

$$H_{dot} = \Phi^\dagger \begin{pmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & -\epsilon \end{pmatrix} \Phi \quad (2-42)$$

$$H_T = \sum_{k,\beta} \Psi_{k,\beta}^\dagger T_{k,\beta} \Phi + h.c \quad (2-43)$$

where  $\Psi_{\beta,k} = \begin{pmatrix} c_{\beta,k\uparrow} \\ c_{\beta,-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$ ,  $\Phi = \begin{pmatrix} d_\uparrow \\ d_\downarrow^\dagger \end{pmatrix}$ ,  $T_{k,\beta} = \begin{pmatrix} t_{k,\beta}(t) & 0 \\ 0 & -t_{k,\beta}^*(t) \end{pmatrix}$  其中

$$t_{k,L,\sigma}(t) = t \text{Exp} \left[ \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mu_L(\tau) d\tau \right] \quad (2-44)$$

这儿我们没有考虑由外电场诱导的位移电势。

考虑到超导导线中存在电子空穴对, 选择Nambu表象比较方便。仍然利用电流公式(2-22), 但是要注意的是这儿的格林函数定义不用于§2.3节中在泡利矩阵 $\sigma_z$ 表象中的格林函数定义, 在Nambu表象中, 格林函数 $G_{i,j}^{r,a}$ 和 $G_{i,j}^<$ 定义为[5]:

$$G_{i,j}^{r,a} = \mp i\theta(\pm t \mp t') \begin{pmatrix} \langle \{X_{i\uparrow}(t), Y_{j\uparrow}^\dagger(t')\} \rangle & \langle \{X_{i\uparrow}(t), Y_{j\downarrow}(t')\} \rangle \\ \langle \{X_{i\downarrow}^\dagger(t), Y_{j\uparrow}^\dagger(t')\} \rangle & \langle \{X_{i\downarrow}^\dagger(t), Y_{j\downarrow}(t')\} \rangle \end{pmatrix} \quad (2-45)$$

$$G_{i,j}^< = i \begin{pmatrix} \langle Y_{j\uparrow}^\dagger(t') X_{i\uparrow}(t) \rangle & \langle Y_{j\downarrow}(t') X_{i\uparrow}(t) \rangle \\ \langle Y_{j\uparrow}^\dagger(t') X_{i\downarrow}^\dagger(t) \rangle & \langle Y_{j\downarrow}(t') X_{i\downarrow}^\dagger(t) \rangle \end{pmatrix} \quad (2-46)$$

由于公式(2-22)中两项共轭, 我们只求第一项的实部

$$J_{\beta\uparrow}(t) = 2q \sum_{k\sigma} \int_{-\infty}^t dt' \text{Re} \left\{ G_{\uparrow,\sigma}^r(t, t') \left[ t_{\beta,k',\sigma}(t') g_{\beta,k',\sigma,k\uparrow}^<(t', t) t_{\beta,k,\uparrow}(t) \right] + G_{\uparrow,\sigma}^<(t, t') \left[ t_{\beta,k',\sigma}(t') g_{\beta,k',\sigma,k\uparrow}^a(t', t) t_{\beta,k,\uparrow}(t) \right] \right\} \quad (2-47)$$

引入线宽函数

$$\begin{aligned} \Gamma_{\beta,\sigma\sigma'}(\epsilon, t', t) &= 2\pi\rho(\epsilon) t_{\beta,k\sigma}^*(t') t_{\beta,k\sigma'}(t) \\ &= 2\pi\rho_\beta(\epsilon) t_{\beta,k\sigma}^* t_{\beta,k\sigma} \exp \left\{ i \left( \int_0^t \sigma' \mu_\beta(\tau) d\tau - \int_0^{t'} \sigma \mu_\beta(\tau) d\tau \right) \right\} \\ &= \Gamma_\beta \exp \left\{ i \left( \int_0^t \sigma' \mu_\beta(\tau) d\tau - \int_0^{t'} \sigma \mu_\beta(\tau) d\tau \right) \right\} \end{aligned} \quad (2-48)$$

这儿用到了宽带近似 $\rho(\epsilon) = \rho^N$ 。

从而, 方程(2-47)变成

$$J_{L\uparrow}(t) = -2q \text{Im} \int_{-\infty}^t dt' \int \frac{d\epsilon}{2\pi} e^{i(\epsilon + qV_L)(t-t')} \left\{ \Gamma_{L,\uparrow\uparrow}(\epsilon, t', t) \left[ f(\epsilon) G_{\uparrow\uparrow}^r(t, t') + G_{\uparrow\uparrow}^<(t, t') \right] \right\}$$

$$= -2q\text{Im}\Gamma_L \left\{ \frac{1}{2} G_{\uparrow\uparrow}^<(t, t) + \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \int_{-\infty}^t dt' \right. \\ \left. \left[ f(\epsilon) G_{\uparrow\uparrow}^r(t, t') \exp \left( i(\epsilon + qV_L)(t - t') + i \int_{t'}^t W(\tau) d\tau \right) \right] \right\} \quad (2-49)$$

## 参考文献

- [1] N. S. Wingreen, A.-P. Jauho, and Y. Meir, *Time-dependent transport through a mesoscopic structure*, Phys. Rev. B, **48**, 8487-8490 (1993); A.-P. Jauho, N. S. Wingreen, and Y. Meir, *Time-dependent transport in interacting and noninteracting resonant-tunneling systems*, Phys. Rev. B, **50**, 5528-5544 (1994)
- [2] M. H. Pedersen and M. Büttiker, *Scattering theory of photon-assisted dlectron transport*, Phys. Rev. B, **58**, 12993-13006 (1998); B. G. Wang, J. Wang, and H. Guo, *Current partition: a nonequilibrium Green's function approach*, Phys. Rev. Lett., **82**, 398-402 (1999).
- [3] Y. Nambu, *Quasi-particles and Gauge invariance in theory of superconductivity*, Phys. Rev. **117**, 648-663 (1960).
- [4] Y. Zhu, Q.F. Sun, and T.H. Lin, *Andreev reflection through a quantum dot coupled with two ferromagnets and a superconductor*, Phys. Rev. B **65**, 024516-024524 (2001).
- [5] J. C. Curvas, A. Martin-Rodero, and A. L. Yeyti, *Hamiltonian approach to the transport properties of superconducting quantum point contacts*, Phys. Rev. B, **54**, 7366-7379 (1996).
- [6] 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); 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)

### 第三章 自旋霍尔效应与霍尔效应的性质比较

**摘要:** 本章研究存在自旋轨道耦合的二维电子气体体系的内在自旋霍尔效应。通过利用格林函数方法得到的LB公式, 可以求得流过横向导线的具有固定自旋的粒子流 $I_{p,\sigma}$ , 从而得到横向电导 $G_e$ 及自旋霍尔电导 $G_{sH}$ 。发现横向自旋霍尔电导对横向测量位置, 有效磁场的强度, 以及体系的构形及尺寸都非常敏感。随着这些参数的不同, 自旋霍尔电导的大小甚至方向都在改变。自旋霍尔电导的这种行为从本质上区别于量子霍尔电导, 后者不随测量位置, 外磁场强度, 体系尺寸及构形等参数变化, 至少符号不会改变。自旋霍尔效应的这种行为完全源于它的完全不同于量子霍尔效应的量子态: 自旋霍尔效应体系的本征态是扩展态, 而量子霍尔体系本征态是大家熟知的边缘态, 二者有本质区别。

#### §3.1 引言

为了能更深入地研究自旋霍尔效应, 我们首先需要了解自旋霍尔效应的本质。而最直接的方法就是把它和看似相近的量子霍尔效应比较, 发现二者之间的区别与联系。(量子)霍尔效应是凝聚态物理中一个重要现象, 它描述了二维体系中纵向运动的电子受由垂直外磁场引起的洛伦兹力的作用, 向体系横向边缘偏转, 从而导致横向电荷积累的现象。而最近出现的内在自旋霍尔效应 (§1.4节有介绍) 则描述二维体系中纵向运动的自旋受由自旋轨道耦合导致的有效磁场作用, 向体系横向边缘偏转的现象, 并且相反的自旋向着相反的方向偏转, 导致纵向电压驱动下在横向边缘出现符号相反的自旋积累, 如果横向有外电极相连则导致自旋霍尔电流。这两种效应看似相似, 实则不然。首先, 自旋霍尔效应中的有效磁场不同于霍尔效应中的真实磁场, 有效磁场完全由自旋轨道耦合引起, 它不会破坏体系的时间反演对称性, 而真实磁场破坏时间反演对称性; 其次, 自旋霍尔体系中自旋 $\sigma_z$ 不再是好量子数, 即自旋不再守恒, 而真实磁场尽管引起自旋极化(如果考虑Zeeman效应), 却不破坏自旋守恒。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[1], 而对于有限大的系统, 自旋霍尔效应在杂质浓度低于某个临界值时, 仍然可以存在[2], 即自旋霍尔效应可以一定程度抵御杂质散射。而在量子霍尔效应中, 在杂质散射存在的情况下, 霍尔电导不仅继续存在, 而且原来量子化的电导值也继续保持。

在这一章中, 我们通过比较霍尔效应和量子霍尔效应的表现形式, 透过表象寻找自旋霍尔效应的本质。这些比较包括: 霍尔效应中, 横向霍尔电压是个常

数，不会随测量点的不同而变化，那么自旋霍尔电导是不是也不随测量点变化而变化；霍尔效应中只要体系有垂直磁通穿过，不管是从体系的哪个区域穿过，不管磁场强度怎么变化，霍尔电压都会在边缘形成相同符号的同一分布，自旋霍尔电导是不是也应该有类似性质，等等。

### §3.2 体系介绍

所考虑的四端口二维体系如图3-1所示，中间区是介观散射区，包括存在Rashba[4]和Dresselhaus[5]自旋轨道耦合的灰色区域（用“SO”标记）和没有自旋轨道耦合的白色区域（用“NSO”标记）。沿x方向的两个二维导线（lead1和lead2）是驱动端，加小的驱动电压，沿y方向的两个一维导线（lead3和lead4）是横向自旋霍尔电流的测量端。所有的导线都是理想的没有自旋轨道耦合的正常导线。中间区哈密顿  $H = p^2/2m^* + V(x, y) + \frac{\alpha}{\hbar}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) - \frac{\beta}{\hbar}(\sigma_x p_x - \sigma_y p_y)$ ，其中 $\alpha$ 和 $\beta$ 分别是Rashba和Dresselhaus耦合系数， $V(x, y)$ 是体系硬壁限制势，在边界以外为无穷大，边界以内为零， $(x, y)$ 区域包括中间区和导线区，而 $\alpha$ 和 $\beta$ 只有在中间区不为零，在导线区为零。紧束缚模型的二次量子化哈密顿表达如下[3]：

$$H = \sum_i [a_{i1}^\dagger a_{i1}^\dagger] \begin{bmatrix} -t & -iV_D + V_R \\ -iV_D - V_R & -t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{i+\delta_x \uparrow} \\ a_{i+\delta_x \downarrow} \end{bmatrix}$$

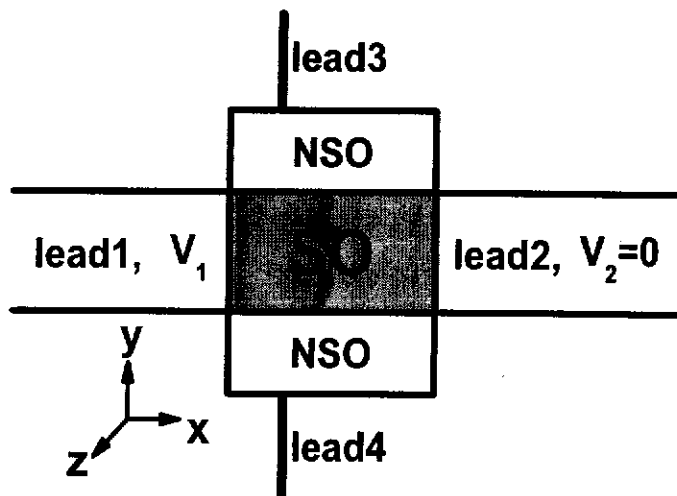


图 3-1 四端口自旋霍尔体系示意图。中间区是介观散射区，包括存在Rashba和Dresselhaus自旋轨道耦合的灰色区域（用“SO”标记）和没有自旋轨道耦合的白色区域（用“NSO”标记）。沿x方向的两个二维导线端口用来加驱动电压，沿y方向的两个一维导线是横向自旋霍尔电流的测量端。

$$+ \sum_i [a_{i1}^\dagger a_{i1}^\dagger] \begin{bmatrix} -t & -iV_R + V_D \\ -iV_R - V_D & -t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{i+\delta_y \uparrow} \\ a_{i+\delta_y \downarrow} \end{bmatrix} + H.C \quad (3-1)$$

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 $i = [i_x, i_y]$ 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，设为长度单位。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。散射区尺寸设为 $N \times M$  ( $M = W + 2m$ )，其中，“SO”区尺寸 $N \times W$ ，对称的两个“NSO”区尺寸都为 $N \times m$ 。导线1和导线2线宽为 $W$ ，一维导线线宽设为1。

