

件 $J_2 = J_4 = 0$ 。同理，利用方程(5-3)，粒子流 $J_{p,\sigma}$ 以及随之而来的自旋流 $J_{p,s}$ 马上可得。

§5.3 数值计算及结果讨论

在数值计算中，我们把体系费米能固定在 $E_F = -3t$ 处，比较接近带底 $-4t$ 的地方。在真正的系统中，当改变外磁场 B 时，保持不变的不是费米能 E_F ，而是体系的态密度 n_s 。但如果体系存在大量杂质散射或者退相干过程，体系的态密度随能量改变就比较缓慢，相应地，假设如射费米能 E_F 固定就比较合理。在计算过程中，我们把 $t = \hbar^2/(2m^*a^2) \approx 5meV$ 设为能量单位，其中， $m^* = 0.05m_e$ ，而相应格点常数 $a = 12.5nm$ 。计算涉及两种体系尺寸： $W = 40a$ 和 $20a$ 。外磁场 B_z 导致矢势 $A = (-B_z y, 0, 0)$ ，从而引起额外的相位 $\phi = \frac{q}{\hbar} B a^2$ 。 $\phi = 1$ 时， $B = \hbar/(ea^2)$ ，为直观起见，我们用 $\hbar/(ea^2)$ 作为外磁场 B 的单位。一个单位磁场约相当于 $B = 4.2T$ ，相应 $\mu_B B = 0.05t$ ，这儿我们设了朗德 g 因子 $g_s = 2$ 。此外，在霍尔体系，要产生对输运起决定作用的边缘态，回旋半径 $r_c = v/\omega_c$ 必须满足 $r_c < W/2$ ，也就是说磁场要满足 $2/W < B$ 。另外，在存在自旋轨道耦合的体系， $V_R = xt$ ，相当于 Rashba 自旋轨道耦合强度 $\alpha = 2aV_R \approx 1.25x \times 10^{-10} eVm$ ，相应自旋进动长

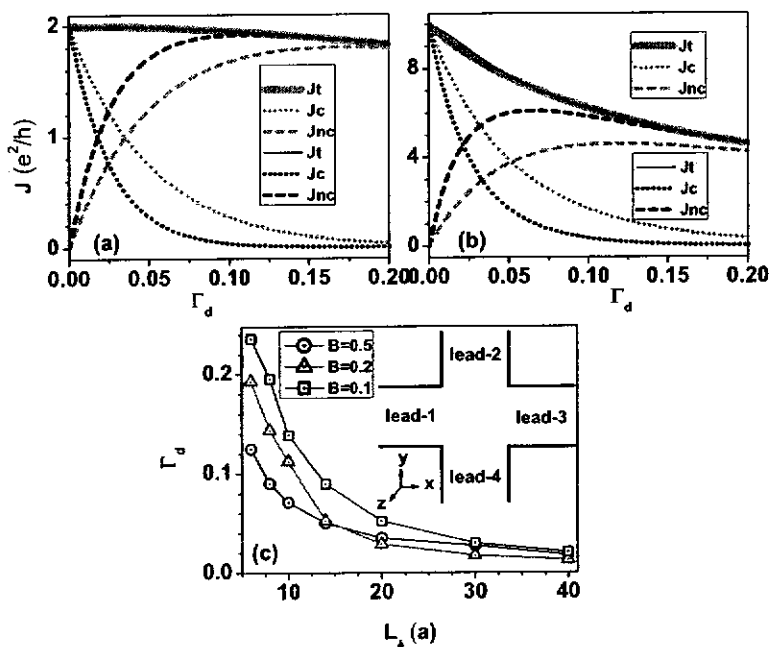


图 5-1 图(a)和图(b)分别是外磁场 $B = 0.5$ 和 $B = 0.1$ 情况下，两端口体系的总电流 J_t ，相干成分电流 J_c ，非相干成分电流 J_{nc} 随退相干强度 Γ_d 在不同体系尺寸（灰色或绿色线条： $W = 20$ ；黑色线条： $W = 40a$ ）情况下的变化曲线。图(c)：退相干强度 Γ_d 随体系位相相干长度 L_ϕ 的变换曲线。图(c)插图：四端口体系结构示意图。

度 $L_{SO} = \pi a / (2x)$ 。

实验上, 位相相干长度 L_ϕ 是可观测量, 被用来描述各种退相干过程。实验条件不同, 退相干过程也不同, 对应不同的退相干长度 L_ϕ 。因此, 真实的实验中有多种退相干过程, 但是用来描述退相干过程的可观测量只有一个, 那就是位相相干长度或者叫退相干强度 L_ϕ 。下面, 在进行具体的数值分析之前, 我们先来研究退相干强度 Γ_d 和位相相干长度 L_ϕ 之间的关系。先定义 L_ϕ : 如果电子经过一段距离后, 丢失相位记忆的几率为 50%, 剩下 50% 的积累保持相位记忆, 那么这段距离我们就定义为位相相干长度 L_ϕ 。在退相干过程作用下, 介观体系的输运电流通常既有位相相干成分, 也有不相干成分。为了把 Γ_d 和体系的退相干强度直观地联系起来, 我们考虑了两端口的介观体系 (去掉图 5-1c 结构图中的导线 2 和导线 4)。此体系中电子可以直接从导线 1 隧穿到导线 3, 这是位相相关的电流成分; 也可以从导线 1 经虚拟导线间接隧穿到导线 3, 这是丢失相位记忆的电流成分。如果在某退相干强度 Γ_d 下, 这两种成分正好各占一半, 那么此时的体系尺寸 W 就是我们定义的位相相干长度 L_ϕ 。而这个 Γ_d 就是导致此体系发生退相干 (位相相干长度 $L_\phi = W$) 的退相干强度。这样我们对 Γ_d 和 L_ϕ 的对应关系就有了直观的了解。图 5-1a 和 b 分别作了中间区尺寸 $W = 20a$ 和 $W = 40a$ 的两端口体系的总电流 J_t , 位相相干电流 J_c 以及位相不相干电流 J_{nc} 随退相干强度 Γ_d 的变化曲线。发现电流 J_t 随 Γ_d 增加缓慢下降, 这是因为携带输运电子的边缘态逐渐遭到破坏。当 $\Gamma_d = 0$, 电流非相干成分为零, 随着 Γ_d 不断增加, 非相干成分逐渐增加, 在 J_c 和 J_{nc} 两条曲线交汇处, 相干和不相干成分各占一半, 我们定义此时的退相干强度 Γ_d 为临界退相干强度 Γ_{dc} , 与之相对应的位相相干长度 $L_\phi = W$, 其中 W 是体系尺寸。图 5-1 作了退相干强度 Γ_d 随位相相关长度 L_ϕ , 在不同外磁场 B 下的变化关系图。看得出, 对于所有的磁场, L_ϕ 都随 Γ_d 单调递增。而且 $\Gamma_d \rightarrow 0$, $L_\phi \rightarrow \infty$ 。当 Γ_d 不很小 (例如, $\Gamma_d > 0.05t$), 磁场 B 越大, 位相相干长度 L_ϕ 越长, 因为磁场越大, 边缘态越坚固。特别地, 对于我们计算采用的体系尺寸 $W = 40a$ 和 $20a$, 相应退相干强度临界值 $\Gamma_{dc} \approx 0.02$ 和 0.05 。当 $\Gamma_d > \Gamma_{dc}$, 体系将不再保持退相干 (体系尺寸大于退相干长度)。

§5.3.1 整数量子霍尔效应

这一节讨论退相干作用对整数量子霍尔效应的影响。首先考虑没有自旋轨道相互作用的四端口体系。在此体系中, 没有退相干作用时 ($\Gamma_d = 0$), 在洛伦兹力 $qv \times B$ 作用下, 所有的传到电子都在边缘态携带下, 沿着体系边缘运动, 12 个透射系数 $T_{p \neq q}$ ($p, q = 1, 2, 3, 4$) 中, 仅有四个 T_{21}, T_{32}, T_{43} 和 T_{14} 不为零, 且为

不为零的偶数，偶数值就代表边缘态的个数。在这里由于自旋简并，边缘态个数为 $2N$ ，其中， N 为整数。当 $\Gamma_d \neq 0$ ，边缘态被部分破坏，结果导致透射系数 T_{21}, T_{32}, T_{43} 和 T_{14} 不再是整数，变成小于原来整数值的非整数。此外还出现新的非零透射系数 T_{12} 。

图5-2作了导线1中的电流 J_1 ，霍尔电压 V_H ，和霍尔电阻 ρ_H ，以及霍尔电阻的倒数 $1/\rho_H$ 随外磁场 B 或者外磁场倒数 $1/B$ ，在不同的退相干强度下的变化关系图。这里的 $1/\rho_H$ 并不等于霍尔电导，因为在霍尔体系中定义的电阻是矩阵形式，霍尔电阻 ρ_H 只是此矩阵的其中一个矩阵元，如果要定义电导，也应该是对此电阻矩阵求逆，而此你矩阵中的相应矩阵元才是真正意义上的霍尔电导，一般， $1/\rho_H$ 不等于霍尔电导，即矩阵元的逆不等于逆矩阵的相应矩阵元。从图5-2可以看出，如果外磁场太小($B < 0.05$)，就不能形成边缘态，此时体系属于经典极限，满足经典霍尔体系方程，纵向电流 J_1 随磁场 B 缓慢线性上升，但是随 Γ_d 的增加迅速衰减。霍尔电压 V_H 和霍尔电阻 ρ_H 也随磁场 B 线性增加，这些都符合经典的自由电子模型。接下来我们重点研究高磁场下的量子体系。此体系中，磁

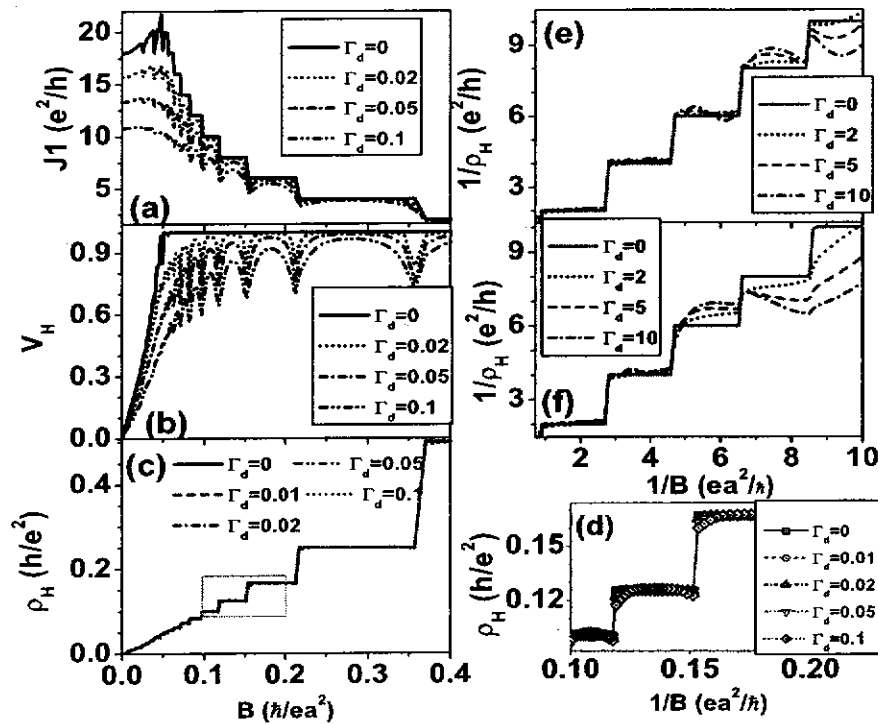


图 5-2 图(a)-(c): 导线1电流 J_1 ，横向霍尔电压 V_H ，霍尔电阻 ρ_H 在不同退相干强度 Γ_d 下，随外磁场强度 B 的变化关系图。其它参数：自旋轨道耦合强度 $V_R = 0$ ，体系尺寸 $W = 40a$ 。图(d): 图(c)中用方框标记部分的放大图。图(e)和图(f)分别是霍尔电阻的倒数 $1/\rho_H$ 在体系尺寸 $W = 40a$ 和 $W = 20a$ 时随磁场的倒数 $1/B$ 的变化关系图，其中自旋轨道耦合强度 $V_R = 0$ 。其它参数：费米能 $E = -3t$ 。

场 B 已经达到足以形成稳定的边缘态,在此边缘态作用下,群速度相反的输运流在空间上彼此分离,各自沿着相反的横向边缘独立行走[28],体系进入量子霍尔区。当 $\Gamma_d = 0$,霍尔电压 $V_H = V_2 - V_4 = 1$,纵向电流 J_1 和霍尔电阻 ρ_H 都出现由朗道能级以及边缘态[29]共同导致的量子化平台。当 $\Gamma_d \neq 0$,纵向电流 J_1 严重偏离量子化平台结构,霍尔电压 V_H 也不再是常数,但是霍尔电阻 $\rho_H = V_H/J_1$ 却几乎不发生任何改变,仍然保持平整的量子化平台,甚至在 Γ_d 很大(远大于 Γ_{dc})的情况下也依然如此。(图5-2c和图5-2d)。这意味着,尽管体系已经严重退相干,但是整数量子霍尔效应却依然存在,也就是说,整数量子霍尔效应可以非常有效地抵制退相干作用。从图5-2d,我们可以看出, Γ_d 较大时,霍尔平台首先在众带边处遭到破坏,这是因为带边的费米能 E_F 比带中央的更接近朗道能级,电子因此也更容易被散射到处于扩展态的朗道能级上,从而导致霍尔电阻在带边偏离量子平台的异常情况。为了看得更清楚,我们在图5-2e和图5-2f中作了 $1/\rho_H$ 随 $1/B$ 的变化关系图。发现,在大的 Γ_d 处,磁场越大,平台越难被破坏,体系越大,平台也越难被破坏。这是因为磁场越大,相邻朗道能级的间隔 ΔE 也越大,相应回旋半径越小,相反方向的输运流被越强烈地束缚在相反的横向边缘,结果边缘态就更加稳定;而体系尺寸越大也越有利于相反方向的输运流的彼此空间上的分离,这也导致边缘态更加稳定。在 $1/B < 3$ 区域的第一个平台结构在达到 $10t$ 时,仍能保持,这是非常不可思议的,因为此时的 Γ_d 已远远超过体系相应的临界退相干强度 $\Gamma_{dc} = 0.02$ ($W=40$)和 0.05 ($W=20$)。

