

摘要

我们运用非平衡 Green 函数方法建立了一套多体动力学 Bloch 方程来描述在 Voigt 配置的磁场作用下的 n 型 GaAs (100) 量子阱中的电子自旋进动以及由于 D'yakonv-Perel' (DP) 效应 [Zh. Eksp. Teor. Fiz. **60**, 1954(1971)[Sov. Phys.-JETP **38**, 1053(1971)]] 引起的自旋去相位 (dephasing)。在我们的理论中包含了所有的自旋守恒散射, 比如电-声子散射, 电子-非磁性杂质散射以及电子-电子 Coulomb 散射。通过用数值方法自治地求解这套 Bloch 方程的方程, 我们研究了在不同初始自旋极化、杂质浓度、温度、磁场以及不同电子密度下的自旋去相位。从我们的理论计算得到的自旋去相位不仅包括了最早由 D'yakonov 和 Perel' 提出的因为有效的自旋翻转散射导致的自旋去相位, 还包括了最近 Wu 提出的由于 DP 效应带来的非均匀扩展导致的多体自旋去相位 [Wu, J. Supercond.:Incorp. Novel Mechanism **14**, 245 (2001); Wu and Ning, Eur. Phys. J. B **18**, 373 (2000)]。我们的结果表明, 在我们研究的电子密度范围内, 由于多体效应导致的自旋去相位占主导地位。此外, 因为我们包括了所有的自旋守恒散射, 特别是电子-电子 Coulomb 散射, 我们可以研究很大的 (可以高达 100%) 初始自旋极化下的自旋去相位, 而在大自旋极化下的自旋去相位以前从来没有人研究过。我们得到的结果表明, 在自旋去相位时间和初始自旋极化的曲线上有一个很大的反常峰。同时, 在低自旋极化情况下, 我们得到的结果和实验上的结果定性和定量地符合都很好。

我们还把 Bloch 方程推广到空间不均匀的系统中以研究自旋在 n 型 GaAs (100) 量子阱中的自旋输运。我们重新检查了近独立电子模型成立的条件, 并指出这个模型不足以研究自旋输运, 而需要我们提出的多体理论。我们还进一步指出了一种新的自旋退相干机制, 这种机制是由于不同波矢的电子 / 自旋之间在扩散方向上的干涉导致的, 在我们的文中这种机制也被称为“非均匀扩展效应”。我们指出非均匀扩展即使在没有任何散射时也可以导致自旋退相干, 并且这种退相干效应导致的自旋极化的衰减比起由于 DP 效应和散射一起作用导致的自旋去相位引起的自旋极化的衰减要重要得多。我们进一步研究了 n 型 GaAs 量子阱在不同温度, 不同杂质浓度, 不同驱动电场和不同

的偏置电场，以及按照 Voigt 配置的不同磁场下的自旋输运/扩散。同时我们还利用我们的多体理论研究了自旋包随时间和空间的演化。在我们的理论自洽的包括了非均匀扩展效应，由于空间不均匀导致的自旋扩散以及自旋去相位机制这些因素。我们得到的结果有很多和原来的单电子模型得到的结果有很大的不同，是原来简单理论所不能得到的。

Abstract

We perform a many-body study of the spin dephasing due to the D'yakonov-Perel' effect in n -typed GaAs (100) quantum wells under magnetic fields in the Voigt configuration by constructing and numerically solving the kinetic Bloch equations. We include all the spin conserving scattering such as electron-phonon, the electron-nonmagnetic impurity as well as the electron-electron Coulomb scattering in our theory and investigate how the spin dephasing time is affected by the initial spin polarization, temperature, impurity, magnetic field as well as the electron density. The dephasing obtained from our theory contains not only that due to the effective spin-flip scattering first proposed by D'yakonov and Perel' [Zh. Eksp. Teor. Fiz. **60**, 1954(1971)[Sov. Phys.-JETP **38**, 1053(1971)]], but also the recently proposed many-body dephasing due to the inhomogeneous broadening provided by the DP term [Wu, J. Supercond.:Incorp. Novel Mechanism **14**, 245 (2001); Wu and Ning, Eur. Phys. J. B **18**, 373 (2000)]. We show that for the electron densities we study, the SDT is dominated by the many-body effect. Equally remarkable is that we are now able to investigate the spin dephasing with extra large spin polarization (up to 100 %) which has not been discussed both theoretically and experimentally. We find a huge anomalous resonance of the spin dephasing time for large spin polarizations. The spin dephasing time we get at low initial spin polarization is in agreement with the experiment data both qualitatively and quantitatively.

We then extend our many-body kinetic Bloch equations to the systems with spacial inhomogeneity. We reexamine the widely adopted quasi-independent electron model and show the inadequacy of this model in studying the spin transport. We further point out a new decoherence effect based on interference effect of electrons/spins with different momentum k along the direction of the diffusion, which is referred as "inhomogeneous broadening effect" in our paper. We show that this inhomogeneous broadening can cause

spin decoherence alone even in the absence of the scattering and that the resulting decoherence can be more important than the dephasing effect due to the D'yakonov-Perel' term together with the scattering. Our theory takes all the inhomogeneous broadening effect, the spin diffusion due to the spacial inhomogeneity and the spin dephasing into account and gets the results self-consistently. We further study the spin diffusion/transport of an n -typed GaAs quantum well in the steady state under different conditions, such as at different temperatures; in the presence of impurities; in the presence of external electric fields along the diffusion direction and/or the QW growth direction; and with magnetic fields in the Voigt configuration. We also demonstrate a time evolution of a spin package calculated from our many-body theory. Different features predicted from our many-body theory are highlighted in the paper.

致谢

本论文的完成首先要归功于吴杭生教授和吴明卫教授的精心指导，很难想象如果没有他们在学习和研究上对我的帮助、培养和鼓励，这篇论文会如此顺利的完成。两位吴老师的严谨求实的治学态度，追求物理本质和清晰的物理图像的研究方法，鼓励创新的精神以及刻苦钻研的工作作风对我的教益是我这几年来最大的收获之一，也将使我终生受益。同时还需要感谢吴杭生老师和他的夫人陈宝珠老师、吴明卫老师和他的夫人孙炜老师这几年来对我生活上的关心和爱护。吴杭生老师在病中仍然记挂着我的论文的进展让人倍受感动，希望他能早日康复。除了在学术上的教导之外，吴明卫老师对我生活上的一些亦师亦友式的劝戒也令我受益匪浅。

我的论文也从吴明卫教授和本实验室中全体成员共同造就的良好学术氛围中得到帮助，特别要感谢程晋罗同学搭建的计算机 Cluster，使我的计算能够顺利的完成。

最后我要特别感谢我父母多年的养育之恩，他们含辛茹苦的辛勤劳动为我提供的机会以及他们在我遭受挫折时对我的支持和鼓励，没有他们忘我的付出，就不会有这篇论文的产生。也感谢我的朋友刘汝为在生活上对我的照顾，在精神感情上的关心和爱，以及在本论文完成过程中为我提供的各种帮助。

插图

2.1	III—V 族半导体能带结构	5
2.2	光学跃迁选择定则	18
2.3	时间分辨 Faraday 旋转角装置图	21
2.4	磁性半导体中 Faraday 旋转角随时间的变化	22
2.5	n 型体 GaAs 中 Faraday 旋转角随时间的变化	23
2.6	自旋阀结构	28
2.7	带边发光偏振度测量自旋极化的装置图	29
2.8	输运时 Faraday 旋转角随位置的变化	29
2.9	Datta-Das 晶体管	30
2.10	Johnson 晶体管	32
2.11	Monisma 晶体管	34
3.1	四自旋子带模型	38
3.2	电子、空穴密度以及光学、自旋相干随时间的变化	44
3.3	驰豫时间近似下以及自洽求解的自旋相干随时间变化的比较	45
3.4	Landé 因子 g 依赖于能量时造成的自旋去相位情况下的电子、空穴密度以及光学、自旋相干随时间的变化	46
3.5	不同磁场不同杂质浓度下电子密度和自旋相干随时间的演化	47
3.6	杂质浓度为 $0.01 N_e$, $N_e = 10^{23} \text{ m}^{-3}$ 的 GaAs 体材料中自旋去相位时间和磁场的关系	50
3.7	杂质为零, $N_e = 10^{23} \text{ m}^{-3}$ 的 GaAs 体材料中自旋去相位时间和磁场的关系	51
3.8	杂质浓度为 $0.01 N_e$, $N_e = 10^{22} \text{ m}^{-3}$ 的 GaAs 体材料中自旋去相位时间和磁场的关系	52
3.9	多体理论和单体理论得到的自旋去相位时间的比较	53

3.10 (110)量子阱中电子密度和自旋相干随时间的演化	53
4.1 (100) GaAs 量子阱中不考虑 Coulomb 散射时电子密度和自旋相干随时间的演化	63
4.2 (100) GaAs 量子阱中考虑 Coulomb 作用时电子密度和自旋相干随时间的演化	65
4.3(a)杂质浓度为零时, 不同温度下自旋去相位时间和初始自旋极化的关系	67
4.3(b)杂质为 $0.1 N_c$ 时, 不同温度下自旋去相位时间和初始极化的关系	68
4.4(a)温度为 120 K 时不同杂质浓度下自旋去相位时间和初始极化的关系	69
4.4(b)温度为 200 K 时不同杂质浓度下自旋去相位时间和初始自旋极化的关系	70
4.5(a)低初始自旋极化下自旋去相位时间和温度的关系	72
4.5(b)初始自旋极化为 75 % 时自旋去相位时间和温度的关系	73
4.6 不同初始自旋极化、杂质浓度下自旋去相位时间和外磁场的关系	76
4.7 GaAs 量子阱中不同外磁场下自旋去相位时间和初始极化的关系	77
4.8 不同初始自旋极化下的自旋去相位时间和总电子密度的关系	79
5.1 简化模型下电子密度和自旋相干随位置的变化	90
5.2 自旋向上和自旋向下子带上的电子密度和自旋相干的非相干和随距离的变化	92
5.3 不同磁场下的电子密度和自旋相干随距离的变化	95
5.4 不同杂质浓度下的电子密度和自旋相干随距离的变化	96
5.5 不同温度下的电子密度和自旋相干随距离的变化	98
5.6 不同外电场下的电子密度和自旋相干的变化	100
5.7 不同杂质浓度、不同外电场作用下的电子密度和自旋相干随距离的变化	101
5.8 不同偏置电压下的电子密度和自旋相干随距离的变化	103
5.9(a)不同自旋的电子密度差随距离和时间的变化	106
5.9(b)自旋相干随距离和时间的变化	107
5.9(c)单体理论预言的不同自旋电子密度之差随距离和时间的变化	108
5.9(d)不同时刻下不同自旋的电子密度之差和位置的关系	109

第一章

引言

从上个世纪六十年代半导体晶体管发明之后，使用电子来进行逻辑操作的微处理器上器件集成度按照 Moore 律每 18 个月增加一倍的速度增加[1, 2, 3]，这种增长还将以此速度持续数年。但是随着器件尺寸的日渐缩小，量子效应开始变得重要起来，传统的电子学将遇上不少问题，比如由于隧穿效应，电子将透过绝缘体产生电流泄漏；晶体管器件的开关过程带来的大量热耗散等，人们普遍认为以传统的电子学为基础的硅工业技术慢慢的开始接近其极限 [1, 2, 3, 4]。寻找传统电子学的替代品已经成为许多公司、大学以及研究机构的课题，到目前为止已经提出了大量的方案，比如分子电子学、生物电子学、高分子电子学、自旋电子学等 [2]。在这些方案中，利用电子的自旋取代电荷（或者与电荷相结合）为信息载体的自旋电子学器件由于具有快速，低能耗等优越的性能而倍受关注[1, 2, 5, 6, 3, 7, 4]。

自旋电子学（Spintronics, Spin electronics 或者 Spin-based electronics）指的是研究固体中电子自旋（在更广泛的意义上也包括原子核的自旋）及在器件设计中使用自旋属性来取代电荷自由度（或与之相结合）的学科[6, 2, 7, 3]。在传统的电子学中，信息处理完全依赖于电子的电荷自由度，电子的自旋自由度并没有起多少作用。相反的，在信息存储方面，电子的磁性（即自旋）从一开始就扮演了重要的角色，例如最早硬盘驱动器就是利用磁阻效应来实现的。自从1988年发现巨磁阻（GMR）效应[8, 9, 10, 11, 12, 13]之后，只过了不到6年就实现了产业化[10]，自此之后硬盘上单位面积的数据存储量就迅速增长，达到了前所未有的水平[14]。利用隧道磁电阻（TMR）[15, 16]这一更先进的自旋电子学技术还可以制造出更新的信息存储器——磁随机存储器，这种存储器具有数据断电不丢失、可以与传统的随机存储器相媲美的开关速度和读写能力等优良的性质。这一技术也发展到了相当成熟的阶段，预计在近几年内就能投放市场[7, 10, 17, 6, 12, 13]。这些与信息存储有关的自旋电子学器件其关键

第一章 引言

元件是用铁磁合金制造而成，这是三大类自旋电子学器件中的第一类，又称为磁电子学 (Magnetoelectronics)，也是目前发展最为成熟的一类[7]。

第二类自旋电子学器件研究的目标更彻底一些，它希望能找到一种全新的方法在半导体中产生和利用自旋极化电流，包括研究在半导体中输运，寻找使用半导体来实现自旋起偏器和自旋阀的办法。这种器件一旦能够实用化，将可以使现有的微电子制造技术得到充分应用；同时可以利用半导体材料的优良的光学性能，既可以放大电信号也能放大光信号，最终可望实现把逻辑、存储、通信等功能集中在一块芯片上新型多功能器件[7, 3, 2, 5, 6, 12, 13]。

第三类自旋电子学器件研究则试图利用单个电子的自旋量子状态来实现量子计算，可能的器件包括包括利用电子的自旋实现量子位、通过操纵单个电子的自旋状态来实现量子逻辑门等。这一类自旋电子学的实现将是比第二类自旋电子学器件的实现更加遥远的未来的事情[7, 3, 2, 5, 6, 12, 13, 18, 19, 20, 21]。

为了实现第二、三类自旋电子学器件还有很多问题需要研究，主要问题包括：

1. 自旋退相干机制以及如何提高退相干时间。由于自旋电子学器件利用的是电子的自旋极化，所以对自旋极化的退相干的理解以及研究如何最大程度的提高自旋退相干时间是自旋电子学器件设计的前提。
2. 自旋在半导体中的输运特性的研究。包括如何有效地把自旋极化电流注入到半导体中（或者如何在半导体中产生大自旋极化的电流）；如何有效的探测半导体中的自旋极化信号；载流子的自旋极化信息在半导体中能维持多远；自旋极化电流在经过不同半导体界面时会发生什么情况；在强电场下自旋极化电流有什么特性等等。
3. 如何设计可行的自旋晶体管以及如何操纵单个电子自旋实现量子逻辑门，并研究这些器件的特性等。