因为所有导线里都没有自旋轨道耦合，自旋 $\sigma$ 在导线体系中是守恒量，因此自旋流可以准确定义。流过第 $p$  ( $= 3, 4$ )根导线具有确定自旋 $\sigma$  ( $\sigma = \uparrow, \downarrow$ 代表自旋朝 $+z$ 或 $-z$ 方向)的粒子流 $I_{p,\sigma}$ 可根据Landauer - Büttiker公式(2-36)求得： $I_{p\sigma} = (e/h) \sum_{q \neq p, \sigma'} T_{p\sigma, q\sigma'} (V_p - V_q)$  [6]，其中， $V_p$ 是加在 $p$ 导线上的偏压， $T_{p\sigma, q\sigma'}$ 是自旋为 $\sigma'$ 的电子从导线 $q$ 到导线 $p$ 中的 $\sigma$ 自旋态的透射几率。并且， $T_{p\sigma, q\sigma'} = \text{Tr}[\Gamma_{p\sigma} G^r \Gamma_{q, \sigma'} G^a]$ ，其中展宽函数 $\Gamma_{p\sigma} = i(\Sigma_{p\sigma}^r - \Sigma_{p\sigma}^a)$ ， $\Sigma_{p\sigma}^{r,a}$ 是由导线和导线与散射区的耦合项共同引入的自能， $G^{r,a} = [E - H_c - \sum_p \Sigma_{p\sigma}^{r,a}]^{-1}$ ，其中 $H_c$ 是中间散射区的哈密顿矩阵。有了 $I_{p,\sigma}$ ，自旋流 $J_p^s = \frac{\hbar}{2}(I_{p,\uparrow} - I_{p,\downarrow})$ 和电流 $J_p^e = e(I_{p,\uparrow} + I_{p,\downarrow})$ 马上求得。LB公式中的边条件设置如下： $V_1 = V$ ， $V_2 = 0$ ， $V_3 = V_4 = 0$  (求横向电流时采用自然边条件) 或 $J_3 = J_4 = 0$  (求纯的自旋霍尔电流)。事实上，根据体系的对称关系可以直接得出 $V_3 = V_4 = 0.5$ ，如果我们设 $V_1 = 0.5$ ， $V_2 = -0.5$ ，则 $V_3 = V_4 = 0$ ，回到自然边条件。自旋霍尔电导 $G_{3,sH} = J_3^s/V_1$ ， $G_{4,sH} = J_4^s/V_1$ 。为了便于比较，我们也求了同样体系 (只是边条件不同) 的横向电导 $G_{3,e} = J_3^e/V_1$ 和 $G_{4,e} = J_4^e/V_1$ 。此外，计算过程中，我们选取带底 ( $-4.0t$ ) 附近的费米能 $E_f = -3.8t$ ，其中， $t = \hbar^2/2m^*a^2 \approx 0.1eV$ 表示相邻格点的跳跃能，设为能量单位。 $m^* = 0.05m_e$ ，相应的格点长度 $a \approx 2.6nm$ 。体系尺寸 ( $M, N, m$ ) 和自旋进动长度 $L_{SO} = \frac{\pi a t}{2V_R}$ ) 处于同量级。 $L_{SO}$ 是指自旋进动角改变 $\pi$ 所要经过的距离，如果取 $V_R = 0.03t$ ，则 $L_{SO} = 50a$ 。

### §3.3 数值计算结果及讨论

#### §3.3.1 只存在Rashba自旋轨道耦合的情况

首先，我们研究只有Rashba自旋轨道作用的情况 ( $V_D = 0$ )。在这种情况下，当散射区所有区域都有自旋轨道耦合时 ( $m = 0$ )，自旋霍尔电

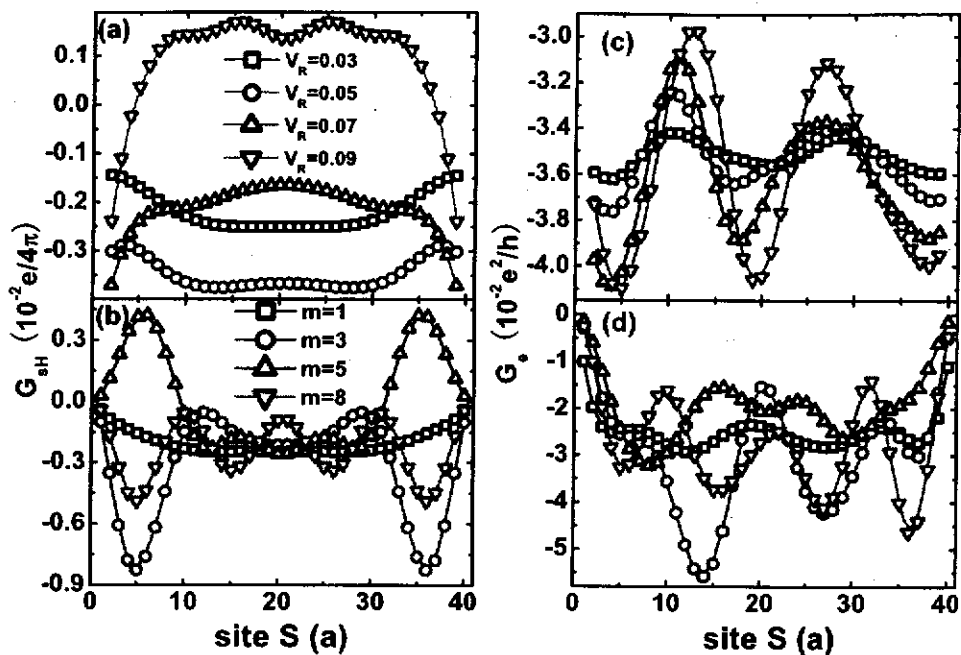


图 3-2 自旋霍尔电导 $G_{SH}$ 和横向电导 $G_e$ 随横向测量位置 $S$ 的变化关系图。图(a,c): 固定“NSO”区域宽度 $m = 0$ , 对于不同的Rashba自旋轨道耦合强度 $V_R = 0.03, 0.05, 0.07, 0.09$ 的情况。图(b,d): 固定Rashba自旋轨道耦合强度 $V_R = 0.03$ , 对于不同的“NSO”区域宽度 $m = 1, 3, 5, 8$ 的情况。其他参数:  $V_D = 0, N = 40, W = 30, E_f = -3.8$ 。

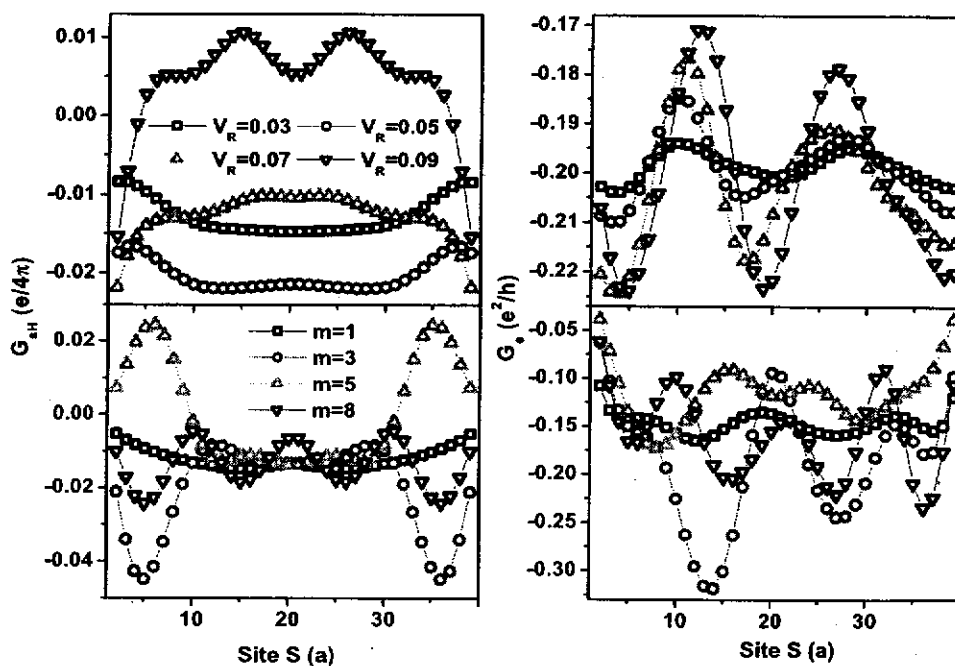


图 3-3 同图3-2, 不同的只是横向导线3和4宽度为 $3a$ 而不是 $1a$ 。

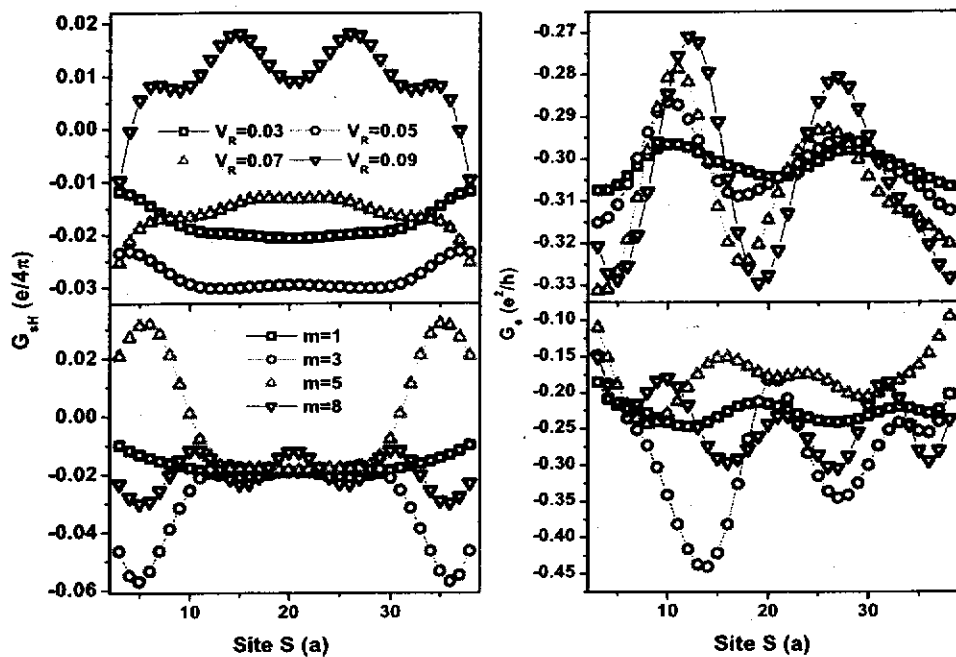


图 3-4 同图3-2，不同的只是横向导线3和4宽度为5a而不是1a。

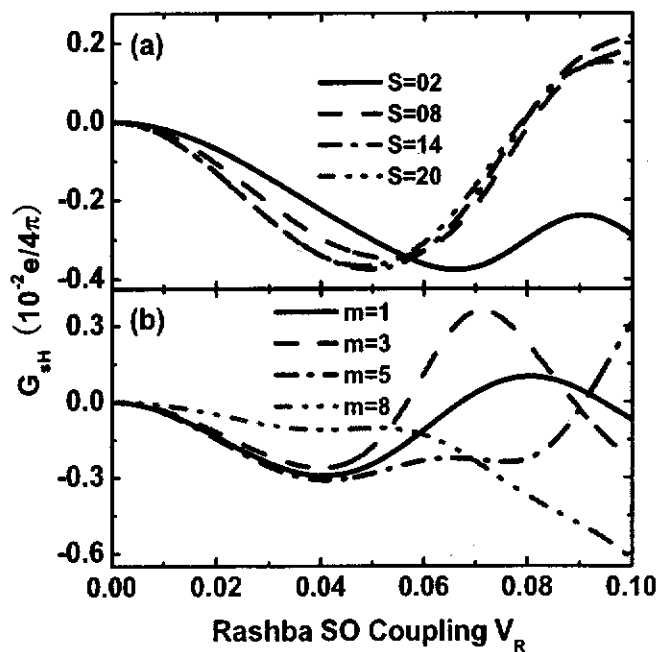


图 3-5 自旋霍尔电导 $G_{SH}$ 和纵向电导 $G_L$ 随Rashba自旋轨道耦合强度 $V_R$ 的变化关系图。图(a)：固定“NSO”区域宽度 $m = 0$ ，对于不同的横向测量位置 $S = 2, 8, 14, 20$ 的情况。图(b)：固定横向测量位置 $S=20$ ，对于不同的NSO”区域宽度 $m = 0, 1, 3, 5, 8$ 的情况。



导  $G_{3,sH} = -G_{4,sH}$ , 而横向电导  $G_{3,e} = G_{4,e} = G_e$ , 因此图中只出示  $G_{4,sH}$  和  $G_{4,e}$ , 分别记作  $G_{sH}$  和  $G_e$ 。图3-2, 3-3, 3-4都是  $G_{sH}$  和  $G_e$  随测量位置的变化关系图, 图3-5是  $G_{sH}$  随Rashba自旋轨道耦合强度  $V_R$  的变化关系图。从中可以看出, 当有效磁场布满整个散射区时 ( $m = 0$ ),  $G_{sH}$  随测量位置的不同有振荡行为, 不仅大小在变化, 甚至也改变方向 (图3-2a中  $V_R = 0.09$  的那条曲线), 而且在固定的测量位置, 对于不同的  $V_R$ ,  $G_{sH}$  也出现了从负值到正值得振荡。与此相反, 真正的霍尔电导  $G_H$  则随测量位置呈同一分布, 大小和方向均不随测量位置改变, 而且这种呈同一分布的  $G_H$  只随外磁场强度的增加单调递增, 绝对不会有振荡行为, 更不会改变符号。而且即使当横向导线宽度不为1, 也会有类似的振荡行为 (图3-3, 3-4), 说明这种振荡现象是一种普遍行为, 并不是由于横向导线的特殊的一维结构导致的结果。接下来, 我们固定有效磁场强度 ( $V_R = 0.03$  固定), 改变有效磁场的作用范围, 即让有效磁场只作用在散射区的中间部分 (看图3-1), 观察自旋霍尔电导的行为。对于霍尔效应, 如果磁场只作用在如图3-1所示的二维平面的中间部分, 由于霍尔电压的作用, 电荷积累会自动从磁场作用范围的横向边缘转移到二维平面的横向边缘, 积累量只是微微改变, 因此霍尔电压或者霍尔电导都不会有太大的改变。而自旋霍尔效应就大为不同, 从图3-2b和3-5b可以看出, 不管有效磁场在散射区中多大范围内存在 (无论  $m$  等于多少),  $G_{sH}$  都随测量位置振荡, 大小变, 方向也变 (图3-2b中  $m = 5$  的那条曲线), 而且对于不同的有效磁场分布 (不同的  $m$ ),  $G_{sH}$  也有改变符号的振荡行为。

