场和运动的自旋之间的相互作用，也就是我们这一节的内容—自旋轨道相互作用。严格来讲，电场和运动自旋之间的相互作用完全来源于相对论效应，从Dirac方程的非相对论极限[2]，我们可以严格导出自旋轨道耦合在实空间的表达式（本文不作推导）。下面我们仅用浅显易懂的语言粗略阐述[3]自旋轨道相互作用。

作为磁矩，自旋可以看成是距离很小的两个磁荷组成的磁偶极矩，因此在自旋周围会产生非匀强磁场，运动的自旋产生运动的磁场，结合相对运动原理和动生电动势概念，这个运动的非匀强磁场会产生一个附加电场。概括为一句话，运动的自旋产生电场，而这个电场和外电场之间就会发生力矩的作用。另外，从相对运动的角度，我们可以把自旋看成静止的而外电场相对于自旋是运动的，结果运动的电场产生磁场，而这个磁场对磁矩（自旋）产生力矩的作用。总结以上论述，电场对运动的自旋产生力矩作用。由此产生的相互作用势的经典表达式为：

$$V_{SO} = \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{E}) \quad (1-1)$$

其中， $p$ 是粒子动量， $m_e$ 是电子质量， $c$ 是光速， $v$ 指移动的自旋或磁矩的速度， $E$ 是外电场（此外电场只是相对于自旋的外电场，不是加在系统外电路上的偏电压产生的真实的外电场），在这儿 $E$ 可以表达为电势的梯度 $\nabla V(\mathbf{r})/e$ 。因为量子力学的算符一般不具有对易性，公式(1-1)的量子表达式稍微有些不同，表达为：

$$\begin{aligned} V_{SO}(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar}{8m_e^2 c^2} \{ \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot [\mathbf{p} \times \nabla V(\mathbf{r})] - \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}) \} \\ &= \frac{\hbar}{8m_e c^2} \{ \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot [\hat{\mathbf{p}} \times \nabla V(\mathbf{r})] + \nabla V(\mathbf{r}) \cdot (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \hat{\mathbf{p}}) \} \end{aligned} \quad (1-2)$$

其中， $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ 表示自旋 $\frac{1}{2}$ 的泡利矩阵算符， $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ 表示算符化的动量。为表达式简洁起见，在下面的推导过程中，我们统一略去量子算符上方的“ $\hat{\cdot}$ ”标记。如果 $V(\mathbf{r})$ 是球对称的中心势场， $V(\mathbf{r}) = V(r)$ ，上式化为：

$$V_{SO}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} V(r) \mathbf{s} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p})$$

就是我们在原子物理里熟知的Thomas自旋轨道耦合项。但是真实的介观体系中的势场一般都是有对称破缺的，很少有规则的中心球对称势场。在这里我们考虑两种对称破缺，一种是结构对称破缺，另一种是体对称破缺。前一种导致Rashba自旋轨道相互作用，后一种导致Dresselhaus自旋轨道相互作用。下面我们分别描述两种自旋轨道相互作用。

§1.2.1 Rashba自旋轨道相互作用 $V_R$ 

考虑一个由不同材质构成的半导体异质结，由于两种材质的费米能不同，在接触面为了达到相同费米面，电子会从费米能高的材质一边流向费米能低的材质一边，而在远离接触面的地方两种材质仍然保持各自的费米能。这样在接触面处，由于电子的移动形成如图1-1a所示的微电荷积累。正电荷积累导致高电势，负电荷积累形成低电势，在远离结面的地方无电荷积累，电势趋于平稳。 $V(z)$ 分布如图1-1a所示。在图中所示的 $V(z)$ 的低谷处（短横线标记），电子被限制在势阱中，这样电子只能在垂直于界面的 $x-y$ 平面内自由移动，而不能沿 $z$ 方向移动，形成如图1-1b所示的二维电子气系统。在这样的二维电子气中，由于 $z$ 方向严重受限，所以 $\frac{d}{dz}V(\mathbf{r})$ 远大于 $\frac{d}{dx}V(\mathbf{r})$ 和 $\frac{d}{dy}V(\mathbf{r})$ 。这样公式(1-2)变为[4]:

$$\begin{aligned} V_{SO}(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar}{8m_e c^2} \{(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) \cdot \nabla V(\mathbf{r}) + \nabla V(\mathbf{r}) \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p})\} \\ &= \frac{\hbar}{8m_e c^2} \left\{ (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) \cdot \hat{z} \frac{d}{dz} V(z) + \hat{z} \frac{d}{dz} V(z) \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) \right\} \\ &= \frac{\hbar}{4m_e c^2} \left[ \frac{d}{dz} V(z) \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) \right] \end{aligned} \quad (1-3)$$

这儿的 $\hat{z}$ 表示 $z$ 方向的单位矢量。如果 $V(z)$ 不是关于 $z=0$ 镜面对称，则上式的态平均不为零。在二维系统中，只考虑 $p_x, p_y$ 分量，得到二维电子气中的Rashba自旋轨道耦合 $V_{SO}(x, y) = \alpha(x, y)(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x)$ ，其中 $\alpha$ 是耦合系数。

§1.2.2 Dresselhaus自旋轨道相互作用 $V_D$ 

在具有体对称破缺的固体物质中，例如闪锌矿结构[5]，在布里渊区的某些

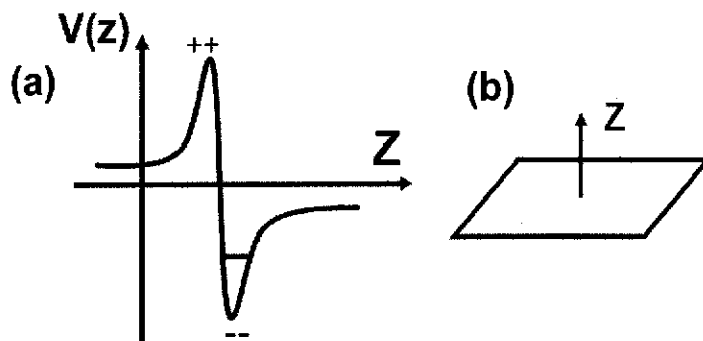


图 1-1 图(a): 半导体异质结垂直结面的电势 $V(z)$ 在结面处为了消除两种不同材质的费米面的不同，发生电荷微移，在结面附近形成微电荷积累，从而导致结面附近电势巨变，而在远离结面的地方，电势趋于平稳。图(b): 二维电子气系统，电子全部被沿 $z$ 方向限制在 $x-y$ 平面内。

对称点，把公式(1-2)按微扰展开，可以得到如下形式的Dresselhaus 自旋轨道耦合：

$$V_D = \beta_0 \mathbf{K}(\mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (1-4)$$

其中，

$$\begin{aligned} K_\mu(\mathbf{p}) &= \sum_{\nu\delta} p_\nu p_\mu p_\nu \epsilon_{\mu\nu\delta} \\ &= p_x (p_y^2 - p_z^2) + p_y (p_z^2 - p_x^2) + p_z (p_x^2 - p_y^2) \end{aligned} \quad (1-5)$$

在二维体系中，忽略带间散射，只考虑和平行于平面分量对应的 $p_x, p_y$ 分量，并把哈密顿展开到 $p_x, p_y$ 的线性项，就可以得到大家熟知的Dresselhaus自旋轨道耦合的哈密顿形式：

$$V_D = -\beta(\sigma_x p_x - \sigma_y p_y) \quad (1-6)$$

其中， $\beta = \beta_0 \langle p_z^2 \rangle$ 。

### §1.3 自旋输运工作的研究现状

1965年，戈登·摩尔（Gordon Moore）在准备一个关于计算机存储器发展趋势的报告时，发现了一个惊人的趋势，即：集成电路芯片上所集成的晶体的数目每18个月翻一番，相应性能确提高一倍，这是著名的摩尔定律。时至今日，晶体管集成度和电子器件在性能和稳定程度上都已达到极限。而自旋完全是量子效应的产物，在量子相干程度及发热规律等方面有着与电子完全不同的性质，所以我们期望研制出利用电子的自旋作为载流子的，能够突破摩尔定律瓶颈的场效应量子器件<sup>1</sup>。广义上的自旋既可以指单个电子的自旋，即磁矩 $g\mu_B s$ 中的自旋，这儿的 $\mu_B$ 是玻尔磁子， $g$ 是电子的朗德因子，注意在固体中电子的朗德因子通常不同于自由电子的朗德因子 $g = 2.0023$ ；此外自旋还可以指大量电子的平均自旋，即物理上的磁化，用物理量磁化率 $\chi$ 来表征。在这儿我们注重的是第二个自旋定义，联系这个定义，自旋输运中有三个主要问题需要解决：（1）如何在实际体系中产生自旋极化，也就是如何进行自旋注入？（2）自旋极化能在多大范围，多长时间内保持住，即如何有效保持自旋极化态？（3）如何探测自旋？下面我们将简单了解目前针对这三个问题的研究现状并简单介绍一些自旋输运在器件方面的实际应用。有关自旋电子学基础及应用的详情可参考综述性文献[6]。

<sup>1</sup>场效应量子器件指用电场或门电压控制流经器件的电流的通与不通，也就是控制器件的开与关。像晶体二极管，三极管等都是典型的场效应器件

### §1.3.1 自旋注入和探测

#### §1.3.1.1. 自旋注入

自旋注入就是要在各种样品中产生非平衡的自旋布居，这儿的自旋不仅指电子的自旋，也可以是空穴，原子核，激子等粒子或准粒子，但是在这篇文章里，我们主要指电子的自旋极化。这可以通过电学[7-9]，光学[10]等方法来实现。存在自旋轨道耦合的介质中的自旋相关散射[11]以及绝热[12]和非绝热[13]的自旋泵效应也可以实现非平衡的自旋分布，此外还可以通过自旋霍尔效应[15-18]产生自旋流。自旋霍尔效应是这篇文章的重点，在后面的章节中会有介绍，因此这儿暂不作介绍。下面我们只简单介绍电学和光学注入的方法。

电学注入是最简单的自旋注入方法，早在1963年，Clark和Feher[7]就利用Feher效应[19]在置于磁场中的砷化铟样品中成功注入自旋。之后Aronov等人[8, 9]建立了从铁磁导体中往正常金属，半导体，超导体等物质中注入自旋的理论。需要注意的是，这里的自旋注入，是注入了自旋极化的电子流，这一点不同于Clark的实验。Aronov指出（图1-2）[9]，当电流从流过铁磁导体—正常金属结面，铁磁导体中的自旋极化电流将使得正常金属中的电流发生磁化，从而导致非平衡的磁化强度 $\delta M$ 或者非平衡的自旋布局。由于自旋驰豫效应， $\delta M$ 在正常导体内扩散最后消失。之后直到1985年Johnson[20]才在实验上首次在铝质体材料中实现了极化电子的自旋注入和测量，1993年又成功地在薄层中注入自旋并进行测量[21]，被称作自旋二极管又叫Johnson自旋晶体管。1999年，Hammer等人[22]成功从铁磁金属向半导体二维电子气中注入自旋，但是由于铁磁和半导体不匹配致使注入效率只有1%。之后通过在铁磁和半导体之间插入绝缘体，注入效率大大提高[23]。

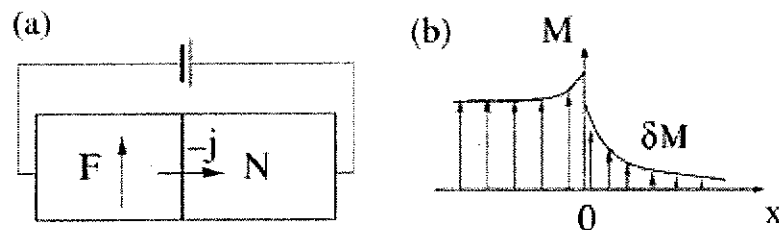


图 1-2 图示说明从铁磁导体向正常导体注入自旋极化流。图(a)：装置示意图，左边为铁磁导体，右边是正常导体，中间箭头标记电流方向。图(b)：磁化强度 $M$ 随空间坐标的变化情况，坐标零点表示铁磁—正常导体的界面处，左边的铁磁导体内磁化强度稳定，而右边正常导体内分布着有铁磁导体导入的非平衡的磁化强度 $\delta M$ ， $\delta M$ 随距界面的距离衰减。

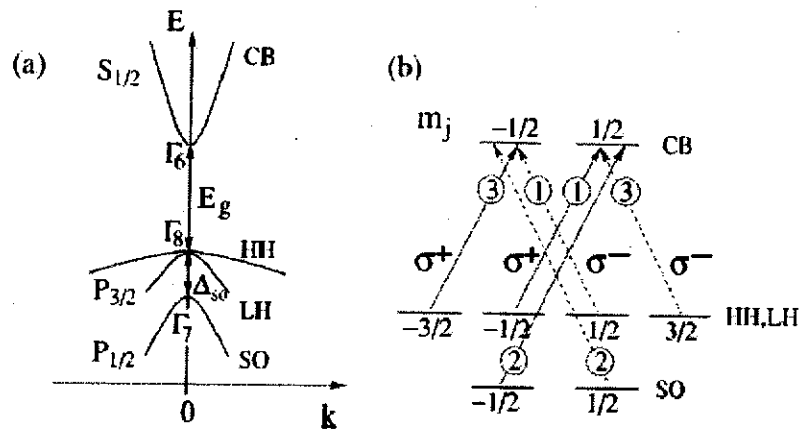


图 1-3 砷化镓带间跃迁的示意图。图(a): 布里渊区 $\Gamma$ 点附近的能带结构示意图。图(b): 光子激发下的服从选择定则的各种由z分量总角动量子数 $m_j$ 标记的 $|m_j\rangle$ 子带间的跃迁。

下面介绍半导体中光学注入的原理及方法。早在1968年, Lampel[24] 就证明了在硅介质中也可以实现自旋的光学注入。这儿我们以砷化镓半导体为例, 用左旋或右旋光子激发价带和导带中电子空穴对, 由于光子带有 $\pm\hbar$ 的角动量, 电子空穴对产生服从选择定则的自旋极化。图1-3是砷化镓带间跃迁的示意图。(a)图是布里渊区 $\Gamma$ 点附近的能带结构示意图,  $E_g$ 表示能隙, CB表示导带, HH是价带重空穴带, LH是价带轻空穴带, SO表示自旋轨道劈裂产生的子带。(b)图是光子激发下的服从选择定则的各种由z分量总角动量子数 $m_j$ 标记的 $|m_j\rangle$ 子带间的跃迁。圆圈中的数字表示跃迁和复合强度。定义自旋极化的电子空穴的存在寿命为 $\tau$ , 只有当极化的自旋的驰豫时间 $\tau_s < \tau$ , 体系才真正实现了自旋注入。通过对光照的圆偏振测量, 可以研究半导体中的非平衡自旋动力学[25], 从而测得像自旋极角, 自旋驰豫时间, 电子空穴复合时间等有用的物理量[10, 26]。