针对这些问题，本论文先回顾对自旋电子学的基本概念，及其研究的历史和现状；接着在第四章中研究 n 型半导体中的自旋去相位 (dephasing) 问题，试图回答半导体中自旋信号能保持多久这个问题，解决这个问题是自旋电子学器件设计的前提；然后针对自旋信号在半导体中的传递，在第五章中研究自旋极化在半导体中的输运。

第二章

自旋电子学的基本概念

人类对自旋电子学的研究可以追溯到上个世纪三十年代中期，在电子自旋概念提出后不久 Mott 就指出由于自旋向上和自旋向下两种载流子之间的不对称性，以及自旋翻转时间远大于载流子碰撞时间是导致铁磁体中的电阻反常行为的主要原因[22, 23, 24, 25]。对半导体中的自旋弛豫的研究大体上开始于上个世纪五十年代，Elliot 和 Yafet 首先研究了载流子因为自旋—轨道耦合而产生的与动量弛豫有关的自旋弛豫[26, 27, 28]，他们得到的这种自旋弛豫机制后来被称为 Elliot-Yafet (EY) 机制。随着研究的深入，到了七十年代中期，半导体中的三种主要的自旋去相位机制都已在理论上被讨论了[29, 26, 27, 30]。尽管第一个观测到半导体中载流子的自旋弛豫的实验手段是利用电子和原子核的精细作用通过核磁共振来间接的测量载流子自旋弛豫[31]，早期观测自旋弛豫的手段主要是通过光学取向 (Optical Orientation) 的办法来进行的[32, 33, 34]。早在七十年代初就有报导在比较低的温度下 III-V 族半导体体材料中的自旋弛豫时间能够达到几个纳秒[35, 36]，不过由于条件不成熟，这些结果并没有受到相应的重视。到了九十年代中后期，Kikkawa 和 Awschalom 用时间分辨 Faraday 旋转 (Time-Resolved Faraday Rotation, TRFR) 方法测量了半导体中的自旋积聚随时间的演化，他们发现在很广的温度和磁场范围内 n 型半导体体材料中的自旋弛豫时间可以超过 100 纳秒，在量子阱自旋弛豫时间最长的也可以达到几个纳秒[37, 38, 39]，此外他们还观测到自旋极化信号可以穿过不同半导体的界面而且在距离初始自旋极化中心将近 100 μm 远处还可以探测到自旋极化信号。这个结果大大坚定了人们对自旋电子学的信心，广泛地激发起研究自旋电子学的兴趣。在自旋电子学的器件设计方面，Datta 和 Das 于 1990 年提出了第一个自旋电子学器件的设计方案[40]，随后不同的研究者又提出了多种不同的自旋电子学器件的设计方案[41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50]。但是由于没有解决自旋电注入效率比较低的问题，而且半导体中的有关自旋 dephasing、自旋运输的许多问题

还有待于研究，迄今为止这些器件尚未完全实现。

为了更好的了解半导体中和自旋去相位、自旋输运有关的问题，我们先简要地对半导体中和自旋有关的知识做一个综述。目前半导体自旋电子学的研究对象主要是III-V族半导体，因此我们的内容将只限于这类材料上。

2.1 自旋的性质和自旋dephasing概念

自旋是电子的一种内在属性，在外加磁场B作用下，自由电子自旋的Hamiltonian为

$$H = g\mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{s}, \quad (2.1)$$

其中 g 为 Landé 因子， $\mathbf{s} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ 是自旋算符， μ_B 为 Bohr 磁子，而 $\boldsymbol{\sigma}$ 是 Pauli 矩阵。当外加磁场沿 z 方向时，能量的本征态就是自旋的 z 分量 s_z 的本征态，记为 $|\frac{1}{2}\rangle$ （自旋向上态）和 $|\frac{-1}{2}\rangle$ （自旋向下态），本征值分别为 $\frac{1}{2}$ 和 $-\frac{1}{2}$ ，相应的本征能量为 $\frac{1}{2}g\mu_B B$ 和 $-\frac{1}{2}g\mu_B B$ 。由于自旋取向不同的电子能量不同，当（近）自由电子气系统达到平衡时，自旋向上和自旋向下的电子数目 N_\uparrow 和 N_\downarrow 不同，系统磁矩 $M_0 = \sum_i \mathbf{s}_i = \frac{1}{2}(N_\uparrow - N_\downarrow)\mu_B$ （ i 是所有电子的指标）不为零。

如果自由电子气系统的初始磁矩不平行于平衡磁矩 M_0 ，在不考虑其它作用时总磁矩 M 将按照如下方程绕磁场进动，

$$\frac{dM}{dt} = g\mu_B M \times B. \quad (2.2)$$

容易看出，这种进动的频率为 $g\mu_B B$ ，磁矩的大小以及其于磁场的夹角保持不变。但是在实际系统中，由于各种耗散机制，磁矩的进动会不断衰减，平行于磁场方向的分量将趋于平衡值 M_0 ；而垂直于磁场方向上的分量将衰减到零。由于磁矩的纵向分量（平行于磁场方向）是和系统能量相关的，它趋于平衡的时候必然需要和外界发生能量交换，因此磁矩的纵向分量的驰豫反应了能量的驰豫，表征这一驰豫过程的驰豫时间为 T_1 ；而磁矩的横向分量（垂直于磁场方向）是对应于自旋的两种本征态之间的相位相关，它的衰减反应了两种自旋本征态之间的相位相干的损失过程，它的驰豫时间为 T_2 。 T_1 和 T_2 分别称为纵向和横向驰豫时间，在通常情况下，这两者并不相同，一般来说 T_1 要长于 T_2 [51, 52]。

在半导体材料中，自旋驰豫的机制和材料的能级结构以及载流子与杂质、晶格以及载流子之间的相互作用有很大的关系，下面我们简单的阐述 III-V 族半导体的能带结构以及造成自旋驰豫的机制。

2.2 III-V 族半导体的能带结构

III-V 族半导体的能带结构已经被很好的研究过了[53]。这种材料中的能带结构如图 2.1(a) 所示，其价带顶和导带底都是位于 Brillouin 区的中心 (Γ 点) 上。在不考虑自旋的时候，III-V 族半导体的导带电子是非简并的，其波函数为 S 型，表象为 Γ_1 。在考虑了自旋作用之后，导带分裂为两个表象为 Γ_7 的子带，总角动量 $s = \frac{1}{2}$ 在 z 轴上的投影是量子化的 $s_z = \pm\frac{1}{2}$ ，相应的波函数为 $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ 和 $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ 。在没有考虑自旋轨道耦合时表象为 Γ_{15} 的价带空穴为三重简并的，波函数为 P 型，分别为 X, Y, Z 。考虑自旋-轨道耦合之后， Γ_{15} 子带分裂成两个 Γ_8 子带和一个 Γ_6 子带。其中两个 Γ_8 子带的总角动量 $J = \frac{3}{2}$ ，根据其总角动量在 z 方向上的分量不同而分为重空穴带 ($J_z = \pm\frac{3}{2}$) 和轻空穴带 ($J_z = \pm\frac{1}{2}$)； Γ_6 子带通常被称为自旋分裂价带，其总角动量 $J = \frac{1}{2}$ ， z 轴上的分量为 $\pm\frac{1}{2}$ 。分裂之后的能级结构如图 2.1(b) 所示。

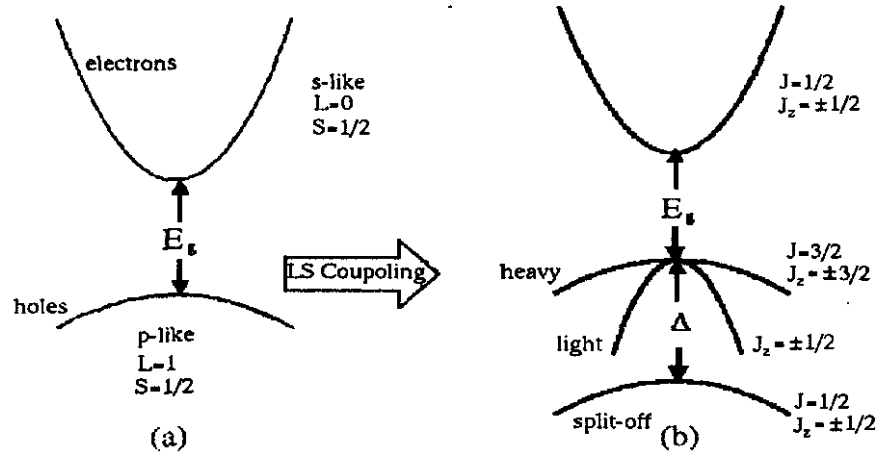


图 2.1: III-V 族半导体能带结构

对于 III-V 族半导体，导带 Γ_7 和价带 Γ_8, Γ_6 上在 $k = 0$ 附近的能谱可以统一采用两能带模型[54, 55]来处理。这些带上的能谱可以用如表 2.1 所示的 8×8 矩阵来描述[56, 34]。在此 Hamiltonian 中包括了晶胞里不同元素的相对位移 u 和由形变张量 ϵ 描述的单轴形变引起的能量改变。这里 m_0 是自由电子质量； m^* 是导带电子有效质量； m'_e 是除了 Γ_{15} 子带之外的所有其它子带对导带电子有效质量 m^* 的贡献；常数 A', B', D' 来源于除了 Γ_1 子带之外的所有子带的贡献； m_{cv} 是与导带和其它子带之间的相互作用有关，它决定了一个 k 三次方的带间作用，在数值上接近于自由电子质量 m_0 [57]； E_g 和 Δ 分别为带隙以及价带的自旋-轨道分裂； a, b, d 是空穴的形变势常数； d_0 是空穴和光学声子相互作用的形变势常数； C_1 则是电子的形变势常数； C_2 和 d_2 分别为声学声子和光学声子的带间形变势常数。

第二章 自旋电子学的基本概念

	$ \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$ (c)	$ \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle$ (c)	$ \frac{3}{2}\frac{3}{2}\rangle$ (v)	$ \frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle$ (v)	$ \frac{3}{2}-\frac{1}{2}\rangle$ (v)	$ \frac{3}{2}-\frac{3}{2}\rangle$ (v)	$ \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$ (v')	$ \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle$ (v')
$\langle\frac{1}{2}\frac{1}{2} $ (c)	$\frac{k^2}{2m_c^*} + C_1\epsilon$	0	$-K_+$	$\sqrt{\frac{2}{3}}K_z$	$\sqrt{\frac{1}{3}}K_-$	0	$-\sqrt{\frac{1}{3}}K_z$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}K_-$
$\langle\frac{1}{2}-\frac{1}{2} $ (c)	0	$\frac{k^2}{2m_c^*} + C\epsilon$	0	$-\sqrt{\frac{1}{3}}K_+$	$\sqrt{\frac{2}{3}}K_z$	K_-	$-\sqrt{\frac{2}{3}}K_+$	$\sqrt{\frac{1}{3}}K_z$
$\langle\frac{3}{2}\frac{3}{2} $ (v)	$-K_+^*$	0	$F' - E_g$	H'	I'	0	$-\sqrt{\frac{1}{2}}H'$	$-\sqrt{2}I'$
$\langle\frac{3}{2}\frac{1}{2} $ (v)	$\sqrt{\frac{2}{3}}K_z^*$	0	H'^*	$G' - E_g$	0	I'	$-\frac{G'-F'}{\sqrt{2}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}H'$
$\langle\frac{3}{2}-\frac{1}{2} $ (v)	$\sqrt{\frac{1}{3}}K_-^*$	$\sqrt{\frac{2}{3}}K_z^*$	I'^*	0	$G' - E_g$	$-H'$	$\sqrt{\frac{2}{3}}H'^*$	$\frac{G'-F'}{\sqrt{2}}$
$\langle\frac{3}{2}-\frac{3}{2} $ (v)	0	K_-^*	0	I'^*	$-H'^*$	$F' - E_g$	$\sqrt{2}I'^*$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}H'^*$
$\langle\frac{1}{2}\frac{1}{2} $ (v')	$-\sqrt{\frac{1}{3}}K_z^*$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}K_+^*$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}H'^*$	$-\frac{G'-F'}{\sqrt{2}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}H'$	$\sqrt{2}I'$	$\frac{G'-F'}{2} - E_g - \Delta$	0
$\langle\frac{1}{2}-\frac{1}{2} $ (v')	$-\sqrt{\frac{2}{3}}K_-^*$	$\sqrt{\frac{1}{3}}K_z^*$	$-\sqrt{2}I'^*$	$\sqrt{\frac{2}{3}}H'^*$	$\frac{G'-F'}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{2}H'$	0	$\frac{G'-F'}{2} - E_g - \Delta$

表 2.1: 两带Hamiltonian

表中的

$$\begin{aligned}
 K_x &= \frac{Pk_x}{m} - i\frac{k_y k_z}{m_{cv}} - iC_2\epsilon_{yz} - id_2u_x, & K_y &= \frac{Pk_y}{m} - i\frac{k_z k_x}{m_{cv}} - iC_2\epsilon_{zx} - id_2u_y, \\
 K_z &= \frac{Pk_z}{m} - i\frac{k_x k_y}{m_{cv}} - iC_2\epsilon_{xy} - id_2u_z, & K_{\pm} &= \sqrt{\frac{1}{2}}(K_x \pm K_y), & P &= \langle S|P_z|Z\rangle, \\
 F' &= A'k^2 + \frac{1}{2}B'(k^2 - 3k_z^2) + a\epsilon + \frac{1}{2}b(\epsilon - 3\epsilon_{zz}), \\
 G' &= A'k^2 - \frac{1}{2}B'(k^2 - 3k_z^2) + a\epsilon - \frac{1}{2}b(\epsilon - 3\epsilon_{zz}), \\
 H' &= -D'k_z(k_x - ik_y) - d(\epsilon_{zx} - i\epsilon_{xy}) - d_0(u_x - iu_y), \\
 I' &= -\frac{\sqrt{3}}{2}B'(k_x^2 - k_y^2) + iD'k_x k_y - \frac{\sqrt{3}}{2}b(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}) + id\epsilon_{xy} + id_0u_z.
 \end{aligned}$$

第二章 自旋电子学的基本概念

应用微扰论，在考虑了导带和价带之间的相互作用后，可以得到导带电子的 Hamiltonian：

$$H_c = \frac{\mathbf{k}^2}{2m^*} + \frac{1}{2}\mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \vec{\sigma} + \frac{1}{2}\alpha(\vec{\sigma} \cdot \phi), \quad (2.3)$$

式中的 $\vec{\sigma}$ 是 Pauli 矩阵。这个 Hamiltonian 的最后两项是由于在波矢空间缺少反演中心导致的，第一项起源于闪锌矿晶格结构没有体反演中心，称为 BIA 项，它对应于波矢的三次方项，其中 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 的各个分量为[58]：

$$h_x(\mathbf{k}) = \gamma k_x(k_y^2 - k_z^2), \quad h_y(\mathbf{k}) = \gamma k_y(k_x^2 - k_z^2), \quad h_z(\mathbf{k}) = \gamma k_z(k_x^2 - k_y^2), \quad (2.4)$$

$$\gamma = (4/3)(m^*/m_{cv})(1/\sqrt{2m^*E_g})(\eta/\sqrt{1-\eta/3}), \quad \eta = \Delta/(E_g + \Delta) \quad (2.5)$$