为了比较, 我们也作了同样体系不同边条件的横向电导  $G_e$  随测量位置的变化关系图 (图3-2c,d)。发现当  $m = 0$  时,  $G_e$  只在小范围内振荡,  $m \neq 0$  时, 振荡幅度加大, 但是绝对不会改变符号。而且  $G_e$  还比  $G_{sH}$  大将近10倍, 这说明自旋霍尔电导是非常微弱的, 远远小于普通常数  $\frac{Ne}{4\pi}$ ,  $N$  指通道数, 在这儿  $N = 2$ , 当然这和我们选取的费米能以及自旋轨道耦合强度都有很大关系。但是, 在霍尔电导却是精确的普通常数  $\frac{Ne^2}{h}$ ,  $N$  是边缘态的个数, 由磁场强度和费米能共同决定。

为什么自旋霍尔效应和霍尔效应会有如此大的差别? 其根本原因就在于在有限大体系的量子霍尔效应中, 真实的磁场导致边缘态, 此边缘态决定体系的横向霍尔电导或电压。而在自旋霍尔效应中, 没有边缘态, 体系的本征态是扩展态, 正是此扩展态对体系的输运性质起作用。在此扩展态作用下, 使自旋发生偏转的力的指向不像霍尔效应中的洛伦兹力总是向着  $y$  方向, 而是由自旋  $\sigma$  来决定, 由于进动,  $\sigma$  的大小和方向都一直在变化, 导致力的指向也跟着一起变化[7]。由于以上原因, 自旋霍尔电导  $G_{sH}$  对横向测量位置, 系统构形, 自旋轨道耦合强度等

参数十分敏感。

再看图3-6a和3-6c中自旋霍尔电导 $G_{sH}$ 以及横向电导 $G_e$ 随“SO”区域宽度 $W$ 的变化关系。可以看出， $G_{sH}$ 和 $G_e$ 都随 $W$ 的变化出现近周期分布的峰结构。这是由体系的横向限制引起的分立子带导致的。从自由电子模型出发，各子带带底能量 $E_n \approx \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2m \cdot W^2 a^2} = \frac{n^2 \pi^2}{W^2} t$ 。 $W$ 不断增加， $E_n$ 就不断下降，在这个过程中，下降的子带一个一个被费米能 $E_F$ 穿过，当一个新的子带落到费米能以下时，费米面附近的态密度就会有一个跳跃，导致 $G_{sH}-W$ （或者 $G_e-W$ ）关系图上近周期分布的峰依次出现。我们把 $W$ 限制在某一个周期里（比如 $W=44, 45, 46, 47$ ）再来看不同测量点的变化情况，从图3-6b和3-6d可以看出，不同测量点的自旋霍尔电导 $G_{sH}$ 和横向电导 $G_e$ 都出现振荡，其中 $G_e$ 只是在远离零点的地方小幅振荡，而 $G_{sH}$ 的振荡幅度就比较大，当费米能刚好穿过某个自能带时， $G_{sH}$ 甚至出现从正值到负值的大范围振荡（ $W=47$ ）。

### §3.3.2 两种自旋轨道耦合都存在的情况

接下来，我们研究Rashba和Dresselhaus两种自旋轨道耦合都存在的情况。在上一节里已经讲过，当Dresselhaus自旋轨道耦合 $V_D = 0$ 时，流过导线3和导线4的自旋流是守恒的，即 $G_{3,sH} = -G_{4,sH}$ 。但是当 $V_D$ 和 $V_R$ 都不等于零时， $G_{3,sH} \neq$

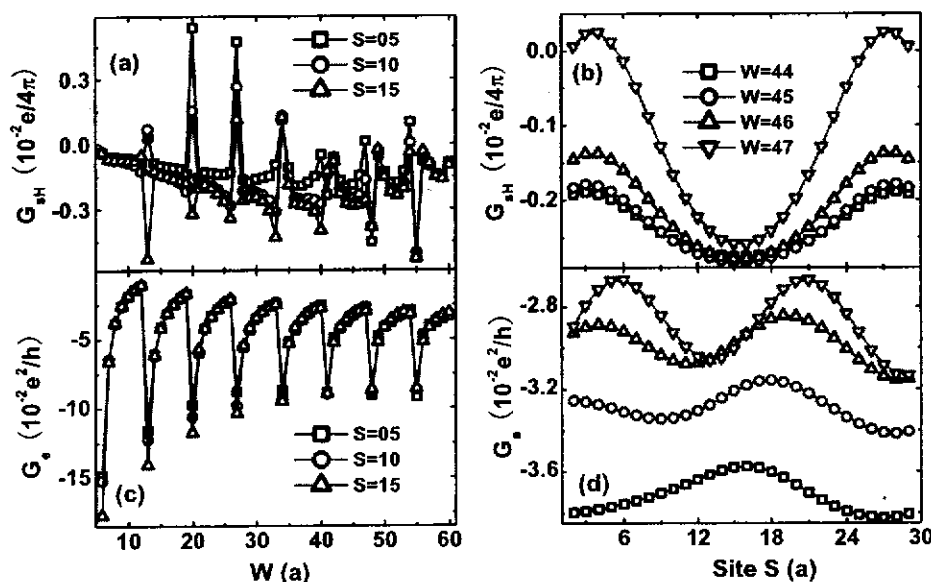


图 3-6 图(a,c): 在固定“SO”区域宽度 $W = 5$ 情况下，自旋霍尔电导 $G_{sH}$ 和横向电导 $G_e$ 在不同的横向测量位置 $S = 5, 10, 15$ 情况下，随“SO”区域宽度 $W$ 的变化关系图。图(b,d): 对于不同的“SO”区域宽度 $W = 44, 45, 46, 47$ ，自旋霍尔电导 $G_{sH}$ 和横向电导 $G_e$ 随横向测量位置 $S$ 的变化关系图。其他参数： $N = 40, m = 0, V_R = 0.03, V_D = 0, E_f = -3.8$ 。

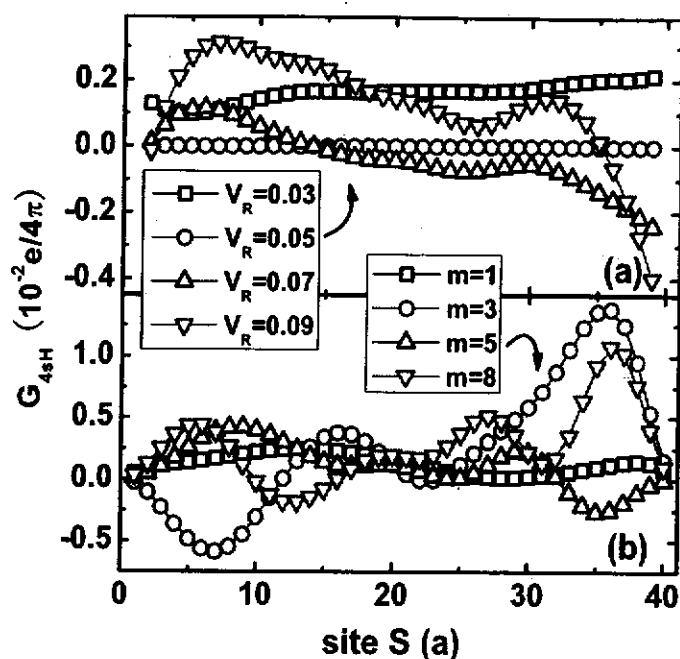


图 3-7 自旋霍尔电导 $G_{4,sH}$ 随横向测量位置 $S$ 的变化关系图。图(a): 固定“NSO”区域宽度 $m = 0$ , 对于不同的Rashba自旋轨道耦合强度 $V_R = 0.03, 0.05, 0.07$ 的情况。图(b): 固定Rashba自旋轨道耦合强度 $V_R = 0.03$ , 对于不同的“NSO”区域宽度 $m = 1, 3, 5, 8$ 的情况。其他参数:  $V_D = 0.05, N = 40, W = 30, E_f = -3.8$ 。

$-G_{4,sH}$ , 也就是说, 这种情况下, 横向自旋流不守恒。另一方面, 根据体系对称性, 自旋霍尔电导有对称关系 $G_{3,sH}(S) = -G_{4,sH}(W - S)$ 。需要指出的是当 $V_D = V_R$ 时,  $G_{4,sH} = G_{3,sH} = 0$ , 这和文献[8]类似。图3-7给出两种自旋轨道耦合都存在时, 自旋霍尔电导 $G_{4,sH}$ 在不同Rashba自旋轨道耦合强度 $V_R$ 和不同“NSO”区域宽度 $m$ 的情况下, 随横向测量位置 $S$ 的变化。在这种情况下,  $G_{4,sH}$ 呈现出和 $V_D = 0$ 的系统相同的特征, 那就是,  $G_{4,sH}$ 依然强烈地依赖于横向测量位置 $S$ , 随 $S$ 振荡, 在某些条件下 ( $V_R = 0.07, 0.09$ ) 甚至出现从负值到正值的振荡; 当 $m \neq 0$  (图3-7b),  $G_{4,sH}$ 普遍有改变符号的振荡行为。这些特征都从本质上区别于霍尔效应。

综上所述, 自旋霍尔效应强烈地依赖于体系参量, 这种现象不是源于横向测量导线的特殊维度, 而是一种普遍现象, 不管在只有Rashba耦合, 还是Dresselhaus耦合, 还是两者兼有的体系中, 都是如此。此外, 如果导线3和导线4位于两个横向边缘的不同位置,  $G_{3,sH}$ 和 $G_{4,sH}$ 的行为将更加复杂, 因此, 自旋霍尔效应决不是像霍尔效应那样简单, 还有待于深入研究。

### §3.4 小结

通过以上分析，我们得出结论：自旋霍尔电导随横向测量位置，体系构形，以及自旋轨道耦合强度等体系参量都有强烈的依赖关系，并随这些参量的变化剧烈振荡，这种振荡不仅改变自旋霍尔电导的大小，甚至还改变它的方向，这种现象关系在自旋霍尔效应中是普遍存在的，并不是个别特殊现象。这和我们熟知的霍尔效应大为不同。在霍尔效应中，霍尔电导不随横向测量位置的改变而改变，不依赖于体系构形，而且不管外磁场大小怎样变化，霍尔电导也绝对不会改变方向。自旋霍尔效应和霍尔效应之间之所以有这些现象上的区别，其根本原因是它们的本征态不同，在霍尔效应中，决定霍尔电导的是边缘态，而在自旋霍尔体系，本征态是扩展的，无论是改变体系构形或是改变自旋轨道耦合强度，都将导致本征态在全局范围内的改变，从而从根本上导致了自旋霍尔电导以及横向电导随测量位置等参数振荡的结果。

## 参考文献

- [1] 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**, 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).
- [2] 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); 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); 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)-241304(R) (2004).
- [3] 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); 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)
- [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] M. I. Dyakonov and V. Y. Kachorovskii, Sov. Phys. Semicond., **20**, 110 (1986); G. Bastard and R. Ferreira, Surf. Sci. **267**, 335 (1992); G. Dresselhaus, *Spin-orbit coupling effects in Zinc Blende structure*, Phys. Rev., **100**, 580-586 (1955).
- [6] Chapter 2 and 3, in *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, edited by S. Datta (Cambridge University Press 1995); T. P. Pareek, *Pure spin currents and the associated electrical voltage*, Phys. Rev. Lett., **92**, 076601-076604 (2004).
- [7] B. K. Nikolic, L. P. Zarbo, and S. Welack, *it Transverse spin-orbit force in the spin Hall effect in ballistic semiconductor wires*, Phys. Rev. B **72**, 075335-075340 (2005); S.-Q. Shen, *Spin Transverse Force on Spin Current in an Electric Field*, Phys. Rev. Lett. **95**, 187203-187206 (2005); K. Yu. Bliokh, *Comment on "Spin Transverse Force on Spin Current in an Electric Field"*, cond-mat/0511146.
- [8] 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).