接下来,我们研究存在自旋轨道耦合($V_R \neq 0$)的四端口体系。图5-2是 $\Gamma_d = 0$ 时,霍尔电阻倒数 $1/\rho_H$ 随磁场倒数 $1/B$,在不同的自旋轨道耦合强度 V_R 下的变化关系图。有趣的是尽管自旋轨道耦合引起扩展态[16],但 $1/\rho_H$ 仍能保持整数量子化台阶。不同的是,在 $V_R = 0$ 时,台阶数都为偶数值,而当 $V_R \neq 0$,自旋简并解除,出现量子化的奇数台阶。并且 V_R 越大,奇数台阶越宽;磁场 B 越小,奇数台阶也越宽(图5-2a)。当 V_R 越来越大,奇数台阶的甚至可以和偶数台阶一样宽,甚至比偶数台阶还要宽。

考虑退相干作用对存在自旋轨道耦合($V_R \neq 0$)的四端口体系的影响。图5-3b是霍尔电阻倒数 $1/\rho_H$ 随磁场倒数 $1/B$,在不同的退相干强度及不同的自旋轨道耦合强度情况下的变化关系图。 V_R 较小(例如, $V_R = 0.05t$)时,边缘态导致的偶数霍尔台阶可以在退相干过程作用下继续保持,但是源于自旋轨道耦合的奇数台阶却很快被退相干作用破坏以至消失。自旋轨道耦合较强(例如, $V_R = 0.5t$)时,体系更倾向于形成扩展态,此时外磁场导致的边缘态已不足以主导体系的输运过程。此时,奇数和偶数的霍尔台阶同时在退相干程度很弱的情况下遭到

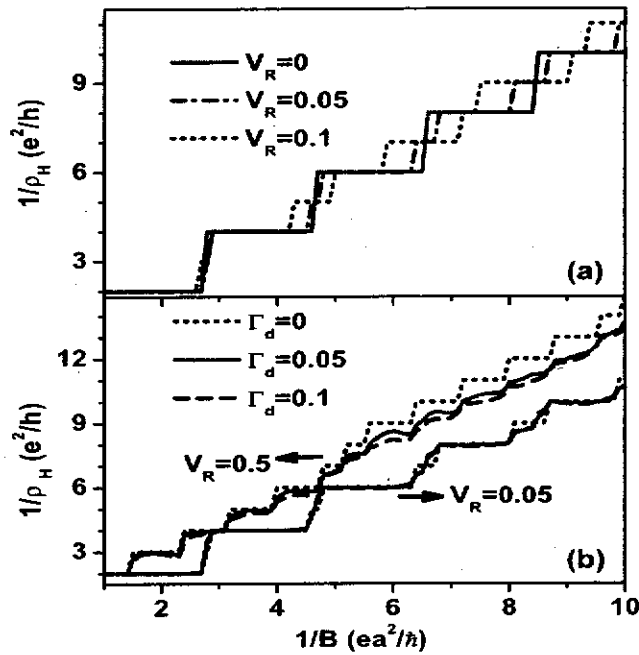


图 5-3 图(a): 无退相干过程时霍尔电阻倒数 $1/\rho_H$ vs.随外磁场倒数 $1/B$ 的变化关系图, 其中, $\Gamma_d = 0$ 。图(b): 不同退相干强度 Γ_d , 不同自旋轨道耦合强度 V_R 情况下, 霍尔电阻倒数 $1/\rho_H$ 随外磁场倒数 $1/B$ 的变化。with $V_R = 0.05t$ and $0.5t$ for different Γ_d . The system size 图(a)和图(b)中, 都有体系尺寸 $W = 40a$, 费米能 $E = -3t$ 。

破坏。要知道, 在 $V_R \neq 0$ 的体系, 霍尔平台即便在 $\Gamma_d (= 10t)$ 远远大于 Γ_{dc} 的情况下, 都能够很好地保持。这说明自旋轨道耦合大大降低了体系抵御退相干的能力。在实际的二维体系中, Rashba自旋轨道势 α 通常小于 $10^{-11} eV m$, 相应的 V_R 小于 $0.08t$ 。因此我们在图5-3中采用的 $V_R = 0.05t$ 已经足够大, 在这样大的 V_R 作用下, 当 $\Gamma_d = 0.1$ 大到 $\Gamma_d = 0.1 \gg \Gamma_{dc}$ 时, 霍尔平台仍然能够保持。这说明, 尽管自旋轨道耦合降低了体系抵抗退相干的能力, 但是这样的体系仍然有比较强的抵制退相干的能力。

§5.3.2 自旋霍尔效应

在存在自旋轨道耦合的体系里, 有自旋霍尔效应, 这是前面几章研究的内容。在这儿我们不去关心自旋霍尔效应本身; 而是着重研究外磁场 B 对它的影响, 以及在外磁场作用下, 退相干作用对它的影响。首先看 $\Gamma_d = 0$ 的情况。图5-4a作了在此情况下, 横向自旋流 $J_{2,s} = -J_{4,s}$ 随磁场倒数 $1/B$, 在不同自旋轨道耦合强度 V_R 下的变化关系。发现, 当量子化的 $1/\rho_H$ 从奇数台阶向偶数台阶跳跃时, 横向自旋流 $J_{2,s}$ 达到共振极大, 此时费米能刚好穿过由于自旋轨道耦合导致自旋极化的两支朗道能级中的一支。有关此共振峰起源的详细介绍

见§5.3.3节。

横向自旋流在共振磁场 $1/B$ 处达到极大，但是原理共振点， $J_{2,s}$ 几乎为零，即此时，自旋几乎没有极化。当 $V_R = 0.2$ ，共振点大约在 $1/B = 3.1t, 5.1t, \dots$ ； $V_R = 0.1$ ，大约在 $1/B = 3.0t, 5.0t, 9.0t, 7.0t, \dots$ 。在图5-4b中，我们把磁场固定在共振点 $1/B = 5.1$ 处，作横向自旋流 $J_{2,s}$ 随 V_R 的变化关系图。发现，当 V_R 较大时， $J_{2,s}$ 呈现随即分布，因为此时扩展态占主导。当 $V_R < 0.5t$ ， $J_{2,s}$ 变化较为规则。 $1/B = 5.1$ 是 $J_{2,s}$ 在 $V_R = 0.2t$ 附近的共振点，此时， $J_{2,s}$ 在 $V_R = 0.2t$ 附近有一个随 V_R 的平稳分布区（图5-4b中的dash dotted line）。当 $1/B$ 偏离共振点5.1， $J_{2,s}$ 迅速偏离随 V_R 平稳分布的共振型曲线（图5-4b中的实线和虚线）。

下面考虑退相干作用 Γ_d 对横向自旋流 $J_{2,s}$ 的影响。图5-5a是横向自旋流 $J_{2,s}$ 随磁场倒数 $1/B$ ，在不同退相干强度下的变化曲线。可以看出，退相干过程压制共振自旋流但是提升非共振自旋流，并且退相干强度 Γ_d 越大，这种效果越明显。接下来，我们分别提取非共振点 $1/B = 2$ 和共振点 $1/B = 3.1$ ，分别在图5-5b和图5-5c中作 $J_{2,s}$ 随 V_R 在不同的退相干强度下的变化关系图。同图5-5a，当 V_R 不是很大时（ $0.2 \leq V_R \leq 0.4$ ），退相干过程压制共振自旋流（5-5c），提升非共振自旋流（5-5b）。另一方面，当 V_R 非常大（ $V_R > 0.5$ ），横向自旋流强烈依赖于退相干

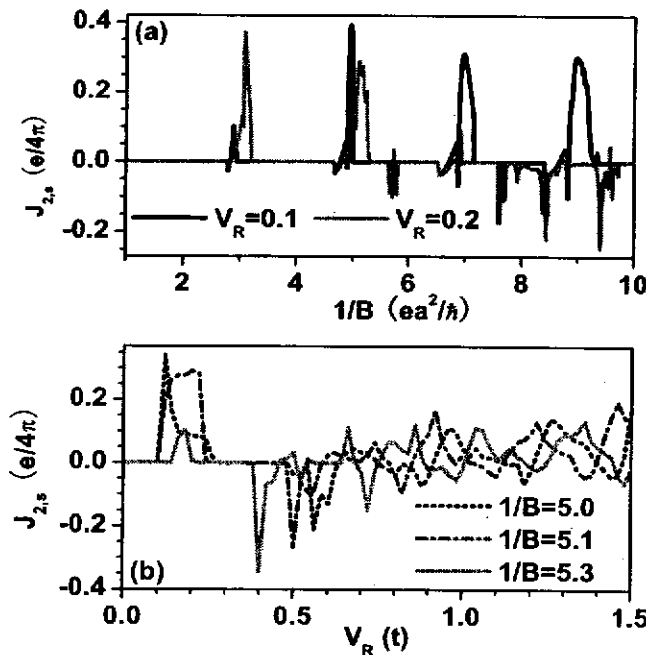


图 5-4 图(a)：横向自旋流 $J_{2,s}$ 在不同自旋轨道耦合强度 V_R 下，随磁场倒数 $1/B$ 的变化关系图。图(b)：横向自旋流 $J_{2,s}$ 在共振磁场($1/B \approx 5.1$)附近，随自旋轨道耦合强度 V_R 的变化关系图。其它参数：退相干强度 $\Gamma_d = 0$ ，体系尺寸 $W = 40a$ ，费米能 $E = -3t$ 。

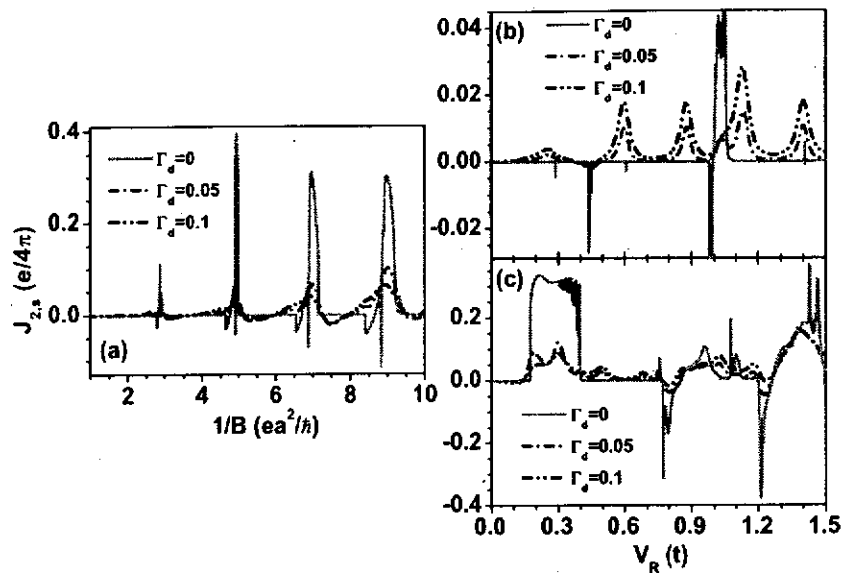


图 5-5 图(a): 横向自旋流 $J_{2,s}$ 在不同退相干强度随磁场倒数 $1/B$ 的变化关系图, 其中, $V_R = 0.1$ 。图(b)-(c): 横向自旋流 $J_{2,s}$ 分别在非共振磁场 ($1/B = 2$) 和共振磁场 ($1/B = 3.1$) 处, 不同的退相干强度 Γ_d 下, 随自旋轨道耦合强度 V_R 的变化关系图。所有图中, 都有体系尺寸 $W = 40a$, 费米能 $E = -3t$ 。

强度 Γ_d , 呈现混沌分布。

§5.3.3 塞曼效应的影响

以上所述结果都没有考虑塞曼效应, 现在, 我们来简单了解塞曼效应对两种体系的影响。为了凸现塞曼效应, 所有体系都不考虑退相干作用的影响。事实上, 退相干的作用还和前几节所述现象类似。为了便于比较, 图5-6和图5-7分别作了透射系数随磁场倒数 $1/B$ 在没有塞曼效应和考虑塞曼效应两种情况下的变化关系图。其中图a是自旋轨道耦合 $V_R = 0.1$ 的体系, 图b是 $V_R = 0$ 的体系。 $V_R \neq 0$ 时, 由于导线2和导线4中的 $V_R = 0$, 此非均匀 V_R 分布在两个横向边缘 (导线2和导线4与中间区的接触处) 形成额外的边界散射势, 导致 $V_R = 0.1$ 的体系不仅有绕体系边缘行走的透射系数 ($T_{12} = T_{23} = T_{34} = T_{41}$), 还有从导线3到导线1的散射态 (T_{13})。另外, 为了便于分析问题, 每个图中我们都作了相应体系的中间区的本征朗道能级随 $1/B$ 的关系图。可以看出随着磁场减小, 每当费米能穿过一个朗道能级, 相应透射系数就会发生跳跃。对比图5-6和图5-7, 发现塞曼效应使得 $V_R = 0$ 体系简并的朗道能级发生劈裂, 使得 $V_R = 0.1$ 体系由于自旋轨道引起的自旋劈裂的朗道能级重新分布, 并且, 随着磁场减小劈裂能级交叉。这就导致了费米面穿过新的朗道能级时相应的一系列变化, 包括透射系数的变化, 以及横向自旋流的变化。