第二项是由于晶格形变导致的结构各向异性，称为 SIA 项，它是波矢的线性项，其中 $\alpha = 4/3C_2\eta[2E_gm_e(1-\eta/3)]^{-1/2}$ ， ϕ 各个分量为[59, 60, 61]

$$\phi_x = \epsilon_{xy}k_y - \epsilon_{xz}k_z, \quad \phi_y = \epsilon_{yz}k_z - \epsilon_{yx}k_x, \quad \phi_z = \epsilon_{zx}k_x - \epsilon_{zy}k_y. \quad (2.6)$$

这两项描述了导带电子的自旋轨道耦合，会引起导带上的自旋翻转，其作用相当于一个大小和方向与波矢 \mathbf{k} 有关局域磁场。

在考虑了价带和导带之间的相互作用后， Γ_8 价带上的 Hamiltonian H_v 仍然保持表2.1中画双线的部分的形式不变，不过需要把系数 F' 、 G' 、 I' 、 H' 分别换成 F 、 G 、 I 、 H ；而 F 、 G 、 I 、 H 则是把相应的 F' 、 G' 、 I' 、 H' 表达式中的 A' 换成 $A = A' + A_0$ ， B' 换成 $B = B' + A_0$ ， D' 换成 $D = D' + \sqrt{3}A_0$ 得到的结果，其中

$$A_0 = -\frac{1}{3E_g}(P/m)^2 \simeq \frac{1}{6m_e(1-\eta/3)}. \quad (2.7)$$

这些项中 H 、 I 表示了轻重两个空穴子带之间的耦合。导带对价带的影响使得价带电子的 Hamiltonian 上外加了一个和 \mathbf{k} 的三次方以及 \mathbf{k} 和 ϵ 的线性项有关的量

$$H_{v2} = -\frac{1}{2\eta}\mathbf{J} \cdot \mathbf{h}(\mathbf{k}) - \frac{\alpha}{2\eta}\mathbf{J} \cdot \psi, \quad (2.8)$$

其中 \mathbf{J} 是空穴自旋角动量算符。在考虑相对论修正之后， H_v 还包括如下线性项

$$H_{v3} = \frac{4}{\sqrt{3}}\mathcal{K}\mathbf{k} \cdot \mathbf{V}, \quad V_z = \frac{1}{2}\{J_z(J_x^2 - J_y^2) + (J_x^2 - J_y^2)J_z\} \dots \quad (2.9)$$

第二章 自旋电子学的基本概念

电子和声子以及杂质的散射

表2.1描述了静态张力以及电子与引起子格位移 U 的声学声子和光学声子的短程（形变）相互作用对能谱的影响。除了这些短程作用之外，在晶格中还有长程作用，在通常情况下这些长程作用是占主导的。电子与光学声子之间极化的长程作用由如下的 Fröhlich Hamiltonian 描述

$$\mathcal{D}_{k',k}^{\text{opt}} = iC \frac{(\mathbf{q} \cdot \mathbf{U})}{q^2} \mathbf{I} \delta_{\mathbf{q},\mathbf{k}-\mathbf{k}'}, \quad (2.10)$$

这里 \mathbf{I} 是单位矩阵， $C = e\omega_{LO}(4\pi\rho_0/\epsilon^*)^{1/2}$ ， $\epsilon^{*-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1}$ ， ϵ_0 和 ϵ_∞ 分别是静态和高频介电常数， ρ_0 是晶格密度， ω_{LO} 和 \mathbf{q} 是光学声子的频率和波矢，在极化的光学声子中， \mathbf{q} 和 \mathbf{U} 是平行的，晶格相对位移 \mathbf{U} 为

$$\mathbf{U} = \frac{2\sqrt{M_1 M_2}}{M_1 + M_2} (\mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2), \quad (2.11)$$

其中 \mathbf{U}_1 和 \mathbf{U}_2 分别是质量为 M_1 和 M_2 的原子形成的子格的位移。 \mathbf{k} 和 \mathbf{k}' 则分别是初态和末态的电子波矢。

长程的电子—压电势声学声子相互作用的 Hamiltonian 的形式如下，

$$\mathcal{D}_{k',k}^{\text{ac}} = i \frac{8\pi e \beta_0}{\epsilon_0 q^2} (q_x \epsilon_{yz} + q_y \epsilon_{zx} + q_z \epsilon_{xy}) \mathbf{I} \delta_{\mathbf{q},\mathbf{k}-\mathbf{k}'}, \quad (2.12)$$

其中 β_0 为压电模。

电子和非磁性杂质离子之间的相互作用为

$$V_{k',k} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2 + L_{\text{Deb}}^2} \mathbf{I} \delta_{\mathbf{q},\mathbf{k}-\mathbf{k}'}, \quad (2.13)$$

L_{Deb} 则是 Debye 屏蔽常数。

电子—空穴交换作用

除了普通的 Coulomb 之外，在晶格中电子和空穴之间还存在交换作用。这种交换作用的一个重要性质是它依赖于电子和空穴之间相对的自旋取向。其 Hamiltonian 可以表示为 [62, 56, 34]:

$$H_{\text{ex}} = \pi a_B^3 \mathcal{D} \delta(\mathbf{r}) \delta_{\mathbf{K},\mathbf{K}'}, \quad (2.14)$$

a_B 激子的 Bohr 半径， $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$ 为电子和空穴的相对坐标， \mathbf{K} 和 \mathbf{K}' 分别为散射前后电子和空穴的总的动量。 \mathcal{D} 有两个来源，一是电子和空穴在同一个位置上的短程交换作用，对于 III-V 族半导体，这一项可以写成：

$$\mathcal{D}_{\text{ex}} = \frac{1}{4} \Delta_{\text{ex}} (\mathbf{J} \cdot \vec{\sigma}), \quad (2.15)$$

第二章 自旋电子学的基本概念

其中 Δ_{ex} 是总角动量为 $J = 1$ 和 $J = 2$ 的 $\Gamma_7 \times \Gamma_8$ 激子态之间的交换能级分裂。另外一个来自于长程湮灭作用:

$$\pi a_B^3 D_{ij}^{\text{ann}} = \frac{4\pi e^2}{m^2 \epsilon_{\infty} E_g^2} \frac{(\mathbf{P}_{0i} \cdot \mathbf{K})(\mathbf{P}_{0j} \cdot \mathbf{K})}{K^2}, \quad (2.16)$$

P_{0i} 是动量算符在初态 (基态) 和以电子—空穴对总动量 \mathbf{K} 的为表征的末态 i 之间的矩阵元。假设末态电子和空穴的状态分别是 m 和 n , 那么 P_{0i} 为 $P_{0i} = \langle T n | P_i | m \rangle$, T 是时间反演算符。由于价带的自旋轨道分裂, 由 (2.15) 和 (2.16) 描述的电子—空穴交换作用将会引起电子的自旋翻转。

2.3 自旋去相位机制

2.3.1 EY 机制

Elliot[26] 和 Yafet[27] 分别于 1954 和 1963 年指出: 晶格中的自旋—轨道耦合会引起不同自旋取向的电子波函数的混合。这使得原来是自旋守恒的散射 (比如电子杂质或者电声子散射) 也会导致电子自旋翻转从而引起自旋去相位。随后有人计算了在不同散射下由 EY 效应引起的自旋去相位的驰豫时间[63, 64, 65, 66]。下面我们概述一下由 EY 效应引起的自旋去相位的驰豫时间的理论计算。

长程作用

从表 2.1 中我们可以看到, 价带电子和导带电子之间的波函数有混合, 考虑二次作用后, 导带上的不同自旋取向的电子可以通过这些波函数混合互相翻转, 这种自旋翻转的矩阵元为:

$$H_{m'k',mk} = \sum_{s,s'} \frac{H_{m'k',s'k'}^k H_{s'k',sk}^{\text{int}} H_{sk,mk}^k}{(E_s - E_m)(E_{s'} - E_m)}. \quad (2.17)$$

这里 $H_{sk,mk}^k = H_{mk,sk}^{k*}$ 是表 2.1 中的 k 的线性项, 对应于导带和价带之间的波函数混合。 $H_{s'k',sk}^{\text{int}}$ 为电子和杂质或者声子的相互作用, 对于声学声子、纵向光学声子以及非磁性杂质而言, 这一项是自旋守恒散射,

$$H_{s'k',sk}^{\text{int}} = H_{k',k}^{\text{int}} \delta_{s',s}. \quad (2.18)$$

由此应用表 2.1, 我们可以得到具有自旋翻转项的散射矩阵:

$$H_{k',k} = H_{k',k}^{\text{int}} \frac{i\vec{\sigma} \cdot (\mathbf{k}' \times \mathbf{k}) \eta (1 - \eta/2)}{3m^* E_g (1 - \eta/3)}. \quad (2.19)$$

第二章 自旋电子学的基本概念

对于弹性散射, $k' = k$, $(\frac{k' \times k}{m^*})^2 = 4E_k^2 \sin^2 \theta$, 其中 $E_k = k^2/2m^*$ 是电子能量, θ 是 k' 和 k 之间的夹角。对于 k 空间中各向同性的情况, 应用 Fermi 黄金规则, 得到如下自旋弛豫速率:

$$\frac{1}{\bar{\tau}_s} = 4\pi \int \frac{d\Omega_k}{4\pi} \sum_{k'} |H_{m'k',mk}|^2 \delta(E_k - E_{k'}) \quad (m \neq m'), \quad (2.20)$$

我们已知动量弛豫速度定义为

$$\frac{1}{\bar{\tau}_p} = 2\pi \sum_{k'} |H_{m'k',mk}^{int}|^2 (1 - \cos \theta) \delta(E_k - E_{k'}), \quad (2.21)$$

因此可以把自旋弛豫速度写成

$$\frac{1}{\bar{\tau}_s} = \frac{16}{27} \frac{1}{\bar{\tau}_p} \left(\frac{E_k}{E_g}\right)^2 \eta^2 \left(\frac{1 - \frac{1}{2}\eta}{1 + \frac{1}{2}\eta}\right)^2 \Phi, \quad (2.22)$$

其中

$$\Phi = \frac{\int_{-1}^1 (1 - \mu^2) \sigma(\mu) d\mu}{\int_{-1}^1 (1 - \mu) \sigma(\mu) d\mu}, \quad (2.23)$$

$\mu = \cos \theta$, $\sigma(\mu)$ 是微分散射截面。在高温时候, 电子分布为 Maxwell 分布, 可以假定电子动能 E_k 远大于光学声子能量, 因此对于光学声子 $\sigma(\mu) \sim (1 - \mu)$, $\Phi = 1$; 而对于杂质离子引起的散射 $\sigma(\mu) \sim [(1 - \mu) + 2/\beta]^{-2}$, 其中 $\beta = (2kL_{Deb})^2$,

$$\Phi = \frac{2(2 + \beta) \ln(1 + \beta) - 2\beta/(2 + \beta)}{\beta \ln(1 + \beta) - \beta/(1 + \beta)}. \quad (2.24)$$

应用 Maxwell 分布函数对 EY 机制引起的自旋去相位速率求平均之后, 得到

$$\frac{1}{\tau_s} = r \frac{1}{\tau_p} \left(\frac{k_B T}{E_g}\right)^2 \eta^2 \left(\frac{1 - \eta/2}{1 - \eta/3}\right)^2, \quad (2.25)$$

式中的 r 是一个和散射机制有关的数, 对于光学声子散射 $r = 1$, 而对杂质离子散射 $r = 3\Phi(4k_B T L_{Deb}^2 m^*)$; τ_p 是动量弛豫时间, 它和电子迁移率 μ_e 的关系为 $\mu_e = e\tau_p/m^*$, 其形式由如下表达式给出

$$\tau_p = \langle \bar{\tau}_p E_k \rangle / \langle E_k \rangle, \quad (2.26)$$

其中的尖括号表示对 Maxwell 分布函数求平均。

短程作用

从表 2.1 中我们可以看到在考虑短程作用时，电子和光学声子散射（表 2.1 中的 K_z 和 K_{\pm} 项里和 U 成正比的项）就足以把电子从价带散射到导带上去，因此只要考虑一次 Γ_8 或者 Γ_6 子带和 Γ_7 子带的混合就可以有自旋翻转散射。此时的散射矩阵元为

$$H_{m'k',mk} = - \sum_s \frac{H_{m'k',sk}^k H_{sk',mk}^{\text{int}} + H_{m'k',sk}^{\text{int}} H_{sk',mk}^k}{E_s - E_m}. \quad (2.27)$$

把表 2.1 中的表达式代入，得到和自旋翻转相关的散射矩阵元为

$$H_{k',k} = - \frac{1}{3} \frac{\eta d_2 \sigma \times (U \times (k + k'))}{[2m^* E_g (1 - \eta/3)]^{1/2}}. \quad (2.28)$$

同时考虑横向和纵向的光学声子散射，类似的可以得到如下自旋弛豫速率

$$\frac{1}{\bar{\tau}_s} = \frac{16}{27} \frac{1}{\tau_p} \frac{E_k^2}{E_0 E_g} \frac{\eta^2}{1 - \eta/3}, \quad (2.29)$$

其中 $E_0 = C^2/4d_2m^*$ 。

比较(2.22)和(2.29)，我们发现短程作用的自旋弛豫速度只是把长程作用中的 E_g^2 用 $E_0 E_g$ 代替，考虑短程作用之后并不改变自旋去相位和温度的依赖关系。

2.3.2 DP 机制

从导带电子的 Hamiltonian（方程(2.3)）可以看到，在缺少反演对称中心的晶格中，导带电子的自旋—轨道耦合导致 $k \neq 0$ 的导带电子自旋简并被破坏，除了在主轴 $\langle 100 \rangle$ 和 $\langle 111 \rangle$ 上，具有相同波矢不同自旋电子的能量是不同的。导带电子的自旋分裂等价于在晶格中存在一个大小和方向依赖于波矢 k 的磁场。受此等效磁场影响，电子自旋会绕该磁场做 Larmor 进动。这个有效磁场是高度各向异性的，当电子受碰撞而改变其波矢时，电子的进动方向和频率也随之改变，两者结合产生了一个有效的自旋翻转散射，因此导致了自旋去相位。下面我们讨论在单电子近似下，由 DP 效应导致的自旋去相位的自旋弛豫时间。

自旋弛豫时间的一般表达式

电子密度矩阵 $\rho(k)$ 的演化方程为：

$$\partial_t \rho(k) + i[H_1(k), \rho(k)] + W_{k',k}(\rho(k) - \rho(k')) = 0, \quad (2.30)$$