## 第四章 自旋流诱导的自旋霍尔效应

**摘要:** 本章研究在存在Rashba或(和) Dresselhaus自旋轨道耦合的四端口二维电子气系统中, 纵向自旋流或者自旋压 $qV_{s=x,y,z}$ 导致横向自旋霍尔电导 $G^{ss'}$  (暂且叫自旋自旋霍尔效应) 的新现象。通过利用格林函数方法得到的Landauer-Büttiker公式, 可以求得 $G^{ss'}$ 的各个分量( $s, s' = x, y, z$ 共九个分量)。此外, 纵向自旋流还导致横向电导 $G^{cs}$ , 称之为逆自旋霍尔效应 (§1.4.2节中有介绍)。而根据第三章的内容, 纵向的偏电压 $qV_c$ 可以导致自旋霍尔电导 $G^{sc}$  (自旋霍尔效应) 以及横向电导 $G^{cc}$  (姑且叫霍尔效应, 事实上, 严格意义上或者说大家公认的霍尔效应是真实磁场作用下而不是有效磁场作用下的效应)。综合起来, 纵向偏电压或自旋偏压引起横向自旋流或电导, 共计 $4 \times 4 = 16$ 个横向导元, 表示为 $G_p^{\mu\nu} = J_{p,\mu}/V_\nu$ , 其中 $\mu, \nu = x, y, z, c$ 。由于体系存在对称关系, 这些导元之间相互关联。对于只存在Rashba (或Dresselhaus) 自旋轨道耦合的 $C_2$ 对称系统, 16个导元之中有8个元素为零。数值计算表明自旋自旋霍尔电导 $G^{ss'}$ 远远大于其它导元分量。因此, 在存在自旋轨道耦合的二维体系中, 自旋自旋霍尔效应占主导地位。

### §4.1 引言

在存在自旋轨道耦合的体系中, 纵向偏电压导致横向自旋流, 在没有外电路的情况下导致横向自旋积累, 这是上面已经介绍过的自旋霍尔效应。自旋霍尔分内在自旋霍尔效应和外在自旋霍尔效应 (有关介绍见§1.4.1节), 这儿我们关注的是内在自旋霍尔效应, 即自旋轨道耦合导致的体系特殊的能带结构引起的自旋霍尔效应 (此后, 只要不特别指明, 文中所有出现的自旋霍尔效应都指的是内在自旋霍尔效应)。此外, 不仅纵向电流能导致横向自旋流, 反过来, 纵向自旋流也可以导致横向电流[1, 2], 谓之逆自旋霍尔效应。不仅如此, 自旋霍尔和逆自旋霍尔效应之间还存在Onsager关系[2]。Onsager关系指出, 自旋霍尔效应中的自旋霍尔电导和逆自旋霍尔效应中的霍尔电导相等。两点需要说明: 第一, 这儿的霍尔电导指由自旋流导致的垂直方向的电导; 第二, 由于自旋流和电导单位不同, 本谈不上相等, 但是这儿的相等只是粒子意义上的相等, 并不涉及自旋和电荷的实际单位。

迄今为止, 大部分关于自旋霍尔效应[3, 4]中的诱导自旋流以及逆自旋霍尔效应中的驱动自旋流的研究都只局限于自旋 $\sigma_z$ 分量。然而, 由于自旋的矢量性, 自旋极化一定会朝向各个方向, 包括 $x, y, z$ 方向以及任何 $\hat{n}$ 方向, 因此自旋霍尔效

应以及逆自旋霍尔效应中的自旋流绝不只是 $\sigma_z$ 的极化方向，它也可能沿着平行于 $x-y$ 平面的任何方向极化。Branislav等人就研究指出自旋霍尔电导不仅有传统的垂直于平面的自旋 $z$ 分量，而且有指向平面的自旋 $x, y$ 分量[5, 6]，并且两个横向端口输出的沿 $y$ 方向极化的横向自旋霍尔流方向相等（如图4-1左上插图所示），即它们同时流入或同时流出两个横向导线（图4-1中的导线2和导线4）。而在逆自旋霍尔效应中，纵向（图4-1中的导线1和导线3）驱动自旋流的极化方向也可能沿平行于 $x-y$ 平面的 $x$ 和 $y$ 方向，并且由 $y$ 方向极化的纵向自旋流诱导的两个横向导线中的电流方向也相同（同时流入或同时流出）[7]。与此相反，在普通的 $\sigma_z$ 极化的自旋霍尔效应及逆自旋霍尔效应中，诱导的两个横向端口的自旋流或电流的方向总是相反（如图4-1右上插图所示），即一个端口流入另一个端口流出。

为了彻底研究自旋霍尔效应中自旋的矢量性，我们在有限大的四端口体系的纵向（图4-1中的导线1和导线3）端口加自旋相关的偏电压（也叫自旋压），计算横向端口中（图4-1中的导线2和导线4）各个分量的诱导自旋霍尔电导，即自旋流诱导的自旋霍尔电导，又叫自旋自旋霍尔电导。这是一个新的尚未有人涉足的领域。

### §4.2 体系介绍

如图4-1所示，在有限大的四端口二维体系中，中间区是介观散射区，存在Rashba或（和）Dresselhaus自旋轨道相互作用，它通过四根导线（图中“lead1”，“lead2”，“lead3”，“lead4”）和外电极相连。体系哈密

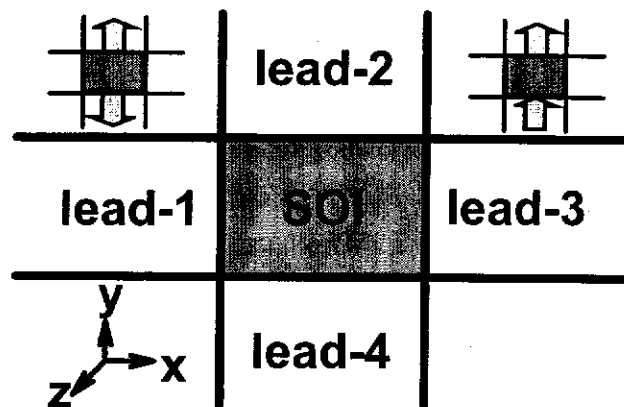


图 4-1 主图：存在Rashba或（和）Dresselhaus自旋轨道耦合的四端口二维电子气体系示意图。四个导线都是干净的，没有任何自旋轨道耦合的理想导线，其中纵向导线1和导线3是驱动端，用来加驱动自旋压 $V_s$ 或偏电压 $V_e$ ，导线2和导线4是测量端，用来测量由纵向驱动诱导的横向自旋流 $J_{p,s}$ 和横向电流 $J_{p,c}$ 。左上插图：描述导线2和导线4中相同方向即同时流入或同时流出的流，此时， $J_2 = J_4$ 。右上插图：描述导线2和导线4中相反方向即一个流入另一个流出的流，此时， $J_2 = -J_4$ 。

顿  $H_0 = p^2/2m^* + V(x, y) + \frac{\alpha}{\hbar}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) - \frac{\beta}{\hbar}(\sigma_x p_x - \sigma_y p_y)$ , 其中  $\alpha$  和  $\beta$  分别是 Rashba 和 Dresselhaus 耦合系数,  $V(x, y)$  是体系硬壁限制势, 在边界以外为无穷大, 边界以内为零,  $(x, y)$  区域包括中间区和导线区, 而  $\alpha$  和  $\beta$  只有在中间区不为零, 在导线区为零。整个体系的紧束缚模型的二次量子化哈密顿表达如下 [10, 11]

$$H = \sum_i [-t a_i^\dagger a_{i+\delta x} - t a_i^\dagger a_{i+\delta y} + i a_i^\dagger (V_R \sigma_y + V_D \sigma_x) a_{i+\delta x} - i a_i^\dagger (V_R \sigma_x + V_D \sigma_y) a_{i+\delta y}] + H.C \quad (4-1)$$

其中  $a_i^\dagger = (a_{i\uparrow}^\dagger, a_{i\downarrow}^\dagger)$ ,  $i$  是中间区和导线区的格点坐标,  $t = \hbar^2/2m^*a^2$  是相邻格点的跳跃项,  $a$  是格点长度, 在这儿设为长度单位。  $\delta x$  和  $\delta y$  是沿  $x$  和  $y$  方向的单位矢量。  $\sigma_x, \sigma_y$  是自旋泡利矩阵。  $V_R = \alpha/2a$  和  $V_D = \beta/2a$  分别代表 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合强度。注意,  $V_R$  和  $V_D$  只有在中间散射区取值才不为零。

纯的自旋压  $V_s$  ( $s = x, y, z$ ) 加在纵向驱动端 (导线1和导线3), 它不会引起偏电压  $V_c$ , 可以由自旋电池装置提供, 此装置在理论 [8] 及实验上均已实现 [9]。导线1和导线3之间也可以加有自旋极化的偏电压, 而不是纯的自旋压, 比如考虑导线1和导线3为铁磁导线情况。这种情况我们也可以通过  $J_\mu = G^{\mu\nu} V_\nu$  来得到各个横向导元分量  $G^{\mu\nu}$ , 但是这样一来, 自旋自旋霍尔效应, 自旋霍尔效应以及逆自旋霍尔效应将混在一起。所以, 为了便于理论分析, 我们在纵向端口加纯的, 整体没有电压降落的自旋压。在这样的自旋偏压  $V_s$  作用下, 导线1和导线3中自旋向上和自旋向下的电子的化学势  $\mu$  发生劈裂, 有  $\mu_{1,s\uparrow} = -\mu_{1,s\downarrow} = -\mu_{3,s\uparrow} = \mu_{3,s\downarrow} = eV/2$ , 其中  $s = x, y, z$  代表自旋极化方向。为了比较, 我们也在导线1和导线3上加偏电压  $V_c$ , 研究已有的自旋霍尔效应, 此时,  $\mu_{1,s\uparrow} = \mu_{1,s\downarrow} = -\mu_{3,s\uparrow} = -\mu_{3,s\downarrow} = eV/2$ 。在偏电压  $V_c$  作用下, 导线1和导线3中的电势是自旋不相关的。因此, 在导线1和导线3中, 可以不用区分自旋方向, 因为不管化学势  $\mu_{1,s\uparrow} = \mu_{1,s\downarrow} = -\mu_{3,s\uparrow} = -\mu_{3,s\downarrow} = eV/2$  中的  $s$  取什么方向, 在横向端口中都导致相同的结果, 包括横向自旋流和电流。横向端口作为测量端, 偏压设为零。由于自旋轨道相互作用, 纵向的自旋压  $V_s$  或偏电压  $V_c$  引起横向的自旋流  $J_s$  或电流  $J_c$ , 在这儿我们分别用黑体  $\mathbf{J}$  和  $\mathbf{V}$  表示四分量矢量  $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z, J_c)$  和  $\mathbf{V} = (V_x, V_y, V_z, V_c)$ 。在小偏压极限, 求得  $4 \times 4$  维的线性横向矩阵导  $G^{\mu\nu} = J_{p,\mu}/V_\nu$ , 其中  $\mu, \nu \in \{x, y, z, c\}$ ,  $p = 2, 4$ 。

### §4.3 公式推导

因为导线中没有自旋轨道耦合，自旋守恒，这样由纵向自旋压或偏电压 $V_\mu$ 诱导的横向导线2和导线4中自旋为 $\pm s$ 的粒子流 $J_{p,\pm s}$  ( $p=2,4$ ,  $s=x,y,z$ ) 可以通过Landauer-Büttiker (LB) 公式 $I_{p,s\sigma} = (1/h) \sum_{q,\sigma'} T_{ps\sigma,q\sigma'} (\mu_{p,s\sigma} - \mu_{q,s'\sigma'})$  分别求得。其中， $\mu_{p,s\sigma}$  和  $\mu_{q,s'\sigma'}$  源于 $q$ 端口所加的自旋压或偏电压引起的自旋相关或自旋无关的化学势 $V_\mu$  (上一段有描述)。  $T_{qs'\sigma',ps\sigma}$  表示从导线 $p$ 的自旋 $s\sigma$ 态到导线 $q$ 的自旋 $s'\sigma'$ 态的透射几率。注意，公式4-1表达的是 $\sigma_z$ 表象下的哈密顿，因此直接用哈密顿4-1，只能求沿 $s, s' = \pm z$ 方向极化的透射系数 $T_{qs'\sigma',ps\sigma}$  及相应粒子流 $J_{p,\pm s}$ ，而得不到沿 $\pm x$ 和 $\pm y$ 方向极化的粒子流。为此，我们需要在自旋空间旋转哈密顿(4-1)，使得导线 $p$ 中的 $\uparrow, \downarrow$ 代表 $\pm s$ 方向，导线 $q$ 中的 $\uparrow, \downarrow$ 代表 $\pm s'$ 方向。

对于任意非自旋投影方向 $\hat{s}, \hat{s}'$ 的自旋算符

$$\sigma_{s,s'} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & e^{-i\phi} \sin(\theta) \\ e^{i\phi} \sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad (4-2)$$

总存在归一化变换

$$U_s = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} & -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (4-3)$$

其中 $(\theta, \phi)$ 表示 $s$ 方向方位角。使 $\sigma_{s,s'}$ 变成 $\sigma_z$ 投影算符，即 $U_{s,s'}^\dagger \sigma_{s,s'} U_{s,s'} = \sigma_z$ 。旋转后的升降算符变为

$$\begin{pmatrix} a'_{i\uparrow} \\ a'_{i\downarrow} \end{pmatrix} = U_{s(s')}^\dagger \begin{pmatrix} a_{i\uparrow} \\ a_{i\downarrow} \end{pmatrix} \quad (4-4)$$

其中 $i$ 是导线 $p(q)$ 中的格点坐标，中间区和其它两根纵向导线中的升降算符 $a_{i\sigma}$ 维持原状。变换后导线 $p, q$ 中的哈密顿 $H'_{p,q}$ 为

$$\begin{aligned} H'_{p,q} &= \sum_{i,i'} (a'_{i\uparrow}, a'_{i\downarrow})_{p,q} U_s^\dagger \begin{pmatrix} t & 0 \\ 0 & t \end{pmatrix} U_s \begin{pmatrix} a'_{i'\uparrow} \\ a'_{i'\downarrow} \end{pmatrix}_{p,q} \\ &= \sum_{i,i'} (a'_{i\uparrow}, a'_{i\downarrow})_{p,q} \begin{pmatrix} t & 0 \\ 0 & t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a'_{i'\uparrow} \\ a'_{i'\downarrow} \end{pmatrix}_{p,q} \end{aligned} \quad (4-5)$$

其中， $i, i'$ 是导线区的格点坐标。可以看出，因为导线哈密顿和自旋无关，不包含自旋 $\sigma$ 矩阵算符，因此在 $U_s$ 变换作用下，导线哈密顿保持不变。而通过变换，导线和中间区的耦合哈密顿形式却发生了如下变化

$$H'_T = \sum_{i,i'} (a'_{i\uparrow}, a'_{i\downarrow})_c \begin{pmatrix} t & 0 \\ 0 & t \end{pmatrix} U_s \begin{pmatrix} a'_{i'\uparrow} \\ a'_{i'\downarrow} \end{pmatrix}_{p,q} + H.C.$$

$$= (a_{\uparrow}^{\dagger}, a_{\downarrow}^{\dagger})_c t_{cp} \otimes U_s \begin{pmatrix} a_{\uparrow}^{\dagger} \\ a_{\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix}_{p,q} + H.C. \quad (4-6)$$