### §1.3.1.2. 自旋探测

自旋探测也是自旋电子学研究的一个重要范畴。自旋探测要求对自旋非平衡布局的改变的反应必须足够灵敏, 所以我们的研究目标就是尽量忠实的记录自旋态的改变, 而不必关心自旋本身。最早的自旋探测是Johnson[20]1985年利用强磁场在铝质体材料中实现的。而更为有效的自旋探测是基于Hanle效应【所谓Hanle效应, 是横向磁场带来无规相位使得纵向自旋积累减小的现象[34]】的自旋探测[14, 35]和基于法拉第效应[36, 37]或者Kerr效应[14, 38]的自旋测量。其中, Hanle效应还是测量自旋退相于时间的一个有力工具, 而Kerr旋转比较适用于测量较厚不容易被穿透的样品或者是长在厚的衬底上的薄样品的自旋积累的时空分布。此外还有光发射二极管测量[39]; 测量通过铁磁-非铁磁界面的自

旋流产生的扭矩[40]; 以及利用自旋轨道作用, 测量由纵向自旋流诱导的横向偏压[41] (逆自旋霍尔效应); 等。有关自旋探测的详细介绍, 见§1.4.2节。

### §1.3.2 自旋驰豫和自旋退相干

在实际的场效应电学器件中, 样品往往都连着外电极, 电流驱动电子以及由大量电子携带的自旋分布形成的非平衡自旋布局进入样品, 在样品中形成非平衡的自旋积累。与此同时自旋驰豫和自旋退相干总是使得非平衡的自旋积累趋于平衡分布即零自旋分布。我们定义自旋驰豫时间和自旋退相干时间分别为 $T_1$ 和 $T_2$ , 其中 $T_1$ 是纵向磁化强度到平衡状态所需的时间, 是自旋分布的热平衡时间。此外, 纵向磁场引起自旋拉曼进动, 而 $T_2$ 就是自旋的横向进动分量丢失相位的时间。 $T_1$ 和 $T_2$ 最初来自于研究置于由沿 $z$ 方向的稳恒磁场和 $x, y$ 方向的周期磁场[27, 28]组成的外磁场 $\mathbf{B}(t) = B_0\hat{z} + \mathbf{B}_1(t)$ 中的磁矩的进动, 衰减, 扩散的磁矩动力学Bloch-Torrey方程: [27, 29]

$$\begin{aligned}\frac{\partial M_x}{\partial t} &= \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{B})_x - \frac{M_x}{T_2} + D\nabla^2 M_x \\ \frac{\partial M_y}{\partial t} &= \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{B})_y - \frac{M_y}{T_2} + D\nabla^2 M_y \\ \frac{\partial M_z}{\partial t} &= \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{B})_z - \frac{M_z - M_z^0}{T_1} + D\nabla^2 M_z\end{aligned}\quad (1-7)$$

其中 $\gamma = \mu_B g / \hbar$ 是电子的回旋频率,  $D$ 是扩散系数,  $M_z^0 = \chi B_0$ 是热平衡的磁化强度, 其中 $\chi$ 是磁化系数。对于由大量具有动力学性质的电子组成的系统,  $T_1$ 和 $T_2$ 指的是处于不同动量态的大量电子的平均自旋。通常我们把 $T_1$ 和 $T_2$ 统称为自旋驰豫时间 $\tau_s$ , 标记自旋恢复平衡的时间。在自旋产生的过程中, 积累与驰豫互相竞争, 只有当积累率大于驰豫率时, 自旋积累才能被实际应用于输运系统, 但是在一些需要进行快速切换的器件中, 反而需要短自旋驰豫时间。当积累和驰豫达到平衡, 自旋积累或者说净磁矩也就达到了稳恒状态。

物理上的自旋驰豫机制主要有(1)Eilott-Yafet自旋驰豫[30]: 由于离子实引入的自旋轨道相互作用, 固定自旋的电子波函数中有相反自旋的混合成分, 导致自旋驰豫; (2)D'yakonov-Perel自旋驰豫[31]: 在对称破缺的固体中, 自旋轨道耦合使得电子感受到和自旋相关的势场, 引起无规动量散射, 导致自旋驰豫; (3)Bir-Aronov-Pikus自旋驰豫[32]: p型掺杂半导体中, 电子空穴交换作用产生局域磁场振荡, 导致电子自旋翻转; (4)超精细相互作用自旋驰豫[33]。典型的自旋驰豫时间为纳秒量级, 但是不同体系的自旋时间又有很大差别, 范围从皮秒到微秒不等, 一般在金属和半导体中自旋驰豫时间比较长。

### §1.3.3 自旋输运的典型应用

研究自旋输运的目的就是为了实际应用。迄今为止，已经有不少关于自旋输运实际运用典范，比如像自旋阀[42]，自旋过滤[43]，自旋二极管[44]，自旋场效应晶体管，[45] 磁致双极晶体管[46]，热电子自旋晶体管[47]，自旋比特门[48]等。

#### §1.3.3.1. 自旋场效应晶体管

最典型的自旋器件是Datta和Das于1990年提出的自旋场效应管[45]，示意图见图1-4。自旋场效应管结构包括由铁磁导线构成的源电极和漏电极（1-4中标记有黑色箭头的区域），电流从源电极导入被极化，通过控制铁磁导线的磁化方向可以保证自旋的极化方向沿着流的传输方向，接着，极化电流弹道式地通过中间狭窄的弹道区，到达右边的漏电极。如果自旋在到达漏电极时仍保持原来的极化方向（图中中间区靠上面的自旋示意图），则此极化电流可以很容易地流入漏电极，那么此时场效应管处于开启状态；相反，如果自旋在进入漏电极之前正好进动到和初状态相反的方向（图中中间区靠下面的自旋示意图），则此极化电流就不容易进入漏电极，此时场效应管处于关闭状态。由于中间的弹道区存在自旋轨道耦合，门电压可以通过电压调节来调制中间区自旋轨道耦合强度，从而改变自旋进动频率，使得在弹道区初末态的自旋可以自由地达到平行或反平行。因此，调节门电压，即可控制自旋场效应管中自旋流的开和关。这一点和普通的电学场效应管用门电压来控制电流的开与关的思想类似，但是原理完全不同。值得一提的是，尽管早在1990年就有了概念，Datta的自旋场效应管至今仍

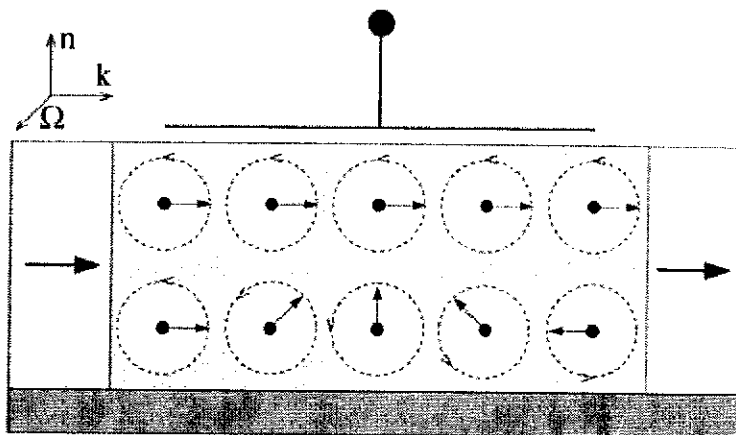


图 1-4 自旋场效应管结构示意图。左右标记有黑色箭头的是源电极和漏电极，两电极之间是狭窄的存在自旋轨道耦合的弹道区，通过门电压可以控制自旋轨道耦合的强度。

然没有实现。原因是多方面的，其中有最重要的两点：（1）自旋注入是非平庸的（nontrivial）；（2）自旋旋转进动频率不够大，以至于在经过弹道区期间还不能完成半个周期进动。

### §1.3.3.2. 自旋阀

而应用最成功的典范是巨磁阻（Giant Magnetoresistance简称GMR）效应。人们在很早的时候就发现了铁磁介质中各向异性的磁阻，但是各向异性的差别只有百分之几，根本无法应用于实际器件，直到1988年，Grünberg和Fert[49]才发现，在磁介质与非磁介质交替排列的模式下，各向异性的磁阻的差别大大提高（可达50%）。当位于非磁介质两边的磁介质的磁化方向相反时，体系的磁阻达到极大，而当两磁介质磁化方向相同时，自旋极化方向和磁介质磁化方向相同的电子感受到极小的电阻，这就是巨磁阻效应。如图1-5a所示[50]，磁介质—非磁介质—磁介质的结构中，当两边磁介质的磁化方向平行时，由于几乎没有自旋相关的散射，左边完全极化（即极化率 $P = (n_{\uparrow} - \downarrow) / (n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) = 100\%$ ，在这儿为了说明问题我们特设100%的极化率，这只是一种理想情况，实际磁性物质的极化率都没有达到100%）的铁磁中的多子（自旋向下的电子）几乎无阻碍地经非磁介质到达右边的铁磁介质，整个过程畅通无阻，这是低电阻情况。在这种情况下，铁磁中的少子（自旋向上的电子）在铁磁费米面的态密度接近零，因此对输运几乎没贡献。而当两边磁化方向反平行，由于右边磁介质中自旋向下的电子的态密度几乎为零，而左边自旋向下的电子到达中间的非磁介质后，又受到很多自旋相关

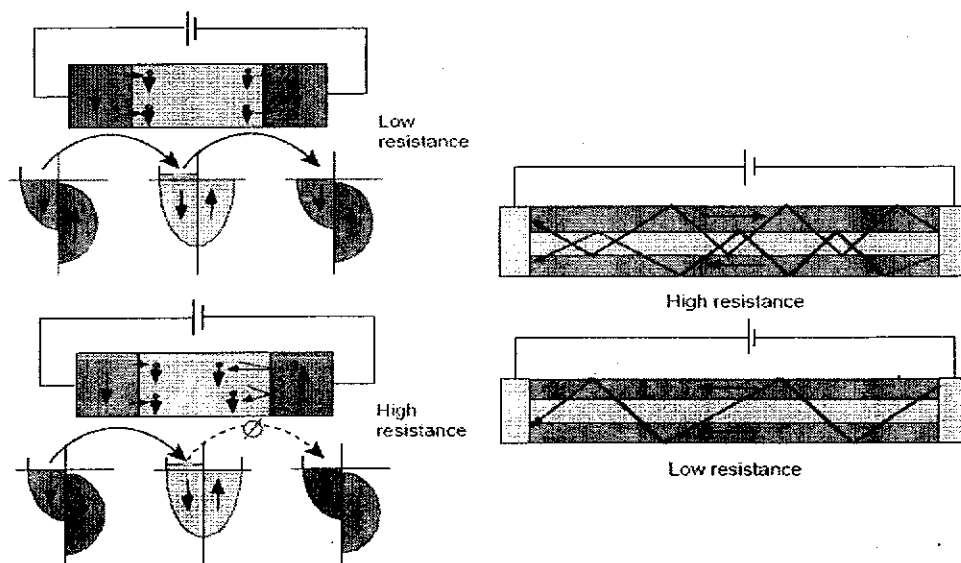


图 1-5 图(a): 巨磁阻原理示意图。图(b): 实际应用中巨磁阻原理示意图。

的散射，根本无法隧穿到达右边的磁介质，这样就导致整个过程的高电阻。由于图1-5a (the structure of current in plane, 简称CIP结构) 的结构中，沿电流方向的电阻很小，在实际应用中往往采用1-5b所示[50]的结构 (the structure of current perpendicular to the plane, 简称CPP结构)。和CIP结构类似，在CPP结构中，两边磁介质磁化方向反平行时，电子受到(磁介质-非磁介质)界面散射，传输通道变窄，导致高电阻。而当两边磁化方向平行时，没有(磁介质-非磁介质)界面散射，传输通道比较宽，导致低电阻。实际应用中，往往把两个铁磁层中的一个做成硬磁层(磁化方向很难翻转)，另一个铁磁层做成软磁层(磁化方向很容易翻转)，这样就构成了由外电流通过软磁层来控制自旋的自旋阀。

时至今日，以自旋阀为应用基础的磁头和磁存储器件已经成功地实现工业化生产。磁存储是利用每个存储点上的磁场方向代表二进制的0或1，每个存储点就是一个磁畴，磁畴的交界处有磁壁，磁壁厚度从100—1000Å不等，视具体材料而定，而磁头就是用来读出这些0或1。如图1-5a所示[50]，磁头(图中夹在电流中间的绿色区域)由巨磁阻结构的自旋阀构成，其中软磁层的磁化方向和存储区的磁介质平面平行，而硬磁层磁化方向和平面垂直(图中未标出)。当磁头扫过由各个磁畴时，磁畴产生的磁场使得巨磁阻中的软磁层的磁化方向向上或向下偏转，由于巨磁阻效应，通过自旋阀的电流发生变化，电流的大小直接代表存储区的0或1。而在图1-5b中[50]，磁存储器件由一个一个的自旋阀结构(图中的“Sense line”标记区)和位于上下方并分别与之垂直或平行的电极(图中的“Bit line”和“Word line”标记区)组成。垂直交叉的电极分别从互相垂直的方向平行扫过“Sense line”标记区，通过分别控制通过两电极的电流可以控制“Sense line”区每个存储点的硬磁层或软磁层的磁化方向，记录0或1，完成磁存储。选择改变硬磁层还是改变软磁层的磁化方向是根据不同需要，比如节能或降低成本等因素来决定的。如果软磁层来存储0或1，在读取得过程中，会破坏原来的存储状态，必须有一个读取后回复的过程。而如果0或1存储在硬磁层，可以通

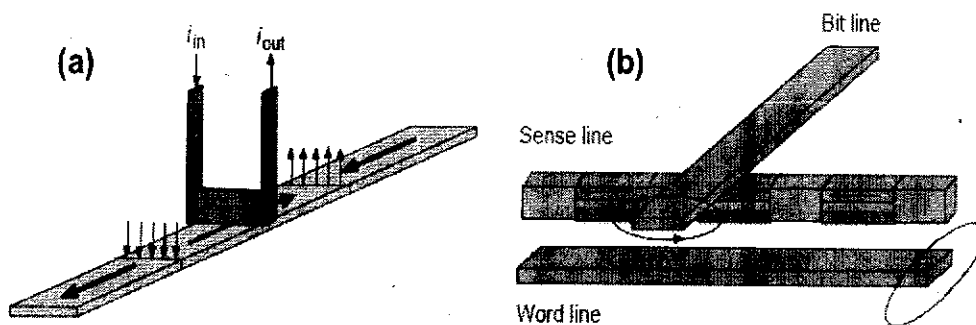


图 1-6 图(a): 读出性磁头原理示意图。图(b): 磁存储器原理示意图。

过控制软磁层磁化方向来读取，而不破坏原来的存储状态。反过来，完成磁存储的Sense line”区中每个存储点上的相对磁化方向又会影响电极和存储点组成的回路上的电流，通过此电流即可读出存储点上的0或1。