第二章 自旋电子学的基本概念

$W_{k'k}$ 是散射几率，在这里它关于自旋对角的； $H_1(\mathbf{k})$ 为自旋分裂算符。把自旋密度矩阵分成各项同性和各向异性两个部分， $\rho(\mathbf{k}) = \bar{\rho} + \rho_1(\mathbf{k})$ ，其中 $\bar{\rho}$ 为 $\rho(\mathbf{k})$ 对角度的平均。对方程 (2.30) 做角度平均，得到 ρ 的方程：

$$\partial_t \bar{\rho} + i \overline{[H_1(\mathbf{k}), \rho_1(\mathbf{k})]} = 0, \quad (2.31)$$

把上式代入到方程 (2.30) 中，得到 $\rho_1(\mathbf{k})$ 的方程：

$$\partial_t \rho_1(\mathbf{k}) + i[H_1(\mathbf{k}), \rho_1(\mathbf{k})] + i[H_1(\mathbf{k}), \bar{\rho}(\mathbf{k})] + \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (\rho_1(\mathbf{k}) - \rho_1(\mathbf{k}')) = 0. \quad (2.32)$$

各向异性场 $H_1(\mathbf{k})$ 在半导体中通常都很小，可以认为是小量；由它导致的密度矩阵的各向异性部分 $\rho_1(\mathbf{k})$ 是与 $H_1(\mathbf{k})$ 同阶的小量，因此 $\rho_1(\mathbf{k}) \ll \bar{\rho}(\mathbf{k})$ 。保留方程 (2.32) 到 $H_1(\mathbf{k})$ 的一阶项，并假设碰撞为弹性散射，散射截面 $\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ 只与 E_k 以及 \mathbf{k} 和 \mathbf{k}' 之间的夹角 θ 有关。因此可以把 $\rho_1(\mathbf{k})$ 的方程化为

$$i[H_1(\mathbf{k}), \bar{\rho}(\mathbf{k})] + \int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}'}}{2\pi} \sigma(E_k, \theta) (\rho_1(\mathbf{k}) - \rho_1(\mathbf{k}')) = 0. \quad (2.33)$$

把 $H_1(\mathbf{k})$ 按球面函数展开：

$$H_1(\mathbf{k}) = \sum_l C_{l,m} k^l Y_m^l(\theta_k, \varphi_k), \quad (2.34)$$

在驰豫时间近似下，假设 $\rho_1(\mathbf{k})$ 具有如下形式的解，

$$\rho_1(\mathbf{k}) = -i \sum_l \tau_l k^l Y_m^l(\theta_k, \varphi_k) [C_{l,m}, \bar{\rho}] \quad (2.35)$$

其中 τ_l 为自旋驰豫时间。把 (2.35) 和 (2.34) 代入到 (2.33) 中，并利用关系式：

$$\int Y_m^l(\theta_{\mathbf{k}'}, \varphi_{\mathbf{k}'}) \sigma(E_k, \theta) \frac{d\Omega_{\mathbf{k}'}}{2\pi} = Y_m^l(\theta_k, \varphi_k) \int_0^\pi \sigma(E_k, \theta) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta, \quad (2.36)$$

其中 $P_l(\cos \theta)$ 是 Legendre 多项式，从而得到：

$$\frac{1}{\tau_l} = \int_0^\pi \sigma(E_k, \theta) (1 - P_l(\cos \theta)) \sin \theta d\theta, \quad (2.37)$$

同样把 (2.35) 和 (2.34) 代入到 (2.31) 中，得到

$$\partial_t \bar{\rho} + \frac{1}{4\pi} \sum_{lm} k^{2l} \tau_l [C_{lm}, [C_{lm}, \bar{\rho}]] = 0. \quad (2.38)$$

上面这个方程的第二项代表了自旋驰豫。对于自旋为 $\frac{1}{2}$ ，

$$H_1(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \vec{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}), \quad (2.39)$$

第二章 自旋电子学的基本概念

其中 $\Omega(\mathbf{k})$ 是有效磁场。在没有形变的系统中，有效磁场主要来源于 Dresselhaus 项，此时方程(2.34)中只有 $l = 3$ 的项不为零；在有形变或者二维系统中还有 Rashba 项，此时只有 $l = 1$ 的项不为零。对于这两种情况方程(2.38)都可以写出

$$\partial_i \bar{\rho} + \tau_l \overline{[H_1(\mathbf{k}), [H_1(\mathbf{k}), \bar{\rho}]]} = 0, \quad (2.40)$$

对于三维 $l = 3$ ，而二维 $l = 1$ 。而 $\bar{\rho}(\mathbf{k})$ 则是

$$\bar{\rho}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \mathbf{S}(\mathbf{k}) \cdot \vec{\sigma}, \quad (2.41)$$

$\mathbf{S}(\mathbf{k})$ 为电子平均自旋： $\mathbf{S}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} S_p(\rho(\mathbf{k}) \vec{\sigma})$ 。把方程 (2.39) 和 (2.41) 代入方程 (2.40)，得到

$$\partial_i S_x(\mathbf{k}) = -\tau_l \left[S_x(\mathbf{k}) (\overline{\Omega_x^2(\mathbf{k})} + \overline{\Omega_y^2(\mathbf{k})}) - S_x(\mathbf{k}) (\overline{\Omega_x(\mathbf{k}) \Omega_x(\mathbf{k})}) - S_y(\mathbf{k}) (\overline{\Omega_y(\mathbf{k}) \Omega_x(\mathbf{k})}) \right], \quad (2.42)$$

其中

$$\overline{\Omega_i(\mathbf{k}) \Omega_j(\mathbf{k})} = \int \Omega_j(\mathbf{k}) \Omega_j(\mathbf{k}) \frac{d\Omega_{\mathbf{k}}}{4\pi}. \quad (2.43)$$

有关 $S_x(\mathbf{k})$ 和 $S_y(\mathbf{k})$ 的方程只有把方程 (3.16) 的指标作轮换即可得到。从方程 (3.16) 可以看出由 DP 机制引起的自旋驰豫时间通常是一个张量

$$\frac{1}{\tilde{\tau}_{s,ii}} = \tau_l (\overline{\Omega^2(\mathbf{k})} - \overline{\Omega_i^2(\mathbf{k})}), \quad \frac{1}{\tilde{\tau}_{s,ij}} = \tau_l (\overline{\Omega_i(\mathbf{k}) \Omega_j(\mathbf{k})}) \quad (i \neq j) \quad (2.44)$$

这里

$$\overline{\Omega^2(\mathbf{k})} = \sum_i \overline{\Omega_i(\mathbf{k})^2}. \quad (2.45)$$

三维系统中的自旋dephasing

在三维情况下 $\Omega(\mathbf{k}) = \mathbf{h}(\mathbf{k})$ ，把 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 的表达式代入到方程(2.44)，我们可以得到，

$$\frac{1}{\tilde{\tau}_s} = \frac{32}{105} \gamma_3 \tilde{\tau}_p (2m^* \gamma^2) E_{\mathbf{k}}^3, \quad (2.46)$$

式中

$$\gamma_l = \frac{\int_{-1}^1 \sigma(E_{\mathbf{k}}, \mu) (1 - P_l(\mu)) d\mu}{\int_{-1}^1 \sigma(E_{\mathbf{k}}, \mu) (1 - \mu) d\mu}, \quad (2.47)$$

假设这个量和能量无关，对分布函数求平均之后得到由 DP 效应导致的自旋驰豫时间为：

$$1/\tau_s = Q \tau_p (2m^* \gamma^2) (k_B T)^3, \quad (2.48)$$

第二章 自旋电子学的基本概念

其中

$$Q = \frac{32}{105} \gamma^3 \frac{\langle \bar{\tau}_p E_k^3 \rangle (E_k)}{\langle \bar{\tau}_p E_k \rangle (k_B T)^3}, \quad (2.49)$$

Q 是一个与散射机制有关的数。对电子—极化光学声子散射, $Q = 0.8$; 而对电子—杂质散射, $Q \simeq 1.5$ 。

单轴形变晶格中的自旋dephasing

在有单轴形变的晶格中, 有效磁场还包含 Rashba 项, 其有效磁场为 $\Omega_{lx}(k) = \alpha\phi_z = \alpha(\varepsilon_{xz}k_x - \varepsilon_{yz}k_y)$ 等等, 这一项也会引起额外的自旋去相位。在这种情况下,

$$\overline{\Omega_{lx}^2} = \frac{\alpha^2 k^2}{3} (\varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2) \quad \overline{\Omega_x(k)\Omega_y(k)} = \frac{\alpha^2 k^2}{3} \varepsilon_{xz}\varepsilon_{yz}, \quad (2.50)$$

其它结果通过轮换 x, y, z 得到。当张力沿(111)时, $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = (\varepsilon_{111} - \varepsilon_{1\bar{1}0})/3 \equiv \varepsilon'_{111}/3$, 由公式(2.44)得:

$$\frac{1}{\bar{\tau}_{s,ii}} = \frac{4}{\bar{\tau}_{s,ij}} = \frac{4}{3} \bar{\tau}_p C_3^2 k^2 \left(\frac{\varepsilon'_{111}}{3}\right)^2 \quad (i \neq j). \quad (2.51)$$

这个驰豫时间张量 $1/\bar{\tau}_s$ 的主轴位于(111)方向上。在主轴坐标系里,

$$\frac{1}{\bar{\tau}_{s,\parallel}} = \frac{2}{\bar{\tau}_{s,\perp}} = \frac{4}{3} \bar{\tau}_p m^* E_k^2 (\alpha \varepsilon'_{111})^2, \quad (2.52)$$

用 Maxwell 分布函数求平均之后, 有

$$\frac{1}{\tau_{s,\parallel}} = \frac{2}{\tau_{s,\perp}} = 2m^* (\alpha \varepsilon'_{111})^2 k_B T. \quad (2.53)$$

当压力沿(110)方向上时, $\varepsilon_{xy} = (\varepsilon_{110} - \varepsilon_{1\bar{1}0})/2 \equiv \varepsilon'_{110}/2$, $\varepsilon_{yz} = \varepsilon_{xz} = 0$, 因此有

$$\frac{1}{\bar{\tau}_{s,22}} = \frac{2}{\bar{\tau}_{s,xx}} = \frac{2}{\bar{\tau}_{s,yy}} = \frac{2}{3} \bar{\tau}_p k^2 (\alpha \varepsilon'_{xy})^2. \quad (2.54)$$

这个驰豫时间的主轴是(001), 是和张力的方向相垂直, 在主轴坐标系里

$$\frac{1}{\bar{\tau}_{s,\parallel}} = \frac{2}{\bar{\tau}_{s,\perp}} = \frac{1}{2} \bar{\tau}_p m^* E_k (\alpha \varepsilon'_{110})^2, \quad (2.55)$$

对分布函数求平均之后的结果为

$$\frac{1}{\tau_{s,\parallel}} = \frac{2}{\tau_{s,\perp}} = \frac{3}{2} m^* \tau_p k_B T (\alpha \varepsilon'_{110})^2. \quad (2.56)$$

纵向磁场对自旋驰豫的影响

在外加磁场作用下电子自旋将绕外场做 Larmor 进动，如果这个进动足够快，将会抑制电子自旋绕 DP 机制导致的等效的内部磁场的进动，因此可以使得自旋的有序取向保持得更久，从而减小自旋驰豫[67]。这个效果在 Larmor 进动频率 $\Omega_L = g\mu_B B$ 大于内部磁场的改变速度 $1/\tau_{\text{int}}$ 时尤其明显。对于 DP 机制，当动量发生改变时，内部磁场立刻随之改变。因此对于 DP 机制来说， τ_{int} 由动量驰豫时间 τ_p 决定。当 $\Omega_L \leq \tau_p^{-1}$ 时，外加磁场的作用开始变得明显。从对称性角度看，这种抑制作用和磁场的取向没有关系，不过由于在最早的光学取向实验中，由于 Hanle 效应[68, 32]，横向磁场会使得带边发光更为无序，因此理论上一般都是考察纵向磁场对自旋驰豫的影响。外加的纵向磁场对自旋驰豫的影响可以估算如下：在 τ_p 时间内，自旋绕内部磁场旋转的角度 $\Delta\phi = \Omega(\mathbf{k})\tau_p$ ，其中 $\Omega(\mathbf{k})$ 为电子自旋绕内部磁场进动的频率。当 $t \ll \tau_p$ 时，旋转角的方均值可以写成 $\overline{(\Delta\phi)^2} = \overline{(\Omega(\mathbf{k})\tau_p)^2}t/\tau_p$ ，其中 $\overline{\Omega^2(\mathbf{k})}$ 是 $\Omega(\mathbf{k})^2$ 对所有可能 \mathbf{k} 的平均。 $\overline{(\Delta\phi)^2}$ 达到1所需要花费的时间大体就是自旋驰豫时间。在外加磁场为零时 $\tau_s(0) = \overline{\Omega^2(\mathbf{k})}\tau_p$ ，这个结果和方程 (2.44) 只相差一个常数，因此上面的这个估计基本上是合理的。在有很大的外加磁场的时候，由于 $\Omega(\mathbf{k})/\Omega_L$ 是电子自旋的进动轴偏离外场的最大可能角度，因此在 τ_p 内电子自旋的旋转角的偏差不超过 $\Delta\phi(B) = \Omega(\mathbf{k})/\Omega_L$ 。所以在有很大的纵向磁场时自旋驰豫时间可以大体上估计如下：

$$\overline{(\Omega^2(\mathbf{k})/\Omega_L^2)}(\tau_s(B)/\tau_p) = \tau_s(B)\overline{\Omega^2(\mathbf{k})}\tau_p/\Omega_L^2\tau_p^2 = 1. \quad (2.57)$$

对于一般磁场，可以用如下的公式来表示驰豫时间和磁场的关系

$$\frac{1}{\tau_s(B)} = \frac{1}{\tau_s(0)} \frac{1}{1 + (\Omega_L\tau_p)^2}. \quad (2.58)$$

外加磁场除了引起电子自旋的 Larmor 进动之外，还会影响电子的轨道运动从而进一步抑制 DP 机制，增长自旋驰豫时间[69, 70]。我们知道，外加磁场 B 会引起电子动量 \mathbf{k} 围绕它做进动，进动频率 $\Omega_c = eB/m^*c$ 。在强场下， $\Omega_c\tau_p \ll 1$ ，电子动量垂直于磁场方向的分量的平均值为零而平行于磁场方向的分量保持不变。当磁场沿 (100) 或者 (111) 时，DP 项 $h(\mathbf{k})$ 的所有分量对所有垂直于 B 方向的动量平均之后都为零，即外加磁场完全抑制了 DP 机制。当外加磁场施加在别的方向上时，尽管 $h(\mathbf{k})$ 的平均并不完全为零，DP 机制的作用也会被大大的削弱。在 III-V 族半导体中， $\Omega_L/\Omega_c = gm^*/2m_0$ 通常都很小（比如在 GaAs 中， Ω_L/Ω_c 仅仅为 0.03），因此动量绕磁场的进动对自旋驰豫的抑制作用应该超过自旋绕磁场做 Larmor 进动对自旋驰豫的抑制。由这些分析可以看出，纵向磁场对自旋驰豫的影响随磁场的变化规律是：当磁场比较小的时候，自旋