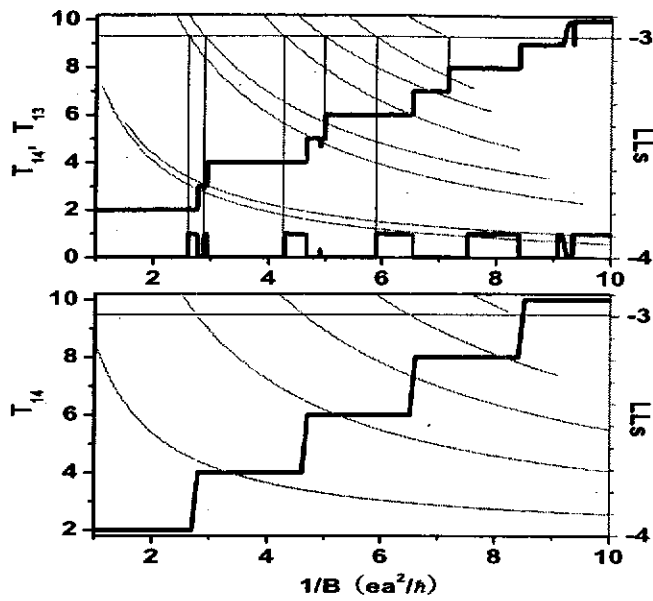


图 5-6 不考虑塞曼效应, 体系透射系数 $T_{14,13}$, 体系朗道能级(LLs)随磁场倒数 $1/B$ 的变化曲线。上图(a): $V_R = 0.1t$; 下图: $V_R = 0$ 。其它参数: 退相干强度 $\Gamma_d = 0$, 体系尺寸 $W = 40a$, 费米能 $E = -3t$ 。

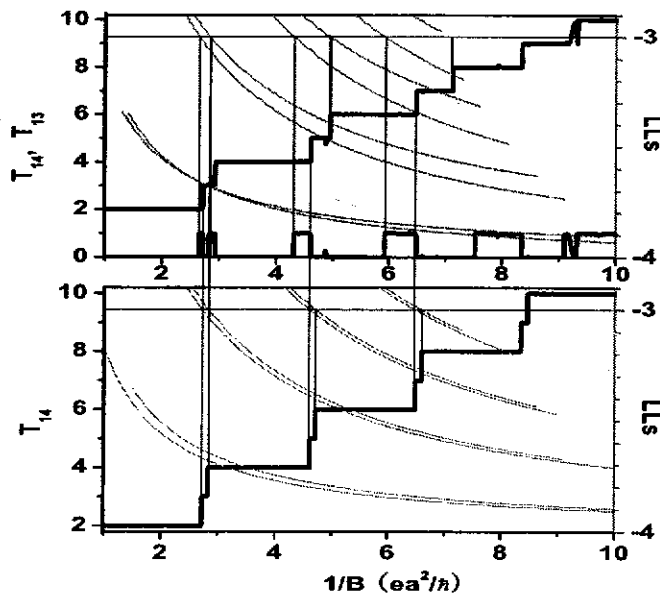


图 5-7 考虑塞曼效应, 体系透射系数 $T_{14,13}$, 体系朗道能级(LLs)随磁场倒数 $1/B$ 的变化曲线。上图(a): $V_R = 0.1t$; 下图: $V_R = 0$ 。其它参数: 退相干强度 $\Gamma_d = 0$, 体系尺寸 $W = 40a$, 费米能 $E = -3t$ 。

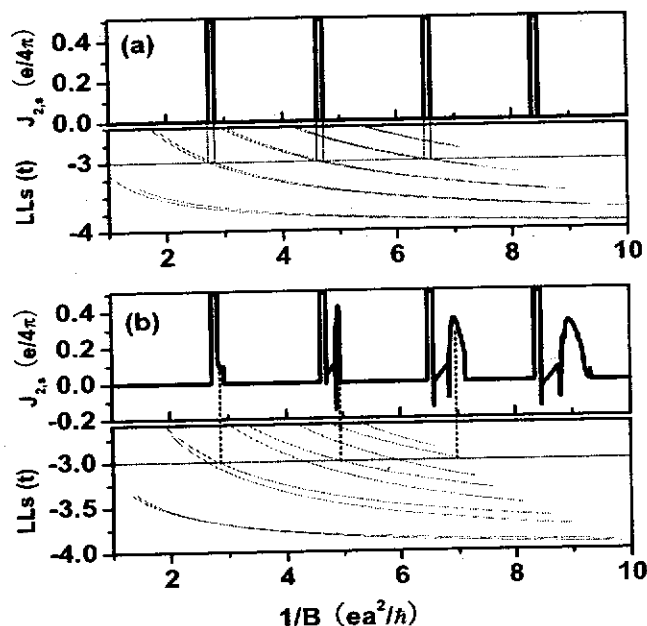


图 5-8 横向自旋流 $J_{2,s}$ ，体系本征朗道能级随磁场倒数 $1/B$ ，在不同自旋轨道耦合强度 $V_R = 0$ (a)和 $V_R = 0.1t$ (b)情况下的变化关系图。其它参数：退相干强度 $\Gamma_d = 0$ ，体系尺寸 $W = 40a$ ，费米能 $E = -3t$ 。

图5-8a和5-8b 就分别作了在 $V_R = 0$ 和 $V_R \neq 0$ 体系，且在塞曼效应作用下横向自旋流 $J_{2,s}$ 随磁场倒数 $1/B$ 的变化曲线，并结合朗道能级，标记了自旋流的共振点。发现，当 $V_R = 0$ ，横向自旋流仅有一族由塞曼效应导致的极大峰，而当 $V_R \neq 0$ ，横向自旋流除了有由塞曼效应导致的一族极大峰外，还有一族源于自旋轨道耦合的共振峰。当存在塞曼效应时，朗道能级的自旋简并解除，发生自旋劈裂。此时，自旋向上和自旋向下的电子的态密度不同，相应被自旋上和自旋下的电子填充的朗道能级的位置也不同。因此，对于同一个费米能，被自旋上和自旋下的电子填充的朗道能级数就有可能不同。一旦不同，则费米能一定位于两个相邻的塞曼劈裂的朗道能级间，此时朗道能级一定是奇数占据，体系产生横向自旋 $1/2$ 极化流，极化峰的位置正好是费米能和劈裂的朗道能级相交的位置（图5-8a中的红色竖线），极化峰的宽度正好是塞曼劈裂的宽度（约为 $0.05t$ ）。类似地，偶数占据时，携带自旋上和自旋下电子的边缘态数相同，此时，没有自旋极化流。另一方面，当 $V_R \neq 0$ ，由于自旋轨道耦合作用，自旋上和自旋下的朗道能级被混合，然后重新分布，产生新的自旋劈裂的朗道能级。注意新的朗道能级已经不再区分自旋上和自旋下，即，每支朗道能级中都有自旋上的成分，也有自旋自旋下的成分，这一点和塞曼劈裂由质。通过解无限大自由电子体系的薛定额方程得到的体系的本征波矢，我们发现，由自旋轨道耦合导致的或者由自旋

轨道耦合和塞曼效应共同导致的自旋劈裂的朗道能级中的其中一支，自旋严重劈裂，而另外一支，自旋几乎不发生劈裂。这就导致了图5-8b中的第二族横向自旋流极大峰，即由自旋轨道耦合导致的共振峰，这族共振峰的位置恰好就在费米能和朗道能级的其中一支相交的位置（图5-8b中的红色虚线）。此外，塞曼峰间距几乎不随 V_R 改变，而自旋轨道耦合共振峰随 V_R 的增大而增大（没有给出图示），这充分说明，这两族峰有完全不同的物理图像。

§5.4 小结

本章研究了退相干过程对垂直外磁场作用的四端口存在自旋轨道耦合以及不存在自旋轨道耦合的二维介观体系的影响。发现在不存在自旋轨道耦合的体系，体系呈现偶数霍尔平台结构，且霍尔电阻平台在退相干强度 Γ_d 非常大的情况下，仍保持的很好。这充分说明，在没有自旋轨道耦合霍尔体系中，外磁场可以非常有效的抵制退相干作用。体系越大，磁场越大，抵御能力越强。对于存在自旋轨道耦合的四端口体系，自旋简并解除，体系出现奇数霍尔平台。而且此奇数霍尔平台能被较小的退相干强度 Γ_d 破坏，但是偶数平台仍能保持。这说明自旋轨道耦合使得体系抵御退相干的能力大大降低。此外，我们也研究了磁场作用下的自旋轨道耦合体系的横向自旋流，发现当费米能穿过体系自旋劈裂的两支朗道能级的其中一支时，横向自旋流达到共振极大，并且退相干作用压制共振自旋流，但是提高非共振自旋流。最后，我们还研究了塞曼效应的影响，发现塞曼效应引起朗道能级的重新分布，并导致透射系数在费米面穿过新的朗道能级时的一系列变化，这导致了横向自旋流随磁场变化的又一族极大峰值。这两族峰：由塞曼效应导致的塞曼极大峰，和由自旋轨道耦合导致的自旋共振峰，源于两种完全不同的物理机制。

参考文献

- [1] D. E. Khmel'nitskii, *Quantum hall effect and additional oscillations of conductivity in weak magnetic fields*, Phys. Lett. **106A**, 182-183 (1984).
- [2] R. B. Laughlin, *Levitation of Extended-State Bands in a Strong Magnetic Field*, Phys. Rev. Lett. **52**, 2304-2304 (1984).
- [3] For a review, see *The Quantum Hall Effect*, edited by R. E. Prange and S. M. Girvin (Springer-Verlag, New York, 1990).
- [4] K. von Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, *New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance*, Phys. Rev. Lett. **45**, 494-497 (1980).
- [5] F. Delahaye, D. Deminguez, F. Alerandre, J. P. Andre, J. P. Hirtz, and M. Razeghi, *Metrologia*, **22**, 103 (1986).
- [6] S. He, X.-C. Xie, S. Das Sarma, and F.-C. Zhang, *Quantum Hall effect in double-quantum-well systems*, Phys. Rev. B **43**, 9339-9342 (1990); S. He, X.-C. Xie and F.-C. Zhang, *Anyons, boundary constraint, and hierarchy in fractional quantum Hall effect*, Phys. Rev. Lett. **68**, 3460-3463 (1992).
- [7] V. P. Mineev, *de Haas - van Alphen effect versus integer quantum Hall effect*, Phys. Rev. B **75**, 193309-193312 (2007).
- [8] D. C. Tsui, H. L. Störmer, and A. C. Gossard, *Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit*, Phys. Rev. Lett. **48**, 1559-1562 (1982).
- [9] R. B. Laughlin, *Anomalous Quantum Hall Effect: An Incompressible Quantum Fluid with Fractionally Charged Excitations*, Phys. Rev. Lett. **50**, 1395-1398 (1983).
- [10] N. Read, *Theory of the half-filled Landau level*, Semicond. Sci. Technol. **9**, 1859-1864 (1994); For a review, see *Perspectives in Quantum Hall Effects*, edited by S. DasSarma and A. Pinczuk (Wiley, New York, 1997).
- [11] J. E. Hirsch, Phys. Rev. Lett. *Spin Hall Effect*, **83**, 1834-1837 (1999); M. I. Dyakonov and V. I. Perel, *Possibility of Orienting Electron Spins with Current*, JETP Lett. **13**, 467-469 (1971); M. I. Dyakonov and V. I. Perel, *Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors* Phys. Lett. A **35**, 459-460 (1971).
- [12] 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).

- [13] 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).
- [14] 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); L. Sheng, D. N. Sheng, C. S. Ting, and F. D. Haldane, *Nondissipative Spin Hall Effect via Quantized Edge Transport*, Phys. Rev. Lett. **95**, 136602-136605 (2005).
- [15] 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); S.-Q. Shen, Y.-J. Bao, M. Ma, X. C. Xie, and F. C. Zhang, *Resonant spin Hall conductance in quantum Hall systems lacking bulk and structural inversion symmetry*, Phys. Rev. B **71**, 155316-155325 (2005); 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).
- [16] 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).
- [17] 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).
- [18] 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).
- [19] 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); 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).
- [20] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Observation of spin Hall effect*, Science **306**, 1910-1913 (2004); 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); 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).

- [21] 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).
- [22] S. O. Valenzuela and M. Tinkham, *Direct electronic measurement of the spin Hall effect*, Nature **442**, 176-179 (2006).
- [23] D. Z. Liu, X.-C. Xie, and Q. Niu, *Weak Field Phase Diagram for an Integer Quantum Hall Liquid*, Phys. Rev. Lett. **76**, 975-978 (1996); X.-C. Xie, D. Z. Liu, B. Sundaram, and Q. Niu, *Transition from the integer quantum Hall state to the insulator state*, Phys. Rev. B **54**, 4966-4973 (1996);
- [24] S. Kivelson, D.-H. Lee, and S. C. Zhang, *Plasmons localized at point charges in semiconductor quantum wells*, Phys. Rev. B **48**, 2223-2235 (1992).
- [25] M. Büttiker, *Four-Terminal Phase-Coherent Conductance*, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761-1764 (1986); M. Büttiker, *Symmetry of electrical conduction*, IBM J. Res. Dev. **32**, 317-321 (1988).
- [26] Roksana Golizadeh-Mojarad and Supriyo Datta, *Nonequilibrium Green's function based models for dephasing in quantum transport*, Phys. Rev. B **75**, 081301-081304 (2007).
- [27] Chapter 2 and 3, in *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, edited by S. Datta (Cambridge University Press 1995).
- [28] for the simple picture on IQHE, also see Chapter 4, in *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, edited by S. Datta (Cambridge University Press 1995).
- [29] R. B. Laughlin, *Quantized Hall conductivity in two dimensions*, Phys. Rev. B **23**, 5632-5633 (1981); B. I. Halperin, *Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential*, Phys. Rev. B **25**, 2185-2190 (1982).