其中，“ $c$ ”代表中间区，“ $p$ ”代表第 $p$ 根导线。 $i, i'$ 是导线区或中间区的格点坐标， $\otimes$ 表示直积。可以看出，耦合哈密顿矩阵由原来的 $t_{cp} \otimes I (I \otimes t_{pc})$ 变为现在的 $t_{cp} \otimes U_s (U_s \otimes t_{pc})$ ，其中， $t_{cp}(t_{pc})$ 是从中间区到导线 $p$ （从导线 $p$ 到中间区）的轨道空间的耦合哈密顿矩阵。由此得出，在新的自旋表象下，由导线和耦合项共同导致的自能：

$$\begin{aligned} \bar{\Sigma}_{p\uparrow}^r &= [T_{cp} \otimes U_s] \left[ g_p^r \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right] [U_s^{\dagger} \otimes T_{pc}] = \Sigma_p^r \otimes U_s \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} U_s^{\dagger} \\ \bar{\Sigma}_{p\downarrow}^r &= [T_{cp} \otimes U_s] \left[ g_p^r \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] [U_s^{\dagger} \otimes T_{pc}] = \Sigma_p^r \otimes U_s \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} U_s^{\dagger} \\ \bar{\Sigma}_p^r &= \bar{\Sigma}_{p\uparrow}^r + \bar{\Sigma}_{p\downarrow}^r = T_{cp} g_p^r T_{pc} \otimes I = \Sigma_p^r \otimes I \end{aligned} \quad (4-7)$$

其中， $\Sigma_p^r$ 是变换以前不计自旋的自能矩阵， $g_p^r$ 是第 $p$ 根导线的格林函数矩阵。上式说明转动后的总自能 $\bar{\Sigma}_p^r$ 形式不变，这是因为体系的耦合矩阵及导线哈密顿都与自旋无关。接下来，变换后的态展宽函数 $\Gamma_{p,s\sigma}$ 同理可得

$$\Gamma_{p,s\sigma} = i(\bar{\Sigma}_{p\sigma}^r - \bar{\Sigma}_{p\sigma}^a) = i(\Sigma_p^r - \Sigma_p^a) \otimes U_s S_{\sigma} U_s^{\dagger} \quad (4-8)$$

其中， $\sigma = \uparrow, \downarrow$ 分别代表 $s$ 方向的自旋上和自旋下，

$$S_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

利用方程(4-8)，不管 $s, s'$ 朝什么方向，从导线 $p$ 自旋 $s$ 态到导线 $q$ 的自旋 $s'$ 态的透射系数都能得到

$$\begin{aligned} T_{qs'\sigma',ps\sigma} &= \text{Tr}[\Gamma_{q,s'\sigma'} G^r \Gamma_{p,s\sigma} G^a] \\ &= \text{Tr}[\Gamma_q \otimes U_{s'} S_{\sigma'} U_{s'}^{\dagger} G^r \Gamma_p \otimes U_s S_{\sigma} U_s^{\dagger} G^a] \end{aligned} \quad (4-9)$$

其中，超前和推迟格林函数 $G^r = [G^a]^{\dagger} = \{E_F I - H_0 - \sum_{p,\sigma} \Sigma_{p,\sigma}^r\}^{-1}$ ，其中 $I$ 是 $2N \times 2N$ 维的单位矩阵（ $N$ 代表中间区的格点数）。因为自能 $\Sigma_p^r$ 和导线中自旋取向无关，不受自旋极化方向的影响【方程(4-7)】，因此格林函数 $G^{r,a}$ 也不受自旋极化方向影响。这意味着不管导线区的哈密顿在自旋空间如何旋转，中间区的非平衡格林函数 $G^{r,a}$ 都会保持相同的形式。有了透射系数 $T_{qs'\sigma',ps\sigma}$ ，粒子流 $I_{p,s\sigma} = (1/h) \sum_{q,\sigma'} T_{ps\sigma,qs'\sigma'} (\mu_{p,s\sigma} - \mu_{q,s'\sigma'})$ 马上求得。

一旦有了粒子流 $I_{p,s\sigma}$  ( $p = 2, 4$ ) 电流 $J_{p,c} = e\{I_{p,s\uparrow} + I_{p,s\downarrow}\}$ 和自旋流 $J_{p,s} = (\hbar/2)\{I_{p,s\uparrow} - I_{p,s\downarrow}\}$ 自然可求 ( $s = x, y, z$ )。事实上，电流 $J_{p,c}$ 已经和自旋指标 $s$ 无关，即 $I_{p,x\uparrow} + I_{p,x\downarrow} = I_{p,y\uparrow} + I_{p,y\downarrow} = I_{p,z\uparrow} + I_{p,z\downarrow} = I_{p,\hat{n}\uparrow} + I_{p,\hat{n}\downarrow}$ ，因此下面的表达统统都略掉电流表达式中的 $s$ 下标。有了横向流 $\mathbf{J}_p = (J_{p,x}, J_{p,y}, J_{p,z}, J_{p,c})$ 和纵向

驱动压  $V = (V_x, V_y, V_z, V_c)$ , 16个横向导元  $G_p^{\mu\nu} = J_{p,\mu}/V_\nu (\mu, \nu \in c, x, y, z)$  很容易求得。这16个导元包括纵向偏电压  $V_c$  诱导横向电流  $J_{p,c}$  产生的霍尔电导  $G_p^{cc}$ , 纵向偏电压  $V_c$  诱导横向自旋流  $J_{p,s=x,y,z}$  产生的自旋霍尔电导  $G_p^{cs}$ , 纵向自旋压  $V_{s=x,y,z}$  诱导横向电流产生的逆自旋霍尔电导  $G_p^{sc}$ , 以及纵向自旋压  $V_{s=x,y,z}$  诱导横向自旋流  $J_{p,s=x,y,z}$  产生的自旋自旋霍尔电导  $G_p^{ss'}$ 。

#### §4.4 16个导元之间的对称关系

在做具体的数值计算之前, 我们先来根据体系的对称性分析以上16个横向导元  $G_p^{\mu\nu}$  之间的对称关系。首先, 哈密顿(4-1)所描述的体系满足时间反演不变性[12], 因此透射系数满足:  $T_{ps\sigma,qs'\sigma'} = T_{qs'\bar{\sigma},ps\bar{\sigma}}$ , 透射系数的这种关系决定了横向导元的性质; 其次, 如果体系还具有几何对称性, 16个导元中还会有零元出现, 使结果大大简化。下面, 我们就以矩形体系这种具有  $C_2$  对称的体系为例, 利用体系对称性, 得出16个导元之间的对称关系。

对于中间区为矩形的体系, 它的几何形状或者说限制势  $V(x, y)$  具有绕过矩形中心沿  $x, y, z$  方向的三条对称轴旋转  $180^\circ$  旋转不变的  $C_2$  对称。然而, 体系中的自旋轨道耦合部分不能满足此实空间的  $C_2$  旋转不变性, 为此, 我们需要同时考虑轨道和自旋空间, 构造能使整个哈密顿满足操作变换不变的对称操作  $U = U_0 \otimes U_s$ , 其中,  $U_0$  和  $U_s$  分别是作用在实空间和自旋空间的对称操作。分析

表 4-1 四种情况下16个横向导元之间的对称关系: (a)  $V_R \neq 0, V_D = 0$ ; (b)  $V_R = 0, V_D \neq 0$ ; (c)  $V_R \neq V_D \neq 0$ ; (d)  $V_R = V_D \neq 0$ 。表中“0”表示相应导元  $G_{2(4)}^{\mu\nu} = 0$ , “+ (-)”表示  $G_2^{\mu\nu} = \pm G_4^{\mu\nu}$ 。

(a)	$V_x$	$V_y$	$V_z$	$V_c$	(b)	$V_x$	$V_y$	$V_z$	$V_c$
$J_x$	0	-	+	0	$J_x$	0	-	0	+
$J_y$	-	0	0	+	$J_y$	-	0	+	0
$J_z$	+	0	0	-a	$J_z$	0	+	0	-c
---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
$J_c$	0	+	-a	0	$J_c$	+	0	-c	0
(c)	$V_x$	$V_y$	$V_z$	$V_c$	(d)	$V_x$	$V_y$	$V_z$	$V_c$
$J_x$	-	-	+	+	$J_x$	-r	-s	+o	+e
$J_y$	-	-	+	+	$J_y$	-s	-r	+o	+e
$J_z$	+	+	-	-	$J_z$	+u	+u	-	0
---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
$J_c$	+	+	-	-	$J_c$	+v	+v	0	-

以下四种不同体系：(1). 仅存在Rashba自旋轨道耦合；(2). 仅存在Dresselhaus自旋轨道耦合；(3). Rashba和Dresselhaus自旋轨道都存在，但是耦合强度不等；(4). Rashba和Dresselhaus自旋轨道都存在，且耦合强度相等。

下面，我们以第一种仅存在Rashba自旋轨道耦合的情况为例，列出所有能使整个哈密顿操作变换不变(即， $U^\dagger H U = H$ )的对称操作 $U$ ，并分别依据这些操作导出横向导元之间的对称关系。

(i)  $U_1 = C_{2z} \otimes \exp(-i\frac{\pi}{2}\sigma_z)$ ，它对哈密顿进行如下变换： $x \rightarrow -x$ ， $y \rightarrow -y$ ， $z \rightarrow z$ ， $\sigma_x \rightarrow -\sigma_x$ ， $\sigma_y \rightarrow -\sigma_y$ ， $\sigma_z \rightarrow \sigma_z$ 。在 $U_1$ 作用下，系统(包括实空间和自旋空间)绕过中心点的 $z$ 轴旋转 $\pi$ ，导致 $J_{2,x\sigma} \rightarrow J_{4,x\bar{\sigma}}$ ， $\mu_{1,x\sigma} \rightarrow \mu_{3,x\bar{\sigma}}$ 。这样自旋流 $J_{2,x} = (\hbar/2)\{J_{2,x\uparrow} - J_{2,x\downarrow}\} \rightarrow (\hbar/2)\{J_{4,x\downarrow} - J_{4,x\uparrow}\} = -J_{4,x}$ ，而自旋偏压 $V_x$ 保持不变，因为电势 $V_c$ 和自旋 $\sigma_x$ 在实空间和自旋空间旋转变换下同时改变符号，结果相当于 $V_x$ 不变号。对 $J_{2,\mu}$ 和 $V_\mu$ 的操作同理可得，有：

$$\begin{aligned} J_{2,c} &\rightarrow J_{4,c} & V_c &\rightarrow -V_c \\ J_{2,x} &\rightarrow -J_{4,x} & V_x &\rightarrow V_x \\ J_{2,y} &\rightarrow -J_{4,y} & V_y &\rightarrow V_y \\ J_{2,z} &\rightarrow J_{4,z} & V_z &\rightarrow -V_z \end{aligned} \quad (4-10)$$

这样便得到横向导元间的对称关系。例如 $G_2^{xx} = J_{2,x}/V_x = -J_{4,x}/V_x = -G_4^{xx}$ ，等等。

(ii)  $U_2 = C_{2y} \otimes \exp(-i\frac{\pi}{2}\sigma_x)$ ，它对哈密顿进行如下变换： $x \rightarrow -x$ ， $y \rightarrow y$ ， $z \rightarrow -z$ ， $\sigma_x \rightarrow \sigma_x$ ， $\sigma_y \rightarrow -\sigma_y$ ， $\sigma_z \rightarrow -\sigma_z$ 。 $U_2$ 变换相当于在实空间绕过中心点的 $y$ 轴旋转 $\pi$ ，并绕自旋空间的 $x$ 轴旋转 $\pi$ 。在 $U_2$ 作用下， $J_{p,\mu}$ ( $p=2,4$ )和 $V_\mu$ 变为如下形式：

$$\begin{aligned} J_{2(4),c} &\rightarrow J_{2(4),c} & V_c &\rightarrow -V_c \\ J_{2(4),x} &\rightarrow J_{2(4),x} & V_x &\rightarrow -V_x \\ J_{2(4),y} &\rightarrow -J_{2(4),y} & V_y &\rightarrow V_y \\ J_{2(4),z} &\rightarrow -J_{2(4),z} & V_z &\rightarrow V_z \end{aligned} \quad (4-11)$$

得出， $G_p^{cc} = J_{p,c}/V_c = J_{p,c}/(-V_c) = -G_p^{cc}$ ，从而有 $G_p^{cc} = 0$  ( $p=2,4$ )。事实上，从 $U_2^\dagger H U_2 = H$ ，我们便可得出矩阵中的八个元素为零，它们是： $G_p^{cc} = G_p^{cx} = G_p^{xc} = G_p^{xx} = G_p^{yy} = G_p^{yz} = G_p^{zy} = G_p^{zz} = 0$  ( $p=2,4$ )。

(iii)  $U_3 = C_{2x} \otimes \exp(-i\frac{\pi}{2}\sigma_y)$ ，它对哈密顿进行如下变换： $x \rightarrow x$ ， $y \rightarrow -y$ ， $z \rightarrow -z$ ， $\sigma_x \rightarrow -\sigma_x$ ， $\sigma_y \rightarrow \sigma_y$ ， $\sigma_z \rightarrow -\sigma_z$ 。 $U_3$ 变换相当于体系实空间 $x$ 轴旋转 $\pi$ ，并绕

自旋空间y轴旋转 $\pi$ 。在 $U_3$ 作用下,  $J_{p,\mu}(p = 2, 4)$ 和 $V_\mu$ 变为如下形式:

$$\begin{aligned} J_{2,c} &\rightarrow J_{4,c} & V_c &\rightarrow V_c \\ J_{2,x} &\rightarrow -J_{4,x} & V_x &\rightarrow -V_x \\ J_{2,y} &\rightarrow J_{4,y} & V_y &\rightarrow V_y \\ J_{2,z} &\rightarrow -J_{4,z} & V_z &\rightarrow -V_z \end{aligned} \quad (4-12)$$

值得一提的是, 以上三种对称操作并不是互不相关的, 例如,  $U_3 U_1 = U_2$ , 因此, 从方程(4-10)和方程(4-12)也可以得到方程(4-11)。