第二章 自旋电子学的基本概念

驰豫基本上不随磁场改变；当磁场增大到 $\Omega_c \tau_p \geq 1$ 时，磁场对轨道运动的影响开始产生作用，自旋驰豫随之下降；而磁场增大到 $\Omega_c \tau_p \gg 1$ 时，磁场对轨道的影响已经达到最大，不会进一步减小自旋驰豫，自旋驰豫随磁场变化速度变小，甚至于完全保持不变；而到了 $\Omega_L \tau_p \geq 1$ 的区域内，Larmor 进动的的影响开始发挥作用，自旋驰豫再次随磁场升高而下降直到自旋驰豫完全被抑制。

2.3.3 BAP 机制

在前面我们提到电子和空穴之间的交换作用和湮灭作用使得电子—空穴散射会导致自旋翻转。这种由于电子—空穴之间的交换作用而产生的自旋翻转散射导致的自旋驰豫的机制称为 BAP 机制。考虑高阶项，由于 EY 效应，电子—空穴之间的直接 Coulomb 散射也会导致自旋去相位。但是 Bir 等人分析指出电子—空穴之间的由于 EY 效应导致的自旋去相位远不如 BAP 效应有效[30]。

他们用 Fermi 黄金规则得到由于交换作用导致的驰豫时间：

$$\frac{1}{\tau_s(\mathbf{k})} = 4\pi^3 a_B^6 \sum_{\alpha\alpha'\mathbf{p}\mathbf{q}} |\Psi(0)|^4 |D_{m'\alpha',m\alpha}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p})|^2 f_{\mathbf{p}}(1 - f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \times \delta(E_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \quad (m' \neq m), \quad (2.59)$$

其中 $\Psi(\mathbf{r})$ 为电子—空穴的相对运动波函数， $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$ 为电子相对于空穴的空间位置。在此基础上他们分不同情况讨论了自旋驰豫时间，详见文献 [30]。

2.3.4 三种自旋dephasing 机制的关系

EY, DP, BAP 效应在不同情况下起的作用不同。因为 BAP 效应是有电子—空穴交换作用引起的，在 n 型半导体中，由于空穴浓度很低，BAP 效应不显著，自旋驰豫主要是由 EY 和 DP 效应引起的。这两个效应都和价带的自旋劈裂有关，它们的主要区别在于和动量驰豫时间的关系是相反的， $1/\tau_s^{\text{EY}} \sim \tau_p^{-1}$ ，而 $1/\tau_s^{\text{DP}} \sim \tau_p$ 。因此可以预计在掺杂浓度比较高的情况下，EY 效应要比 DP 效应重要。对于电声子散射，两者的作用都随温度的提高而提高，但他们对温度的倚赖关系不同，因此不同温度下二者的作用也不同。由公式 (2.25) 和 (2.48)，有

$$\frac{1/\tau_s^{\text{EY}}}{1/\tau_s^{\text{DP}}} \propto \frac{1}{\tau_p^2 T E_g} \left(\frac{m_{\text{CV}}}{m^*}\right)^2 \left(\frac{1 - \eta/2}{1 - \eta/3}\right)^2, \quad (2.60)$$

因此在低温时候，EY 效应占主导；而在高温时主要是 DP 效应。对于不同类型的半导体，EY 效应和 DP 效应的作用也不相同。从公式 (2.25) 和 (2.48) 我们可以看到， $1/\tau_s^{\text{EY}} \propto 1/E_g^2$ 而 $1/\tau_s^{\text{DP}} \propto 1/E_g$ ，在窄带半导体中，由于 E_g 比较小，因此在窄带半导体中 EY 效应比 DP 效应要重要。对于 GaAs 这样的宽禁带半导体来说，由于 E_g 很大，因此 DP 效应要比 EY 效应重要得多。

在本征和 p 型半导体中，由于空穴浓度比较大，BAP 效应比较重要。对于 p 半导体，主要是 EY 效应和 BAP 效应。这两者都随受主浓度 N_A 升高而升高。在低掺杂时，空穴浓度较低，BAP 效应占主导。由于 BAP 效应的作用的增加速度随空穴浓度增高而降低，因此高掺杂时 EY 作用增强。同样的，在具有很大的自旋劈裂的窄带半导体中 EY 的作用也可能强于 BAP。而对于本征半导体，这三个效应都可能其作用。在低温下其主导作用的是 BAP 效应以及 EY 效应，DP 效应相比之下不是特别重要；而在高温时候，EY 效应减弱，DP 效应增强，而且往外会超过 BAP 效应，因此在高温下主要的自旋驰豫机制是 DP 效应。

2.4 早期研究自旋驰豫的实验方法和结果

对半导体中的自旋驰豫的实验研究很早就开始了，除了少数实验使用核磁共振技术间接测量载流子自旋驰豫之外，早期研究自旋驰豫的实验都是通过测量光学取向的办法来进行的[71, 72, 36, 73, 74]。

光学取向使用圆偏振光把电子从价带激发到导带上，由于光跃迁的选择定则，某种自旋取向的电子被激发起来的可能性更大，因此造成导带电子的自旋不均衡。被激发起来的电子经过一段时间之后与空穴发生复合，同时发射一个光子。同样由于选择定则，不同自旋的电子和空穴复合发射出的左旋和右旋的光子的强度不同，因此通过测量这种带边发光的偏振度就可以体现出导带电子的自旋不均衡。如果在电子产生与湮灭之间的这一段时间内由于自旋驰豫使得由于光激发产生的电子的自旋不均衡减弱，带边发光的偏振度将比没有自旋驰豫的偏振度要低，比较这个偏振度的测量值和理论计算得到的无自旋驰豫时候的偏振度就可以得到自旋驰豫时间。

在做光学取向实验中，一般选择激发光的能量 $\hbar\omega$ 小于自旋劈裂能级和导带之间的带隙 $E_g + \Delta$ ，这样激发光只能使得最高的两个价带上（即重空穴和轻空穴带）的电子被激发到导带上。在三维情况下，不考虑晶格形变势，重空穴和轻空穴在 Γ 点是简并的，和两个原子能级之间的光跃迁的选择定则相似，体半导体晶格中的导带和价带之间的光跃迁的选择定则如图 2.2(a) 所示，其中 σ_{\pm} 表示光子的偏振性。带箭头的线旁边

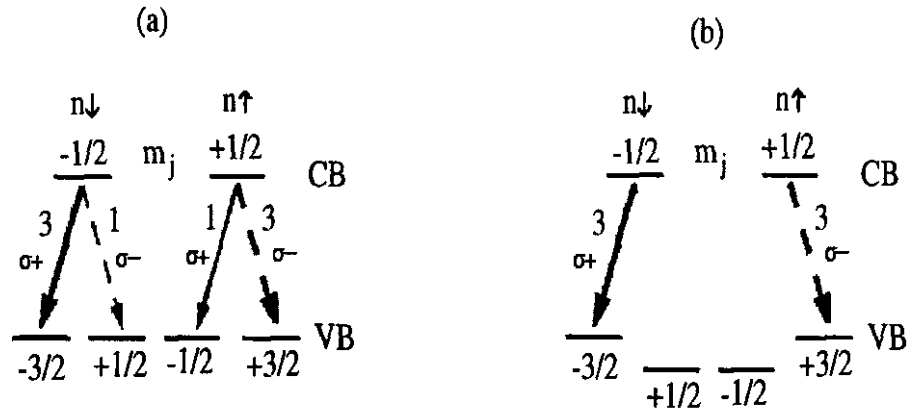


图 2.2: 光学跃迁选择定则

的数字表示跃迁的强度。因此如果我们使用左旋偏振光来激发电子，对于 p 型半导体或者低温时候的本征半导体，在刚刚被激发起来时候的平均电子自旋极化 P_0 为：

$$P_0 = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n_{\uparrow} + n_{\downarrow}} = \frac{3 - 1}{3 + 1} = 50 \% . \quad (2.61)$$

在刚刚被激发起来的时候，电子和空穴的自旋极化都不为零，但是由于 III-V 族材料中空穴的角动量和准动量之间的耦合非常强，在空穴发生碰撞，动量空间的相干消失之后，空穴的自旋相干也跟随着消失，因此空穴的自旋驰豫时间非常短，大体上和动量驰豫时间 τ_p 相当。因此在这些激发产生的电子和空穴达到热平衡时，空穴的自旋已经达到了平衡，系统中只留下了自旋极化的电子。对于电子自旋而言，在连续激发下，由于自旋驰豫，稳定之后的电子自旋极化 P 和电子刚刚被激发起来的自旋极化 P_0 是不同的。电子的自旋驰豫的大小可以用一个自旋驰豫时间 τ_s 来表征。在经过 t 时间之后， $t = 0$ 时刻产生的电子的自旋极化下降到 $P_0 e^{-t/\tau_s}$ ；此外，由于电子-空穴复合，到了 t 时刻，系统中还保持有的 $t = 0$ 时刻激发起来的电子的数目减低到 $N_0 e^{-t/\tau}$ ，其中 N_0 为激发强度，而 τ 为电子寿命。因此达到稳定时，系统的自旋极化 P 就是：

$$P = \frac{\int_0^{\infty} P_0 e^{-t/\tau_s} N_0 e^{-t/\tau} dt}{\int_0^{\infty} N_0 e^{-t/\tau} dt} = \frac{P_0}{1 + \tau/\tau_s}, \quad (2.62)$$

我们可以看到，当 τ_s 远大于电子寿命 τ 时，在电子产生和复合之间，电子自旋极化几乎没有衰减，因此平衡之后的电子自旋极化 P 和激发起来的电子自旋极化 P_0 相同；反过来，如果 $\tau_s \ll \tau$ ，那么在电子复合之前其自旋极化就已经完全被破坏。而根据选择定则，当激发光基本垂直表面时，在反射光方向上观测到的电子和空穴发生复合时施

放出的光子的偏振度为

$$\rho = \frac{(3-1)n_{\uparrow} + (1-3)n_{\downarrow}}{(3+1)n_{\uparrow} + (1+3)n_{\downarrow}} = \frac{1}{2}P, \quad (2.63)$$

由方程 (2.61), (2.62), (2.63), 只要测出带边发光的偏振度就可以得到电子寿命和自旋弛豫时间 τ_s 之比。

如果在垂直于泵浦光方向上施加一个横向磁场 B , 由于自旋在磁场作用下发生 Larmor 进动, 导致自旋极化的改变, 从而影响带边发光的偏振度。磁场对半导体带边发光的偏振度的影响可以按照如下方式计算: 磁场引起自旋进动, 频率为 Ω_L , 同时考虑自旋弛豫和 Larmor 进动, 在 t 时刻电子自旋极化在 z 方向上的分量为 $P_0 \cos \Omega_L t e^{-t/\tau_s}$ 。因此当系统达到稳定时, 自旋极化在 z 方向上的分量为

$$P(B) = \frac{\int_0^{\infty} dt P_0 \cos \Omega_L t e^{-t/\tau_s} N_0 e^{-t/\tau}}{\int_0^{\infty} N_0 e^{-t/\tau} dt} = \frac{P(0)}{1 + (\Omega_L T_s)^2}, \quad (2.64)$$

其中 $P(0)$ 是磁场为零时的平衡极化, 其表达式由公式 (2.62) 给出, 而

$$\frac{1}{T_s} = \frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau_s}, \quad (2.65)$$

称为自旋寿命。由此我们可以看到, 在一个外加横向磁场的的作用下, 半导体带边发光的偏振度将会下降, 这种效应称为 Hanle 效应[68, 32]。

公式 (2.62) 和 (2.64) 是使用光学取向方法测量电子寿命和电子自旋弛豫时间的基本公式。通过测量零场的带边发光偏振度以及磁退偏振曲线 (即偏振度和磁场的关系曲线, 又称 Hanle 曲线) 的半宽度 $B_{\frac{1}{2}} = 1/(g\mu_B T_s)$, 就可以同时得到电子寿命 τ 和自旋弛豫时间 τ_s :

$$\tau_s = \frac{\rho_0}{\rho_0 - \rho(0)} \frac{1}{g\mu_B B_{\frac{1}{2}}}, \quad (2.66)$$

$$\tau = \frac{\rho_0}{\rho(0)} \frac{1}{g\mu_B B_{\frac{1}{2}}}. \quad (2.67)$$

在半导体受到张力作用而产生形变或者在准二维情况下, 体系受到晶格形变和张力的影响, 重空穴价带和轻空穴价带在 Γ 点不再是简并的, 它们之间有一个能级分裂 ΔE 。如果选择激发光的频率小于 $E_g + \Delta E$, 那么这个激光只能使得某一个价带上的电子被激发到导带上, 光跃迁的选择定则发生变化。在体系中形变体现为张力时, 重空穴子带能级较低, 光跃迁出现在重空穴价带和导带之间, 选择定则如在图 2.2(b) 所示 (当形变体现为压力时, 跃迁发生在轻空穴子带和导带之间, 选择定则和图 2.2(b) 类似)。这时候 $P_0 = 100\%$, 而

$$\rho = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n_{\uparrow} + n_{\downarrow}} = P. \quad (2.68)$$

第二章 自旋电子学的基本概念

因此在这类系统中做光学取向实验时，需要按照上面的公式相应地得到电子寿命以及自旋驰豫时间。

在上面分析的 p 型或者本征半导体中，原先体系内的电子数目比较少，可以认为在连续光激发下，平衡之后的电子都是被激光激发起来的。这些电子的数目和光强成正比，但是自旋极化和光强无关。在 n 型半导体中，导带上原来就有很多电子，因此情况将和 p 型半导体有所差异[75]。由圆偏振光激发上来的电子中某种自旋取向的电子占多数，假设电子复合率和其自旋取向没有关系，那么导带电子的将发生自旋积聚，如果自旋驰豫速度非常小的话，即使由光激发起来的电子数目比起平衡时候的导带电子要小得多，达到静态的时候电子自旋还是会有一定的取向。在 n 型半导体中，假设单位时间内光激发起来的载流子浓度 G 相比于导带中原来的电子数 N 是非常小的，此时自旋向上和自旋向下电子数目随时间的变化规律如下：

$$\frac{dN_{\uparrow}}{dt} = \frac{G(1+P_0)}{2} - \frac{N_{\uparrow} - N/2}{\tau_s} - \frac{1}{\tau} \frac{G\tau N_{\uparrow}}{N}, \quad (2.69)$$

$$\frac{dN_{\downarrow}}{dt} = \frac{G(1-P_0)}{2} - \frac{N_{\downarrow} - N/2}{\tau_s} - \frac{1}{\tau} \frac{G\tau N_{\downarrow}}{N}, \quad (2.70)$$