### §1.4 自旋霍尔效应的研究现状

自旋电子学涉及多个领域的诸多内容，实非一篇论文所能穷尽。在这篇论文中我们只挑选一个子领域：自旋霍尔效应，来作重点介绍。简单地说自旋霍尔效应指二维体系中，纵向电流诱导横向自旋流或者在开路情况下导致横向自旋极化电压的现象。

自旋霍尔效应中之所以有自旋霍尔电流或自旋霍尔电势，归根究底是因为自旋向上的电子和自旋向下的电子虽然在纵向偏压的驱动下都朝纵向向前的方向运动，但是在自旋相关的偏转机制的作用下，它们朝横向相反的方向偏转，在开路系统中，一个横向边缘积累向上的自旋，而在相对的另一边横向边缘积累向下的自旋（图1-7b），导致自旋向上的电子的费米能沿 $y$ 方向降落 $\delta V$ ，而自旋向下的电子的费米能沿 $y$ 方向升高 $\delta V$ ，产生自旋霍尔电压 $V_{sH} = \delta V$ 。这种自旋压导致闭路系统中的自旋霍尔电流。相反，在量子霍尔效应中，运动的电子，不管是自旋向上的电子还是自旋向下的电子都是带一个单位的负电荷，感受到一样的洛伦兹力，自然也超一个方向偏转（图1-7a），在两横向边缘形成符号相反的电荷积累，产生霍尔电压 $V_H$ ，在闭路系统中形成霍尔电流。

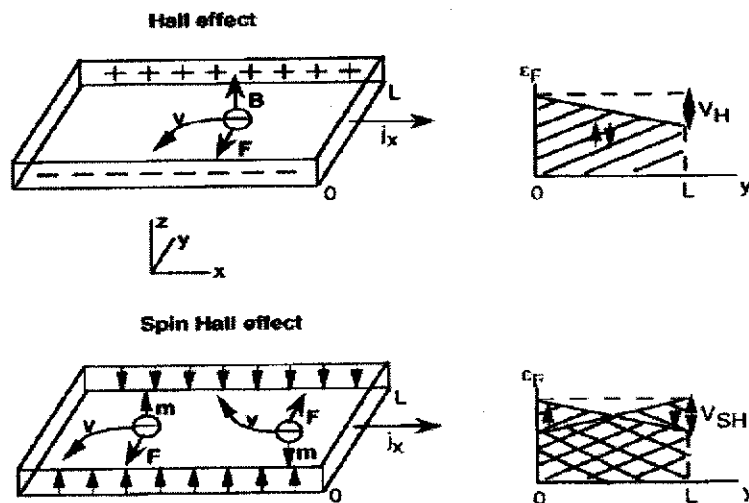


图 1-7 霍尔效应和自旋霍尔效应中载流子运动示意图。霍尔效应中，洛伦兹力使水平运动的电荷发生偏转，在两边界形成非平衡的电荷分布，从而产生霍尔电压 $V_H$ ；自旋霍尔效应中，运动的磁矩（自旋）在一些自旋相关的偏转机制作用下向两侧边偏转，磁矩相反，偏转方向也相反，两侧边由此产生非平衡的自旋积累，产生自旋霍尔电压 $V_{sH}$ 。

自旋霍尔效应分内在自旋霍尔效应和外自旋霍尔效应。外自旋霍尔效应一般认为是源于由自旋轨道耦合引起的自旋相关势散射（比如斜角散射[51, 52]）或磁性杂质散射，这样的散射对于自旋向上的电子和自旋向下的电子是不对称的，对自旋向上的电子，左旋散射发生的几率较大，而对自旋向下的电子，右旋散射发生的几率较大。另外，在半导体异质结形成的二维电子气中，由体系对称破缺引起Rashba[4]或者Dresselhaus[5]自旋轨道耦合，在这样的体系中，当通入纵向电流，在没有任何外磁场及磁性介质的情况下，由于具有特殊的Bloch能带结构，体系产生纯的无耗散的横向自旋流，这被称作内在自旋霍尔效应。下面我们重点介绍内在自旋霍尔效应的起源。

### §1.4.1 自旋霍尔效应的起源

存在自旋轨道耦合的二维自由电子气哈密顿表达为：

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \alpha \hat{z}) = \frac{p^2}{2m^*} + (\sigma_x \alpha p_y - \sigma_y \alpha p_x) \quad (1-8)$$

其中第一项是动能项，第二项是自旋轨道耦合项， $\alpha$ 表示自旋轨道耦合强度，在实验上， $\alpha$ 大概为 $10^{-11} \text{ eV}/\hbar$ 的量级，并且可以通过门电压调节，调节幅度最高可达50% [53]。为了简单有效的说明问题，我们假设体系的势能项为常数并设为零。自旋轨道耦合项的作用相当于一个有效磁场对磁矩的力矩作用，从方程(1-8)可以看出，有效磁场 $B' = 2\alpha(\mathbf{p} \times \alpha \hat{z})$ 的大小和自旋轨道耦合强度成正比，还和动量 $\mathbf{p}$ 有关。在泡利矩阵空间，哈密顿写作：

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) & \alpha \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ -\alpha \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) & -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \end{pmatrix} \quad (1-9)$$

解薛定额方程，得到体系的本征波函数及色散关系。

本征波函数：

$$\Phi_{k_s}(\mathbf{r}) = N_{k_s} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} i s \left( \frac{k_x}{k} - i \frac{k_y}{k} \right) \\ 1 \end{pmatrix}$$

其中 $N_{k_s}$ 是归一化常数。注意，尽管由于自旋轨道耦合，体系的能带发生劈裂，但仍然是自旋简并的。

色散关系：

$$E_{k_s} = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m^*} [(k + s k_R)^2 - k_R^2] \quad (1-10)$$

图1-8a中给出方程(1-10)中 $k_x$ 方向的色散关系图，不同于图1-8b中所示的塞曼劈裂的色散关系，自旋轨道耦合导致抛物线型的自由电子的色散关系发生自旋劈裂，沿 $k_x$ 方向分离成自旋劈裂的两支，而塞曼磁场则导致自旋正负的能带上移及下移。这两种自旋劈裂有本质的区别：第一，Rashba自旋轨道耦合不破坏体系的时

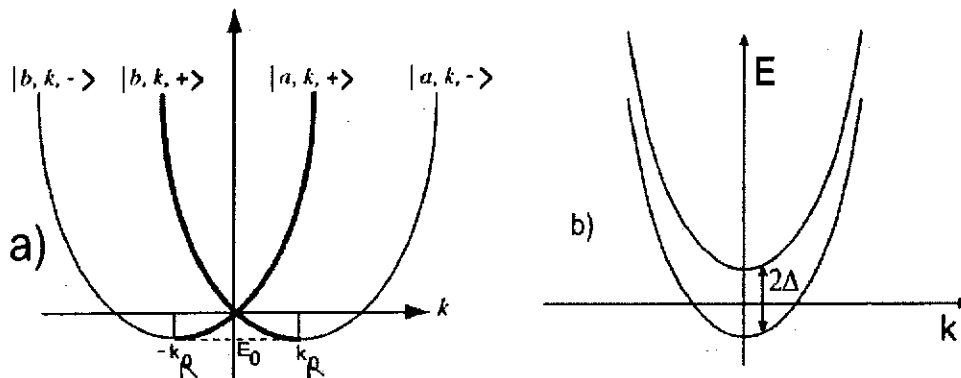


图 1-8 存在Rashba自旋轨道耦合体系和塞曼劈裂体系 $p_x$ 方向的色散关系图。其中图(a)中态指标a表示电子的群速度大于零，态指标b表示电子的群速度小于零，态指标k标记动量态，而±是标记Rashba劈裂的自旋指标，图中粗黑线代表“+”支，细黑线代表“-”支。

间反演对称，体系保持Kramers二重简并，而塞曼劈裂由磁场引起，磁场破坏体系的时间反演不便性，体系因此不存在Kramers简并；第二，在平衡状态，自旋轨道耦合体系自旋处处不极化，而塞曼劈裂体系在平衡状态通常引起自旋极化。自旋轨道耦合体系的色散关系在动量空间的立体图和投影图如图1-9a所示，根据哈密顿(1-8)，自旋轨道耦合导致和自旋（沿图1-9a所示角方向）平行或者反平行的方向的有效磁场，当体系处于平衡状态（外电场 $E_x=0$ ）时，由于体系的整体动量平均为零，导致有效磁场的平均效果也为零，磁矩不受力矩作用。但是当外电场 $E_x$ 不为零时，电子在 $x$ 方向被整体加速，经过一些散射作用，最后达到一个稳定的漂移速度（或者说一个整体动量 $p_x$ ）。此时，有效磁场只有 $B'_y$ 的分量，根据Bloch方程，它直接导致自旋向 $z$ 方向偏离，并且当 $p_y > 0$ 时，自旋向 $+z$ 方向偏离，当 $p_y < 0$ 时，向 $-z$ 方向偏离（图1-9b）。换句话说， $p_y > 0$ 时，向上的自旋受

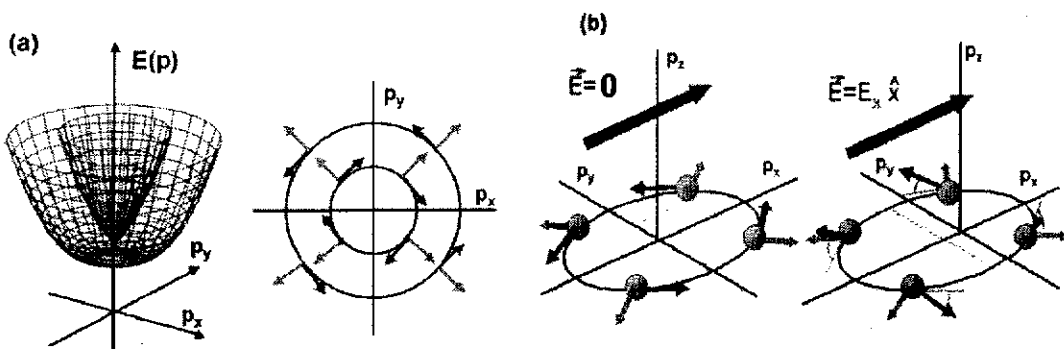


图 1-9 内自旋霍尔效应原理图。图(a)：存在Rashba自旋轨道耦合体系的色散关系在动量 $k$ 空间的立体图及投影图，图中径向方向的箭头是动量 $k$ 的方向，角方向的箭头标记自旋的方向，并且自旋正和自旋负支的自旋方向是相反的。图(b)：不加外电场的平衡状态以及加上外电场的非平衡状态的比较。

两个子带

到力矩作用发生偏转（向一侧），而 $p_y < 0$ 时，向下的自旋受到力矩作用发生偏转（向另一侧）。总结为一句话，内在自旋霍尔效应源于外电场作用下自旋感受到的有效磁场从平衡态到非平衡态的变化。

### §1.4.2 自旋霍尔效应实验

尽管早在三十多年前就有人预言了自旋霍尔效应的存在[54]，但是直到最近几年才在实验上[15-17, 41, 55]真正观测到自旋霍尔效应。在这些实验中，全部都测到了电流驱动产生的横向自旋流或者自旋积累，但是产生自旋霍尔效应的手段及测量自旋积累得方法却各不相同：有在n型半导体[15, 17, 55-59]中，也有在p型半导体[16]中，还有在金属铝[41]中探测自旋霍尔效应的；有直接探测[15-17, 56-58]，也有通过探测逆自旋霍尔产生的电流来间接探测[41, 55, 59]自旋积累（或自旋流）的；有通过磁场[15, 17, 56-58]，也有通过电场[41]，还有通过光学手段[16, 55, 59]来达到测量目的的。

实验[16]采用共面的p-n结光发射二极管装置。p型砷化铝镓-砷化镓-n型砷化铝镓相间的结构形成两个结面处的二维电子气（2DEG）和二维空穴气体（2DHG）以及LED偏压作用下在阶梯形界面处形成的PIN结构共面二极管，剖面如图1-10a所示，二极管中的电子从2DEG流向2DHG，电子并在空穴对在2DHG的阶梯形边界附近复合并放出圆偏振光子，测得的光子偏振方向就代表空穴气体中沿x方向的一个边界附近的沿z方向的自旋极化。另一个边界的自旋积累同理可测。测量发现在纵向电流 $J_x$ 驱动下，两个边界的自旋积累相反，并且电流反向，极化方向也反向。通过计算证明此装置中的杂质效应非常小，表明实验测到的是干净的，没有自旋相关散射的内在自旋霍尔效应。

和实验[16]不同，在实验[15, 17, 56, 57]中，（n-GaAs/n-InGaAs）n型半导体异质结构成二维电子气体体系。如图1-10b所示，在沿y方向的外电场驱动下，由于自旋轨道相互作用，体系产生沿x方向流动，极化方向和二维平面垂直的体自旋流，由于没有外电路连通，此自旋流在样品边缘形成图1-10b中左图所示的自旋积累。图1-10b中右图中反射系数的极小（边上的两条黑线）正好标记出样品边缘的位置。实验基于Hanle效应（纵向磁场引起横向自旋进动和退相干），用Kerr旋转分光镜（Kerr rotation spectroscopy）测得Kerr旋转角随外磁场的变化曲线，曲线呈洛伦兹分布，拟合得到洛伦兹函数 $A/[(\omega_L \tau_s)^2 + 1]$ （其中 $\omega_L = g\mu_B B/\hbar$ ），从而确定自旋极化的强度A和自旋相干时间 $\tau_s$ 。实验[15]分别测量了没有拉伸的和有拉伸的InGaAs/GaAs异质结面的自旋积累，对比发现自旋积累受拉伸的影响，并且和拉伸的方向有微弱的依赖关系，这说明实验[15]中测