综合方程(4-10,4-11,4-12), 16个导元 $G_p^{\mu\nu}$ 间的对称马上可以得到, 结果列在表4-1中。表4-1a,b,c,d全部表示成类似矩阵的形式, 它的列(用“ $J_\mu$ ”标记)表示横向(导线2或导线4)测到的电流或自旋流, 行(用“ $V_\nu$ ”标记)表示纵向(导线1和导线3之间)自旋驱动压或驱动电压。表中的“0”表示导线2和导线4测到的横向自旋导或电导都为零, “+(-)”表示非零的, 并且在导线2和4中方向相同( $G_2^{\mu\nu} = G_4^{\mu\nu}$ )或相反( $G_2^{\mu\nu} = -G_4^{\mu\nu}$ )的横向导元 $G_p^{\mu\nu}$ 。一些特殊的导元尽管符号不同, 但是具有相同的绝对值(例如,  $-G_p^{zc} = |G_p^{zc}|$ ,  $p = 2, 4$ ), 这些导元用英文字母作了下标标记, 不同的字母表示不同的值, 字母相同, 即表示它们的绝对值相同。英文字母上面的“-”表示相反数, 例如,  $\bar{a} = -a$ 。

对于只存在Dresselhaus自旋轨道耦合的体系, 只需把以上对Rashba体系推导过程中的 $\sigma_x$ 改为 $\sigma_y$ , 把 $\sigma_y$ 改为 $\sigma_x$ , 即可得到Dresselhaus自旋轨道耦合体系对称变换和导元之间的对称关系。这样, 在只存在Dresselhaus自旋轨道耦合的体系, 三个对称变换分别是:  $U_1 = C_{2z} \otimes \exp(-i\frac{\pi}{2}\sigma_z)$ ;  $U_2 = C_{2y} \otimes \exp(-i\frac{\pi}{2}\sigma_y)$ ;  $U_3 = C_{2x} \otimes \exp(-i\frac{\pi}{2}\sigma_x)$ 。在这些对称变换作用下, 我们发现了如表4-1b中所列的16个横向导元之间的对称关系; 对于Rashba和Dresselhaus自旋轨道耦合同时存在的体系( $V_R \neq V_D \neq 0$ ), 能够使哈密顿保持不变的对称操作只有 $U_1$ , 在 $U_1$ 作用下导元之间有如表4-1c所示的对称关系; 当 $V_R = V_D \neq 0$ 时, 除了 $U_1$ , 还存在另外一个对称操作 $U_4 = I \otimes (\sigma_{x(y)} \rightarrow \sigma_{y(x)}, \sigma_z \rightarrow \sigma_z)$ , 这导致 $s_x$ 和 $s_y$ 的交换对称性, 导元 $G_p^{\mu\nu}$ 之间的对称关系列在表4-1d中。事实上, 由于 $U_4$ 对称操作仅作用在自旋空间, 因此, 对于具有任意几何形状( $V(x, y)$ )的体系(不仅仅对于矩形体系), 只要 $V_R = V_D$ ,  $U_4$ 对称操作都成立, 而且由 $U_4$ 对称操作导致的 $G_p^{zc} = G_p^{cz} = 0$ 的对称关系也都成立。

综合以上矩形体系的四种不同情况, 我们得出以下结论: 第一, 所有的横向导元都满足 $|G_2^{\mu\nu}| = |G_4^{\mu\nu}|$ , 横向电流或横向自旋流的绝对值相等, 即,  $|J_{2,\mu}| = |J_{4,\mu}|$ ( $\mu = x, y, z, c$ )。具体来说, 对于表4-1的各个矩阵, 矩阵的八个块对角元满足 $G_{2,\mu} = -G_{4,\mu}$ , 而另外八个非块对角元满足 $G_2^{\mu\nu} = G_4^{\mu\nu}$ 。第二, 交换 $\sigma_x$ 和 $\sigma_y$ ,

表4-1a即变到表4-1b, 这说明仅存在Rashba自旋轨道耦合和仅存在Dresselhaus自旋轨道耦合的体系等价, 等价条件就是 $\sigma_x$ 和 $\sigma_y$ 互换。第三, 只要体系只有一种自旋轨道耦合 (Rashba或Dresselhaus形式), 16个导元 $G^{\mu\nu}$ 就有一半为零<sup>1</sup>。第四, 对于传统的自旋霍尔效应和逆自旋霍尔效应 (它们中的自旋极化朝向 $\sigma_z$ 方向), 横向自旋流或电流守恒, 即,  $G_2^{zc(cz)} = -G_4^{zc(cz)}$ 。不仅如此,  $G^{zc}$ 和 $G^{cz}$ 之间还满足Onsager关系:  $G_{2(4)}^{zc} = G_{2(4)}^{cz}$  [2]。注意, 由于我们没有交换逆自旋霍尔效应和自旋霍尔效应中的驱动端和测量端,  $G_{2(4)}^{zc} = G_{2(4)}^{cz}$ 仅在正方体系中成立, 对于矩形体系,  $G_{2(4)}^{zc}$ 一般不等于 $G_{2(4)}^{cz}$ 。再来看 $G^{cy}$ 和 $G^{yc}$ , 也就是表4-1中的非块对角矩阵元, 导线2和导线4中的两个横向流总是同时流入或同时流出, 有 $G_2 = G_4$ , 不满足流守恒, 也不满足Onsager关系, 因为Onsager关系要求 $J_2 = -J_4$ 。

### §4.5 数值计算结果及讨论

下面, 以第一种只有Rashba自旋轨道耦合情况为例, 我们通过数值计算得出表4-1a中的非零矩阵元, 重点放在自旋自旋霍尔电导 $G_p^{ss'}$  ( $s, s' \in x, y, z$ )。数值计算中采用正方体系, 但是要注意4-1a中列出的是针对矩形 (包括正方)

<sup>1</sup>在文献[6]中, 矩阵元 $G^{zc}$ 的值非常之小, 但并不为零, 这有别于我们的结果 [ $G^{zc}$ 严格等于零, 看表4-1a], 尽管文献[6]和我们的体系完全相同。这是因为在他们的方程(8)中, 忽略了“ $G_{22}^{ss'} - G_{22}^{ss}$ ”这一项

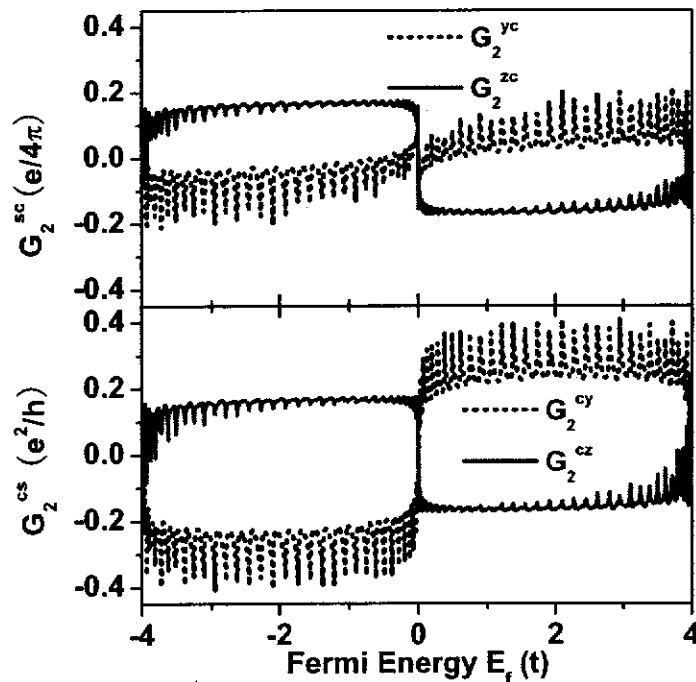


图 4-2 自旋霍尔电导 $G_2^{sc}$ 和逆自旋霍尔电导 $G_2^{cs}$ 随费米能 $E_f$ 变化关系图。参数选择:  $L = 34a$ ,  $V_R = 0.03t$ 。

体系的对称关系。计算中的一些体系参数如下：有效质量 $m^*$  设为 $0.05m_e$ [13]，【在这儿我们用了n型HgTe半导体的相关参数，具体情况请参看文献[13]。事实上，对于其它半导体材料，例如GaAs，有 $m^* = 0.036m_e$ ，结果类似】费米能 $E_F = -3.8t$ (图4-4,图4-5)，这个费米能非常接近导带带底 $-4t$ ，这儿的 $t$ 是我们的能量单位，相应的格点常数 $a \approx 2.6nm$ [5, 6]。中间区尺寸 $L$ 和自旋旋过 $\pi$ 进动角所经过的进动长度 $L_{SO}(L_{SO} \equiv \pi at/2V_R)$ 在同一量级。取 $V_R = 0.03t$  (相当于 $\alpha \approx 1 \times 10^{-11}eV \cdot m$ )， $L_{SO} \approx 50a$ 。

图4-2描述传统的自旋霍尔电导 $G^{zc}$ 和逆自旋霍尔电导 $G^{cz}$ ，平面内自旋霍尔电导 $G^{yc}$ 和逆自旋霍尔电导 $G^{cy}$ ，随费米能的变化。它们都关于费米能的零点奇对称，因此在导带半带即 $E_f = 0$ 的地方都等于零。自旋霍尔电导 $G^{zc}$ 和 $G^{yc}$ 的这种行为和文献[5, 6]中的描述相同。图4-2表明，垂直平面的横向导元 $G^{zc} = G^{cz}$ ，它们满足Onsager关系[2]。另一方面，平面内的导元分量 $G^{yc}$ 小于 $G^{cy}$ ，它们不满足Onsager关系，因为它们的流方向相同（图4-1左插图）。此外 $G^{yc}$ 和 $G^{cy}$ 还强烈地依赖于费米能。

现在重点来看自旋自旋霍尔电导 $G^{ss'}$  ( $s, s' \in x, y, z$ )。图4-3描述 $G^{ss'}$ 随费米能 $E_f$ 的变化。和 $G^{sc}$ 与 $G^{cs}$ 不同， $G^{ss'}$ 关于 $E_f$ 偶对称，并且在导带的半带处 ( $E_f = 0$ )，自旋自旋霍尔电导达到极大值。而且，通过比较图4-2和图4-3，发现自旋自旋霍尔电导 $G^{ss'}$ 远远大于（最少大一个数量级）自旋霍尔电导 $G^{cs}$ 及逆自旋霍尔电导 $G^{sc}$ 。这意味着在存在自旋轨道耦合的体系里，自旋自旋霍尔效应占主导地位。此外，自旋自旋霍尔电导 $G^{ss'}$ 之间不服从Onsager关系，即，一般

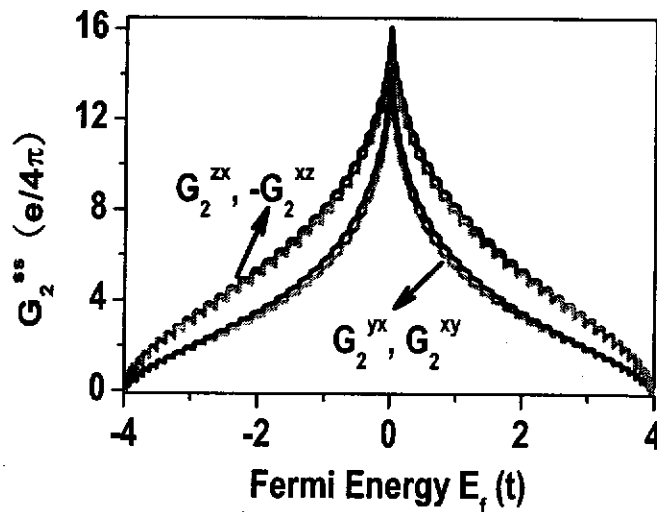


图 4-3 非零自旋自旋霍尔电导 $G_2^{xy}$ (black),  $G_2^{yz}$ (green or gray),  $G_2^{zx}$ (black), 和 $-G_2^{xz}$ (green or gray)随费米能 $E_f$ 变化关系图。参数选择： $L = 34a$ ,  $V_R = 0.03t$ 。

上,  $G^{xy} \neq G^{yx}$ ,  $G^{xz} \neq G^{zx}$ 。这是因为对于向自旋流诱导横向自旋导的体系, 它已经不再是一个简单的四端口体系, 因为有了自旋指标, 它相当于一个八端口体系。另一方面, Onsager关系还要求体系具有横向边条件:  $J_2 = -J_4$ , 即在外电路中, 除了1, 3端口相连, 2, 4端口也是连在一起的。然而, 在目前的体系中,  $G_2^{xz} \neq -G_2^{zx}$ 。尽管不满足Onsager关系, 但是在 $V_R$ 比较小的情况下(例如,  $V_R < 0.08t$ ),  $|G^{xy}|$ 和 $|G^{xz}|$ 仍然分别近似等于 $|G^{yx}|$ 和 $|G^{zx}|$ 。

图4-4和图4-5分别描述自旋自旋霍尔电导 $G^{ss'}$ 随体系尺寸 $L$ 和Rashba自旋轨道耦合强度 $V_R$ 的变化关系。当体系尺寸 $L$ 不断增加, 由于横向导线2和导线4变宽, 导元 $G^{yx}$ 和 $G^{xy}$ 也跟着迅速增加(图4-4)。但是在一些特殊的 $L$ 处, (例如 $L = 26, 46$ ,  $V_R = 0.06t$ ), 由于刚好费米能穿过某个子带,  $G^{xy}$ 和 $G^{yx}$ 并不是一直增长而是在此达到极小。同理, 导元 $G^{zx}$ 和 $G^{xz}$ 也有类似的性质。但是这些性质都发生在 $V_R$ 比较小(相应 $L_{SO} = \pi at/2V_R > L$ )的区域。当 $V_R$ 很大时