上两式中的第一项是单位时间内泵浦光激发的自旋极化的电子数目，第二项是由于自旋驰豫导致的不同自旋取向的电子数的变化，而第三项则是由于电子-空穴复合导致的电子数减小，其中 $G\tau$ 是稳定时的空穴数目。当系统达到平衡时， $dN_{\sigma}/dt = 0$ ，自旋极化为

$$P = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N} = \frac{P_0}{1 + \tau_J/\tau_s}, \quad (2.71)$$

其中 $\tau_J = N/G$ 。从物理上说，当系统达到静态时，单位时间内湮灭的电子-空穴对的数目应当和单位时间内产生的电子-空穴对数目一样，因此 $\tau_J = N/G$ 就代表了导带电子的寿命。比较(2.62)和(2.71)可以发现在 n 型半导体中只是把电子寿命 τ 换成导带电子 τ_J 就可以了。

利用上述的实验原理，Benoit 等测量了在低温 ($T = 1.3 \text{ K}$) 时 p 型 InSb 中由于 EY 机制导致的自旋驰豫[76]；Clark 等测量了在比较高的温度下 ($T > 40 \text{ K}$) p 型 GaAs 和 GaSb 中由于 DP 机制导致的自旋驰豫[36, 73, 74]；Aronov 等测量了在高掺杂情况下的 p 型 GaAs 和 GaSb 的由于 BAP 机制引起自旋驰豫[73, 77]。实验的结果表明了一定条件下自旋驰豫时间可以长达几个纳秒[36]。

2.5 时间分辨的Faraday旋转

光学取向的方法只能测量出系统达到静态时候的自旋极化，从而间接的获得自旋弛豫过程的信息，但是无法直接观测到自旋极化随时间的动态演化过程。随着实验技术的提高，尤其是飞秒激光器的实现使得观测半导体中自旋的动态演化成为现实。在这种实验中，是利用 Faraday/Kerr 效应，通过测量不同时刻下 Faraday/Kerr 偏转角来获得由激光激发起来的自旋分布随时间演化的信息[78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 37, 38, 39, 89, 4, 90, 91]。所谓的 Faraday 效应指的是沿 k 方向传播的线性偏振光在经过具有磁极化的介质后透射光的偏振方向会相对于入射光的偏振方向旋转一定的角度，这个旋转角度的大小和介质的磁矩在 k 方向上的分量成正比[92]。Kerr 效应和 Faraday 效应相似，只是把透射光换成了反射光。产生这个旋转的原因是在磁矩的作用下，左旋的圆偏振光和右旋的圆偏振光在介质的具有不同透射率和反射率，其透射率或者反射率之差和介质的磁矩成正比。

实验的装置如图2.3所示，首先利用沿 z 方向传播的一个圆偏振的脉冲泵浦 (Pump) 光 (宽度大约为 100 fs) 来产生产生自旋不平衡的载流子，从而使得 z 方向上具有不为零的磁矩；在经过一定的时间延迟 Δt 之后，利用一束传播方向稍为偏离泵浦光并且强度远低于泵浦光的线性偏振激光为探测光 (Probe)，通过测量探测光的 Faraday 角 θ_F 或者 Kerr 角 θ_K 随 Δt 的变化就可以得到 z 方向上磁矩随时间的变化。

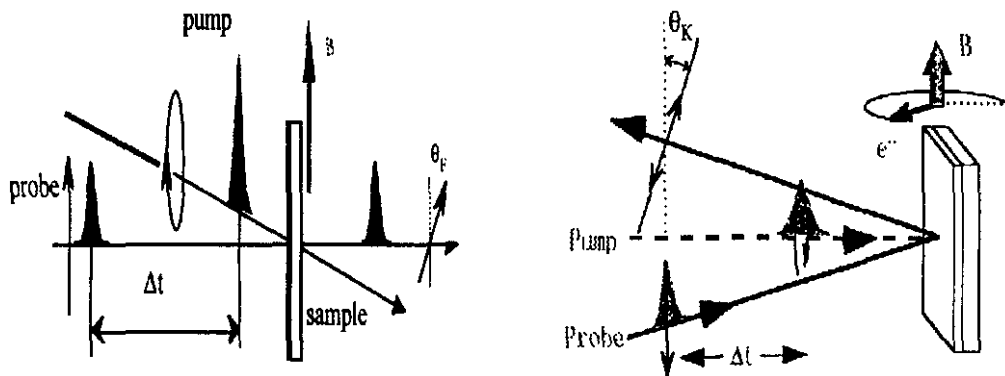


图 2.3: 测量Faraday旋转角 θ_F (a)以及Kerr旋转角 θ_K (b)的装置图

Crooker 和 Awschalom 首先利用这个方法探测在掺 Mn^{2+} 离子的磁性半导体量子阱中的光激发载流子的自旋随时间的变化，他们的结果如图 2.4 所示[87]，Faraday 旋转角 θ_F 随时间的变化反应出了电子和空穴的总磁矩在 z 方向上的分量随时间的变化。在 $t = 0$ 时刻，自旋极化的电子和空穴被泵浦光激发起来，产生了初始的极化， θ_F 也在泵浦光的脉冲宽度内从零上升到最高点。在横向磁场的作用下，电子的磁矩绕磁场做频

第二章 自旋电子学的基本概念

率为 $\Omega_L = g\mu_B B$ 的 Larmor 进动，因此与电子磁矩相应的 Faraday 角也以 Ω_L 为频率做振荡；由于自旋驰豫的影响，进动角度随时间不断衰减，Faraday 旋转角 θ_F 的振荡幅度也相应的不断减小。而由于轻重空穴能级辟裂，磁场提供的能量不足以使得重空穴自旋改变，因此重空穴不做 Larmor 进动，所以其磁矩只是由于驰豫而单调减小。如图 2.4(a) 所示，实验上观测到的 Faraday 旋转角可以分成电子的贡献和空穴的贡献，其中电子的贡献按照

$$\theta_F^e(\Delta t) \propto e^{-\Delta t/\tau} \cos \Omega_L \Delta t \quad (2.72)$$

做衰减振荡的，其中 τ 是横向驰豫时间，体现了横向的自旋驰豫[88, 39, 91]。而空穴的贡献则按照 $\theta_F^h(\Delta t) \propto e^{-\Delta t/\tau_h}$ 衰减， τ_h 为空穴驰豫时间。通过拟合 $\theta_F^e(\Delta t)$ 和 $\theta_F^h(\Delta t)$ 包络线随延迟时间 Δt 的衰减速率即可获得电子和空穴自旋的驰豫时间 τ 和 τ_h 。实验的结果也证实了电子自旋驰豫时间 τ 要远于空穴的驰豫时间 τ_h 。他们还进一步发现在电子一空穴复合之后还可以观测到 θ_F 具有一个频率比电子的 Larmor 频率要小得多并且衰减也比电子自旋衰减要慢的多的衰减振荡（如图 2.4(b) 所示），他们认为这是由于有激光激发起来的自旋极化了的电子和 Mn^{+2} 离子相互作用，从而导致 Mn^{+2} 离子子晶格被极化，而由于 Mn^{+2} 离子自旋驰豫很小，因此当电子一空穴对湮灭之后， Mn^{+2} 磁矩仍然会持续保持数百皮秒。

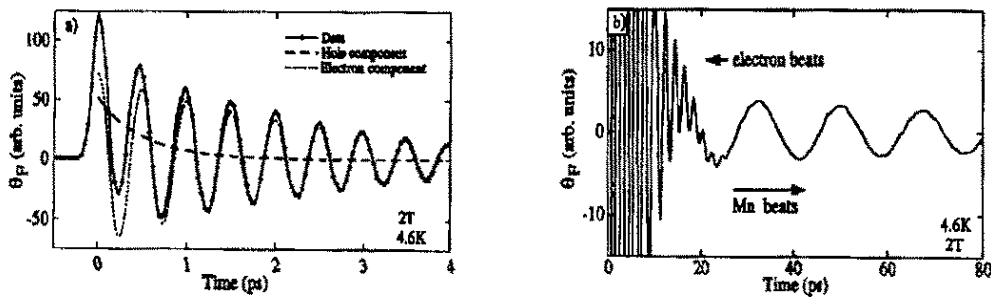


图 2.4: (a) Faraday 旋转角随时间的变化，实线为总的 Faraday 旋转角；虚线为重空穴的贡献；而点线为电子的贡献；(b) Mn^{+2} 离子极化导致的 Faraday 旋转角[87]。

为了解释这些实验现象，Sham 等人建立了 Bloch 方程来描述磁性半导体量子阱中由激光激发的电子和空穴的自旋/光学相干随时间的演化，并得到了 Faraday 旋转角和这些相干的关系[93, 94, 95]。他们利用 Awschalom 等人的实验得到的电子和空穴的驰豫时间，在驰豫时间近似下计算了 Faraday 旋转角随延迟时间 Δt 的演化，得到的 $\theta_F(\Delta t) - \Delta t$ 和实验上观测到的结果符合的很好[93]。

Awschalom 和 Kikkawa 等人随后利用这套方法测量了在各种条件下的 n 型半导体材料、异质结、量子点中的自旋驰豫过程。典型的实验结果如图 2.5 所示[39]。由于

第二章 自旋电子学的基本概念

空穴自旋驰豫时间很短，在电子做 Larmor 进动一两个周期之后，空穴磁矩对 θ_F 的贡献就没有了，因此当电子驰豫时间不是很大的时候，直接拟合 $\theta_F(\Delta t) - \Delta t$ 的包络线就可以求出电子的驰豫时间。在 Awschalom 和 Kikkawa 的实验中，泵浦光和探测光是由钛宝石激光器产生的一束激光经过分光镜分成的两束相干光，并利用泵浦光和探测光之间的光程差来实现时间延迟 Δt 。由于实验条件的限制，大的时间延迟实现起来很困难，因此在驰豫时间比较长的情况下，在实验条件允许的范围内测量到的 $\theta_F(\Delta t)$ 几乎没有衰减，因此难以确定 τ 。为了测量在自旋驰豫很小的系统中的驰豫时间，Awschalom 和 Kikkawa 等人使用泵浦光以 t_{ep} 为间隔做持续地激发，当泵浦间隔 t_{ep} 和 τ 在一个量级上时，不同时刻激发的电子自旋会相互迭加，使得 Faraday 旋转角随时间的演化为

$$\begin{aligned} \theta_F(\Delta t) &\propto \sum_n e^{-(\Delta t + nt_{ep})/\tau} \cos \Omega_L(\Delta t + nt_{ep}) \\ &= e^{-t/\tau} \frac{\cos(\Omega_L t) - e^{-t_{ep}/\tau} \cos[\Omega_L(t - t_{ep})]}{1 - 2e^{-t_{ep}/\tau} \cos(\Omega_L t_{ep}) + e^{-2t_{ep}/\tau}}, \end{aligned} \quad (2.73)$$

在一般情况下，前后相邻的两束泵浦光激发起来的电子自旋信号的相位不匹配，因此在某个确定的时间延迟 Δt 下 $\theta_F(\Delta t)$ 很小；只有在 $\Omega_L = 2m\pi/t_{ep}$ (m 为整数) 时相邻的两个泵浦光产生的自旋信号相加，使得 $\theta_F(\Delta t)$ 大大增强。因此确定某个时间延迟，改变磁场，可以画出 $\theta_F(\Delta t) - B$ 曲线，在这个曲线上有很大的共振峰，而峰的半宽度和 τ 成正比，测出此半宽度就可以得到自旋驰豫时间[39, 89, 91]。

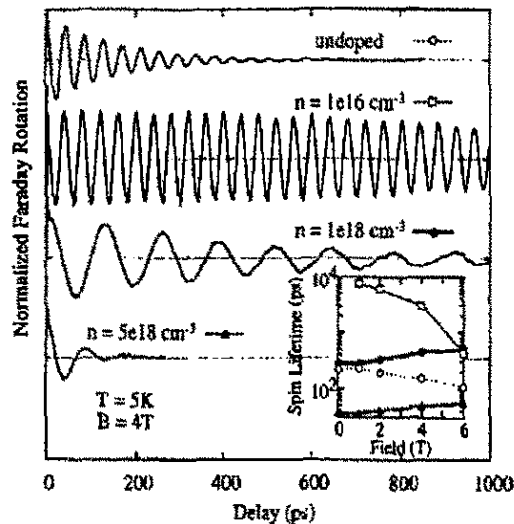


图 2.5: 在 4 T 横向磁场作用下，不同掺杂浓度下 n 型 GaAs 体材料的 Faraday 和时间延迟 Δt 的关系，插图中是相应的自旋驰豫时间和磁场的关系

Awschalom 和 Kikkawa 等人的实验结果表明, 在低温 ($T = 5 \text{ K}$) 和适当的磁场 ($B = 4 \text{ T}$) 下, 无掺杂三维 GaAs 体材料的自旋驰豫时间只有 10 ps ; 当掺杂浓度升高, τ 也随之升高; 到了最优的掺杂浓度 $N = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 时, 在 4 T 特斯拉的磁场作用下, τ 可以达到最大值 $\sim 10 \text{ ns}$; 如果浓度进一步增大, τ 又开始下降, 当 $N = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时, τ 降低到不到 40 ps [39]。在掺杂浓度比较低的时候, 由于 EY 和 BAP 机制占主导, 自旋驰豫时间随磁场的减小而增大。在低温、零磁场、 $n = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 时电子的自旋驰豫时间可以达到 100 ns [39]。当温度升高时, 自旋驰豫时间很快下降, 到了 $T = 100 \text{ K}$ 时, $n = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 的材料 τ 降低了大约一到两个量级, 只剩下 50 ps 。而在 ZnSe/ZnCdSe 量子阱/异质结中的实验结果则显示了由于量子阱的尺寸效应, 准二维电子的自旋驰豫时间大大低于三维, 在低温下自旋驰豫时间仅有几个纳秒; 并且准二维电子的自旋驰豫时间不象体材料中那样随温度急剧改变, 例如在 2 T 的磁场作用下的电子浓度 $n = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 的量子阱中, 当温度从 5 K 升高到 270 K 时, τ 只从 3.9 ns 减低到 1.3 ns [38]。Awschalom 和 Kikkawa 等人还测量了 CdSe 量子点中的自旋驰豫, 他们发现在 6 K 的低温下, 半径为 $22\text{--}57 \text{ \AA}$ 的 CdSe 量子点中的载流子自旋去相位时间为大约 100 ps , 而且自旋去相位时间基本上不随半径改变; 不过当半径提高到 80 \AA 时, 自旋去相位时间减低到大约 40 ps 。如果在 CdSe 量子点外面再加上 CdS 外壳, 则半径为 $22\text{--}57 \text{ \AA}$ 的量子点和半径为 80 \AA 的量子点中自旋去相位时间相应地增加到 3 ns 和 1 ns 。当温度升高到室温时候, 半径为 50 \AA 的量子点中载流子的自旋去相位时间减低到 50 ps , 而半径为 80 \AA 的量子点中的自旋去相位时间减低到 0.4 ns [96, 91]。