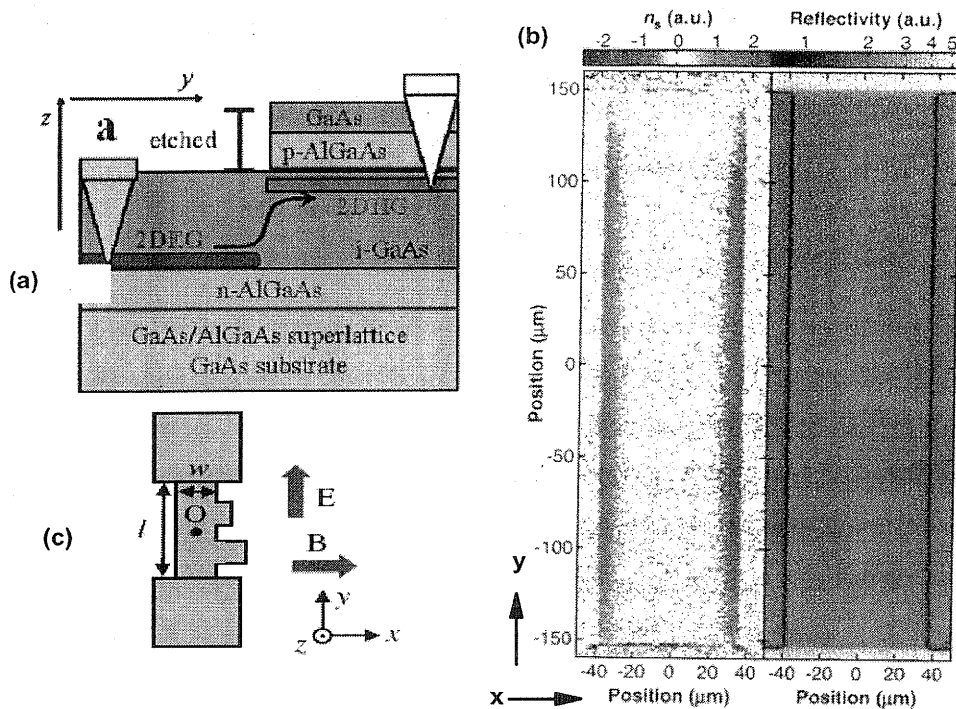


图 1-10 图(a): 共面的p-n结光发射二极管装置示意图。图(b): n型半导体中由自旋霍尔效应导致的横向自旋积累。图(c): n型半导体中, 增加了横向自旋流通道, 旨在区分边界限制势造成的自旋积累和山自旋霍尔效应导致的自旋积累。

到的是外在自旋霍尔效应。实验[17]发现上述体系的横向自旋积累对驱动电流的方向（此电流方向指电流沿着的晶体的某个晶向，不是指沿着实验室坐标的方向）有强烈的依赖关系，充分证明自旋轨道耦合是各向异性的，这为量子调控自旋积累创造了有利条件。在实验[56]中，增加了横向通道（图1-10c），测得自旋积累在左侧边缘总是极大，而在右侧突出来的边缘并不是总是达到极大，说明实验中的自旋积累确实来源于自旋霍尔效应，而不是源于由Bychkov-Rashba效应带来的边界自旋劈裂[4]。此外，实验[56]在II-VI族n型砷化锌半导体中测到沿平面方向体自旋极化，以及极化方向垂直于平面的横向自旋积累。值得一提的是，由于II-VI族半导体带隙较宽，自旋相干时间较长，以上平面内的以及垂直于平面的自旋极化都可以在室温下观测到。

自旋轨道耦合使得自旋相反的电子的偏转方向也相反，这导致了朝一个方向注入的自旋相反的电子在横向的偏转方向相反，从而产生自旋积累，这是自旋霍尔效应。那么如果自旋相反的电子朝相反的方向注入（注入自旋流），自旋轨道耦合同样使得自旋相反的电子偏转方向（左旋或者右旋）也相反，这却导致自旋相反的电子向着同一个边缘积累（图1-11），产生电荷积累，这就是逆自旋霍

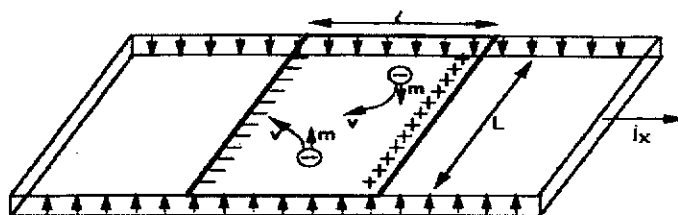


图 1-11 逆自旋霍尔效应示意图

尔效应。实验[41, 55, 59]正是利用逆自旋霍尔效应现象，通过测横向霍尔电压或霍尔电流来间接证明体系中的确存在自旋霍尔效应。实验[41]用铁磁导体向金属铝中注入自旋流，测得横向霍尔电压正比于注入的自旋流。而实验[55, 59]则是通过往样品中垂直打入圆偏振光子，产生瞬时自旋流，测得横向霍尔电流。

至今，对自旋积累的测量技术仍然很不成熟，上面涉及到的测量方法以及§1.3.1.2.中提到的方法无不繁琐复杂，所用的测量设备无不精密微妙。这些测量需要强激光，磁场，铁磁导体，自旋轨道作用等有可能破坏原有的自旋积累的媒介，所以这些测量手段都不是很实用。因此，建立一套简单方便，行之有效的自旋测量方法，势在必行。这也是我们在第七章之所以研究如何简单有效地利用电学的方法测量自旋流的重要原因。

### §1.4.3 自旋霍尔效应的理论研究

2003年，Murakami等人[60]和Sinova等人[61]分别预言了Luttinger自旋轨道耦合的p型半导体和n型半导体异质结二维电子气中的内在自旋霍尔效应。他们指出，由自旋霍尔效应产生的自旋流不同于传统的自旋极化输运流，也不同于基于自旋相关散射的外在自旋霍尔效应（一般情况，体系既有内在自旋霍尔效应，也有外在自旋霍尔效应，但是外在自旋霍尔效应很弱，比内在自旋霍尔效应小大概二到三个数量级）。首先，这儿的自旋流不是源于费米面附近的载流子分布，而完全是由体系特殊的Bloch态引起的，体现的是体系平衡态的性质；其次，由于完全不涉及磁场、磁介质等磁性媒介，自旋轨道耦合又完全不破坏体系的时间反演对称性，因此由电场（时间反演对称）引起的自旋流（时间反演对称）具有时间可逆性，即这样的自旋流是无耗散的。在文献[61]所研究的无限大体系中，当自旋劈裂的两个子能带都被占据时，自旋霍尔电导甚至是和自旋轨道耦合强度以及体系费米能等参数无关的常数 $e/8\pi$ 。基于这些无可争辩的优点，内在自旋霍尔效应又是自旋注入的绝佳候选，同时也成为近几年有关自旋霍尔效应方面理论研究的焦点。其中大量研究集中在非磁性杂质对自旋霍尔效应的影响[62, 63]，磁场对自旋霍尔效应的影响[64-66]以及自旋流定义[67-69]方面。此外理论方面还研究了自

旋霍尔电导的普适涨落[70], 极化方向和体系平面平行的自旋霍尔电导[71]以及自旋霍尔绝缘体[72]。

#### §1.4.3.1. 杂质及磁场作用下的自旋霍尔效应

以上有关自旋流定义的争议, 有一个共同的前提: 自旋不守恒。只要我们在自旋守恒的体系中求解自旋流, 自然就不存在自旋流定义的混淆。可以肯定, 在四端口外接电路的有限大体系中, 只要用来测量自旋霍尔效应的横向电极不存在自旋轨道耦合, 自旋霍尔效应就毫无争议, 这篇论文研究的就是这种自旋霍尔效应。在这种体系里, 自旋霍尔电导不是普适的常数, 它依赖于自旋轨道耦合强度以及体系费米能等参数。

真实的体系总是有杂质存在, 杂质散射不可避免。在有限大的量子相干体系中, 杂质散射导致安德森定域化, 随着杂质浓度的增强, 体系从弹道导体过渡到金属扩散区直到最后变成绝缘体。在存在自旋轨道耦合的体系, 仍然存在金属绝缘体转变的杂质浓度临界点[62], 而且在杂质散射不太强烈的金属区, 自旋霍尔效应仍然存在[63]。此外, 对于无限大体系, 自旋霍尔效应对杂质非常敏感, 很小的杂质散射都足以破坏自旋霍尔效应[73]。

当体系置于垂直的外磁场中, 垂直磁场产生等间隔分布的朗道能级, 并且间隔只与垂直磁场有关。在有限大的体系中, 由于边界势的影响, 朗道能级在边缘处抬升, 形成边缘态。而体系中的自旋轨道耦合使得自旋退简并, 并且破坏原来等间隔分布的朗道能级, 使得劈裂的朗道能级重新分布, 此分布却是和自旋轨道耦合有关。Qiao等人[64]研究了在垂直外磁场作用下的存在自旋轨道耦合以及杂质散射的有限大的二维电子气体体系的自旋霍尔电导的低磁场相图, 发现随着杂质浓度的提高, 边缘态被破坏, 体系从整数型的自旋霍尔电导区, 进入自旋霍尔液体区(自旋霍尔电导及其涨落都不为零), 混沌区(自旋霍尔电导为零, 但是它的涨落不为零), 最后进入自旋霍尔绝缘区(自旋霍尔电导及其涨落都为零)。此外, Shen等人[65, 66]也研究了无限大二维电子气系统, 发现如果不考虑边界效应[65], 没有边缘态, 只有塞曼效应和自旋轨道耦合互相竞争, 引起能级简并, 当入射电子的费米能刚好等于此简并能量时, 自旋霍尔电导达到共振极大, 而霍尔电导却不受影响。考虑边界效应时[66], 受边缘态影响, 横向自旋极化和自旋霍尔电流都只出现在边界附近。

### §1.5 论文的主要内容

从第二章开始, 介绍我们自己在自旋输运方面的工作, 包括二维电子气中的自旋霍尔效应, 自旋积累, 以及对自旋测量的构想。其中重点介绍的是自旋霍

尔方面的工作。另外，论文也介绍了少量作者在博士期间的其它工作。

第二章，我们从非平衡格林函数出发，利用Dyson方程及Keldysh方程，推导出格林函数表达的普遍电流公式。利用此公式得出大家熟知的零温，线性近似下的推广了的Landauer-Büttiker公式，此公式可以用来计算有多个外电极连接的介观系统的电流及自旋流。此外我们也推导了一般的交流体系的电流公式。

接下来利用Landauer-Büttiker公式具体计算了几个四端口的霍尔体系，并得出了一系列有意义的结论。具体如下：从§1.4.1节我们了解到，（内在）自旋霍尔效应源于外电场作用下自旋感受到的和动量有关的沿二维平面有效磁场对自旋产生的力矩的作用。这种有效磁场不会破坏体系的时间反演不变性，完全不同于在量子霍尔效应中的真实的磁场，因此自旋霍尔效应和量子霍尔效应一定有本质的不同。在第三章里，我们比较并讨论了二者之间本质的区别[74]：发现在量子霍尔效应中起作用的是边缘态，而在自旋霍尔效应中，扩展态对输运起主导作用。此外，我们知道无自旋极化的纵向电流可以驱动产生沿不同方向极化的横向自旋流，而在第四章中，我们发现沿任意方向极化的纵向自旋流也能产生横向自旋流，并且此自旋流也可以沿任意方向极化[75]。众所周知，在量子霍尔效应中，垂直磁场能有效抵御静态杂质散射，使得霍尔平台即使在体系受到一定量杂质散射时仍能保持。然而真实体系中往往不仅有静态杂质散射还存在有内部自由度的其它杂质散射（比如磁性杂质或者晶格震动），这种杂质破坏体系的位相相干性。霍尔体系的垂直磁场能抵御这种退相干作用吗？当体系存在自旋轨道耦合时，退相干作用又会对体系产生什么影响？通过第五章的讨论，我们得出结论：二维体系中的垂直磁场可以有效抵御退相干，但是自旋轨道耦合却降低垂直磁场的抵御能力[76]。

存在自旋轨道耦合作用的二维体系中的横向自旋积累有多种导致因素，在第六章，我们提出即使体系不存在对称破缺，单纯由限制势导致的自旋轨道耦合也可以在样品两边界引起的符号相反的自旋积累[77]，并且此积累和实验[60]上测到的自旋积累符合的非常好。

如§1.4.2节中所述，现有的自旋测量方法都非常的复杂繁琐，技术上也难以普及，在第七章中，我们通过量子点接触系统[78]和双量子点[79]不依赖磁性介质，不加外磁场，甚至不需要自旋轨道耦合，只是纯粹用电学的方法，简单有效的实现自旋流探测。所用的双量子点装置以及量子点接触装置都是在现有的实验条件非常普及的装置，因此这样的探测廉价可行。

第八章是一些和自旋无关的其他工作，介绍正常—量子点—超导体在打开或关闭电压时，电流的开关响应时间[80]。最后一章是整篇论文的总结。

## 参考文献

- [1] L. L. Sohn, L. P. Kouwenhoven, and G. Schön, *Mesoscopic Electron Transport*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, (1997).
- [2] J. D. Bjorken and S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics* McGraw-Hill, New York, (1965).
- [3] Q.-F. Sun, J. Wang, and H. Guo, *Quantum transport theory for nanostructures with Rashba spin-orbital interaction*, Phys. Rev. B, **71**, 165310-165320 (1965).
- [4] E. I. Rashba, Fiz. Tverd. Tela (Leningrad), **2**, 1224 (1960) [Sov. Phys. Solid State **2**, 1109 (1960)]; Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, *Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers*, J. Phys. C **17**, 6039-6045 (1984).
- [5] G. Dresselhaus, *Spin-orbit coupling effects in Zinc Blende structure*, Phys. Rev., **100**, 580-586 (1955).
- [6] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Spintronics: Fundamentals and applications*, Rev. Mod. Phys., **76**, 323-410 (2004).
- [7] W. G. Clark, and G. Feher, *Nuclear polarization in InSb by a dc current*, Phys. Rev. Lett. **10**, 134-138 (1963).
- [8] A. G. Aronov, *Spin injection and polarization of excitations and nuclei in superconductors*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **71**, 370-376 (1976) [Sov. Phys. JETP **44**, 193 - 196 (1976)]; A. G. Aronov, and G. E. Pikus, *Spin injection into semiconductors*, Fiz. Tekh. Poluprovodn. (S.-Peterburg) **10**, 1177-1180 (1976) [Sov. Phys. Semicond **10**, 698-700 (1976)].
- [9] A. G. Aronov, *Spin injection in metals and polarization of nuclei*, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **24**, 37-39 (1976) [JETP Lett. **24**, 32 - 34 (1976)].
- [10] F. Meier, and B. P. Zakharchenya, Eds., *Optical Orientation*, North-Holland, New York, (1984).
- [11] N. F. Mott, and H. S. W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions*, 3rd ed. Clarendon, Oxford, (1965); J. Kessler, *Polarized Electrons*, Springer, New York, (1976); L. S. Levitov, Y. V. Nazarov, and G. M. Éliashberg, *Magnetoelectric effects in conductors with mirror isomer symmetry*, Zh. Eksp. Teor. Fiz., **88**, 229-236 (1984) [Sov. Phys. JETP **61**, 133-137 (1973)].
- [12] E. R. Mucciolo, C. Chamon, and C. M. Marcus, *An adiabatic quantum pump of spin polarized current*, Phys. Rev. Lett., **89**, 146802-146805 (2002); P. Sharma, and C.