第六章 纵向偏压导致的横向边界自旋积累

摘要: 本章研究表明对于二维带状体系, 在纵向电流驱动下, 由边界限制势导致的自旋轨道耦合项也能在横向边缘引起符号相反的自旋积累, 此积累和纵向电流强度成正比, 并且当驱动电流反向, 自旋积累也跟着改变符号。不同于外在的和内在的自旋霍尔效应, 由限制势导致的横向边缘的自旋积累, 几乎不受杂质散射, 体系尺寸等因素影响, 这为实验上的自旋积累提供另一种可能的解释¹。

§6.1 引言

在这一章中, 我们介绍一种简单的自旋积累机制, 由此产生的自旋积累和前面介绍的自旋霍尔效应中的自旋积累极为相近, 但是起源却完全不同, 这也从另一个侧面反映出自旋霍尔效应远不像我们想象中的那么简单。

关于自旋霍尔效应, 有两个比较有代表性的实验[2, 3], 这两个实验都观察到纵向电流驱动下半导体两个横向边缘的符号相反的自旋积累。其中一个实验采用n型GaAs半导体异质结, 结面为 $300\mu\text{m} \times 77\mu\text{m}$ 的长条形[2], 通过Kerr旋转分光镜来探测横向边缘的自旋积累; 另一个实验采用一个共面的p-n结, 通过光发射二极管探测p型结面中横向边缘的自旋积累。

这些实验都是为了测量理论上预测的外在或内在的自旋霍尔效应。其中外在自旋霍尔效应是几十年前就有的概念[4, 5]: 由于体系存在自旋相关散射, 自旋向上的电子和自旋向下的电子被反射后左偏和右偏的几率不等, 导致它们分别向体系两个相反的横向边缘积累。而内在自旋霍尔效应是近几年才发展起来的观念, Murakami等人⁶和Sinova等人⁷首先分别在Luttinger自旋轨道耦合的三维半导体的p型结面⁶和Rashba自旋轨道耦合的二维n型半导体结面⁷中预测了内在自旋霍尔效应。此后, 关于内在自旋霍尔效应的研究文献[8-11]大量涌现。然而, 直到现在内在自旋霍尔效应仍然是一个颇有争议的话题: 首先, 文献⁷指出, 无限大的各向同性的体系的局域内在自旋霍尔电导是一个不随体系尺寸, 自旋轨道耦合强度, 费米能等参数变化的普适量, 然而又有一些工作却显示自旋霍尔电导不是一个普适量, 它依赖于自旋轨道耦合强度和体系费米能⁸。此外, 杂质散射对自旋霍尔效应也有不容忽视的影响: 在无限大体系, 自旋霍尔效应对杂质散射非常敏感, 轻微的杂质散射就足以湮灭自旋霍尔效应⁹; 而在有限大体系, 自旋霍尔效应在杂质浓度低于临界值时仍然存在¹⁰。

¹实际上, 在我们这个工作完成不久, 就有一个专门设计的实验¹, 用来区分由边界势导致的自旋积累和由自旋霍尔效应导致的自旋积累

尽管实验[2]和实验[3]中观测到的自旋积累和自旋霍尔效应中预测的现象一致，但这并不说明理论已经完全解释了实验。因为由外在自旋霍尔效应导致的自旋积累的符号和实验结果正好相反[9]，内在自旋霍尔导致的自旋积累的符号刚好和实验一致，但是由于真实的实验体系并不是弹道散射体系，而是存在一定的杂质散射，这样，自旋积累随体系横向尺寸的增加逐渐消失。因此我们无法用纯粹的内在自旋霍尔效应来解释实验。在这一章，我们就提出另一种可以导致和实验[2]类似的，符号相反的横向边缘自旋积累的机制。

§6.2 自旋积累机制

考虑如图6-1插图所示的沿 x 方向无限长沿 y 方向有限宽的带状分布结构。整个体系的哈密顿 $H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} + V(y)$ ，其中 $p_{x/y}$ 表示 x, y 方向的动量， m^* 是有效质量。 $V(y)$ 是横向限制势。如图6-1所示， $V(y)$ 在中间为常数，在边缘处由于边界效应，限制势迅速抬高，呈抛物形分布。由于相对论效应，由横向限制势引起的内部电场 $E = \nabla V(y)/e$ ，导致了另一种形式的自旋轨道耦合项 $V_{SO} = \frac{e\hbar}{2m^*c^2} \sigma \cdot (E(y) \times p)$ [13, 14]。考虑到内部电场 $E = \nabla V(y)/e$ 垂直于横向边界（沿着 x 方向的两个侧边），因此仅有 y 方向的内部电场 E_y 不为零，这样自旋轨道耦合项变为 $V_{SO} = -\frac{\hbar}{2m^*c^2} \sigma_z p_x \frac{d}{dy} V(y)$ 。在限制势和自旋轨道势的共同作用下，体系的有效势 $V_{eff}(y) = V(y) + \frac{e\hbar}{2m^*c^2} \sigma \cdot (E(y) \times p)$ 。这样，当体系在纵向偏压驱动下产生 $+p_x$ 的动量时，自旋向下($\sigma_z = \downarrow$ 或 -1)的电子感受到的有效势在 $y = 0$ 的横向边缘低于自旋向上的电子，而在 $y = L$ 的横向边缘高于自旋向上的电子（图6-1）。因此，在 $y = 0$ 的横向边缘，电子更倾向于自旋向下，而在 $y = L$ 的横向边缘，电子更倾向于自旋向上，这导致 $+p_x$ 态占据的电子在横向边缘形成自旋相反的自旋积累。相反，如果纵向偏压反向，使得电子整体具有 $-p_x$ 的动量，两横向边缘的自旋积累就会改变符号，形成和 $+p_x$ 态情况相反的自旋积累。这种自

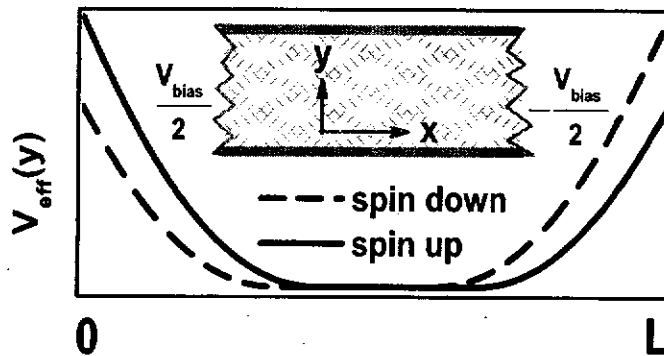


图 6-1 $+p_x$ 群速度下，带状结构横向有效电场 $V_{eff}(y)$ 草图。插图是带状二维体系结构示意图。

旋积累现象和实验[2, 3]观测到的现象完全相同, 但是却源于完全不同的积累机制。另外, 由于这种积累完全源于限制势, 因此几乎不受杂质散射以及退相干的影响。一句话, 横向结构限制势也可以导致横向边缘符号相反的自旋积累, 而这种积累有可能对实验中观测到的类似自旋积累有贡献。

§6.3 体系介绍及公式推导

体系哈密顿:

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} + V(y) - \frac{\hbar}{2m^{*2}c^2} \sigma_z p_x \frac{d}{dy} V(y). \quad (6-1)$$

其中第一项是动能项, 第二项是横向限制势能项, 第三项是由横向限制势引起的自旋轨道耦合项。由于沿x方向是无线长的周期结构, 我们设x方向的势能为常数, 在这儿设为零。由于 $[p_x, H] = 0$ 且 $[\sigma_z, H] = 0$, 因此波矢 k_x 和自旋 σ_z 都是好量子数, 体系的本征波矢写为 $\Psi(x, y) = \phi_{nk_x}(y) \exp(ik_x x)$, 且体系满足色散关系 $E = \epsilon_{nk_x} + \hbar^2 k_x^2 / 2m^*$ 。其中指标 n 标记不同的子能带, 子能带由横向波矢 $\phi_{nk_x}(y)$ 和能级 ϵ_{nk_x} 描述, 它们都是波矢 k_x 的函数。横向波函数 $\phi_{nk_x}(y)$ 满足如下薛定额方程:

$$\left[\frac{p_y^2}{2m^*} + V(y) - \gamma \sigma_z \frac{dV(y)}{dy} \right] \phi_{nk_x}(y) = \epsilon_{nk_x} \phi_{nk_x}(y), \quad (6-2)$$

其中 $\gamma = \frac{\hbar^2 k_x}{2m^{*2}c^2}$ 。

§6.3.1 方势阱限制势

实验中, 沿y方向的体系尺寸 L 很长(例如, 文献[2]中就达到几十微米), 而限制势的变化只在几个原子尺寸的范围, 因此在我们的解析模型中, 用方势阱来模拟横向限制势 $V(y)$ 。这样, 当 $0 < y < L$ 时, $V(y) = 0$, 在此范围以外, $V(y) = V$ 。此时, 自旋轨道耦合势 $V_{SO} = -\gamma \sigma_z \frac{d}{dy} V(y)$ 变成y的 δ 函数。这样的体系的横向波函数可以通过解析求解薛定额方程来得到。由于自旋 σ_z 是好量子数, 自旋上和自旋下完全解耦, 我们可以分别求解自旋上和自旋下的薛定额方程。从方程(6-2)可以得到自旋上的薛定额方程:

$$\left[\frac{p_y^2}{2m^*} + V(y) + \gamma (\delta(y) - \delta(y-L)) \right] \phi(y) = \epsilon \phi(y) \quad (6-3)$$

自旋下的薛定额方程和方程(6-3)类似, 只要把 $\gamma \rightarrow -\gamma$ 即可得自旋下的薛定额方程。方程(6-3)中的波函数 $\phi(y)$ 写作:

$$\phi(y) = \begin{cases} A e^{\beta y}, & y < 0 \\ \sin(k_y y + \theta), & 0 < y < L \\ B e^{-\beta y}, & y > L \end{cases} \quad (6-4)$$

其中, $k_y = \sqrt{2m^*\epsilon}/\hbar$, $\beta = \sqrt{2m^*(V - \epsilon)}/\hbar$. A, B, θ 需要通过边条件确定. 边条件如下:

$$\begin{aligned} \phi(y)|_{y=0^-/L^-} &= \phi(y)|_{y=0^+/L^+} \\ \phi'(y)|_{y=0^+/L^+} - \phi'(y)|_{y=0^-/L^-} &= \pm(2m^*\gamma/\hbar^2)\phi(y)|_{y=0/L} \end{aligned} \quad (6-5)$$

代入边条件, 得:

$$\begin{cases} \sin\theta = A \\ \sin(k_y L + \theta) = B e^{-\beta L} \\ k_y \cos\theta - A\beta = 2m^*\gamma A \\ \beta B e^{-\beta L} + k_y \cos(k_y L + \theta) = 2m^*\gamma B e^{-\beta L} \end{cases}$$

解此方程组, 得到 ϵ_{nk_x} 和 $\phi_{nk_x}(y)$. 这样自旋上的占据几率 $P_{nk_x, \uparrow}(y) = |\phi_{nk_x}(y)|^2$ 马上可得. 自旋下的计算过程类似. 体系在 x 方向是各向同性的周期结构, 自旋积累不依赖于 x 方向的位置坐标, 因此 $P_{nk_x, \uparrow}(y)$ 完全可以描述体系的自旋积累.

§6.3.2 抛物形边缘势

尽管方势阱形式的横向限制势可以解析求解, 但是它不能描述真实的体系, 在真实体系中, $V(y)$ 不是突然从低电势变到高电势, 而是有一个在边缘附近缓变的过程, 尽管只有几个原子尺寸的范围. 因此我们考虑一个如图6-1所示的抛物形的横向限制势 $V(y)$. 这样的体系只能通过紧束缚模型哈密顿[12]数值求解. 在此体系中, 我们还研究了杂质散射对自旋积累的影响. 方程(6-2)中的横向哈密顿在紧束缚模型下表示为:

$$H = \sum_{i, \sigma} (\epsilon_i + V_i + \sigma V_{SO, i}) a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} + \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} \quad (6-6)$$

其中 i 代表沿 y 方向的格点坐标, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ (或 ± 1)表示沿 z 方向极化的自旋指标, $t = \hbar^2/2m^*a^2$ 是相邻格点的跳跃能, a 是格点常数. $y = 0$ 和 $y = L$ 的横向边缘附近 $5a$ 范围内的限制势 $V(y)$ 设为抛物形势, 有:

$$\begin{cases} V(y) = V \frac{(y-6a)^2}{25a^2}, & a \leq y \leq 5a \\ V(y) = V \frac{(y-L+5a)^2}{25a^2}, & L-5a < y \leq L \end{cases} \quad (6-7)$$

对于干净的无杂质的系统, 格点位势 ϵ_i 全部设为零; 当考虑杂质散射时, 体系的格点位势 ϵ_i 在 $[-W/2, W/2]$ 的范围内随机分布. 有了哈密顿(6-6), 体系的本征矢和本征值通过矩阵哈密顿数值可解. 由于哈密顿中自旋向上和自旋向下的部分完全解耦, 我们可分别求解自旋上和自旋下的矩阵哈密顿, 这样比求解同时包括自旋上和自旋下的整体矩阵哈密顿要快很多. 得到本征值和本征矢后, 各 n 子带的自旋占据几率 $P_{nk_x, \sigma}(i)$ 马上可得, 同时利用各子带本征值, 纵向波矢 $\hbar k_x$ 也马上可得.