2.6 自旋注入

对自旋驰豫/去相位的研究展示了自旋电子学器件实现的可能性, 为了真正实现自旋电子学器件还需要研究在半导体中如何产生自旋极化的载流子, 自旋极化的载流子在半导体中的输运特性, 以及如何探测自旋极化载流子。

半导体中自旋极化载流子的产生方法大体上有两种, 一种是上面提到的使用圆偏振的激光来激发, 在本来没有自旋极化的半导体中激发起自旋不均衡的载流子, 不过由于在实际的半导体器件中无法集成大功率激光器, 因此尽管光激发方法产生自旋极化载流子在研究自旋现象时是一个好的办法, 但在器件设计中并不适用; 另外一种就是用电的办法把已经自旋极化的载流子从一种材料 (比如铁磁金属、磁性半导体或者半金属) 注入到半导体材料中, 这种办法对实现全电性的自旋电子学器件是至关重要

的。在本节中我们介绍一下有关自旋注入的研究现状和最新进展[6]。

2.6.1 欧姆注入

在铁磁金属中多数载流子（不妨设为自旋向上）和少数载流子（自旋向下）电导有很大的差别，在电场作用下会产生自旋极化的电流。自旋注入的最直接的办法就是在铁磁金属和半导体之间做出一个欧姆接触，以期望自旋极化的电流能进入到半导体中。由于在一般的金属-半导体界面上的欧姆接触需要在半导体界面上进行高度掺杂，这些铁磁性杂质又会导致在界面上发生自旋翻转散射从而使得自旋极化减低。而 InAs 和过渡族元素接触时可以具有非常理想的分界清晰的界面，这种界面可以认为是没有 Schottky 势垒的欧姆接触，因此最初的尝试集中在提高铁磁金属和 InAs 的欧姆自旋注入。不幸的是，尽管经过了许多的人的努力[97, 98]，也无法实现这一目标，到目前为止，有报导的最高的注入率只不过才 4.5% [99]。

在自旋扩散运输的模型上[100, 101, 102, 103]，Schmidt 指出通过一个理想的铁磁-非铁磁界面的欧姆注入存在一个根本性的问题，他计算了从电阻为 R_F 的铁磁材料通过欧姆注入到电阻为 R_s 的无自旋极化的半导体中之后，电流的自旋极化率从 P_F 降低到 P_s [104]，

$$P_s = \frac{P_F}{1 + \frac{R_s}{R_F}(1 - P_F^2)}, \quad (2.74)$$

对于一般的铁磁性金属和半导体而言， $R_s \gg R_F$ ，因此除非在铁磁材料中自旋极化达到 100%，否则进入到半导体中的自旋极化率将因为铁磁金属和半导体之间的电导不匹配而大大减低。

解决欧姆注入效率低的问题的可以通过利用自旋极化很大的磁性材料来注入，最理想的材料莫过于 $P_F = 100\%$ 的所谓半金属。在这类材料中两个自旋子带之间存在能隙，Fermi 面位居于其中一个子带上，另外一个自旋子带上没有电子占据，因此载流子极化强度可以达到 100% [2, 105]。人们已经尝试过各种磁性 Heussler 合金[106]、铁磁性氧化物[107, 108, 109, 110]以及各种含 Mn 的半导体[111, 112]，但是为了得到能够在室温下工作的半金属材料，还需要更多的努力。

除此之外，提高自旋注入的办法还可以通过降低铁磁材料和半导体之间的电导不匹配来解决，比如利用电阻和半导体差不多的磁性半导体来取代铁磁金属实现注入[113, 114, 115, 116]，不过这类材料需要在低温或者强磁场（几个特斯拉）下才有磁性，而且这些磁性半导体都是 p 型半导体，载流子是空穴，而由于半导体中空穴的自旋去相位时间很短，因此实用价值不是太大。

2.6.2 隧穿注入

降低铁磁金属和半导体之间的电导不匹配也可以通过隧穿注入来实现。Rashba 分析指出[117]，在铁磁材料和半导体之间加入一个隧穿效率依赖于自旋的隧穿结之后，自旋注入效率 γ 为：

$$\gamma = \frac{r_F(\Delta\sigma/\sigma_F) + r_c(\Delta\Sigma/\Sigma)}{r_{FS}}, \quad (2.75)$$

其中 $r_{FS} = r_F + r_s + r_c$, $r_F = L_F\sigma_F/4\sigma_{\uparrow}^F\sigma_{\downarrow}^F$, $r_S = L_s/\sigma_s$, $r_c = \Sigma/4\Sigma_{\uparrow}\Sigma_{\downarrow}$, $\Delta\Sigma = \Sigma_{\uparrow} - \Sigma_{\downarrow}$, $\Sigma = \Sigma_{\uparrow} + \Sigma_{\downarrow}$, $\Delta\sigma = \sigma_{\uparrow}^F - \sigma_{\downarrow}^F$, $\sigma^F = \sigma_{\uparrow}^F + \sigma_{\downarrow}^F$. L_F 和 L_s 分别为铁磁材料和半导体中的自旋扩散长度, σ_{\uparrow}^F (σ_{\downarrow}^F) 和 Σ_{\uparrow} (Σ_{\downarrow}) 则分别是铁磁体和隧穿结中自旋向上 (向下) 的电导, σ_s 是半导体电导。对于一般的金属和半导体, $r_F \ll r_s$, 如果没有隧穿结 T , 就是欧姆注入, 自旋注入效率很低; 只有在 $r_c \geq r_s$ 并且 $\Delta\Sigma/\Sigma$ 比较大的时候才有可能有比较大的自旋注入。如果铁磁体电阻很大, $r_F \gg r_s, r_c$, 那么 $\gamma \simeq \Delta\sigma/\sigma_F$, 自旋注入效率由铁磁体决定; 反之, 如果 $r_s \gg r_F, r_c$ 时, $\gamma \simeq 0$, 自旋极化电流进入到半导体之后就几乎完全消失; 而在隧穿结的电阻很大的情况下, $r_c \gg r_F, r_s$, 那么 $\gamma \simeq \Delta\Sigma/\Sigma$, 注入效率完全由隧穿结决定。也就是说, 在隧穿注入中, 注入效率由铁磁体、隧穿结和半导体中电阻最大的一个环节决定。

因此, 在增加了隧穿结之后, 就可以通过调节隧穿结的电阻来消除铁磁金属和半导体之间的自旋不匹配, 从而实现效率比较高的自旋注入。Alvarado 和 Renaud 使用铁磁性材料做隧道扫描显微镜的探头扫描半导体表面, 他们发现通过真空隧穿可以高效的把自旋极化载流子注入到半导体中去[118]。同样的, 我们可以预计使用铁磁性电极的金属-绝缘体-半导体隧穿二极管或者金属-半导体 Schottky 势垒二极管将会实现高效的自旋注入。Motsnyi 等人最近报导他们利用结构为 FeCo/AlO/(Al,Ga)As/GaAs 的铁磁金属-绝缘体-半导体隧穿结实现了室温下 11% 的注入效率[119, 120]。目前还有很多人在研究如何在半导体表面长出界面清晰并且有高质量的 Schottky 的铁磁性薄膜, 比如在 GaAs 表面上生长出 Fe 或者 FeO[121, 122]。Zhu 等人报导他们使用这类 Fe-GaAs Schottky 二极管在室温下的注入效率可以达到 2%[122]。

2.6.3 在半导体产生自旋极化的其它办法

除了隧穿注入之外, 还可以利用弹道注入的办法来提高自旋注入效率。在弹道注入 (即注入过程不受到散射) 中, 由于铁磁性电极的导带中两个自旋子带之间和半导体导带之间存在差异, 不同自旋的电子的在界面处发射率和透射率不相同[123, 124], 并且由于当电子注入到半导体中之后再次被发射回铁磁性电极的可能性很小。为了要提

高自旋注入效率，可以在铁磁性电极和半导体之间做出一个三维的弹道点接触即可。Upadhyay 的实验展示了这种弹道点接触可以把自旋极化高达 40 % 的电流从铁磁金属注入到非铁磁金属中[125, 126]。

热电子注入也是目前人们研究的一种自旋注入方法。这种方法把能量远高于 Fermi 面的热电子通过隧穿注入到铁磁层中[127, 128, 129]，由于多数载流子和少数载流子在铁磁层中受到非弹性散射的几率不同，它们的自由程相差很多，热电子在经过几倍于少数载流子的自由程（比如 3 个纳米）之后，电流的自旋极化就可以高达 90 % [129]。这个电流继续流动通过一个金属-半导体界面，由于界面作用，只有一部分热电子可以透射到半导体中，这个透射率由金属和半导体之间的能带结构的差异决定。如果在界面上没有受到自旋翻转散射，这种进入到半导体中的弹道电流仍然保持了高度的自旋极化率 ($> 90\%$)。虽然利用这种注入方式注入到半导体中的载流子具有很高的自旋极化率，但是它的最大缺点是总的注入效率太低，大部分载流子并不能进入到半导体中。

除了从外加注入自旋极化了的电流之外，Johnson 等人还提出利用量子阱 [130, 131, 132, 133] 或者量子线 [134] 中的 Rashba 效应 [60] 来自动地产生自旋极化电流。其原理是在这类系统中由于晶格形变或者受到张力作用导致了两种自旋载流子之间的不对称，其结果相当于给电子施加了一个大小和方向都与其运动速度有关的磁场。因此电子在定向流动形成电流时会感受到一个净的磁场作用，从而产生自旋极化的电流。不过实验上并没有很明显的观测到这一现象。

2.7 自旋探测和自旋输运的实验研究

自旋探测是和自旋注入相反的过程，它是从半导体收集有关载流子自旋的信息。原则上用来在半导体中产生自旋极化载流子的方法和技术都可以反过来用以自旋探测。

最直接的自旋探测方法莫过于使用如图 2.6 所示的自旋阀设备来探测。这种设备利用半导体与铁磁材料界面处的输运性质和自旋取向有关的特点来进行自旋探测。在这种设备的两端是铁磁电极，中间是顺磁性半导体，自旋极化电流从一边电极（源极）注入，流过半导体之后进入另外一个铁磁电极（漏极）。如果电流的自旋极化经过半导体到达漏极时还能够维持的话，漏极的磁矩取向将对电流有影响：电流的极化方向和漏极磁矩方向相同时，电流较大；反之则较小。也就是说，两个铁磁电极的磁矩取向相同和相反时的电阻不同。通过测量两种磁矩的取向之间的电阻差就可以测出自旋极化强度。实验上有关实现这种设备的最初方案也是利用欧姆接触来实现对半导体中

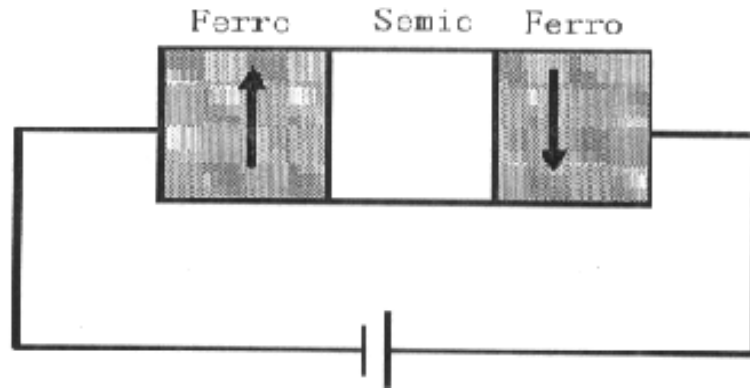


图 2.6: 自旋阀结构

的自旋极化的测量，不过这种方案面临着和利用欧姆接触实现注入同样的困难。和提高自旋注入效率类似，使用隧穿结或者弹道结也可以提高自旋探测效率。当然为了提高信噪比，这类隧穿结必须做得非常之薄才能使之能够高效地收集半导体自旋信息，以免在半导体—铁磁电极界面上损耗的自旋极化比半导体中的自旋驰豫造成的自旋极化损耗还大[117]。

到目前为止，这种用电学手段来注入和测量自旋极化的效率都很低；而光学方法除了被用来高效的产生自旋极化载流子、研究空间均匀的体系中的自旋去相位过程之外，也被广泛的用于探测自旋信息以及研究自旋输运。传统的通过测量带边发光的偏振度以及测量 Faraday 旋转角获得载流子自旋极化信息的办法都被用以研究自旋输运问题。

2.7.1 测量带边发光偏振度的自旋探测方法

图 2.7 所示的是 Ohno 等人用来测量自旋输运的实验设备图 [115]，这是一个典型的通过测量带边发光的偏振度来进行自旋探测的装置 [115, 114, 135, 116, 119, 120]。最上面一层是掺 Mn 的 p 型 GaAs 半导体，这种材料是强顺磁性半导体，在磁场 H 的作用下，MnGaAs 产生自旋极化。在电场作用下，MnGaAs 层中自旋极化了的空穴经过 MnGaAs 和本征的 GaAs 层界面流入 GaAs 空间层 (spacer) 中，随后通过 GaAs 空间层和本征的 InGaAs 量子阱的分界面；同时无极化的电子也从底部的 n 型的 GaAs 层流入到本征的 InGaAs 量子阱中。电子和空穴在量子阱中复合，产生带边发光。由公式(2.68)或者(2.63)，通过测量带边发光的偏振度就可以得到自旋极化的载流子从 MnGaAs 层通过厚度为 d 的 GaAs 空间层之后剩余的自旋极化的大小。通过改变

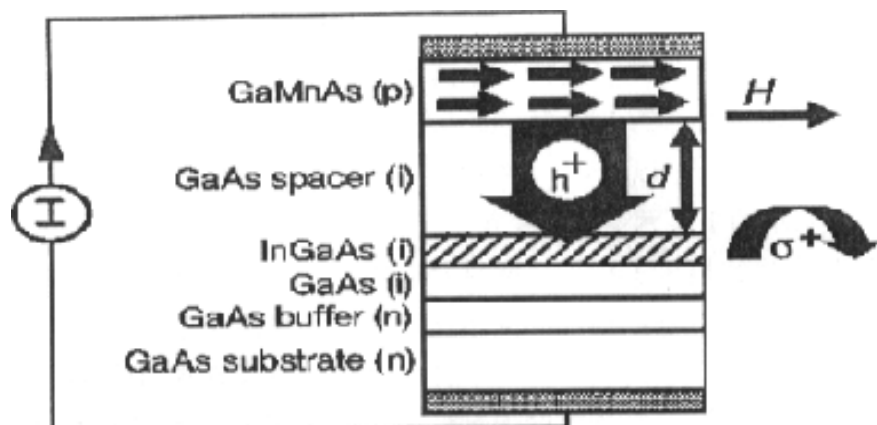


图 2.7: 用带边发光偏振度测量自旋极化的装置图[115]