- Chamon, *Adiabatic charge and spin transport in interacting quantum wires*, Phys. Rev. B **68**, 035321-035325 (2003); S. K. Watson, R. M. Potok, C. M. Marcus, and V. Umansky, *Experimental realization of a quantum spin pump*, Phys. Rev. Lett. **91**, 258301-258304 (2003).
- [13] W. Zheng, J. Wu, B. Wang, J. Wang, Q.-F. Sun, and H. Guo, *Parametric quantum spin pump*, Phys. Rev. B, **68**, 113306-113308 (2003).
- [14] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Observation of spin Hall effect*, Science **306**, 1910-1913 (2004).
- [15] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Observation of the spin Hall effect in semiconductors*, Science, **306**, 1910-1913 (2004).
- [16] J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova, and T. Jungwirth, *Experimental Observation of the Spin-Hall Effect in a Two-Dimensional Spin-Orbit Coupled Semiconductor System*, Phys. Rev. Lett., **94**, 047204-047207 (2004).
- [17] V. Sih, R. C. Myers, Y. K. Kato, W. H. Lau, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Spatial imaging of the spin Hall effect and current-induced polarization in two-dimensional electron gases*, Nature Phys. **1**, 31-35 (2005).
- [18] J. E. Hirsch, *Spin Hall Effect*, Phys. Rev. Lett. **83**, 1834-1837 (1999); Shufeng Zhang, *Spin Hall Effect in the Presence of Spin Diffusion*, Phys. Rev. Lett. **85**, 393-396 (2000).
- [19] G. Feher, *Nuclear polarization via 'hot' conduction electrons*, Phys. Rev. Lett. **3**, 135-137 (1959).
- [20] M. Johnson, and R. H. Silsbee, *Interfacial charge-spin coupling: Injection and detection of spin magnetization in metals*, Phys. Rev. Lett. **55**, 1790-1793 (1985).
- [21] M. Johnson, *Bipolar spin switch*, Science **260**, 320-323 (1993); Johnson, M., *Spin accumulation in gold films*, Phys. Rev. Lett. **70**, 2142-2145 (1993).
- [22] P. R. Hammar, B. R. Bennett, M. J. Yang, and M. Johnson, *Observation of spin injection at a ferromagnet-semiconductor interface*, Phys. Rev. Lett. **83**, 203-206 (1999).
- [23] P. R. Hammar, and M. Johnson, *Spin-dependent current transmission across a ferromagnet-insulator-two-dimensional electron gas junction*, Appl. Phys. Lett. **79**, 2591-2593 (2001); Hammar, P. R., and M. Johnson, *Detection of spin-polarized electrons injected into a two-dimensional electron gas*, Phys. Rev. Lett. **88**, 066806-066809 (2002).
- [24] G. Lampel, *Nuclear dynamic polarization by optical electronic saturation and optical pumping in semiconductors*, Phys. Rev. Lett. **20**, 491-493 (1968).

- [25] M. Oestreich, M. Brender, J. Hübner, D. H. W. W. Rühle, T. H. P. J. Klar, W. Heimbrodt, M. Lampalzer, K. Voltz, and W. Stolz, *Spin injection, spin transport and spin coherence*, *Semicond. Sci. Technol.* **17**, 285-297 (2002).
- [26] R. R. Parsons, *Band-to-band optical pumping in solids and polarized photoluminescence*, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 1152-1154 (1969); A. I. Ekimov, and V. I. Safarov, *Optical orientation of carriers in interband transitions in semiconductors*, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **12**, 293-297 (1970) [*JETP Lett.* **12**, 198-201 (1970)]; D. Z. Garbuzov, A. I. Ekimov, and V. I. Safarov, *Measurement of the lifetime and of the spin-relaxation time of electrons in semiconductors by the optical-orientation method*, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **13**, 36-40 (1971) [*JETP Lett.* **13**, 24-26 (1971)].
- [27] H. C. Torrey, *Bloch equations with diffusion terms*, *Phys. Rev.* **104**, 563-565 (1956).
- [28] J. I. Kaplan, *Application of the diffusion-modified Bloch equation to electron spin resonance in ordinary and ferromagnetic metals*, *Phys. Rev.* **115**, 575 - 577 (1959).
- [29] F. Bloch, *Nuclear induction*, *Phys. Rev.* **70**, 460-474 (1946).
- [30] R. J. Elliott, *Theory of the effect of spin-orbit coupling on magnetic resonance in some semiconductors*, *Phys. Rev.* **96**, 266-279 (1954).
- [31] M. I. D'yakonov, and V. I. Perel', *Spin relaxation of conduction electrons in noncentrosymmetric semiconductors*, *Fiz. Tverd. Tela* **13**, 3581-3585 (1971) [*Sov. Phys. Solid State* **13**, 3023 - 3026 (1971)].
- [32] G. L. Bir, A. G. Aronov, and G. E. Pikus, *Spin relaxation of electrons due to scattering by holes*, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **69**, 1382-1397 (1975) [*Sov. Phys. JETP* **42**, 705-712 (1976)].
- [33] M. I. D'yakonov, and V. I. Perel', *Optical orientation in a system of electrons and lattice nuclei in semiconductors Theory*, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **38**, 362-376 (1973) [*Sov. Phys. JETP* **38**, 177-183 (1973)].
- [34] W. Hanle, *Über magnetische Beeinflussung der Polarisation der Resonanzfluoreszenz*, *Z. Phys.* **30**, 93-105 (1924).
- [35] M. Johnson, and R. H. Silsbee, *Coupling of electronic charge and spin at a ferromagnetic-paramagnetic metal interface*, *Phys. Rev. B* **37**, 5312-5325 (1988).
- [36] J. A. Gupta, D. D. Awschalom, A. L. Efros, and A. V. Rodina, *Spin dynamics in semiconductor nanocrystals*, *Phys. Rev. B* **66**, 125307-125318 (2002).
- [37] Y. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Coherent spin manipulation without magnetic fields in strained semiconductors*, *Nature*, **427**, 50-53 (2004).

- [38] A. V. Kimel, V. V. Pavlov, R. V. Pisarev, V. N. Gridnev, F. Bentivegna, and T. Rasing, *Ultrafast dynamics of the photo-induced magneto-optical Kerr effect in CdTe at room temperature*, Phys. Rev. B **62**, R10610-R10613 (2000).
- [39] J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova, and T. Jungwirth, *Experimental Observation of the Spin-Hall Effect in a Two-Dimensional Spin-Orbit Coupled Semiconductor System*, Phys. Rev. Lett., **94**, 047204-047207 (2005).
- [40] P. Mohanty, G. Zolfagharkhani, S. Kettmann, and P. Fulde, *Spin-mechanical device for detection and control of spin current by nanomechanical torque*, Phys. Rev. B, **70**, 195301-195306 (2004); T.-W. Chen, C.-M. Huang, and G. Y. Guo, *Conserved spin and orbital angular momentum Hall current in a two-dimensional electron system with Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling*, Phys. Rev. B, **73**, 235309-235321 (2006).
- [41] S. O. Valenzuela and M. Tinkham, *Direct electronic measurement of the spin Hall effect*, Nature **442**, 176-179 (2006).
- [42] M. Jullière, *Tunneling between ferromagnetic films*, Phys. Lett. **54A**, 225-226 (1975).
- [43] L. Esaki, P. Stiles, and S. von Molnár, *Magnetointernal field emission in junctions of magnetic insulators*, Phys. Rev. Lett. **19**, 852-854 (1967); D. Frustaglia, M. Hentschel, and K. Richter, *Quantum transport in nonuniform magnetic fields: Aharonov-Bohm ring as a spin switch*, Phys. Rev. Lett. **87**, 256602-256605 (2001); S. K. Joshi, D. Sahoo, and A. M. Jayannavar, *Aharonov-Bohm oscillations and spin-polarized transport in a mesoscopic ring with a magnetic impurity*, Phys. Rev. B **64**, 075320-075325 (2001); S. A. Avodin, L. A. Dmitrieva, Yu. A. Kuperin, and V. V. Sartan, *Spin-dependent transport through the finite array of quantum dots: Spin gun*, cond-mat/0310632 (2003); R. Ionicioiu, and I. D'Amico, *Mesoscopic Stern- Gerlach device to polarize spin currents*, Phys. Rev. B **67**, 041307-041310 (2003).
- [44] M. Kohda, Y. Ohno, K. Takamura, F. Matsukura, and H. Ohno, *A spin Esaki diode*, Jpn. J. Appl. Phys., Part 2 **40**, L1274-L1276 (2001); E. Johnston-Halperin, D. Lofgreen, R. K. Kawakami, D. K. Young, L. Coldren, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Spin-polarized Zener tunneling in (Ga,Mn)As*, Phys. Rev. B **65**, 041306-041309 (2002).
- [45] S. Datta, and B. Das, *Electronic analog of the electrooptic modulator*, Appl. Phys. Lett., **56**, 665-667, (1990).

- [46] J. Gregg, W. Allen, N. Viart, R. Kirschman, C. S. J.-P. Schille, M. Gester, S. Thompson, P. Sparks, V. Da Costa, K. Ounadjela, and M. Skvarla, *The art of spin electronics*, J. Magn. Mater. **175**, 1-9 (1997).
- [47] D. J. Monsma, J. C. Lodder, T. J. A. Popma, and B. Dieny, *Perpendicular hot electron spin-valve effect in a new magnetic field sensor: The spin-valve transistor*, Phys. Rev. Lett. **74**, 5260-5263 (1995); D. J. Monsma, R. Vlutters, and J. C. Lodder, *Room temperature-operating spin-valve transistors formed by vacuum bonding*, Science **281**, 407-409 (1998).
- [48] D. P. DiVincenzo, *Quantum computation*, Science **270**, 255-261 (1995); M. A. Nielsen, and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University, Cambridge, NY (2000); S. Das Sarma, J. Fabian, X. Hu, and I. Žutić, *Spin electronics and spin computation*, Solid State Commun. **119**, 207-215 (2001).
- [49] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn, *Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange*, Phys. Rev. B, **39**, 4828-4830 (1989); M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, and F. Petroff, *Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattice*, Phys. Rev. Lett., **21**, 2472-2475 (1988).
- [50] Gary A. Prinz, *Magnetoelectronics*, Science, **282**, 1660-1664 (1998).
- [51] J. Smit, Physica, *The spontaneous hall effect in ferromagnetics I* **21**, 877-887 (1955); J. Smit, Physica *The spontaneous hall effect in ferromagnetics II* **24**, 39-51 (1958).
- [52] L. Bervger, *Side-jump mechanism for the Hall effect of Ferromagnets*, Phys. Rev. B, **2**, 4559-4566 (1970); L. Bervger, *Side-jump mechanism for the Hall effect of Ferromagnets*, Phys. Rev. B, **5**, 1862-1870 (1972).
- [53] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, and T. Enoki, *Gate Control of Spin-Orbit Interaction in an Inverted  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  Heterostructure*, Phys. Rev. Lett., **78**, 1335-1338 (1997).
- [54] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, *Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors*, Phys. Lett. A, **35**, 459-460 (1971).
- [55] H. Zhao, Eric J. Loren, H. M. van Driel, and Arthur L. Smirl, *Coherence control of Hall charge and spin currents*, Phys. Rev. Lett., **96**, 246601-246604 (2006).
- [56] V. Sih, W. H. Lau, R. C. Myers, V. R. Horowitz, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Generating Spin Currents in Semiconductors with the Spin Hall Effect*, Phys. Rev. Lett. **97**, 096605-096608 (2006).

- [57] Y. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Current-induced spin polarization in strained semiconductors*, Phys. Rev. Lett., **93**, 176601-176604 (2004).
- [58] N. P. Stern, S. Ghosh, G. Xiang, M. Zhu, N. Samarth, and D. D. Awschalom, *Current-induced polarization and the spin Hall effect at room temperature*, Phys. Rev. Lett., **97**, 126603-126606 (2006).
- [59] X.-D. Cui, S.-Q. Shen, J. Li, W. Ge, and F.-C. Zhang, *Observation of electric current induced by optically injected spin current*, Appl. Phys. Lett., **90**, 242115-242117 (2007).
- [60] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, *Dissipationless quantum spin current at room temperature*, Science, **301**, 1348-1351 (2003).
- [61] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald, *Universal intrinsic spin Hall effect*, Phys. Rev. Lett., **92**, 126603-126606 (2004).
- [62] L. Sheng, D. N. Sheng, and C. S. Ting, *Spin-Hall effect in two-dimensional electron systems with Rashba spin-orbit coupling and disorder*, Phys. Rev. Lett., **94**, 016602-016606 (2005).
- [63] B. K. Nikolić, S. Souma, L. P. Zârbo, and S. Souma, *Mesoscopic spin Hall effect in multiprobe ballistic spin-orbit coupled semiconductor bridges*, Phys. Rev. B, **72**, 075361-075372 (2005); Cătălin Pascu Moca, D. C. Marinescu, *Longitudinal and spin-Hall conductance of a two-dimensional Rashba system with arbitrary disorder*, Phys. Rev. B, **72**, 165335-165340 (2005); E. M. Hankiewicz, L. W. Molenkamp, T. Jungwirth, and J. Sinova, *Manifestation of the spin Hall effect through charge-transport in the mesoscopic regime*, Phys. Rev. B, **70**, 241301(R)-141304(R) (2004).
- [64] Z. Qiao, W. Ren, J. Wang, and H. Guo, *Low field diagram of spin-Hall effect in the mesoscopic regime*, Phys. Rev. Lett., **98**, 196402-196405 (2007).
- [65] S.-Q. Shen, Michael Ma, X. C. Xie, and F.-C. Zhang, *Resonant spin Hall conductance in two-dimensional electron systems with a Rashba interaction in a perpendicular magnetic field*, Phys. Rev. Lett., **92**, 256603-256606 (2004).
- [66] Y.-J. Bao, H.-B. Zhuang, S.-Q. Shen, and F.-C. Zhang, *Edge spin current and spin polarization in quantum Hall regime*, Phys. Rev. B, **72**, 245323-245327 (2005).
- [67] J. Shi, P. Zhang, D. Xiao, and Q. Niu, *Proper definition of spin current in spin-orbit coupled systems*, Phys. Rev. Lett., **96**, 076604-076607 (2006).
- [68] Q.-F. Sun, and X. C. Xie, *Definition of the spin current: the angular spin current and its physical consequences*, Phys. Rev. B, **72**, 245305-245311 (2005).