考虑到体系具有时间反演不变性, 纵向偏压 V_{bias} 为零时, 自旋积累 $S(y)$ 为零。当 $V_{bias} \neq 0$ 时, 产生自旋积累 $S(y)$ 。考虑正偏压和零温情况, 体系处于费米能 E_f 附近 $E_f - V_{bias}/2$ 和 $E_f + V_{bias}/2$ 之间的能级全部被处于 $+k_x$ 动量态的电子占据, 此能量范围内动量为 $-k_x$ 的则为空占据态。在微偏压极限, 采用线性近似, 单位偏压下自旋上和自旋下的横向空间占据几率 $P_{\uparrow\downarrow}(i)$ 表示为 $P_{\uparrow\downarrow}(i) = \sum_n \rho_n(E_{k_x}) P_{nk_x, \uparrow\downarrow}(i)$, 其中, $\rho_n(E_{k_x})$ 是第 n 个横向子带的态密度。沿 x 方向传播的能量 $E_{k_x} = E_f - \epsilon_{nk_x}$, 这儿的求和只针对带底低于费米面的众子带。单位偏压作用下的线性自旋积累密度 $P_s(i) \equiv \lim_{V_{bias} \rightarrow 0} \frac{S(ia)}{V_{bias}} = \frac{\hbar}{2} (P_{\uparrow}(i) - P_{\downarrow}(i))$, 线性电荷积累密度 $P_e(i) = e(P_{\uparrow}(i) + P_{\downarrow}(i))$ 。

数值计算中, 选择真实体系的各个参数[15]: 有效电子质量 $m^* = 0.05m_e$, 费米能 $E_f = 0.1\text{eV}$, 相应二维态密度 $n_{2D} = 10^{12}\text{cm}^{-2}$, 格点常数 $a = 0.196\text{nm}$ 。能量单位设为 1eV , 长度单位设为 1nm (在方势阱体系的解析计算过程中) 或者 $1a.u.$ (在紧束缚模型的数值计算中)。

§6.4 数值计算及结果讨论

§6.4.1 干净体系的自旋积累

首先研究体系没有杂质散射时的自旋积累。从上节导出的自旋积累表

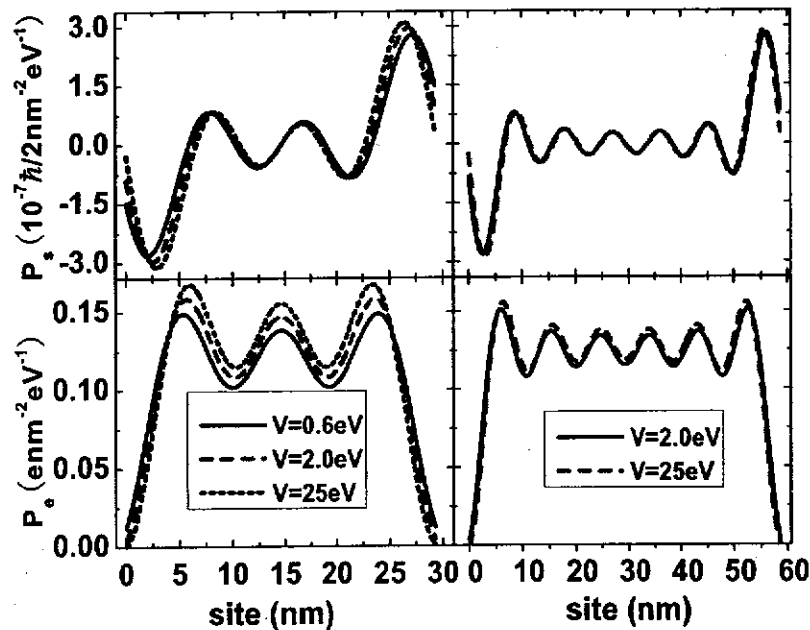


图 6-2 不同限制势强度下, 方势阱体系横向自旋密度 $P_s(y)$ 和电荷密度 $P_e(y)$ 随横向坐标 y 的变化关系图。左图和右图分别对应横向尺寸 $L = 29.3\text{nm}$ 和 $L = 58.6\text{nm}$ 的情况。

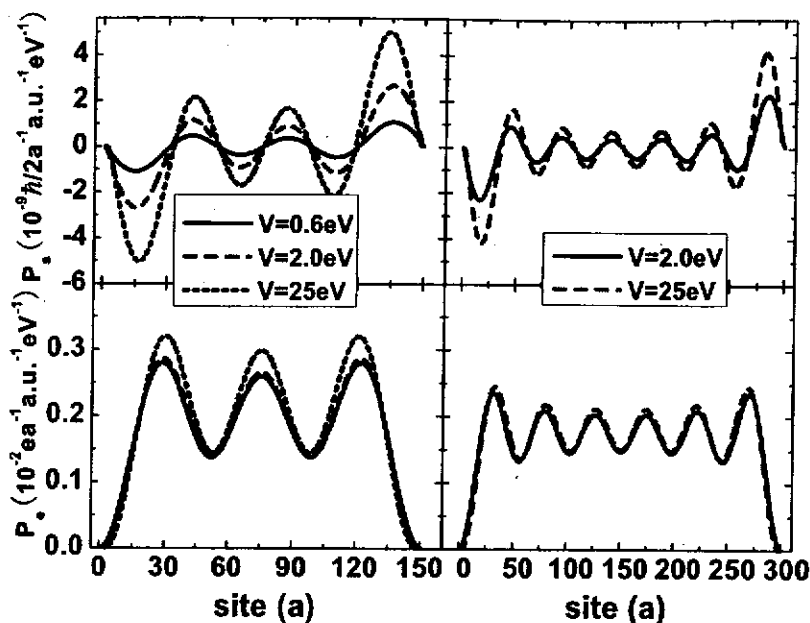


图 6-3 不同限制势强度下, 抛物势体系横向自旋密度 $P_s(y)$ 和电荷密度 $P_c(y)$ 随横向坐标 y 的变化关系图。左图和右图分别对应横向尺寸 $L = 150a$ 和 $L = 300a$ 的情况。

达式可以看出, 自旋积累 $P_s(y)$ 和横向坐标 y 有关但是和与纵向坐标 x 无关。图6-2和图6-3分别作了方势阱体系和抛物势体系中, 横向自旋密度 $P_s(y)$ 和电荷密度 $P_c(y)$ 随横向坐标 y 的变化。看得出: 第一, 不管是方势阱体系还是抛物势体系, 两个横向边缘都有符号相反的自旋积累。如果纵向偏压反向, 由于 $+k_x \rightarrow -k_x$, 自旋积累也反向, 这和实验[2, 3]中观测到的现象类似。而电荷积累在两个横向边缘却有相同的符号, 而且纵向偏压反向, 电荷积累也不变。自旋积累 $P_s(y)$ 是 y 的奇函数, 而电荷积累 $P_c(y)$ 是 y 的偶函数。第二, 自旋积累主要集中在横向边缘附近, 而电荷积累主要集中在横向体内, 由于对输运有贡献的电子以固定的费米能入射, 自旋积累在横向体内呈微振荡分布, 振荡周期约为 $2\pi/k_F$ 。固定费米面(例如, 我们设的 $E_f = 0.1eV$), 横向尺寸 L 越大, 费米面以下的子带越多, 随之振荡周期越短, 幅度越小。当 L 很大时, 体自旋积累 P_s 几乎为零, 而体电荷积累 P_c 几乎为常数。第三, 方势阱体系和抛物势体系中的自旋积累对限制势 $V(y)$ 强度 V 的依赖关系, 稍微有些区别。当 $V = 0$, $P_s(y) = 0$, V 不断增加, $P_s(y)$ 也从零开始不断增大, 这对两个体系都是相同的。但是, 两个体系 $P_s(y)$ 增加的趋势不同: 方势阱体系, $P_s(y)$ 随 V 迅速增加, 在 $V \approx 0.5E_f$ 时, $P_s(y)$ 达到饱和(看图6-2); 抛物势体系, $P_s(y)$ 随 V 缓慢上升, $V \approx 8eV$ 时, $P_s(y)$ 才达到饱和。注意, 图6-2和图6-3中不同 V 的电荷积累曲线几乎不可分辨, 说明限制势的强度几乎不影响电荷积累。

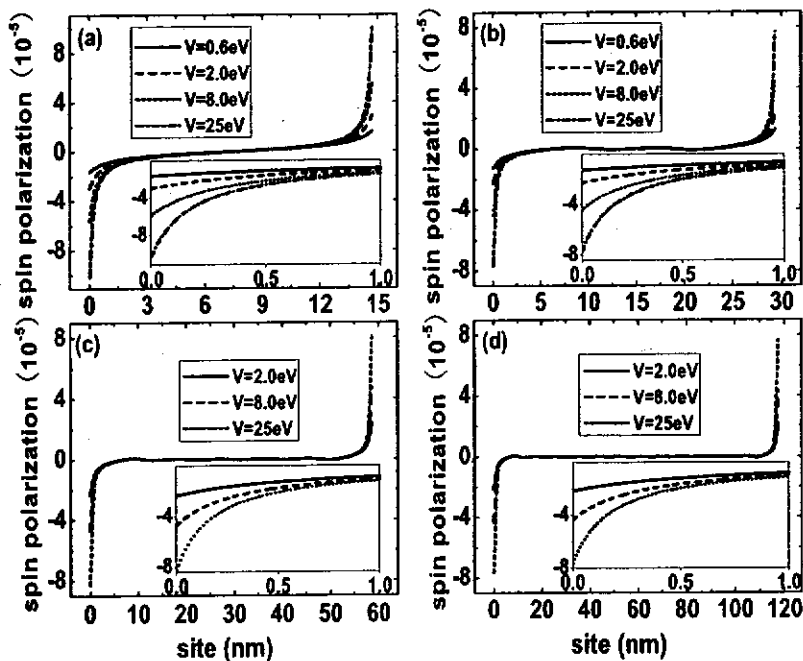


图 6-4 不同横向尺寸下, 方势阱体系横向自旋极化率 P_s/P_e vs 随横向坐标 y 的变化。图(a), (b), (c), (d) 分别对应横向尺寸 $L = 14.6\text{nm}$, $L = 29.3\text{nm}$, $L = 58.6\text{nm}$, $L = 117.3\text{nm}$ 。插图是 $y = 0$ 边界放大的分布图。

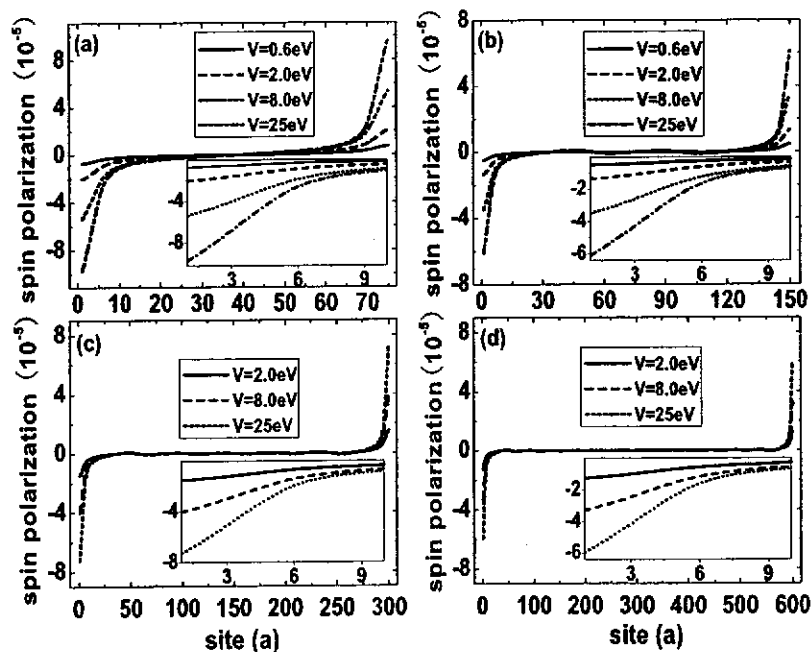


图 6-5 不同横向尺寸下, 抛物势体系横向自旋极化率 P_s/P_e vs 随横向坐标 y 的变化。图(a), (b), (c), (d) 分别对应横向尺寸 $L = 75a$, $L = 150a$, $L = 300a$, $L = 600a$ 。插图是 $y = 0$ 边界放大的分布图。

接下来图6-4和图6-5研究方势阱和抛物势两种不同体系中自旋极化率 $P_s(y)/P_e(y)$ ，在不同的横向限制势强度 V 下，随横向坐标 y 的关系。仍然发现，两个体系都在横向边缘有方向相反的自旋极化。且不管横向尺寸 L 取何值（例如，在图6-4和图6-5中， L 分别取了 14.6nm ， 29.3nm ， 58.6nm 和 117.3nm ），体系都有接近相等的边缘自旋极化率。此外，极化率 $P_s(y)/P_e(y)$ 随限制势强度 V 近线性增长，而自旋积累 $P_s(y)$ 却几乎不随 V 变化（在 V 比较大的时候，看图6-2和图6-3）。从插图中放大图看到，因为限制在实空间的势变化范围不同，抛物势体系的自旋积累宽度要稍大于方势阱体系。

§6.4.2 杂质对自旋积累的影响

下面讨论杂质散射对自旋积累的影响。由于在量子薛定谔方程中无法定量地引入杂质浓度，因此我们只计算杂质对第二种抛物势体系的影响。图6-6显示横向自旋积累 $P_s(y)$ ，电荷积累 $P_e(y)$ ，自旋极化率 $P_s(y)/P_e(y)$ ，在不同的杂质浓度 W 下，随横向坐标 y 的依赖关系。图6-6中的数据是在对随即分布的杂质位形取5000次平均得来的。从图中看出，自旋极化率 $P_s(y)/P_e(y)$ 几乎不受杂质影响，即使杂质浓度 W 已高达 $W = 10E_f$ 。而自旋积累 $P_s(y)$ 和电荷积累 $P_e(y)$ 也仅在横体内（边缘处几乎不受 W 影响）对 W 有微弱的依赖关系。事实上，我们提出的这一套自旋积累机制完全源于边界限制势导致的对于自旋上和自旋下电子表现不同（图6-1）的有效自旋轨道耦合势，自然对杂质散射以及退相干作用极不敏感。