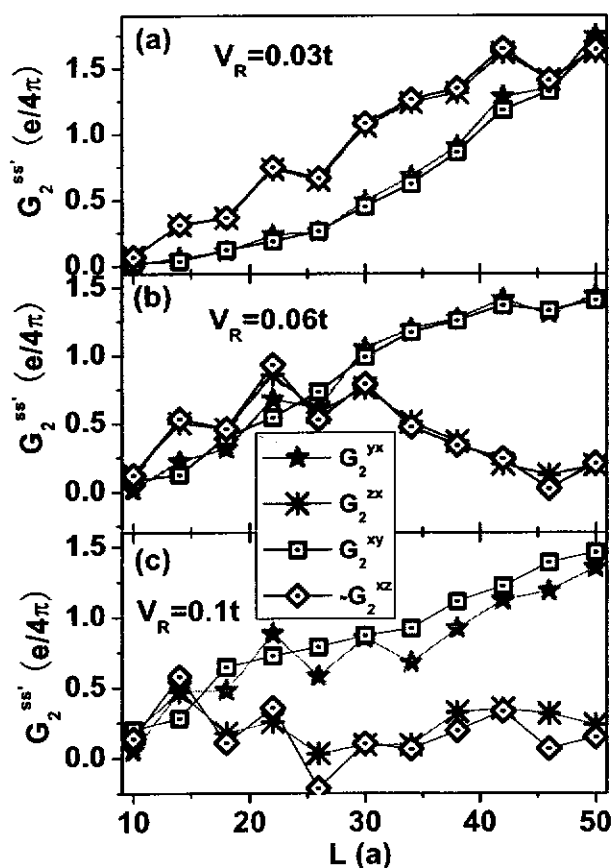


图 4-4 自旋自旋霍尔电导 $G^{ss'}$ 随体系尺寸 $L$ 变化关系图。图(a):  $V_R = 0.03$ ; 图(b)  $V_R = 0.06$ ; 图(c)  $V_R = 0.1$ 。  $G_2^{xy}$ 的曲线和 $G_2^{yx}$ 的曲线, 以及 $-G_2^{xz}$ 的曲线和 $G_2^{zx}$ 的曲线在自旋轨道耦合强度比较小( $V_R = 0.03$ 和 $0.06$ )的情况下几乎重合, 参数: 体系费米能 $E_f = -3.8t$ 。

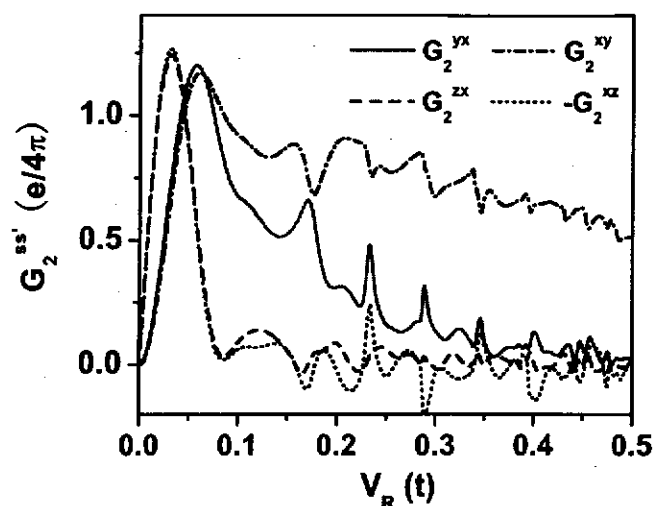


图 4-5 自旋白旋霍尔电导 $G_2^{ss'}$ 随Rashba旋轨道耦合强度 $V_R$ 的变化关系图。参数： $L = 34a$ ,  $E_f = -3.8t$ 。

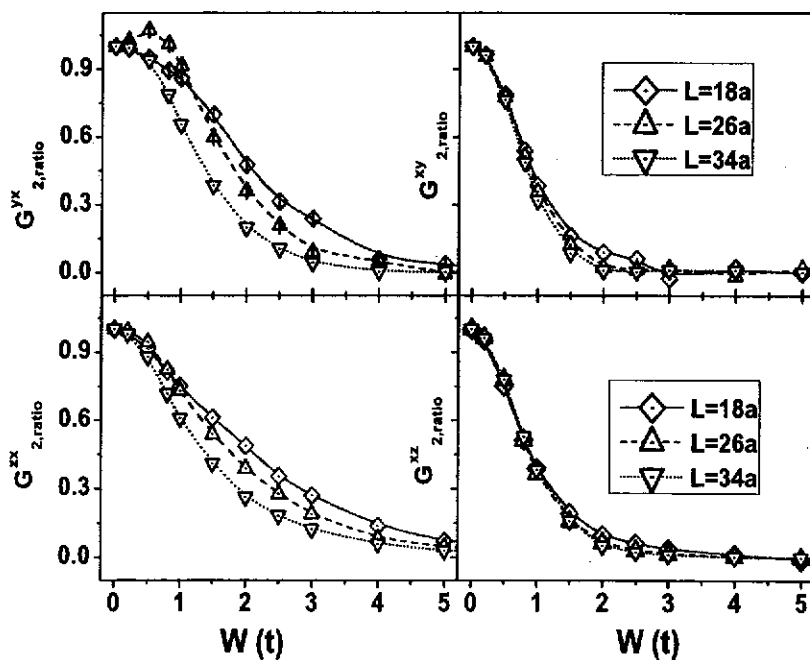


图 4-6 不同体系尺寸 ( $L = 18a, 26a$ , and  $34a$ ) 下, 相对白旋白旋霍尔电导 $G_{ratio}^{ss'} [G_{ratio}^{ss'} = G^{ss'}(W \neq 0)/G^{ss'}(W = 0)]$ 随杂质浓度 $W$ 的变化关系图。其它参数： $E_f = -3.8t$ ,  $V_R = 0.03$ 。

( $L_{SO} < L$ ) (图4-4b, 图4-4c),  $G^{zx}$ 和 $G^{xz}$ 不随体系尺寸 $L$ 近单调递增, 表现异常, 在这种情况下, 扩展态[14]严重影响体系性质。另外, 增加Rashba自旋轨道耦合强度 $V_R$ , 自旋自旋霍尔电导 $G^{ss'}$ 发生振荡(图4-5)。在大的 $V_R$ 区域,  $G^{ss'}$ 呈混沌分布,  $|G^{xy}|$ 和 $|G^{xz}|$ 不再等于 $|G^{yx}|$ 和 $|G^{zx}|$ , 也就是说 $G^{ss'}$ 之间的Onsager关系被彻底破坏。

最后, 在图4-6中, 研究中间区的杂质散射对自旋自旋霍尔电导的影响。考虑格点上的白噪声杂质散射, 这相当于在中间区每个格点位置 $\epsilon_i$ 加一个随机分布的格点位势 $\epsilon_i$ , 即, 在方程(4-1)中多了一项 $\sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i$  (没有杂质时,  $\epsilon_i = 0$ )。  $\epsilon_i$ 在 $[-W/2, W/2]$ 的区间内随机分布,  $W$ 代表杂质浓度。通过对1000次随机分布取平均求得体系在中间区杂质散射作用下的相对自旋自旋霍尔电导 $G_{ratio}^{ss'} \equiv G^{ss'}(W \neq 0)/G^{ss'}(W = 0)$ 。从图4-6看出,  $G^{ss'}$ 随杂质浓度的增加迅速减少, 但是 $G^{ss'}$ 在 $W < t$ 的区域仍然保持很好。自旋自旋霍尔电导的这种行为和传统的自旋霍尔电导相似[15]。因此, 在有杂质的自旋轨道耦合体系, 自旋自旋霍尔电导仍然居于主导地位。此外, 不同尺寸的体系,  $G_{ratio}^{xy}$ 和 $G_{ratio}^{xz}$ 随 $W$ 变化的趋势仍然类似。并且, 小尺寸体系甚至比大尺寸体系更能抵御杂质散射。

#### §4.6 小结

综合存在自旋轨道耦合的体系中的自旋自旋霍尔效应, 自旋霍尔效应, 逆自旋霍尔效应, 以及霍尔效应, 这样的体系可以导出16个可能的横向导元 $G_{p,\mu\nu} = J_{p,\mu}/V_\nu$ , 这儿的 $\mu, \nu = x, y, z, c$ , 其中包括霍尔电导 $G_{cc}$ , 自旋霍尔电导 $G_{sc}$ , 逆自旋霍尔电导 $G_{cs}$ , 以及自旋自旋霍尔电导 $G_{ss}$ 。由于体系的对称性, 16个导元之间一定也存在某种对称关系, 我们研究以下四种具有不同对称性的体系的16个横向导元间的对称关系: (1) 只有Rashba自旋轨道耦合; (2) 只有Dresselhaus自旋轨道耦合; (3) 两种自旋轨道耦合都有, 但是耦合强度不等; (4) 两种都有且耦合强度相等。发现不管纵向驱动源是电流还是朝任何方向极化的自旋流, 导线2和导线4中的各个分量的霍尔自旋流( $\mu = x, y, z$ )或霍尔电流( $\mu = c$ )绝对值都相等。并且 $G^{xx/xy/yx/yy}$ 和 $G^{zz/zc/cz/cc}$ 这八个元满足流守恒; 而对于另外八个元, 横向两个端口的流总是同时流入或流出, 不满足流守恒。此外, 如果只有Rashba或者Dresselhaus自旋轨道耦合存在, 体系具有 $C_2$ 对称性, 此时16个导元中有8个为零。综合以上两点, 尽管在自旋轨道耦合体系, 存在各种类型的霍尔横向导, 总数达16个之多, 然而, 通过分析体系的对称性, 可以大大简化此复杂结果。最后, 数值计算表明, 在所有的横向导元中, 自旋自旋霍尔电导远远大于(大一到两个数量级)其它的导元, 这说明在所有四种效应

中，自旋霍尔效应居主导地位，并且在存在杂质散射的情况下仍然如此。

## 参考文献

- [1] E. M. Hankiewicz, J. Li, T. Jungwirth, Q. Niu, S.-Q. Shen, and J. Sinova, *Charge Hall effect driven by spin-dependent chemical potential gradients and Onsager relations in mesoscopic systems*, Phys. Rev. B, **72**, 155305-155309 (2005).
- [2] 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).
- [3] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, *Dissipationless quantum spin current at room temperature*, Science, **301**, 1348-1351 (2003); S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, *SU(2) non-Abelian holonomy and dissipationless spin current in semiconductors*, Phys. Rev. B **69**, 235206-235219 (2004).
- [4] J. Sinova, D. Culcerm, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. Macdonald, *Universal intrinsic spin Hall effect*, Phys. Rev. Lett., **92**, 126603-126606 (2004).
- [5] 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).
- [6] B. K. Nikolić, S. Souma, L. P. Zárbo, and S. Souma, *Mesoscopic spin Hall effect in multiprobe ballistic spin-orbit coupled semiconductor bridges*, Phys. Rev. B, **72**, 075361-075372 (2005).
- [7] 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).
- [8] Q.-F. Sun, H. Guo, and J. Wang, *A Spin Cell for Spin Current*, Phys. Rev. Lett., **90**, 258301-258304 (2003); W. Long, Q.-F. Sun, H. Guo, and J. Wang, *Gate-controllable spin battery*, Appl. Phys. Lett., **83**, 1397-1399 (2003); B. Wang, J. Wang, J. Wang, and D.-Y. Xing, *Spin current carried by magnons*, Phys. Rev. B, **69**, 174403-174407 (2004); D.-K. Wang, Q.-F. Sun, and H. Guo, *Spin-battery and spin-current transport through a quantum dot*, Phys. Rev. B, **69**, 205312-205317 (2004).
- [9] 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).
- [10] L. Sheng, D. N. Sheng, C. S. Ting, and F. D. M. Haldane, *Nondissipative Spin Hall Effect via Quantized Edge Transport*, Phys. Rev. Lett., **95**, 136602-136605 (2005); J. Li, L. Hu and S.-Q. Shen, *Spin-resolved Hall effect driven by spin-orbit coupling*, Phys. Rev. B **71**, 241305(R)-241308(R) (2005).

- [11] C. P. Moca, and D. C. Marinescu, *Longitudinal and spin-Hall conductance of a two-dimensional Rashba system with arbitrary disorder*, Phys. Rev. B **72**, 165335-165340 (2005).
- [12] F. Mireles and G. Kirczenow, *Ballistic spin-polarized transport and Rashba spin precession in semiconductor nanowires*, Phys. Rev. B **64**, 024426-024438 (2001); Q.-F. Sun, J. Wang, and H. Guo, *Quantum transport theory for nanostructures with Rashba spin-orbital interaction*, Phys. Rev. B **71**, 165310-165320 (2005).
- [13] Y.-S. Gui, C. R. Becker, N. Dai, J. Liu, Z.-J. Qiu, E. G. Novik, M. Schäfer, X.-Z. Shu, J.-H. Chu, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, *Giant spin-orbit splitting in a HgTe quantum well*, Phys. Rev. B **70**, 115328-115332 (2004).
- [14] 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).
- [15] 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).