- [69] Jian Wang, Baigeng Wang, Wei Ren, and Hong Guo, *Conservation of spin current: Model including self-consistent spin-spin interaction* Phys. Rev. B, **74**, 155307-155311 (2006).
- [70] W. Ren, Z. Qiao, J. Wang, Q.-F. Sun, and H. Guo, *Universal spin-Hall conductance fluctuations in two dimensions*, Phys. Rev. Lett., **97**, 066603-066606 (2006).
- [71] J. Li, X. Dai, S.-Q. Shen, and F.-C. Zhang, *Transverse electric current induced by optically injected spin current in a cross-shaped InGaAs/InAlAs system*, Appl. Phys. Lett., **88**, 162105-162107 (2006); B. K. Nikolić, S. Souma, L. P. Zárbo, and J. Sinova, *Nonequilibrium spin Hall accumulation in ballistic nanostructures*, Phys. Rev. Lett., **95**, 046601-046604 (2005).
- [72] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells*, Science, **318**, 766-770 (2007); Shuichi Murakami, Naoto Nagaosa, and Shou-Cheng Zhang, *Spin Hall insulator*, Phys. Rev. Lett., **93**, 156804-156807 (2004).
- [73] J. Inoue, G. E. W. Bauer, and L. W. Molenkamp, *Suppression of the persistent spin Hall current by defect scattering*, Phys. Rev. B **70**, 041303(R)-041306(R) (2004); E. G. Mishchenko, A. V. Shytov, and B. I. Halperin, *Spin Current and Polarization in Impure Two-Dimensional Electron Systems with Spin-Orbit Coupling*, Phys. Rev. Lett. **93**, 226602-226605 (2004); E. I. Rashba, *Sum rules for spin Hall conductivity cancellation*, Phys. Rev. B **70**, 201309(R)-201312(R) (2004); Y. Yao and Z. Fang, *Sign Changes of Intrinsic Spin Hall Effect in Semiconductors and Simple Metals: First-Principles Calculations*, Phys. Rev. Lett. **95**, 156601-156604 (2005); G. Y. Guo, Y. Yao, and Q. Niu, *Ab initio Calculation of the Intrinsic Spin Hall Effect in Semiconductors*, Phys. Rev. Lett., **94**, 226601-226604 (2005); Z. F. Jiang, R. D. Li, S.-C. Zhang, and W. M. Liu, *Semiclassical time evolution of the holes from Luttinger Hamiltonian*, Phys. Rev. B **72**, 045201-045205 (2005); O. Chalaev, and D. Loss, *Spin-Hall conductivity due to Rashba spin-orbit interaction in disordered systems*, Phys. Rev. B **71**, 245318-245324 (2005); B. A. Bernevig, and S. C. Zhang, *Intrinsic Spin Hall Effect in the Two-Dimensional Hole Gas*, Phys. Rev. Lett. **95**, 016801-016804 (2005); R. Raimondi and P. Schwab, *Spin-Hall effect in a disordered two-dimensional electron system*, Phys. Rev. B **71**, 033311-033314 (2005).
- [74] Y. Xing, Q.-F. Sun, and J. Wang, *Nature of spin Hall effect in a finite ballistic two-dimensional system with Rashba and Dresselhaus spin-orbit interaction*, Phys. Rev. B, **73**, 205339-205342 (2006).

- [75] Y. Xing, Q.-F. Sun, and J. Wang, *Symmetry and transport property of spin current induced spin-Hall effect*, Phys. Rev. B, **75**, 075324-075330 (2007).
- [76] Y. Xing, Q.-F. Sun, and J. Wang, *Influence of dephasing process on the quantum Hall effect and the spin Hall effect*, Phys. Rev. B, **75**, 075324-075330 (2008).
- [77] Y. Xing, Q.-F. Sun, L. Tang, and J.-P. Hu, *Accumulation of opposite spins on the transverse edges of a two-dimensional electron gas in a longitudinal electric field*, Phys. Rev. B, **74**, 155313-155317 (2006).
- [78] Y. Xing, Q.-F. Sun, and J. Wang, *Spin measurement based on quantum point contact*, to be submitted to Appl. Phys. Lett..
- [79] Q.-F. Sun, Y. Xing, and S.-Q. Shen, *Double quantum dot as detector of spin current*, to be published in Phys. Rev. B, **77**.
- [80] Y. Xing, Q.-F. Sun, and J. Wang, *Response time of a normal-metal/superconductor hybrid system under a step-like pulse bias*, Phys. Rev. B, **75**, 125308-125315 (2007).

## 第二章 量子输运的格林函数方法

这一章我们首先用非平衡格林函数方法推导一般的电流公式。然后考虑两种特殊情形：(1) 正常导线，直流偏压驱动，小偏压极限，零温，得出可用来求解电流和自旋流的推广的多通道线性Landauer-Büttiker公式。(2) 量子点耦合到正常导线和超导导线，超导端偏压为零，正常端加交流偏压，得出体系的交流隧穿电流公式。

## §2.1 模型及其哈密顿

考虑体系如图2-1，多个外电极通过导线连接到一个任意的介观散射区，导线可以是正常导线，也可以是超导导线，导线上加驱动偏压，偏压可以是直流的，也可以是交流电场辐照下产生的谐振偏压或任何其它形式的交流偏压。中间的散射区可以是一个单能级或多能级的量子点，也可以是有限大的二维电子气。体系哈密顿的一般表达式为：

$$H(t) = \sum_{\beta} H_{\beta}(t) + H_c(t) + H_T(t) \quad (2-1)$$

其中， $H_{\beta}(t)$ 和 $H_c(t)$ 分别表示 $\beta$ 端电极（导线）和中间介观散射区的哈密顿量， $H_T(t)$ 表示端电极和散射区之间的耦合。

$$H_{\beta}(t) = \sum_{k_{\beta}\sigma} \epsilon_{k_{\beta}}(t) c_{k_{\beta}\sigma}^{\dagger} c_{k_{\beta}\sigma} + \sum_{k_{\beta}\sigma, k'_{\beta}\sigma'} t_{k_{\beta}\sigma, k'_{\beta}\sigma'} c_{k_{\beta}\sigma}^{\dagger} c_{k'_{\beta}\sigma'} + \sum_k [\tilde{\Delta}_{\beta}^* c_{k_{\beta}\downarrow} c_{-k_{\beta}\uparrow} + \tilde{\Delta}_{\beta} c_{-k_{\beta}\uparrow}^{\dagger} c_{k_{\beta}\downarrow}^{\dagger}] \quad (2-2)$$

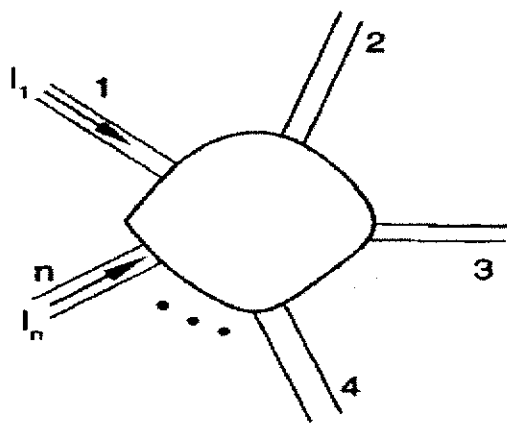


图 2-1 多端口量子输运系统结构示意图。图中每个端电极既可以是正常的，也可以是超导的，所加偏压既可以是直流的，也可以是交流的。中间介观区既可以是一个时间无关的稳态也可以是受外电极交流电场影响的瞬态散射区。

其中,  $c_{k_\beta\sigma}^\dagger$  和  $c_{k_\beta\sigma}$  分别表示第  $\beta$  个端电极中  $k_\beta\sigma$  态电子产生和湮灭算符,  $k_\beta$  是量子态指标,  $\sigma$  代表自旋,  $\epsilon_{k_\beta}(t)$  是导线中单粒子能级, 绝热近似下[1] 分成三部分,

$$\epsilon_{k_\beta}(t) = \epsilon_{k_\beta} + \mu_\beta(t) = \epsilon_{k_\beta} + qV_\beta + W_\beta(t) \quad (2-3)$$

其中  $\epsilon_{k_\beta}$  是无外场时零偏压下的单粒子能级,  $V_\beta$  是  $\beta$  端的直流偏压成分,  $W_\beta(t)$  是  $\beta$  端的交流电压成分.  $t_{k_\beta\sigma, k_\beta\sigma'}$  表示不同态之间的交迭.  $\tilde{\Delta}_\beta$  是  $\beta$  端导线中二体相互作用的一种表现形式, 在这儿表示超导序参量.  $\tilde{\Delta}_\beta$  是二体算符做平均场近似的结果, 也受外加直流或交流电场的影响, 超导序参量  $\tilde{\Delta}_\beta$  在外场中有如下形式,

$$\tilde{\Delta}_\beta = \Delta_\beta \exp \left[ -\frac{2i}{\hbar} \int_0^t \mu_\beta(\tau) d\tau \right] \quad (2-4)$$

其中,  $\Delta_\beta = |\Delta_\beta| e^{i\Phi_\beta}$  是无外场和零偏压下的  $\tilde{\Delta}_\beta$  值. 当  $\Delta_\beta = 0$  时,  $\beta$  端电极可视为只存在单体算符的理想正常导线.

$$H_c(t) = \sum_{j,\sigma} \epsilon_{j,\sigma}(t) c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{jj'(\neq j), \sigma\sigma'} t_{j\sigma, j'\sigma'} c_{j\sigma}^\dagger c_{j'\sigma'} \quad (2-5)$$

$c_{j\sigma}^\dagger$  和  $c_{j'\sigma'}$  分别表示散射区的  $j$  态电子或  $j'$  态电子的产生和湮灭算符,  $j$  和  $j'$  是轨道量子态指标,  $\sigma$  是自旋态指标.  $\epsilon_{j,\sigma}(t)$  是中心散射区的单粒子能级, 在外电极交流电场影响下, 中心区产生感应交流外场, 散射区能级变为时间相关的函数,

$$\epsilon_{j\sigma}(t) = \epsilon_{j\sigma}^0 + W_c(t) = \epsilon_{j\sigma}^0 q \sum_{\beta} u_{j\sigma\beta} V_\beta(t) \quad (2-6)$$

其中,  $u_{j\sigma\beta}$  是无量纲系数, 它由端电极和中心  $j$  区之间的电容与中心  $j$  区的总电容之比决定. 由于规范不变性[2],  $\sum_{\beta} u_{j\sigma\beta} = 1$ .  $t_{jj'(\neq j), \sigma}$  表示不同态之间的交迭. 如果只是考虑一个单能级或多能级的量子点系统, 各能态之间无耦合, 则  $t_{jj'(\neq j), \sigma} = 0$ .

$$H_T(t) = \sum_{j,\sigma, k_\beta, \sigma'} \left[ t_{k_\beta\sigma, j\sigma'} c_{k_\beta\sigma}^\dagger c_{j\sigma'} + t_{j\sigma', k_\beta\sigma} c_{j\sigma'}^\dagger c_{k_\beta\sigma} \right] \quad (2-7)$$

$t_{k_\beta\sigma, j\sigma}$  标记导线和散射区之间的耦合强度.

为了推导电流方便, 我们先把哈密顿(2-2,2-5,2-7) 作么正变换  $U(t)$ :

$$U(t) = \exp \left[ \sum_{\beta k_\beta\sigma} \frac{i}{\hbar} \left( \frac{\Phi_\beta}{2} + \int_0^t \mu_\beta(\tau) d\tau \right) c_{k_\beta\sigma}^\dagger c_{k_\beta\sigma} + \sum_{j\sigma} \frac{i}{\hbar} \int_0^t W_c(\tau) c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} d\tau \right]. \quad (2-8)$$

变换以后的哈密顿为【哈密顿中符号意义同公式(2-2,2-5,2-7)】:

$$H_\beta(t) = \sum_{k_\beta\sigma} \epsilon_{k_\beta} c_{k_\beta\sigma}^\dagger c_{k_\beta\sigma} + \sum_{k_\beta\sigma, k'_\beta\sigma'} t_{k_\beta\sigma, k'_\beta\sigma'} c_{k_\beta\sigma}^\dagger c_{k'_\beta\sigma'} + \sum_k [|\Delta|_\beta c_{k_\beta\downarrow} c_{-k_\beta\uparrow} + |\Delta|_\beta c_{-k_\beta\uparrow}^\dagger c_{k_\beta\downarrow}^\dagger]$$

$$H_c(t) = \sum_{j,\sigma} \epsilon_{j,\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{jj'(\neq j), \sigma\sigma'} t_{j\sigma, j'\sigma'} c_{j\sigma}^\dagger c_{j'\sigma'}$$

$$H_T(t) = \sum_{jk\beta\sigma\sigma'} \left[ t_{k\beta\sigma,j\sigma'}(t) c_{k\beta\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + t_{j\sigma',k\beta\sigma}(t) c_{j\sigma'}^\dagger c_{k\beta\sigma} \right] \quad (2-9)$$

其中,

$$t_{k\beta\sigma,j\sigma'}(t) = t_{k\beta\sigma,j\sigma} \exp \left[ \frac{i\Phi_\beta}{2\hbar} + \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mu_\beta(\tau) d\tau + \frac{i}{\hbar} \int_0^t W_c(\tau) d\tau \right] \quad (2-10)$$

完成么正变换后, 超导相位 $\Phi_\beta$ , 直流偏压 $V_\beta$ , 含时外场 $W_\beta(t)$ , 以及中间区的含时感应场 $W_c(t)$ 都只出现在隧穿矩阵元 $t_{\beta\sigma j}(t)$ 上, 这会大大方便下面的运算。另外, 为了公式简洁, 下面凡有涉及到 $|\Delta_\beta|$ , 一律写为 $\Delta_\beta$ 。

## §2.2 普遍电流公式

从 $\beta$ 端导线流入到中心散射区自旋为 $\sigma$ 的瞬时电流 $J_{\beta\sigma}(t)$

$$\begin{aligned} J_{\beta,\sigma}(t) &= -\frac{q}{\hbar} \left\langle \frac{d\hat{N}_{\beta,\sigma}(t)}{dt} \right\rangle = iq \sum_{k\beta} \left\langle \left[ c_{k\beta\sigma}^\dagger(t) c_{k\beta\sigma}(t), H(t) \right] \right\rangle \\ &= iq \sum_{k\beta j} \left[ \left\langle c_{k\beta\sigma}^\dagger(t) c_{j\sigma'}(t) \right\rangle t_{k\beta\sigma,j\sigma'}(t) - t_{j\sigma',k\beta\sigma}(t) \left\langle c_{j\sigma'}^\dagger c_{k\beta\sigma} \right\rangle \right] \quad (2-11) \end{aligned}$$