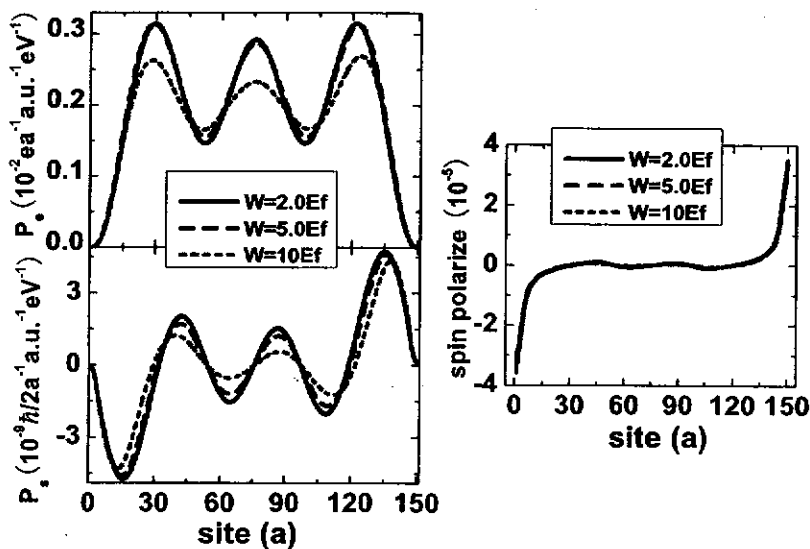


图 6-6 图(a), 图(b), 图(c)分别是横向电荷密度 P_e ，自旋密度 P_s 及自旋极化率 P_s/P_e ，在不同杂质浓度 W 作用下，随横向坐标 y 的变化曲线。其它参数：费米能 $E_f=0.1\text{eV}$ ，横向尺寸 $L = 150a$ ，纵向偏压 $V = 8\text{eV}$ 。

§6.4.3 数值结果和实验比较

为了把我们的结果和实验[2]比较, 我们计算了实验中的自旋极化率和自旋积累。实验数据显示, 样品厚度 $h = 0.9\mu\text{m}$, 自旋积累在边缘处的峰值约为 $P_s \approx (1.5 - 4.2) \times 10^{-6} \text{nm}^{-2} \text{eV}^{-1}$, 相应的自旋极化率 $P_s(y)/P_e(y)$ 约为 $(1.0 - 2.8) \times 10^{-4}$ 。

【注意, 实验中的自旋极化率约为 $(1.0 - 2.8) \times 10^{-4}$ 是通过 $(j_{\uparrow} - j_{\downarrow})/(j_{\uparrow} + j_{\downarrow})$ 来定义的, 并不是我们在计算中的定义 $(P_{\uparrow} - P_{\downarrow})/(P_{\uparrow} + P_{\downarrow})$ 】而我们的计算显示(例如, 图6-2和图6-4), 横向自旋密度分布在边缘处的峰值为 $P_s \approx 0.3 \times 10^{-6} \text{nm}^{-2} \text{eV}^{-1}$, 自旋极化率为 0.8×10^{-4} 。这样的值和从实验中得到的自旋极化率可以比拟。此外, 由于实验中的样品非常厚, 达到 $h = 0.9\mu\text{m}$, 而我们采用的是二维体系, 体系的实际厚度就是我们计算所采用的单位长度(在两种体系中分别为1nm和1a.u), 所以我们计算得到的单位厚度的自旋积累密度比实验中的自旋积累要小几个量级。最后要提的是, 在我们的体系中, 自旋弛豫长度由 $1/k_F$ 决定, 大概为10nm(图6-2和图6-3)。这和最近研究内在自旋霍尔效应的文献[10]中自旋弛豫长度接近。但是和实验[2]中的自旋弛豫长度相去甚远, 实验中大概为 $10\mu\text{m}$ 。造成这种显著差别的最可能的原因是自旋扩散, 因为在实验中, 体系处于扩散区, 边界处的自旋积累可能朝中心区扩散, 使得自旋弛豫长度大大增长, 因此实验中的自旋弛豫长度主要由自旋扩散长度决定, 而不是像我们的模型, 由 $1/k_F$ 决定。但是不管怎样, 我们的简单模型得出结果不仅定性地和实验[2]符合, 而且, 还数值上也符合的较好(在同一数量级上)。

§6.5 小结

总结以上讨论, 对于纵向偏压导致横向边缘自旋积累这一现象, 我们提出了一套完全不同的发生机制。这种自旋积累不是源于内在自旋霍尔效应, 也不是源于自旋相关散射, 而只是源于横向边界限制势产生的有效自旋轨道耦合势, 在纵向电压驱动下, 自旋向上的电子和自旋向下的电子在边缘处感受到这种自旋轨道耦合势能刚好相反, 这导致了电子在横向边缘有完全相反的自旋取向倾向, 从而引起两个横向边缘符号相反的自旋积累。这种自旋积累的程度和纵向偏压成正比, 并且如果纵向偏压反向, 自旋积累也改变符号。除了在自旋弛豫长度上有较大出入, 这和测量自旋霍尔效应的实验[2]测到的非常符合。自旋弛豫长度的这种差别源于实验中的自旋扩散行为。我们提出的这种自旋积累机制简单易行, 在实验上很容易实现。通过考察两种不同的体系, 发现这种自旋积累几乎不受体系横向尺寸的限制, 并且几乎不受杂质散射和退相干的影响, 这对实验非常有利。

参考文献

- [1] 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).
- [2] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Observation of spin Hall effect*, Science **306**, 1910-1913 (2004); 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).
- [3] 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).
- [4] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, *Possibility of Orienting Electron Spins with Current*, JETP Lett. **13**, 467-469 (1971); M. I. Dyakonov and V. I. Perel, *Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors*, Phys. Lett. A, **35**, 459-460 (1971).
- [5] J. E. Hirsch, *Spin Hall Effect*, Phys. Rev. Lett. **83**, 1834-1837 (1999).
- [6] 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).
- [7] 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).
- [8] 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); 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); A. Reynoso, Gonzalo Usaj, and C. A. Balseiro, *Spin Hall effect in clean two dimensional electron gases with Rashba spin-orbit coupling*, cond-mat/0511750.
- [9] J. I. 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).
- [10] J.-P. Hu, B. A. Bernevig, and C.-J. Wu, *Spin current in spin-orbit coupling systems*, Int. J. Mod. Phys. B. **17**, 5991-6000 (2003); 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); 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 (2005); 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); 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); B. K. Nikolić, S. Souma, L. P. Zârbo, and J. Sinova, *Nonequilibrium spin Hall accumulation in ballistic nanostructures*, Phys. Rev. Lett., **95**, 046601-046604 (2005); R. Raimondi and P. Schwab, *Spin-Hall effect in a disordered two-dimensional electron system*, Phys. Rev. B **71**, 033311-033314 (2005); J. Wang, K. S. Chan, and D. Y. Xing, *Intrinsic oscillation of spin accumulation induced by Rashba spin-orbital interaction*, Phys. Rev. B **73**, 033316-033319 (2006).
- [11] 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); 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).
- [12] Chapter 2 and 3, in *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, edited by S. Datta (Cambridge University Press 1995).
- [13] J.D. Bjorken and S.D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics*, (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [14] 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).

- [15] Y.S. Gui, C.R. Becker, N. Dai, J. Liu, Z.J. Qiu, E.G. Novik, H. 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).

第七章 自旋流测量的电学方法

摘要: 本章提出两个分别基于双量子点模型和量子点接触模型进行电学测量自旋流的方法。双量子点模型: 考虑双量子点内和点间的库仑势 U_{in} 和 U_{ex} 的作用, 双量子点结构的库仑势和量子点内能级连续可调, 只要量子点能级和库仑势选取适当, 在自旋偏压(或者自旋流)作用下, 双量子点内实现有选择的自旋极化, 同时通过双量子点结构的电流也达到极大值。此电流峰值直接反映自旋流的大小, 在开路系统中测量此峰值电流产生的电压值, 效果更好。量子点接触模型: 固定费米能或固定限制区能级, 量子点接触结构产生非对称的随费米能或者随限制区能级(用门电压调节)分布的量子化电导(透射系数)台阶。在自旋相关偏压作用下, 由于自旋上和自旋下的不对称, 量子点接触体系产生完全不同于偏电压作用下的具有明显极值峰的特征电流, 开路系统中测电压, 特征更加明显。通过以上两种方法测量电流或电压, 都可以直接标度自旋流(压)。

§7.1 引言

本章以前, 论文涉及的都是有关自旋霍尔效应以及特殊的自旋积累的理论研究。事实上, 为了造出用自旋代替电荷做为输运载流子的电子器件, 人们已经想出了各种理论方法[1, 2]来产生自旋积累或自旋流[3], 当然这其中也包括利用自旋霍尔效应的方法。在实验上, 用泵浦原理[4], 光学注入[5, 6], 磁注入[7, 8], 或者用自旋霍尔效应[9-11]产生自旋极化流, 甚至纯的(无伴随电流)自旋流。但是如何有效测量这些自旋流一直是实验上的难题。目前, 大家公认的自旋测量是基于光发射二极管[9]和Kerr旋转分光镜[10]的自旋测量。此外, 也有其它的一些测量手段[12-14], 比如, 通过测量自旋流流过磁性-非磁性介质结面时产生的自旋扭矩[12], 或者通过测量自旋流在自旋轨道作用下产生的电场[13]实现自旋流探测。所有这些自旋探测的装置无不复杂精妙, 测量条件无不苛刻繁琐, 它们要用到光学手段, 磁性材料, 自旋轨道耦合, 等等复杂条件, 因此这些方法虽然可行, 但是还不够简单方便。到目前为止, 自旋测量仍然是自旋应用的一个瓶颈, 有待彻底解决。

这一章, 我们通过设计特殊的量子微测量结构, 完全用电学手段, 实现自旋流探测。这种测量方法简单易行, 不需要借助光学手段, 磁性材料, 甚至不需要考虑自旋轨道耦合, 原理简单, 操作方便, 测量信号明显, 测量结果可靠, 是自旋流测量的首选。我们在两种量子结构中实现自旋流的电学探测, 一个是双量子点结构, 一个是量子点接触体系, 下面分别介绍。

§7.2 双量子点体系

在过去二十年里，双量子点结构的输运现象已经被广为研究[15, 16]。双量子点又叫人造分子，可做量子比特门[17]，可用来探测自旋翻转率和各种隧穿率[16, 18]，等等。这一节，我们用双量子点结构来实现自旋流的电学探测。

§7.2.1 测量原理

首先了解测量原理。在我们的测量装置中，双量子点外接两根导线，自旋流或者自旋压通过这两根导线流过双量子点结构，我们的目的就是测量流过此体系的自旋流或者测量加在两根导线上的自旋偏压。在自旋偏压[2]作用下，左右导线中不同自旋的电子感受到的化学势也不同，有 $\mu_{L\uparrow} = -\mu_{L\downarrow} = -\mu_{R\uparrow} = \mu_{R\downarrow} = V$ （图7-1）。在这儿我们考虑了纯的自旋偏压，这样的自旋压不产生偏电压，这只是为了分析问题方便，事实上，我们也可以采用没有完全极化的非纯自旋偏压。为便于阐明测量原理，我们特设（这种特殊设置在实际测量中没必要）左量子点能级 $\epsilon_L = 0$ ，右量子点能级 ϵ_R 设在 $-U_{in}$ 处，其中 U_{in} 是量子点内电子电子相互作用的库仑势，左右导线费米能设为零。这样，对于左量子点，有 $\mu_{L\uparrow} > \epsilon_L > \mu_{L\downarrow}$ ，这导致左量子点中只有自旋向上的电子占据态；而对于右量子点，有 $\mu_{R\downarrow} > \epsilon_R + U > \mu_{R\uparrow} > \epsilon_R$ ，这导致右量子点能级 ϵ_L 被自旋向下电子占据，由于库仑作用，自旋向上的电子被排斥到更高的能级 $\epsilon_R + U$ 并且处于空占据态。因此，自旋向上的电子可以顺利隧穿通过双量子点系统（图7-1a），由于泡利不相容原理（右量子点自旋向下态已经被占据）自旋向下的电子则很难通过（图7-1b）。这样，体系就会出现可以用电学的方法探测的极大电流，并且，自旋流越大，此电流也越大。

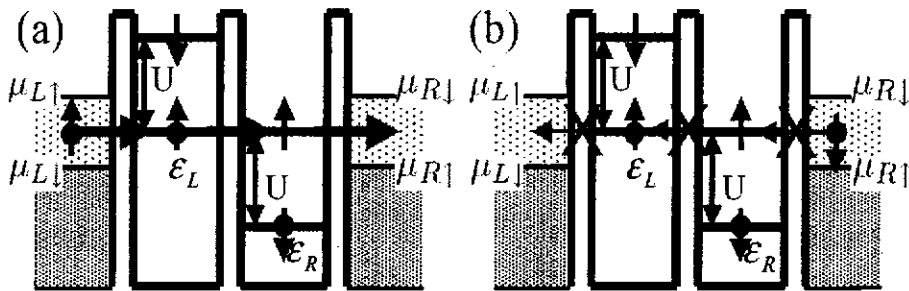


图 7-1 图(a)和图(b)分别表示双量子点系统内自旋向上和向下的电子的隧穿示意图。

§7.2.2 体系介绍及公式推导

接下来, 详细介绍体系, 并利用非平衡格林函数方法推导体系的自旋极化及隧穿电流公式。双量子点测量体系(包括左右导线)哈密顿描述如下:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\alpha, k, \sigma} \epsilon_{\alpha k} a_{\alpha k \sigma}^{\dagger} a_{\alpha k \sigma} + \sum_{\alpha, \sigma} \epsilon_{\alpha} d_{\alpha \sigma}^{\dagger} d_{\alpha \sigma} \\
 & + \sum_{\alpha} U_{in} d_{\alpha \uparrow}^{\dagger} d_{\alpha \uparrow} d_{\alpha \downarrow}^{\dagger} d_{\alpha \downarrow} + \sum_{\sigma, \sigma'} U_{ex} d_{L\sigma}^{\dagger} d_{L\sigma} d_{R\sigma'}^{\dagger} d_{R\sigma'} \\
 & + \sum_{\alpha, k, \sigma} t_{\alpha} a_{\alpha k \sigma}^{\dagger} d_{\alpha \sigma} + \sum_{\sigma} t_c d_{L\sigma}^{\dagger} d_{R\sigma} + H.c. \quad (7-1)
 \end{aligned}$$