## 第五章 退相干作用对自旋霍尔效应的影响

**摘要:** 本章研究位相弛豫对垂直磁场作用下存在或不存在自旋轨道耦合的四端口二维介观系统中的霍尔电导及自旋霍尔电流的影响。发现由存在自旋简并的偶数个边缘态导致的偶数霍尔电导平台在退相干过程强到体系尺寸已远大于位相相干长度的情况下, 仍能很好地保持, 并且体系尺寸越大, 台阶形状保持的越好。另一方面, 当体系有自旋轨道相互作用时, 自旋简并解除, 出现奇数霍尔电导台阶, 这种由于自旋轨道耦合导致的奇数台阶结构很快被退相干过程破坏, 甚至在退相干作用很弱的情况下都不能保持。这个过程是由磁场导致的边缘态和由自旋轨道耦合导致的扩展态的竞争过程。事实说明, 边缘态能有效抵御退相干, 而扩展态几乎不能抵御退相干过程。此外, 我们也研究了退相干作用对有自旋轨道耦合体系的横向自旋霍尔电导的影响, 发现当费米能越过体系由磁场和自旋轨道耦合共同导致的自旋极化的两支本征朗道能级中能级较高的一支时, 横向自旋霍尔电流达到共振极大, 而退相干作用会抹平这些共振峰但是抬高非共振流。

### §5.1 引言

通过前面几章的介绍, 我们已经对自旋霍尔效应的基本性质及表现形式有了基本了解, 这一章我们将介绍垂直磁场作用下的自旋霍尔效应。垂直外磁场作用下的二维体系的本征能谱是一系列由于杂质散射而展宽的朗道能带, 扩展态居于各能带中间[1, 2], 两边带尾处是局域态。这种能带结构直接导致了整数霍尔效应[3, 4], 它描述垂直外磁场作用下横向电导呈量子化台阶分布的现象。当费米能依次扫过各能带中间的扩展区时, 量子化的电导值依次跳过一个一个台阶。在实验上[5], 量子化的霍尔电阻单位 $h/2e^2$ 误差值在百万分之一。再者, 在霍尔体系中, 速度相反的输运电子互相分离, 分别分布在样品的两个位置相反的横向边缘, 这导致了霍尔体系具有很长的弹性散射平均自由程, 因此霍尔效应对杂质以及装置的几何位形, 具体构造等参数相当不敏感。基于以上两点, 量子化的霍尔电阻已经成为国际电阻单位标准。自从1980年量子霍尔效应被发现以来, 在过去的几十年里, 有关霍尔效应的研究大量涌现[6-10], 人们对霍尔效应也有了比较深刻的认识。

除了量子霍尔效应, 描述自旋轨道耦合体系中纵向电流引起横向自旋流的自旋霍尔效应特别是内在自旋霍尔效应也是近来研究的重点, 目前已有许多关于这方面的研究[14-22]。文献[14]研究了非磁性杂质散射对有限大体系中内在自旋霍尔效应的影响; 文献[16]发现在有自旋轨道耦合的体系中, 扩展态对内在自

旋霍尔效应起决定性作用；文献[17, 18]研究了平面内自旋极化的内在自旋霍尔效应；文献[20, 20, 22]在实验上测量了自旋霍尔效应。有关自旋霍尔效应的详细介绍见§1.4节。

我们知道，在真实的体系中，一定有杂质缺陷或者说杂质。杂质分静态杂质和非静态杂质，静态杂质导致我们在上一章提到的白噪声随机杂质散射，粒子经过这样的杂质散射后动量态改变，但是仍能保持原来的相位记忆，即体系仍然是量子相干的。而非静态杂质就大为不同，非静态杂质（像晶格震动的声子，磁性杂质等）有内部自由度，粒子经过非静态杂质散射后不再保持原来的相位记忆，也就是说体系发生退相干。对于上面提到的两种体系，第一种整数量子霍尔体系对静态杂质散射，体系构形等参数不敏感，但是当量子霍尔体系处在弱磁场下或者处在强的杂质散射中，体系还是能从整数量子霍尔区转变到绝缘区。事实上，文献[23]就研究了在外磁场和杂质共同作用下，紧束缚模型的二维量子霍尔体系[24]从霍尔态到绝缘态（局域态）的整体相图。而对第二种体系，即外磁场作用下存在自旋轨道耦合的有限大紧束缚模型的二维电子气体体系，类似的整体相图也在文献[19]中有研究。这些工作都证明整数量子霍尔体系和外磁场作用下的存在自旋轨道耦合的体系都可以有效抵御静态杂质散射。并且前者比后者更能抵御杂质散射。但是非静态杂质即退相干过程对他们的作用至今尚未有结论。因此，在这一章中，我们就针对上面所讲的霍尔体系，以及存在自旋轨道耦合的有限大二维介观体系，用基于非平衡格林函数的Landauer-Büttiker (LB) 公式，研究在外磁场作用下，退相干作用对这两种体系的影响。

## §5.2 体系介绍

考虑介观二维电子气体体系，如图5-1c插图所示，中间区是介观散射区，四周通过导线和外电极相连，其中纵向导线1和导线3是驱动端，用来加驱动电压，而横向导线2和导线4是测量端，测量横向的霍尔电导以及存在自旋轨道耦合体系的自旋霍尔电导。考虑两种体系，一种不存在自旋轨道耦合，另一种存在自旋轨道耦合。在这两种体系中，在外磁场作用下，纵向偏压都会导致横向电流，这会导致我们在这一章要研究的霍尔电导。对于存在自旋轨道耦合的体系，纵向偏压不仅导致横向电流还导致横向自旋流，我们也研究了退相干作用对这横向自旋流的影响。在这儿因为涉及到自旋流计算，为了避免自旋流定义混淆，对存在自旋轨道耦合的体系，我们仅在中间散射区和两根纵向导线1和导线3中考虑自旋轨道耦合项，横向导线2和导线4自旋轨道耦合为零。整个二维体系处于 $x, y$ 平面，中间散射区设为四方结构，尺寸为 $W$ （以格点化长度 $a$ 为长度单位），相应的四周

的四根导线宽度也为 $W$ 。整个体系包括导线和散射区都置于垂直平面的 $z$ 方向外磁场 $B_z$ 中。体系哈密顿 $H = (-i\hbar\nabla + eA)^2/2m^* + \alpha(\sigma_x\nabla_y - \sigma_y\nabla_x)$ ，其中， $e$ 是电子电荷， $m^*$ 是体系的有效质量， $\sigma_{x,y}$ 是自旋泡利矩阵， $\alpha$ 是Rashba自旋轨道耦合强度，在没有自旋轨道耦合的体系， $\alpha = 0$ 。

以上是不存在杂质散射和退相干过程的理想体系。一般说来，真实的体系都存在杂质缺陷，有静态杂质散射，也有具有内部自由度的非静态杂质散射。静态杂质散射相当于在中间区的所有格点上都有一个在 $[-W/2, W/2]$ 范围内随机分布的白噪声格点能 $V_i$ [14, 16, 19] ( $i$ 表示格点坐标)。而具有动力学性质的非静态杂质散射导致的退相干过程，则用虚拟导线[25]的方法唯象地模拟。这相当于在体系的每个格点上 $i$ 都连有一根虚拟导线，电子经过中间区时可以进入虚拟导线，丢失相位记忆后再回到格点 $i$ ，整个过程在虚拟导线中不引起净电流。这种方法是Büttiker早在1986年就引进的。此外，Datta等人[26]也引进了一种基于非平衡格林函数的唯象的模拟退相干过程的方法，并且得出了和虚拟导线的方法相近的结果。在我们的体系中，假设退相干作用只发生在中间散射区，连接它的四根导线是理想的干净导线。

对于真实的中间区以及四根理想导线，采用紧束缚模型的二次量子化哈密顿形式，而对于中间区各格点上的虚拟导线，采用 $k$ 空间自由电子哈密顿形式。事实上，虚拟导线可以采用任何可能的形式，不同形式的虚拟导线导致的结果区别很小。在这儿我们采用自由电子形式，只是为了让计算过程更加简洁。整个体系，包括真实导线，虚拟导线以及中间散射区的二次量子化形式哈密顿表达如下[16, 19]:

$$H = - \sum_i \left[ e^{-im\phi} a_i^\dagger (t\sigma_0 - iV_R\sigma_y) a_{i+\delta_x} + a_i^\dagger (t\sigma_0 + iV_R\sigma_x) a_{i+\delta_y} + H.c \right] \\ + \sum_i a_i^\dagger [B_z g_s \mu_B \sigma_z / 2] a_i + \sum_{i,k} \left[ \epsilon_k a_{ik}^\dagger a_{ik} + (t_k a_i^\dagger a_{ik} + H.c) \right] \quad (5-1)$$

第一项表示真实导线和中间区中相邻格点间的跳跃项以及自旋轨道耦合项。其中， $i = (i_x, i_y)$ 表示图5-1c插图所示体系区域的格点坐标。 $a_i = [a_{i,\uparrow}, a_{i,\downarrow}]^T$ 表示格点 $i$ 处的产生湮没算符， $\delta_x, \delta_y$ 是沿 $x$ 方向和 $y$ 方向的单位矢量， $\sigma_{x,y,z}$ 是自旋泡利矩阵， $\sigma_0$ 表示 $2 \times 2$ 维的单位矩阵。 $t = \hbar^2/2m^*a^2$ 是相邻格点跳跃能，其中 $a$ 是格点常数。 $\phi = qB_z a^2/\hbar$ 是由外磁通或者磁场矢势 $A$ 引入的额外相位， $m$ 来自于 $i_y = ma$ 。体系的 $z$ 方向外磁场 $B = (0, 0, B_z)$ 引起的矢势在朗道规范下表示为 $A = (-B_z y, 0, 0)$ ，相应的额外相位 $\phi$ 以“ $e^{-im\phi}$ ”的形式出现。 $V_R = \alpha/2a$ 表示Rashba自旋轨道耦合强度。在我们的模型中，外磁场 $B_z$ 均匀穿过体系的每一部分，包括四根真实导线区和中间散射区。但是自旋轨道耦合强度 $V_R$ 只存在于两

纵向导线1和导线3以及中间散射区中, 由于涉及求自旋流, 两根横向导线2和导线4中 $V_R = 0$ 。方程(refc5ham)中的第二项表示塞曼劈裂项, 其中 $B_z$ ,  $g_s$ ,  $\mu_B$ 分别表示z方向外磁场强度, 朗德g因子, 和玻尔磁子。最后一项是中间区各个格点上在k空间表示的自由电子形式的虚导线, 以及虚导线和中间格点i的耦合项。其中,  $a_{ik} = [a_{ik,\uparrow}, a_{ik,\downarrow}]^T$ 表示虚导线中的产生湮灭算符。每个格点上耦合一个虚导线, 共有 $N = W \times W$ 个虚导线, 其中 $N$ 是散射区的格点数。

利用Landauer-Büttiker公式[27]可以求得真实导线中的电流 $J_r$  ( $r = 1, 2, 3, 4$ )以及虚导线中的电流 $J_v$  ( $v = 1, 2, \dots, N$ )

$$J_p = \frac{e^2}{h} \sum_{q \neq p} T_{pq} (V_p - V_q), \quad (5-2)$$

其中,  $p, q \in r, v$ ,  $V_p$ 是加在导线 $p$ 上的偏压,  $T_{p,q}$ 是从导线 $q$ 到导线 $p$ 的透射系数。  $T_{pq} = Tr[\Gamma_p G^r \Gamma_q G^a]$ , 其中, 态展宽函数 $\Gamma_p = i(\Sigma_p^r - \Sigma_p^{\dagger})$ ,  $\Sigma_p^r$ 是超前自能。格林函数 $G^r = [G^a]^\dagger = \{E_F I - H_0 - \sum_p \Sigma_p^r\}^{-1}$ , 其中 $I$ 是 $2N \times 2N$ 维单位矩阵,  $N$ 是格点数,  $2N$ 是中间区哈密顿矩阵 $H_0$ 的维度。为了研究自旋霍尔效应, 我们还需要计算存在自旋轨道耦合体系中横向导线2和导线4中的自旋流 $J_{p,s}$  ( $p = 2, 4$ )。因为我们已经设导线2和导线4中的自旋轨道耦合强度 $V_R = 0$ , 因此导线2和导线4中自旋 $\sigma$ 守恒, 它们中的粒子流 $J_{p\sigma}$  ( $\sigma = \uparrow$  or  $\downarrow$ )也可以从Landauer-Büttiker公式得出:

$$J_{p\sigma} = \frac{e}{h} \sum_{q \neq p} T_{p\sigma,q} (V_p - V_q). \quad (5-3)$$

除了透射系数 $T_{p\sigma,q}$ , 方程(5-3)中的所有符号都和方程(5-2)中的相同, 在这儿 $T_{p\sigma,q}$ 表示从导线 $q$ 到导线 $p$ 中的自旋 $\sigma$ 态的透视几率。  $T_{p\sigma,q} = Tr[\Gamma_{p\sigma} G^r \Gamma_q G^a]$  with  $\Gamma_{p\sigma} = i(\Sigma_{p\sigma}^r - \Sigma_{p\sigma}^{\dagger})$ 。有了粒子流 $J_{p\sigma}$ , 直接可以得出自旋流 $J_{p,s} = (\hbar/2)[J_{p\uparrow} - J_{p\downarrow}]$ 。

在我们的计算过程中, 导线1和导线3上的外偏压设为 $V_1 = 0.5$ 和 $V_3 = -0.5$ 。这样电子获得一个沿x方向的群速度 $v_x$ , 在外磁场作用下, 沿x方向运动的电子向y方向偏转, 并最终聚集在横向边缘, 形成两个横向边缘(导线2和导线4与中间区接触的边缘)符号相反的电荷积累。在开路测量系统, 有边条件 $J_2 = J_4 = 0$ , 这将导致横向电压 $V_2 = -V_4$ 。此外, 对于众多虚导线, 电子仅能隧穿进出, 在此过程中丢失相位, 但隧穿进出虚导线的过程并不引起虚导线的净电流, 因此在众多虚导线端口, 也有边条件 $J_v = 0$ , 其中,  $v = 1, 2, \dots, N$ 。利用已求得的透射系数 $T_{pq}$ , 输入参数 $V_1$ 和 $V_3$ , 以及边条件 $J_{p=2,4,v} = 0$ , 从方程(5-2)我们可以求得导线2和导线4端口的横向电压 $V_{2,4}$  ( $V_2 = -V_4$ ), 导线1和导线3中的纵向电流 $J_{1,3}$  ( $J_1 = -J_3$ )。霍尔电压 $V_H = V_2 - V_4$ , 霍尔电阻 $\rho_H = V_H/J_1$ 随之可得。另一方面, 当求横向自旋流时, 一般用自然边条件, 即 $V_2 = V_4 = 0$ 代替电压测量边条