其中,  $\langle \dots \rangle$ 表示对海森堡算符求态平均以及统计平均, 即 $\sum_n \rho_n \langle \Psi_n | \dots | \Psi_n \rangle$ 。其中 $\Psi_n$ 是 $H$ 在 $t = -\infty$ 时平衡体系的本征态。在零温情况, 只是对基态求态平均 $\langle \Psi_0 | \dots | \Psi_0 \rangle$ 。

由于除了轨道态指标, 还涉及到自旋态指标, 如果用格林函数来表达电流, 就需要把原来用轨道态指标作为矩阵元标号的 $N \times N$ 维格林函数矩阵通过直乘二维自旋相关矩阵扩展到 $2N \times 2N$ 维。二维自旋相关子空间可以有不同的取法, 一般如果涉及自旋极化, 取泡利矩阵的 $\sigma_z$ 表象, 而如果涉及电子空穴队(比如库伯对), 取Nambu表象[3]比较方便。如果既有自旋翻转又有电子空穴对, 则取4阶Nambu表象[4]。尽管自旋相关子空间取法各异, 但是公式推导过程类似。在和自旋相关的子空间中, 格林函数 $G_{i,j}^{r,a}$ 和 $G_{i,j}^<$ 定义为:

$$G_{i,j}^{r,a} = \mp i\theta(\pm t \mp t') \langle \{X_i(t), Y_j^\dagger(t')\} \rangle \quad (2-12)$$

$$G_{i,j}^< = i \langle Y_j^{\dagger,T}(t') X_i^T(t) \rangle \quad (2-13)$$

在自旋泡利矩阵 $\sigma_z$ 表象中,

$$X_i(t) = [X_{i,\uparrow}(t), X_{i,\downarrow}(t)]^T, \quad Y_j^\dagger(t') = [Y_{j,\uparrow}^\dagger(t'), Y_{j,\downarrow}^\dagger(t')]^T$$

而在Nambu表象中,

$$X_i(t) = [X_{i,\uparrow}(t), X_{i,\downarrow}^\dagger(t)]^T, \quad Y_j^\dagger(t') = [Y_{j,\uparrow}(t'), Y_{j,\downarrow}^\dagger(t')]^T$$

$i$ 和 $j$ 都是算符的轨道态指标,  $\{\dots\}$ 是费米子的反对易子符号。根据方程(2-11,2-13), 有:

$$J_{\beta\uparrow}(t) = q \sum_{k_{\beta}, j, \sigma} \left[ G_{j\sigma, k_{\beta}\uparrow}^<(t, t) t_{k_{\beta}\uparrow, j\sigma}(t) - t_{j\sigma, k_{\beta}\uparrow}(t) G_{k_{\beta}\uparrow, j\sigma}^<(t, t) \right] \quad (2-14)$$

下面的计算中, 我们只求 $J_{\beta\uparrow}(t)$ 。把 $\uparrow$ 换成 $\downarrow$ 即可得到 $J_{\beta\downarrow}(t)$ 的表达式, 而且在没有自旋极化的系统中, 自旋上的电流和自旋下的电流是相等的, 根本就无需求自旋向下的电流。

下面利用闭合回路上的Dyson方程 $G = g + g\Sigma G$ 求解非平衡格林函数 $G_{j, k_{\beta}, 11}^<(t, t)$ 和 $G_{k_{\beta}, j, 11}^<(t, t)$ 。

关于 $G^{r,a}$ 的Dyson方程:

$$G^{r,a} = g^{r,a} + g^{r,a} \Sigma^{r,a} G^{r,a} = g^{r,a} + G^{r,a} \Sigma^{r,a} g^{r,a} \quad (2-15)$$

关于 $G^<$ 的Dyson方程:

$$\begin{aligned} G^< &= g^< + g^r \Sigma^r G^< + g^r \Sigma^< G^a + g^< \Sigma^a G^a \\ &= g^< + G^r \Sigma^r g^< + G^r \Sigma^< g^a + G^< \Sigma^a g^a \end{aligned} \quad (2-16)$$

【方程(2-16)的推导过程见附录A, 此外, 对方程(2-16)作一些变化可得Keldysh方程, 推导过程见附录B。】

方程(2-15,2-16)中的 $g^{\gamma}(\gamma = r, a, <)$ 代表平衡格林函数,  $\Sigma^{\gamma}$ 是由于绝热地加入相互作用哈密顿引入的自能。乘法表示矩阵相乘, 需要对离散内指标求和, 对连续内指标积分。根据对平衡态的哈密顿 $H_0$ 的选取的不同, 这儿的 $\Sigma$ 和 $g$ 也相应有不同的取法。在这儿我们取平衡态的哈密顿 $H_0 = H_c + \sum_{\beta} H_{\beta}$ , 相互作用哈密顿 $H' = H_T$ , 从而有

$$\Sigma_{k_{\beta}, j}^{r,a}(t, t') = \delta(t - t') T_{k_{\beta}, j}(t), \quad \Sigma_{j, k_{\beta}}^{r,a}(t, t') = \delta(t - t') T_{j, k_{\beta}}(t) \quad (2-17)$$

$$\Sigma_{k'_{\beta}, k_{\beta}}^{r,a}(t, t') = 0, \quad \Sigma_{mm'}^<(t, t') = 0, \quad [m, m' = k_{\beta}, j] \quad (2-18)$$

其中, 对于泡利矩阵 $\sigma_z$ 表象,

$$T_{k_{\beta}, j}(t) = \begin{pmatrix} t_{k_{\beta}\uparrow, j\uparrow}(t) & t_{k_{\beta}\uparrow, j\downarrow}(t) \\ t_{k_{\beta}\downarrow, j\uparrow}(t) & t_{k_{\beta}\downarrow, j\downarrow}(t) \end{pmatrix}, \quad T_{j, k_{\beta}}(t) = [T_{k_{\beta}, j}(t)]^{\dagger} \quad (2-19)$$

对于Nambu表象,

$$T_{k_{\beta}, j}(t) = \begin{pmatrix} t_{k_{\beta}\uparrow, j\uparrow}(t) & -t_{k_{\beta}\uparrow, j\downarrow}^*(t) \\ t_{k_{\beta}\downarrow, j\uparrow}(t) & -t_{k_{\beta}\downarrow, j\downarrow}^*(t) \end{pmatrix}, \quad T_{j, k_{\beta}}(t) = [T_{k_{\beta}, j}(t)]^{\dagger} \quad (2-20)$$

$t = -\infty$ 时, 散射区和外电极还没有耦合, 所以平衡态的 $g_{j\sigma, k_{\beta}\sigma'}^< = 0$ 。因此, 从方程(2-16,2-17,2-18)可以导出方程(2-14)中的 $G_{j\sigma, 11}^<(t, t)$ 和 $G_{k_{\beta}, j, 11}^<(t, t)$ , 它们表达为:

$$G_{j\sigma, k_{\beta}\uparrow}^<(t, t) = \sum_{j', k'_{\beta}, \sigma_1, \sigma_2} \int dt_1 \left\{ G_{j\sigma, j'\sigma_1}^r(t, t_1) t_{j'\sigma_1, k'_{\beta}\sigma_2}(t_1) g_{k'_{\beta}\sigma_2, k_{\beta}\uparrow}^<(t_1, t) \right.$$

$$\begin{aligned}
& + G_{j\sigma, j'\sigma_1}^<(t, t_1) t_{j'\sigma_1, k'_\beta\sigma_2}(t_1) g_{k'_\beta\sigma_2, k_\beta\uparrow}^a(t_1, t) \} \\
G_{k_\beta\uparrow, j\sigma}^<(t, t) = & \sum_{j', k'_\beta, \sigma_1, \sigma_2} \int dt_1 \left\{ g_{k_\beta\uparrow, k'_\beta\sigma_1}^r(t, t_1) t_{k'_\beta\sigma_1, j'\sigma_2}(t_1) G_{j'\sigma_2, j\sigma}^<(t_1, t) \right. \\
& \left. + g_{k_\beta\uparrow, k'_\beta\sigma_1}^<(t, t_1) t_{k'_\beta\sigma_1, j'\sigma_2}(t_1) G_{j'\sigma_2, j\sigma}^a(t_1, t) \right\} \quad (2-21)
\end{aligned}$$

这儿的 $\sigma = 1, 2$ 标记自旋子空间的矩阵元，分别代表自旋 $\uparrow, \downarrow$ 。把式(2-21)代回方程(2-11)，得到电流表达式（以下 $\hbar = 1$ ）：

$$\begin{aligned}
J_{\beta\uparrow}(t) = & q \sum_{j, j'} \sum_{k_\beta, k'_\beta} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma} \int_{-\infty}^t dt_1 \left\{ G_{j\sigma, j'\sigma_1}^r(t, t_1) \left[ t_{j'\sigma_1, k'_\beta\sigma_2}(t_1) g_{k'_\beta\sigma_2, k_\beta\uparrow}^<(t_1, t) t_{k_\beta\uparrow, j\sigma}(t) \right] \right. \\
& \left. + G_{j\sigma, j'\sigma_1}^<(t, t_1) \left[ t_{j'\sigma_1, k'_\beta\sigma_2}(t_1) g_{k'_\beta\sigma_2, k_\beta\uparrow}^a(t_1, t) t_{k_\beta\uparrow, j\sigma}(t) \right] \right\} \\
- q \sum_{j, j'} \sum_{k_\beta, k'_\beta} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma} \int_t^\infty dt_1 & \left\{ \left[ t_{j\sigma, k_\beta\uparrow}(t) g_{k_\beta\uparrow, k'_\beta\sigma_1}^r(t, t_1) t_{k'_\beta\sigma_1, j'\sigma_2}(t_1) \right] G_{j'\sigma_2, j\sigma}^<(t, t_1) \right. \\
& \left. + \left[ t_{j\sigma, k_\beta\uparrow}(t) g_{k_\beta\uparrow, k'_\beta\sigma_1}^<(t, t_1) t_{k'_\beta\sigma_1, j'\sigma_2}(t_1) \right] G_{j'\sigma_2, j\sigma}^a(t, t_1) \right\} \quad (2-22)
\end{aligned}$$

方程(2-22)中的两项互为共轭，可以只求第一项的实部，也可以两项一起求，视具体情况而定。

### §2.3 推广的线性Landauer-Büttiker公式

量子霍尔效应或自旋霍尔效应发生在有限大的二维体系中（图2-2），此二维系统通过导线和外电极相通，纵向两电极间外加驱动电压或驱动电流，横向电极产生霍尔电流（压）或自旋霍尔电流。当二维散射区存

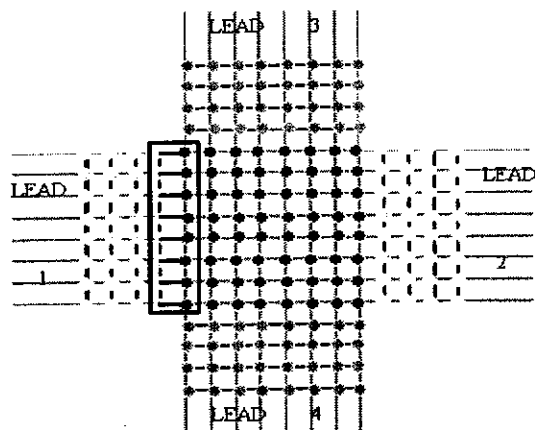


图 2-2 四端口（自旋）霍尔效应的格点模型结构示意图。中间区为介观散射区，通过四根导线外接四个电极。沿 $x$ 方向的两个纵向电极间加驱动电流，沿 $y$ 方向的两个电极间测到霍尔电流或自旋霍尔电流。

在Rashba或Dresselhaus形式的自旋轨道耦合时，体系哈密顿

$$H = p^2/2m^* + V(x, y) + \alpha(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) + \beta(\sigma_x p_x - \sigma_y p_y) \quad (2-23)$$

其中第一项和第二项分别描述动能项和势能项，对于二维电子气（图2-2中所示，包括有限大的中间散射区和四周连接的导线区），我们可以设边界以内的势能处处相等而边界以外势能无穷大。第三项是自旋轨道相互作用项， $\alpha$ 和 $\beta$ 分别表示Rashba和Dresselhaus自旋轨道耦合的强度。我们用图2-2中所示的格点模型来模拟哈密顿(2-23)描述的二维电子气系统，并用紧束缚二次量子化哈密顿来描述此格点模型。如果只考虑相邻格点间的跳跃，二次量子化形式的哈密顿可以表示为[6]：

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\mathbf{i}} [a_{\mathbf{i}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{i}\downarrow}^\dagger] \begin{bmatrix} -t & -iV_D + V_R \\ -iV_D - V_R & -t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{\mathbf{i}+\delta_x\uparrow} \\ a_{\mathbf{i}+\delta_x\downarrow} \end{bmatrix} \\ & + \sum_{\mathbf{i}} [a_{\mathbf{i}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{i}\downarrow}^\dagger] \begin{bmatrix} -t & -iV_R + V_D \\ -iV_R - V_D & -t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{\mathbf{i}+\delta_y\uparrow} \\ a_{\mathbf{i}+\delta_y\downarrow} \end{bmatrix} \\ & + H.C \end{aligned} \quad (2-24)$$

其中 $a_{i\sigma}^\dagger$ 和 $a_{i\sigma}$ 分别表示 $i$ 格点上自旋 $\sigma$ 电子的产生和湮灭算符。而轨道态指标 $\mathbf{i} = [i_x, i_y]$ 在这儿标记坐标表象中的格点位置。 $t = \hbar^2/2m^*a^2$ 表示相邻格点间的跳跃能即动能， $a$ 是格点间距。因为有自旋轨道作用，不同自旋态之间也有耦合，有自旋翻转过程。 $V_R = \hbar\alpha/2a$ ， $V_D = \hbar\beta/2a$ 表示自旋轨道耦合强度。 $\delta_x$ 和 $\delta_y$ 分别表示沿 $x$ 和 $y$ 方向的单位矢量。