其中 $a_{\alpha k \sigma}^{\dagger} (a_{\alpha k \sigma}) (\alpha = L, R)$ 和 $d_{\alpha \sigma}^{\dagger} (d_{\alpha \sigma})$ 分别是 α 导线和紧邻 α 导线的量子点中的电子产生(湮灭)算符。左右量子点都是单能级结构, 能级表示为 ϵ_{α} , 量子点内及量子点间分别有电子-电子相互作用势 U_{in} 和 U_{ex} 。注意, 由于量子点间的耦合 t_c 以及导线和量子点的耦合 t_{α} 都与自旋无关, 以上体系仍然满足自旋 SU(2) 对称。

从 α 导线流入 α 量子点, 自旋为 σ 的粒子流 $J_{\alpha \sigma}$ 以及第 α 量子点内 α, σ 能级的占据数 $n_{\alpha \sigma}$ 分别表示为 [19] 【利用公式(2-49), 也可得到以下公式】:

$$J_{\alpha \sigma} = -\text{Im} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \Gamma_{\alpha} [2f_{\alpha \sigma} G_{\alpha \alpha \sigma}^r(\epsilon) + G_{\alpha \alpha \sigma}^<(\epsilon)] \quad (7-2)$$

$$n_{\alpha \sigma} = \langle d_{\alpha \sigma}^{\dagger} d_{\alpha \sigma} \rangle = -i \int \frac{d\epsilon}{2\pi} G_{\alpha \alpha \sigma}^<(\epsilon) \quad (7-3)$$

其中, $\Gamma_{\alpha} = 2\pi \sum_k |t_{\alpha}|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_{\alpha k})$, $f_{\alpha \sigma}(\epsilon) = 1/\{\exp[(\epsilon - \mu_{\alpha \sigma})/k_B T] + 1\}$ 表示导线 α 中的费米分布。导线中所加偏压为自旋相关偏压(自旋压), 自旋向上的化学势 $\mu_{\alpha \uparrow}$ 和自旋向下的化学势 $\mu_{\alpha \downarrow}$ 彼此不同, 因此有方程(7-2, 7-3)中区分 σ 的量子点推迟格林函数 $G_{\alpha \alpha \sigma}^r(\epsilon)$ 和 Keldysh 格林函数 $G_{\alpha \alpha \sigma}^<(\epsilon)$, 它们是时间表象格林函数 $G_{\alpha \alpha \sigma}^{r, <}(t)$ 的傅立叶变换形式。这儿, $G_{\alpha \alpha \sigma}^r(t) \equiv -i\theta(t) \langle \{d_{\alpha \sigma}(t), d_{\alpha \sigma}^{\dagger}(0)\} \rangle$, $G_{\alpha \alpha \sigma}^<(t) \equiv i \langle d_{\alpha \sigma}^{\dagger}(0) d_{\alpha \sigma}(t) \rangle$ 。

首先求解孤立量子点 ($t_{\alpha} = t_c = 0$) 格林函数 $g_{\sigma}^r(\epsilon)$ 。考虑自旋压 V 小于 U_{in} 的情况, 由于库仑排斥势作用, 这种情况下不可能发生同时隧穿过程。求解运动方程可以得到 $g_{\sigma}^r(\epsilon)$:

$$\begin{aligned}
 g_{\alpha \alpha \sigma}^r(\epsilon) = & \frac{(1 - n_{\alpha \bar{\sigma}})(1 - \{n_{\bar{\alpha}}\})}{A} + \frac{(1 - n_{\alpha \bar{\sigma}})\{n_{\bar{\alpha}}\}}{A - U_{ex}} \\
 & + \frac{n_{\alpha \bar{\sigma}}(1 - \{n_{\bar{\alpha}}\})}{A - U_{in}} + \frac{n_{\alpha \bar{\sigma}}\{n_{\bar{\alpha}}\}}{A - U_{in} - U_{ex}} \quad (7-4)
 \end{aligned}$$

由于 $t_c = 0$, $g_{LR\sigma}^r = g_{RL\sigma}^r = 0$ 。上式中, 如果 $\alpha = L$, $\bar{\alpha} = R$; 如果 $\alpha = R$, $\bar{\alpha} = L$ 。如果 $\sigma = \uparrow$, $\bar{\sigma} = \downarrow$; 如果 $\sigma = \downarrow$, $\bar{\sigma} = \uparrow$ 。还有, $A \equiv \epsilon - \epsilon_{\alpha} - [n_{\bar{\alpha}}]U_{ex} + i0^+$, $\{n_{\bar{\alpha}}\} \equiv n_{\bar{\alpha}} - [n_{\bar{\alpha}}]$ 。 $[n_{\alpha}]$ 是小于 n_{α} 的最大整数, 其中, $n_{\alpha} = n_{\alpha \uparrow} + n_{\alpha \downarrow}$ 是量子点 α 的总占据

数。有了孤立量子点格林函数 $g_\sigma^r(\epsilon)$ ，利用Dyson方程和Keldysh方程：

$$\begin{aligned} G_\sigma^r(\epsilon) &= g_\sigma^r + g_\sigma^r \Sigma_\sigma^r G_\sigma^r \\ G_\sigma^<(\epsilon) &= G_\sigma^r \Sigma_\sigma^< G_\sigma^a \end{aligned} \quad (7-5)$$

其中，格林函数 G_σ^r 和自能 Σ_σ^r 都是 2×2 矩阵，且

$$\Sigma_\sigma^r = \begin{pmatrix} -\frac{i}{2}\Gamma_L & t_c \\ t_c & -\frac{i}{2}\Gamma_R \end{pmatrix}, \quad \Sigma_\sigma^< = \begin{pmatrix} i\Gamma_L f_{L\sigma} & 0 \\ 0 & i\Gamma_L f_{R\sigma} \end{pmatrix} \quad (7-6)$$

即可分别得到包括自能作用的总的格林函数 $G_\sigma^r(\epsilon)$ 和 $G_\sigma^<(\epsilon)$ 。最后，自洽求解方程(7-3,7-4)，得到四个占据数 $n_{\alpha\sigma}$ ($\alpha = L, R, \sigma = \uparrow, \downarrow$)。电流 $J = e(J_{L\uparrow} + J_{L\downarrow}) = -e(J_{R\uparrow} + J_{R\downarrow})$ 也随之可得。

§7.2.3 结果讨论

由于在左右导线上加了纯的自旋压，没有偏电压产生，即， $\mu_{L\uparrow} + \mu_{L\downarrow} = \mu_{R\uparrow} + \mu_{R\downarrow} = 0$ [2]，如果量子点内占据数没有自旋极化，自旋上和自旋下就完全对称，也就不会有电流 J 产生。因此，体系之所以有电流，完全是因为双量子点系统这一特殊构形导致了量子点内占据数的自旋不对称。如果换作在一个单量子点体系加纯的自旋压，就不会有体系电流。下面我们就先来研究双量子点内部自旋不对称的态密度分布以及相应的自旋极化分布。

定义自旋极化 $\Delta n_\alpha \equiv n_{\alpha\uparrow} - n_{\alpha\downarrow}$ 。图7-2a和7-2b分别表示左右量子点内的自旋极化 Δn_α 随量子点能级 ϵ_L 和 ϵ_R 的三维投影图。为了清晰表示左右量子点占据数，图7-2c作了特殊的总电子占据数 $n_L + n_R/2$ 随左右量子点能级变化的三维投影图。实验上，总占据数 $n_L + n_R/2$ 可以用电荷感应 (charge sensing) 技术来测量，例如，用在双量子点结构上耦合量子点接触，量子点接触电导对与之耦合的体系内的电荷数十分敏感，通过探测量子点接触电导，可测得双量子点内电子数，即占据数。详情请参考文献[15, 16]。图7-2a和7-2b显示，自旋极化 Δn_α 在某些特殊区域非常大（接近1）。图7-3a分析双量子点结构内部稳定状态的占据数随量子点能级 $\epsilon_{L,R}$ 的分布图。当自旋偏压 $V = 0$ ，随 $\epsilon_{L,R}$ 的稳态分布图有四个区域，分别是用红色虚线区分的(0, 1)，(1, 1)，(0, 2)和(1, 2)。(n, m)中的n和m分别代表左右量子点中的占据数。这种占据数分布图是大家公认的，并且在实验上可以清楚地观察到[15, 16]。当考虑不为零的自旋偏压 V ，上面提到的四个区域仍然存在，但是边界发生范围为 V 的平移。此外，当 $\epsilon_{L/R}$ 位于 $\pm V$ （以四个没有自旋极化的分布区域之间的红色虚线标记零点坐标轴）之间时，分布图中会出现四个存在自旋极化的占据数区域[标记为(\uparrow , 1)，(0, \downarrow)，(1, \downarrow)和(\uparrow , 2)]，其中 \uparrow / \downarrow 表示自旋极化方向，例如(\uparrow , 1)表示左量子点自旋朝上极化，右量子点不极化且占据数为1。

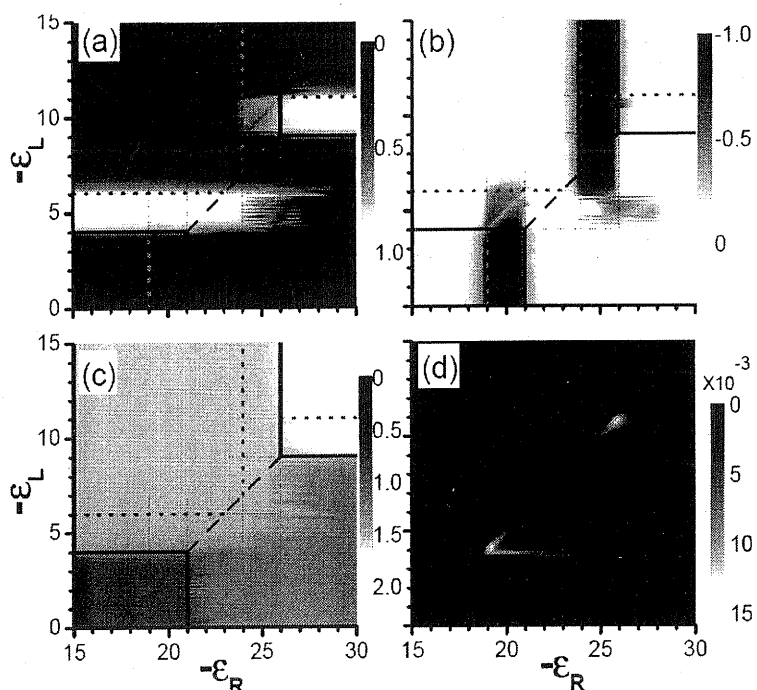


图 7-2 Δn_L (a), Δn_R (b), $n_L + n_R/2$ (c)和电流 J (d)随量子点能级 ϵ_L 和 ϵ_R 的三维分布投影图。其它参数: $\Gamma_L = \Gamma_R = 0.3$, $t_c = T = 0.1$, $U_{in} = 20$, $U_{ex} = 5$, $V = 1$ 。

分析导线中自旋相关的电势 $\mu_{\alpha\sigma}$ 和量子点能级的相对位置, 即可得到图7-3a中的占据数的定性分布图。下面我们以孤立量子点¹为例($\Gamma_L = \Gamma_R = t_c = 0$), 定性分析几个有代表性的区域。(i) (0,1)区: 当左量子点准能级 $\tilde{\epsilon}_L \equiv \epsilon_L + U_{ex}$ (考虑量子点间的库仑排斥)越过 $\mu_{L\uparrow}$ 和 $\mu_{L\downarrow}$, 右量子点能级 ϵ_R 满足 $\epsilon_R < \epsilon_L, \mu_{R\uparrow}, \mu_{R\downarrow} < \epsilon_R + U_{in}$ (图7-3b), 右量子点为没有自旋极化的单占据, 左量子点为空占据。(ii) ($\uparrow, 1$)区: 当 $\mu_{L\downarrow} < \tilde{\epsilon}_L < \mu_{L\uparrow}, \epsilon_R < \mu_{R\uparrow}, \mu_{R\downarrow} < \epsilon_R + U_{in}$ (图7-3c), 自旋向上的电子占据左量子点, 右量子点则为无自旋极化的单占据。(iii) (0, \downarrow)区: 如果 $\tilde{\epsilon}_L > \mu_{L\uparrow}, \mu_{L\downarrow}, \mu_{R\uparrow} < \epsilon_R + U_{in} < \mu_{R\downarrow}$ (图7-3d), 左量子点空占据, 因为 $\epsilon_R, \epsilon_R + U_{in} < \mu_{R\downarrow}$ 右量子点能级 ϵ_R 被自旋向下的电子占据。结果, 自旋向上的能级被排斥到高于 $\mu_{R\uparrow}$ 的 $\epsilon_R + U_{in}$ 位置。其它五个占据区以此类推可得。连接导线的情况和孤立量子点情况类似, 只是在不同占据区的边界处会有一些展宽, 宽度为态展宽函数 Γ_α 。此外, $\Gamma_L, \Gamma_R, t_c \neq 0$ 时, 自旋极化的分布区会向无自旋极化的分布区微微伸展(如图7-3a中的蓝色点线所示)。图7-3a中的定性分析结果正好符合图7-2a和图7-2b中自旋极化 Δn_α 和总占据数 $n_L + n_R/2$ 的数值计算结果。图7-3a中的八个分布区在图7-2中清晰可见。

¹事实上,

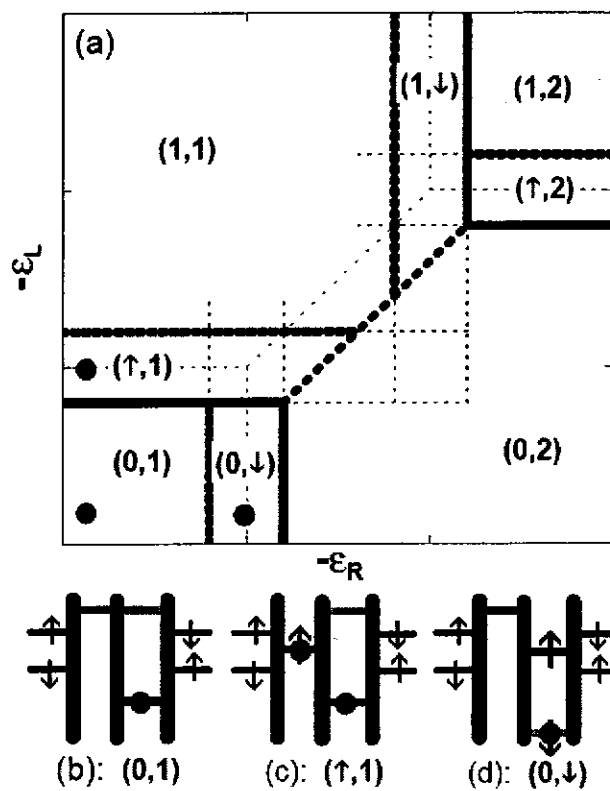


图 7-3 图(a): 自旋压 V 作用下量子点内稳恒状态的占据数随量子点能级分布示意图。红色的点线区分 $V = 0$ 时不同的占据数区域。图(b), 图(c), 图(d)分别是 $(0,1)$ 区, $(\uparrow,1)$ 区和 $(0,\downarrow)$ 区的左右量子点能级示意图。

接下来, 研究由自旋压引起的双量子点体系的隧穿电流 J , 以及在开路系统中由此隧穿电流产生的电压 V_e 。图7-2d作了此电流随左右量子点能级 $\epsilon_{L,R}$ 分布的三维投影图。可以看出, 当 $-V < \bar{\epsilon}_L = \epsilon_R + U_{in} < V$ 时, 左右量子点都处于自旋极化分布区, 此时, 在纯的自旋压 V 驱动下, 尽管没有偏电压作用, 自旋不对称的占据数分布却导致了双量子点体系的隧穿电流 J , 因此隧穿电流 J 可以被用来测量体系自旋流。电流产生原理见图7-1。下面研究隧穿电流随各种体系参数的变化关系。图7-4a显示隧穿电流 J 随自旋压 V 的变化关系, 当 $V = 0$ 时, J 严格为零。随着 V 不断增加, 隧穿电流 J 先增加, 达到极大值后开始下降, 但是并不降到零。即使 V 大到可以和量子点内的库仑作用 U_{in} 比拟, 隧穿电流 J 仍能保持在一个较大的值。由于量子点间的库仑排斥作用, 自旋压 V 较大时, 量子点内的自旋极化大大减弱, 自旋趋于对称分布, 最终导致隧穿电流在 V 较大时反而减小。如果量子点间库仑排斥 U_{ex} 为零, 隧穿电流 J 随自旋压 V 单调递增(图7-4b), 此时, 隧穿电流 J 和自旋压 V 建立一一对应关系。图7-4c是 J 随右量子点能级 ϵ_R 的变化关系。我们发现, 当 $\epsilon_R + U_{in}$ 附近几个 $\bar{\epsilon}_L$ 的范围内(即, $|\epsilon_R + U_{in} - \bar{\epsilon}_L| > 3\Gamma_\alpha$), 左右量子点的有效能级 $\epsilon_R + U_{in}$ 和 $\bar{\epsilon}_L$ 较为接近, 达到或接近共振隧穿条件, 此范围内, J 较大。超出此范围, $\epsilon_R + U_{in}$ 和 $\bar{\epsilon}_L$ 相距较远, 远远超出共振隧穿作用范围, 此时, J 迅速减小。此外, 受电子隧穿过程的影响, 自旋极化 Δn_α 在 $\epsilon_R + U_{in} = \bar{\epsilon}_L$ 时稍微有所减弱, 这导致 J 在共振隧穿点会稍微下降, 而 $J-\epsilon_R$ 曲线上也因此出现一个狭窄的谷。图7-4d作了隧穿电流 J 随体系温度 T 的变化曲线图, 发现 J 对温度 T 仅有微弱的依赖关系, 且在 $T < V$ 的大范围内, J 都能保持较大的值。

以上我们证明了双量子点系统的隧穿电流可以用来测量加在体系上的自旋压(流)。由于在实验上, 电压测量更为方便, 下面, 我们就考虑开路系统, 通过测量由隧穿电流引起的左右导线间的电压 V_e 而不是电流 J 来探测体系的自旋流。在开路系统中, 要求体系的隧穿电流为零, 这相当于原来由纯的自旋压产生的隧穿电流现在被加在左右导线间的电压 V_e 抵消了。这样, 在输入的纯的自旋压 V 和产生的偏电压 V_e 的共同作用下, 处于稳衡状态的左右导线自旋相关的化学势变为 $\mu_{L\uparrow} = V + V_e$, $\mu_{L\downarrow} = -V + V_e$, $\mu_{R\uparrow} = -V - V_e$ 和 $\mu_{R\downarrow} = V - V_e$ 。这儿的 V_e 通过方程(7-2)自洽求解 $J = 0$ 可得。图7-5a和图7-5b分别表示 V_e (细线)和 V_e/V (粗线)随自旋压 V 在 $U_{ex} = 0$ (图b) $U_{ex} \neq 0$ (图a)两种不同情况下的变化曲线。可以看出, 不管 U_{ex} 是否存在, $|V_e|$ 和 $|V_e/V|$ 都随自旋压 V 单调递增, 这和隧穿电流先增加再减小(当 $U_{ex} \neq 0$ 时, 看图7-4a)的性质大不一样。这说明和测量电流的方法相比, 测量电压 V_e 更可靠。图7-5c描述 V_e 随 ϵ_R 的变化, 我们发

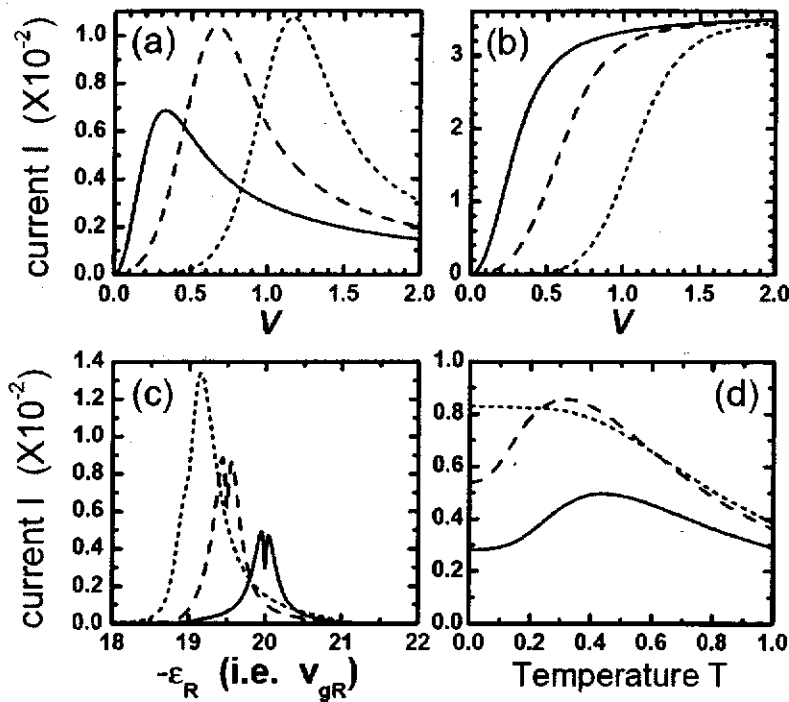


图 7-4 图(a)和图(b)分别是隧穿电流 J 随自旋压 V 在 $U_{ex} = 5$ (a)和 $U_{ex} = 0$ (b)两种不同情况下的变化曲线。图(c)和图(d): 隧穿电流 J 随右量子点能级 ϵ_R (c)和温度 T (d)的变化曲线。其中实线, 短划线和点线分别对应不同的展宽函数 $\tilde{\epsilon}_L = 0$ 和 $\epsilon_R = -20$, $\tilde{\epsilon}_L = 0.5$ 和 $\epsilon_R = -19.5$, 以及 $\tilde{\epsilon}_L = 1$ 和 $\epsilon_R = -19$ 。其它参数同图7-2。

现在很大范围内, 甚至 $\epsilon_R + U_{in}$ 已经远离 $\tilde{\epsilon}_L$, $|V_e|$ 都保持较大值 ($|V_e/V| > 0.1$)。与此相反, 此区域的隧穿电流却值很小 (看图7-4c)。这是因为当 $\epsilon_R + U_{in}$ 远离 $\tilde{\epsilon}_L$ 时, 隧穿几率很小, 导电性下降, 导致体系尽管电流变小, 但是为抵消此电流所需要的电压 $|V_e|$ 却不会减小。因此, 在开路测量系统中, 共振条件 $\epsilon_R + U_{in} = \tilde{\epsilon}_L$ 并非必需。图7-5d描述 V_e 随温度 T 的变化。和图7-4d中电流对温度的关系类似, V_e 对温度 T 也仅有微弱的依赖关系。随后再强调一点, $|V_e/V|$ 在任何外参数包括 V , ϵ_L , ϵ_R 和 T 下, 都大于0.1。假如自旋压在 nV 的量级, 那么相应的诱导电压 V_e 就在 $0.1nV$ 的量级, 以现在的实验条件, 对 $0.1nV$ 的电压测量已经是轻而易举的事情[20], 所以, 我们的方法对极化超过 $1nV$ 的自旋流绝对适用。

§7.2.4 小结

本小节研究了用双量子点系统实现纯自旋流电学测量的方法。在纯的自旋压作用下, 双量子点结构的自旋极化随左右量子点能级的分布图中, 除了有四个自旋不极化的占据数分布区, 还有四个存在自旋极化的占据数分布区。当两个量

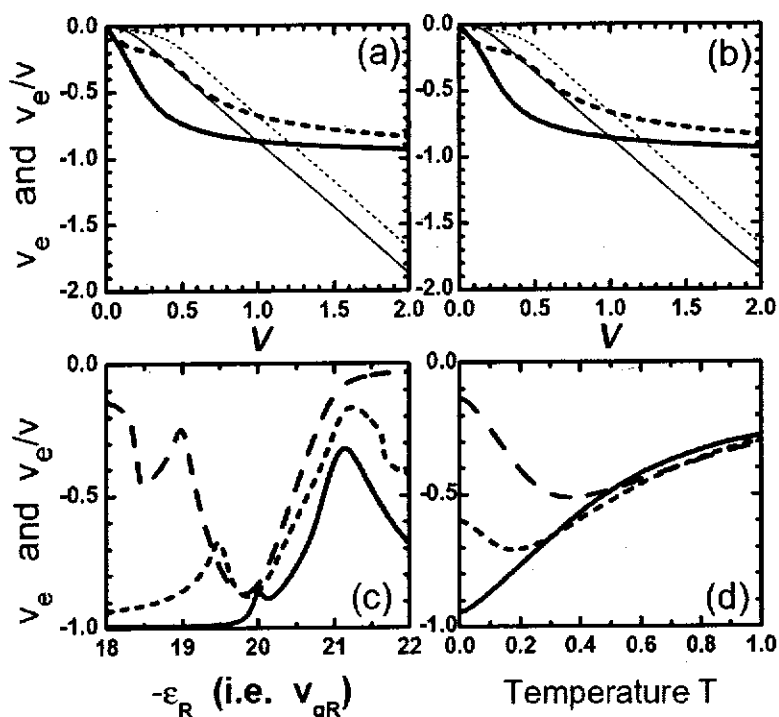


图 7-5 图(a)和图(b)分别是感应电压 V_e 随自旋压 V 在 $U_{cx} = 5$ (a)和 $U_{cx} = 0$ (b)两种不同情况下的变化曲线。图(c)和图(d): 感应电压 V_e 随右量子点能级 ϵ_R (c)和温度 T (d)的变化曲线。其中实线, 短划线和点线分别对应不同的展宽函数 $\tilde{\epsilon}_L = 0$ 和 $\epsilon_R = -20$, $\tilde{\epsilon}_L = 0.5$ 和 $\epsilon_R = -19.5$, 以及 $\tilde{\epsilon}_L = 1$ 和 $\epsilon_R = -19$ 。其它参数同图7-2。

子点的占据都存在自旋极化时, 体系出现大的隧穿电流, 此电流可以用来标记体系的自旋流(压)。在开路系统中, 测量由隧穿电流产生的电压, 也可以实现自旋流测量。并且电压的信号优于电流信号。此外, 电压信号在各种参数下都能保持较大值, 这使得这种完全采用电学手段的自旋流测量方法在实验室切实可行。

§7.3 量子点接触体系

尽管利用双量子点结构可以完全用简单的电学方法就可以实现自旋流测量, 结果可靠, 操作也比较方便, 但是, 由于制作双量子点结构本身就有一定难度, 因此上面的方法还不够简便, 实现起来仍有一定难度。下面我们将介绍一种更为简便的完全用电学手段测量自旋流的方法: 基于量子点接触结构的自旋流测量方法。量子点接触是介观实验中最常见的一种装置, 制作简单, 操控方便, 用它来代替双量子点接触, 将使得自旋流测量更加方便。