在方程(2-24)所表达的哈密顿中，没有超导相互作用项，没有交流偏压成分，而且散射区和导线区的轨道态指标现在都是格点坐标，我们统一用 $i_c$ 和 $i_p$ （ $p = 1, 2, 3, 4$ 分别第1, 2, 3, 4根导线）分别表示中间区和导线区的态指标。这样，一般形式的电流表达式(2-22)变为

$$\begin{aligned} J_{p1}(t) = & q \sum_{i_c, i'_c, i_p, i'_p} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma} \int_{-\infty}^t dt_1 \exp\{iqV_p(t-t_1)\} \\ & \left\{ \int \frac{dE_1}{2\pi} e^{-iE_1(t-t_1)} G_{i_c\sigma, i'_c\sigma_1}^r(E_1) \left[ t_{i'_c\sigma_1, i_p\sigma_2} \int \frac{dE_2}{2\pi} e^{iE_2(t-t_1)} g_{i_p\sigma_2, i'_p\uparrow}^<(E_2) t_{i'_p\uparrow, i_c\sigma} \right] \right. \\ & \left. + \int \frac{dE_1}{2\pi} e^{-iE_1(t-t_1)} G_{i_c\sigma, i'_c\sigma_1}^<(E_1) \left[ t_{i'_c\sigma_1, i_p\sigma_2} \int \frac{dE_2}{2\pi} e^{iE_2(t-t_1)} g_{i_p\sigma_2, i'_p\uparrow}^a(E_2) t_{i'_p\uparrow, i_c\sigma} \right] \right\} \\ & - q \sum_{i_c, i'_c, i_p, i'_p} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma} \int_t^\infty dt_1 \exp\{-iqV_p(t-t_1)\} \\ & \left\{ \left[ t_{i_c\sigma, i_p\uparrow} \int \frac{dE_1}{2\pi} e^{-iE_1(t-t_1)} g_{i_p\uparrow, i'_p\sigma_1}^r(E_1) t_{i'_p\sigma_1, i'_c\sigma_2} \right] \int \frac{dE_2}{2\pi} e^{iE_2(t-t_1)} G_{i'_c\sigma_2, i_c\sigma}^<(E_2) \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left[ t_{i_c\sigma, i_p\uparrow} \int \frac{dE_1}{2\pi} e^{-iE_1(t-t_1)} g_{i_p\uparrow, i_p\sigma_1}^<(E_1) t_{i_p\sigma_1, i_c\sigma_2} \right] \int \frac{dE_2}{2\pi} e^{iE_2(t-t_1)} G_{i_c\sigma_2, i_c\sigma}^a(E_2) \Big\} \\
= & q \sum_{i_c\sigma, i_c\sigma'} \int \frac{dE}{2\pi} \left\{ \left[ G_{i_c\sigma, i_c\sigma'}^r(E) \Sigma_{i_c\sigma', i_c\sigma}^{<, \uparrow'}(E - qV_p) - \Sigma_{i_c\sigma, i_c\sigma'}^{<, \uparrow}(E - qV_p) G_{i_c\sigma', i_c\sigma}^a(E) \right] \right. \\
& \left. + \left[ G_{i_c\sigma, i_c\sigma'}^{<}(E) \Sigma_{i_c\sigma', i_c\sigma}^{a, \uparrow'}(E - qV_p) - \Sigma_{i_c\sigma, i_c\sigma'}^{\uparrow}(E - qV_p) G_{i_c\sigma', i_c\sigma}^{<}(E) \right] \right\} \quad (2-25)
\end{aligned}$$

在方程(2-25)中, 我们引进了由导线和导线与散射区的耦合项共同导致的自能

$$\begin{aligned}
\Sigma_{i_c\sigma', i_c\sigma}^{\gamma, \uparrow'}(E) &= \sum_{i_p\sigma_1, i_p} t_{i_c\sigma', i_p\sigma_1} g_{i_p\sigma_1, i_p\uparrow}^{\gamma}(E) t_{i_p\uparrow, i_c\sigma} \\
\Sigma_{i_c\sigma, i_c\sigma'}^{\gamma, \uparrow}(E) &= \sum_{i_p, i_p\sigma_1} t_{i_c\sigma, i_p\uparrow} g_{i_p\uparrow, i_p\sigma_1}^{\gamma}(E) t_{i_p\sigma_1, i_c\sigma'} \quad (2-26)
\end{aligned}$$

其中,  $\gamma = r, a, <$ , 而  $t_{i_p\sigma_1, i_c\sigma'}$  是导线和散射区耦合哈密顿矩阵的矩阵元, 表示电子在二者之间的隧穿。隧穿只发生在交界面最近邻的格点之间 (如图2-2方框中所示), 因此矩阵元  $t_{i_p\sigma_1, i_c\sigma'}$  的绝大多数值都为零。自能满足关系式

$$[\Sigma^{\gamma, \uparrow'}] = [\Sigma^{\gamma, \uparrow}]^T \quad (2-27)$$

为了避开有争议的自旋流定义, 我们设测量自旋流的导线中无自旋轨道耦合, 以保持此导线中自旋守恒。此时, p导线中不存在自旋轨道耦合, 自能形式更为简单

$$\Sigma_{i_c\sigma, i_c\sigma'}^{\gamma, \uparrow'}(E) = \Sigma_{i_c\sigma, i_c\sigma'}^{\gamma, \uparrow}(E) = \Sigma_{i_c\uparrow, i_c\uparrow}^{\gamma}(E) = \sum_{i_p, i_p} t^2 g_{i_p\uparrow, i_p\uparrow}^{\gamma}(E) \quad (2-28)$$

其中  $t$  最近邻格点间的跳跃能, 是表示导线和散射区之间相邻格点之间的跳跃矩阵元, 因为对于所有的相邻格点都有相同的跳跃能, 所以在这儿我们略掉矩阵元下标。由于加的是直流偏压, 产生的电流也是直流, 方程(2-25)和时间无关, 下面略掉时间变量。利用方程(2-27), 方程(2-25)变成

$$\begin{aligned}
J_{p\uparrow} = & q \sum_{i_c\sigma, i_c\sigma'} \int \frac{dE}{2\pi} \left\{ \Sigma_{i_c\sigma, i_c\sigma'}^{<, \uparrow}(E - qV_p) \left[ G_{i_c\sigma', i_c\sigma}^r(E) - G_{i_c\sigma', i_c\sigma}^a(E) \right] \right. \\
& \left. + \left[ \Sigma_{i_c\sigma, i_c\sigma'}^{a, \uparrow}(E - qV_p) - \Sigma_{i_c\sigma, i_c\sigma'}^{r, \uparrow}(E - qV_p) \right] G_{i_c\sigma', i_c\sigma}^{<}(E) \right\} \quad (2-29)
\end{aligned}$$

利用格林函数关系  $g^{<} = f[g^a - g^r]$ , 得出  $\Sigma^{<} = f[\Sigma^a - \Sigma^r]$ , 其中,  $f$  是导线中的费米分布函数。引入线宽函数

$$\Gamma^{\sigma} = i[\Sigma^{r, \sigma} - \Sigma^{a, \sigma}]$$

方程(2-29)变成

$$\begin{aligned}
J_{p\uparrow} &= iq \sum_{i_c\sigma, i_c\sigma'} \int \frac{dE}{2\pi} \left\{ f_p \Gamma_{p, i_c\sigma, i_c\sigma'}^{\uparrow} [G^r(E) - G^a]_{i_c\sigma', i_c\sigma} + \Gamma_{p, i_c\sigma, i_c\sigma'}^{\uparrow} G_{i_c\sigma', i_c\sigma}^{<}(E) \right\} \\
&= iq \int \frac{dE}{2\pi} \text{Tr} \left\{ f_p \Gamma_p^{\uparrow} [G^r(E) - G^a(E)] + \Gamma_p^{\uparrow} G^{<}(E) \right\} \quad (2-30)
\end{aligned}$$

其中,  $f_p = f(E - qV_p)$ ,  $\Gamma_p^\dagger = \Gamma^\dagger(E - qV_p)$ 。这儿的格林函数 $G$ 和线宽函数 $\Gamma$ 都是矩阵形式, 维度为 $2N \times 2N$ , 其中 $N$ 表示散射区格点的数目, 指标2来源于自旋。矩阵求迹也是对 $2N$ 维总体求迹。原则上讲,  $\Gamma_p$ 矩阵也有 $2N \times 2N$ 维, 但是由于导线和散射区的耦合矩阵只有在导线和散射区的交界面处的矩阵元不为零, 因此,  $\Gamma_p$ 矩阵只有在散射区的边界(和导线接触的地方)矩阵元不为零。

利用Keldysh方程(2-6)(见附录B)得到格林函数

$$G^< = G^r \Sigma^< G^a = \sum_q G^r (i f_q \Gamma_q) G^a \quad (2-31)$$

注意这儿的自能是由导线和耦合项共同贡献的, 不同于§2.2节中的自能只来源于耦合项, 因此Keldysh方程中的 $(1 + G^r \Sigma^r) g^< (1 + \Sigma^a G^a) = G^r f (g^{r,-1} - g^{a,-1}) G^a = 0$ 。

其中, 利用Dyson方程 $G^{r,a} = g^{r,a} + g^{r,a} \Sigma^{r,a} G^{r,a}$ ,  $G^r$ 和 $G^a$ 可以表达为如下形式:

$$G^{r,a} = \left[ g^{r,a,-1} - \sum_q \Sigma^{r,a} \right]^{-1} = \left[ EI - H_c - \sum_q \Sigma^{r,a} \right]^{-1} \quad (2-32)$$

其中,  $H_c$ 是中间散射区 $2N \times 2N$ 的哈密顿矩阵。另外, 从Dyson方程还得出 $G^{a,-1} - G^{r,-1} = -i \sum_q \Gamma_q$ , 等号两边分别左乘 $G^r$ 和右乘 $G^a$ 得出

$$G^r - G^a = -i \sum_q G^r \Gamma_q G^a \quad (2-33)$$

把方程(2-31,2-33)代入方程(2-30), 得到:

$$\begin{aligned} J_{p\uparrow} &= iq \int \frac{dE}{2\pi} \sum_q \text{Tr} \left\{ -i f_p \Gamma_p^\dagger G^r(E) \Gamma_q G^a(E) + i f_q \Gamma_p^\dagger G^r(E) \Gamma_q G^a(E) \right\} \\ &= \frac{q}{\hbar} \sum_q \int \frac{dE}{2\pi} [f_p - f_q] \text{Tr} \left\{ \Gamma_p^\dagger G^r(E) \Gamma_q G^a(E) \right\} \end{aligned} \quad (2-34)$$

在零温情况下, 费米分布为阶梯函数, 方程(2-34)中的积分区间只能限制在偏压范围内。再者, 如计算线性电导, 所加偏压必须非常小, 因此所有对输运有贡献的电子的能量都在费米面附近, 此时可以假设方程(2-34)中的格林函数及线宽函数都和能量无关(费米面处的函数值), 从而得出

$$\begin{aligned} J_{p\uparrow} &= \frac{q^2}{\hbar} \sum_q \text{Tr} \left\{ \Gamma_p^\dagger G^r \Gamma_q G^a \right\} [V_p - V_q] \\ &= \frac{q^2}{\hbar} \sum_{q,\sigma\sigma'} T_{p\uparrow,q\sigma} [V_p - V_q] \end{aligned} \quad (2-35)$$

当 $p$ 导线不存在自旋轨道耦合时,

$$\begin{aligned} J_{p\uparrow} &= \frac{q^2}{\hbar} \sum_{q,\sigma\sigma'} \text{Tr}_0 \left\{ \Gamma_{p,\uparrow} G_{\uparrow,\sigma}^r \Gamma_{q,\sigma\sigma'} G_{\sigma',\uparrow}^a \right\} [V_p - V_q] \\ &= \frac{q^2}{\hbar} \sum_{q,\sigma\sigma'} T_{p\uparrow,q\sigma} [V_p - V_q] \end{aligned} \quad (2-36)$$

其中, “Tr” 求迹对轨道空间和自旋空间同时求, 而 “Tr<sub>0</sub>” 求迹只对轨道态分量求。  $T_{p\uparrow,q\sigma}$  表示q导线到p导线的自旋向上的电子态的透射几率。p导线不存在自旋轨道耦合时, 自旋上和自旋下是分开的, 因此  $\Gamma_p$  只有 “ $\uparrow\uparrow$ ” 或 “ $\downarrow\downarrow$ ” 分量。  $J_{p\downarrow}$  表达式类似, 只要把  $\uparrow$  换成  $\downarrow$  即可。

同时可以求得

$$\begin{aligned} J_p &= J_{p,\uparrow} + J_{p,\downarrow} = \frac{q}{\hbar} \sum_q \int \frac{dE}{2\pi} [f_p - f_q] \text{Tr} \{ \Gamma_p G^r \Gamma_q G^a \} \\ &= \frac{q^2}{\hbar} \sum_q \text{Tr} \{ \Gamma_p G^r \Gamma_q G^a \} [V_p - V_q] \end{aligned} \quad (2-37)$$

其中,  $\Gamma = i(\Sigma^r - \Sigma^a)$ ,

$$\Sigma_{i_c \sigma', i_c \sigma}^{r,a}(E) = \sum_{i_p \sigma_1, i_p \sigma_2} t_{i_c \sigma', i_p \sigma_1}^r g_{i_p \sigma_1, i_p \sigma_2}^{r,a}(E) t_{i_p \sigma_2, i_c \sigma}^a \quad (2-38)$$

## §2.4 N-QD-S系统的交流电流表达式

这一节考虑同时存在超导导线和正常导线的两端口量子点体系, 加交流偏压的特殊情况。由于规范不变性, 我们可以设超导端偏压为零, 并且由于只有一个超导导线, 我们可以选择超导序参量为实数, 即  $\Phi = 0$ 。正常导线是k空间的无自旋极化的理想电子气模型, 超导导线也在k空间表达, 中间区是单能级的量子点模型。这样, 哈密顿(2-23)简化为

$$\begin{aligned} H_L(t) &= \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \\ H_R(t) &= \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_k [\Delta_\beta c_{k\downarrow} c_{-k\uparrow} + \Delta_\beta c_{-k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger] \\ H_c(t) &= \sum_\sigma \epsilon_d d_\sigma^\dagger d_\sigma \\ H_T(t) &= \sum_{\beta k \sigma} [t_{k,j}(t) c_{k\beta\sigma}^\dagger d_\sigma + t_{j,k\sigma}(t) d_\sigma^\dagger c_{k\beta\sigma}] \end{aligned} \quad (2-39)$$

$H_L$  表示左端正常导线,  $H_R$  表示右端超导导线哈密顿。写成Nambu表象的矩阵形式

$$H_L = \sum_k \Psi_{L,k}^\dagger \begin{pmatrix} \epsilon_{L,k} & 0 \\ 0 & -\epsilon_{L,k} \end{pmatrix} \Psi_{L,k} \quad (2-40)$$

$$H_R = \sum_k \Psi_{L,k}^\dagger \begin{pmatrix} \epsilon_{L,k} & \Delta_k \\ \Delta_k & -\epsilon_{L,k} \end{pmatrix} \Psi_{L,k} \quad (2-41)$$