GaAs 空间层的厚度 d , 就可以研究在输运过程半导体中的自旋极化随距离的变化关系。Ohno 等人报导了 d 从 20 nm 变化到 220 nm 都可以观测到带边发光具有一定的偏振度, 这意味着自旋极化的载流子在输运的过程中可以穿越不同半导体界面, 并且将其自旋极化信息的保持至少 200 nm[115]。

2.7.2 测量 Faraday 旋转角的自旋探测方法

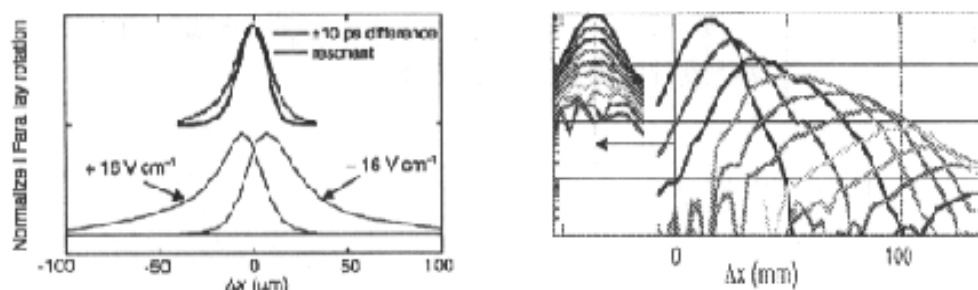


图 2.8: GaAs 体材料中输运时 Faraday 旋转角随位置的变化[38]

除了测量带边发光的偏振度得到自旋极化随输运的变化的信息之外, 另外一个光学手段——测量 Faraday 旋转角的办法也可以用来研究自旋输运。Kikkawa 和 Awschalom 等人利用圆偏振的脉冲激光激发自旋不均衡的载流子, 通过测量样品上不同位置在相同时间延迟下 Faraday 旋转角获得自旋输运中自旋极化随位置的变化关系 [38, 91]。他们对 n-型 GaAs 体材料的测量结果如图 2.8 所示。图 2.8(a) 中显示的是在间隔为 t_{ep} 的持续激发下测量得到的归一化的 Faraday 旋转角随位置的变化, 上面两

条线是在没有外加电场情况下的测量结果，其中粗实线是刚刚被激光激发产生的自旋极化的载流子包引起的 Faraday 旋转角，其半宽度为 $12\ \mu\text{m}$ ，它是通过在不同位置上测量泵浦光激发前后 $10\ \text{ps}$ 的 Faraday 旋转角之差得到的；点线是在不同位置测量的 Faraday 旋转角的结果，可以看出，由于载流子扩散，自旋极化包的宽度也相应的展宽。图 2.8(a) 中所示的下面两条实线是在 $\pm 16\ \text{V/cm}$ 电场的作用下的 Faraday 角随位置的图形，这张图清楚的显示了由于扩散以及电场作用导致的定向运动共同作用对自旋包形状的影响。和没有电场作用的结果相比，在电场作用下载流子的自旋极化信息传输的距离长达 $100\ \mu\text{m}$ ，几乎是没电场时的 3—4 倍。图 2.8(b) 中显示了自旋包随时间和位置的变化：左边是没有电场时的情况，在自旋去相位和自旋扩散的同时作用下，自旋包高度随时间不断减小，宽度也不断展宽；右边是在电场的作用下，自旋包的中心位置被电场拖动向外移动，同时包的高度也在不断减小，宽度不断变大。

2.8 自旋电子学器件设计以及自旋晶体管

在上面的几节中我们讨论了半导体中的自旋驰豫和自旋输运的问题。有关的实验表明，在半导体中自旋驰豫时间相当长，而且自旋极化信息在输运过程中可以穿越不同导体的边界并且可以保持的距离足够远。这些结果都意味着自旋电子学器件是有可能实现的，尽管还有不少问题需要加以解决。而有关自旋电子学器件设计的研究也早在 1990 年就开始了[40]，随着研究的深入，人们提出越来越多的自旋电子学器件设计的方案。在这一节中我们就这些设计方案加以简要的介绍。

2.8.1 Datta-Das 晶体管

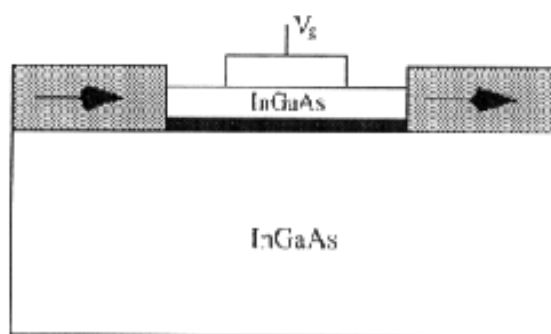


图 2.9: Datta-Das 晶体管

第二章 自旋电子学的基本概念

Datta-Das 晶体管是 Datta 和 Das 于 1990 年提出的一种基于高电子迁移率晶体管结构 (HEMT) 的自旋晶体管设计方案, 这是最早的一种有关自旋电子学器件的设计方案 [40]。其结构如图 2.9 所示, 两端是铁磁的源极和漏极, 中间是一层 InGaAs 薄层, 其中的电子可以看出是准二维电子气。在加上电压之后, 自旋极化方向为 \hat{x} 电流从源极进入 InGaAs 层后从漏极流出。在 InGaAs 层上有一个门电极, 可以施加门电压 V_g , 产生一个偏置电场 E_z 。如果把偏置电压 E_z 看成和形变势等效[136, 137], 从公式 (2.3) 和 (4.5) 可知, 由于 Rashba 效应, 在偏置电场 E_z 作用下, 波矢为 k 的电子将感受到一个等效的磁场 $B = \alpha E_z \times k$ 。在准一维的时候, 等效磁场在 \hat{y} 方向上, 自旋极化沿 \hat{x} 方向的分量为 $P(x) = P_0 \cos(E_z x / V_R)$, 其中 $V_R = g / (m^* \alpha)$ 是和能带结构有关的参数, 大约为几个伏特。因此在一维情况下, 磁矩是有这么门电压来控制的, 可以通过改变门电压的大小改变自旋的取向。由于是操纵电子自旋取向的所需要的能量要比操纵电荷需要的能量要小很多, 并且速度也要比操纵电荷快很多, 因此这些器件的性能要比传统的场效应管优越得多。不过在二维情况下, 不同波矢的电子感受到的等效磁场方向和大小不定, 在输运过程中, 电子自旋要绕这个等效磁场进动。由于散射, 电子波矢会无规的变化, 因此其进动的频率和大小也不断无规改变, 从而导致载流子在经过一段距离的输运之后自旋极化信息消失。Bournel 等人用 Monte-Carlo 方法模拟了不同阱宽下的量子阱中载流子的运动, 详细的研究了自旋极化载流子在量子阱中的输运[138]。他们发现在不加限制的量子阱中, 自旋极化很快的就消失了。不过如果在量子阱的横向上施加了一个很大的约束, 使得准二维情况变成准一维情况那么电子的极化可以一直保持下去。Bournel 等人的模拟结果表明 Datta-Das 晶体管在准一维情况下是有可能实现的。

首先尝试实现 Datta-Das 晶体管设想的是 Cabbibo 等人[139]。他们使用 GaAs/AlGaAs 以及 InGaAs/AlInAs 异质结与溅射沉积的铁电极相连。这两种异质结都是 n 型掺杂的, 掺杂浓度约为 $3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, 在 77 K 时, 它们的迁移率超过 $10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 。尽管他们用原子力和扫描电子显微镜详细记录了每一个实验步骤, 但结果仍令人失望: 由 GaAs 构造的 HEMT 在电压低于 1V 时是绝缘的, 而 InGaAs 构成 HEMT 则呈现很强的非线性伏安特性。人们猜测这些负面结果可能与肖特基势垒结构以及铁的溅射引起的缺陷对载流子的俘获有关。Meier 和 Matsuyama 研究了沉积在 p 型掺杂的 InAs 上的坡莫合金电极的微观磁性特征, 他们是最早尝试利用 InAs 可以和金属形成欧姆接触的特性来使用 InAs 建构自旋晶体管的[140]。Gardelis 等人则是把掺杂浓度为 $6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 、低温迁移率为 $5 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 的 n-型 InAs 量子阱与坡莫合金相接触构造出一个自旋阀。通过形状的各向异性在坡莫合金电极中造成了不同的矫顽场, 从而在电极上产生磁性。Gardelis 等人报导在温度为 0.3 K 时, 通过在平行于二维电子气平面上施加

大小约为坡莫合金电极的矫顽场的磁场，他们观测到大小为 0.1 % 的磁阻。而在温度升高到 10 K 时这个磁阻消失。尽管 Gardelis 等人认为这种小磁阻是由于两个自旋阀效应引起的，即：坡莫合金附近的界面效应以及载流子在两个电极之间的运动而产生的效应。不过由于这个磁阻太小，因此并不能完全肯定这个磁阻就是他们所谓的双自旋阀效应导致的，其它一些可能导致这个小磁阻的效应——比方说由铁磁电极引起的诱导霍尔电压——是无法排除的。

总而言之，人们已经提出用门电压控制自旋方向的晶体管的设计方案，虽然到目前为止这种装置在实验上还没有实现。目前世界上有很多小组开始尝试用磁性电极来制作 HEMT，以期实现 Datta-Das 晶体管。

2.8.2 Johnson 晶体管

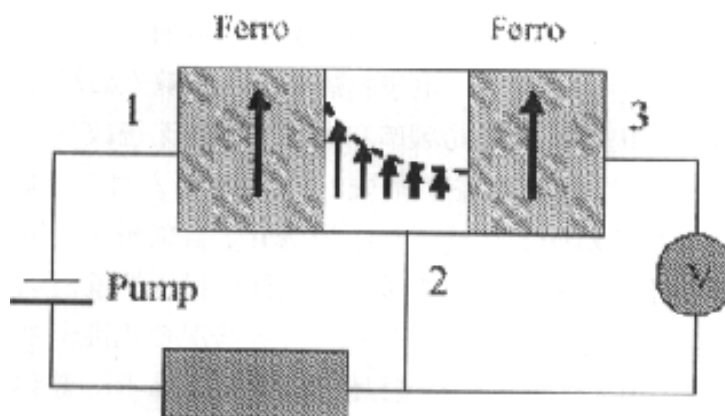


图 2.10: Johnson 晶体管

如图 2.10 所示，Johnson 晶体管[41, 42, 43]与图 2.6 所示的自旋阀结构有点类似，只是将中间的顺磁性层再接上一个电极。按照和普通的三极管同样的叫法，可以类似地把 Johnson 晶体管两边的铁磁电极分别称为发射极和集电极，中间的电极称为基极。和三极管一样，这种设备可以有多种不同的配置和使用方法。图 2.10 画出的使用这种设备作为自旋过滤器的配置。在这种配置中，我们让集电极悬空，而用一个高阻抗的伏特计来测量集电极上的电压；同时在发射极和基极回路上通上电流。这个电流导致在基极上产生自旋积聚。由于集电极悬空，在静态时基极和集电极之间没有电流通过，因此基极和集电极之间的电势是平衡的。在极端情况下，假设集电极是自旋极化非常高的材料——比如说是半金属——制作而成的，集电极就只有一种自旋取向的电子，因此集电极的电势就和基极中与它自旋取向相同的电子的电势

势一样。如果在基极上存在自旋积聚，自旋向上和向下电子之间的电势就不相同[102]。这样集电极上的电压高低就取决于它的磁矩是平行于还是反平行于发射极上的磁矩。改变发射极和集电极之间相对的自旋取向就可以改变集电极上的电压。

和普通三极管一样，Johnson 晶体管中集电极的电学性质可以通过调整发射极和基极来控制。此外，还可以通过一个外加的磁场改变集电极的自旋取向来调节集电极的电学性质。因此相对于普通三极管，Johnson 晶体管引进了自旋的自由度，从而增加了控制设备的渠道。

2.8.3 Monsma 晶体管

尽管 Johnson 晶体管展示了自旋晶体管多种用途，但在 Johnson 晶体管设计上存在一个基本问题，即由于它的所有构成成分都是金属的，因此其操作都是线性的，如果没有附加其它的电极或变压器，它的电压改变很小并且没有功放功能。这使得在实际应用中 Johnson 晶体管受到很大的限制。下面我们介绍另外一种晶体管——Monsma 晶体管——可以克服 Johnson 晶体管的缺点。

Monsma 晶体管[44, 45, 46]的主要结构如图 2.11(a) 所示，它把传统的自旋阀结构——巨磁阻多层膜——作为基极夹在分别作为发射极和集电极的两层硅之间，并在这两层硅和中间的自旋阀结构上都接出电极。实际应用中的自旋阀结构自然要比图 2.11(a) 所示的复杂的多，是由多重磁性/非磁性金属层组成的，不过其工作原理都是相同的。在硅和金属的分界面处形成 Schottky 势垒，这些势垒可以吸收加在电极之间的偏压。集电极 Schottky 势垒的偏压向后，而发射极 Schottky 势垒的偏压向前，这些势垒的高度一般大约为 0.6—0.7 eV。当电子在发射极中受到电场加速进入到基极时电子就变成能量大约要高于基极 Fermi 能 1 eV 左右的热电子。如 2.6.3 节中讨论的热电子自旋注入那样，这些进入到基极的载流子在巨磁阻多层膜中将受到非弹性散射而损失能量。如果这些巨磁阻多层膜中的铁磁材料是反铁磁序的话，那么两种自旋取向的电子在向集电极运动中都将受到强烈的散射，能够运动到集电极并且保留有足以克服基极和集电极之间的 Schottky 势垒的能量的电子数目 $n(x)$ 随距离的按照图 2.11(b) 所示的粗曲线做指数衰减，衰减强度为 λ_1 ；如果外加了一个磁场使得巨磁阻多层膜之间变成铁磁序，那么只有一种自旋取向的电子会受到强烈的散射，另外一种自旋取向的电子受到散射比较弱， $n(x)$ 随距离的衰减强度 λ_2 要小于 λ_1 。因此在此外磁场作用下，通过集电极的电流要比没有此磁场的电流要大。也就是说和 Johnson 晶体管一样，人们可以通过外磁场调节 Monsma 晶体管的电学性质。不过在 Monsma 晶体管中，电流改变的大小以及对磁场的灵敏度都远较 Johnson 晶体管来得高。比如 Monsma 等人报导了他们

制作出使用由四层的 [Cu(2 nm)/Co(1.5nm)] 组成的巨磁阻多层膜为基极的 Monsma 晶体管，在温度为 77 K，发射极和基极之间的电流为 100 mA 时，施加了和多层膜矫顽场相同大小的磁场前后电流从 $0.1 \mu\text{A}$ 变化到 $0.5 \mu\text{A}$ 。换一句话说，他们通过外加了两个半导体电极得到的磁电流改变率达到了 400%。与之相比较的是对于一般的 [Cu/Co] 多层膜面内的磁阻只有 3%[46]。因此 Monsma 晶体管很有可能可以用在实际的设备上。

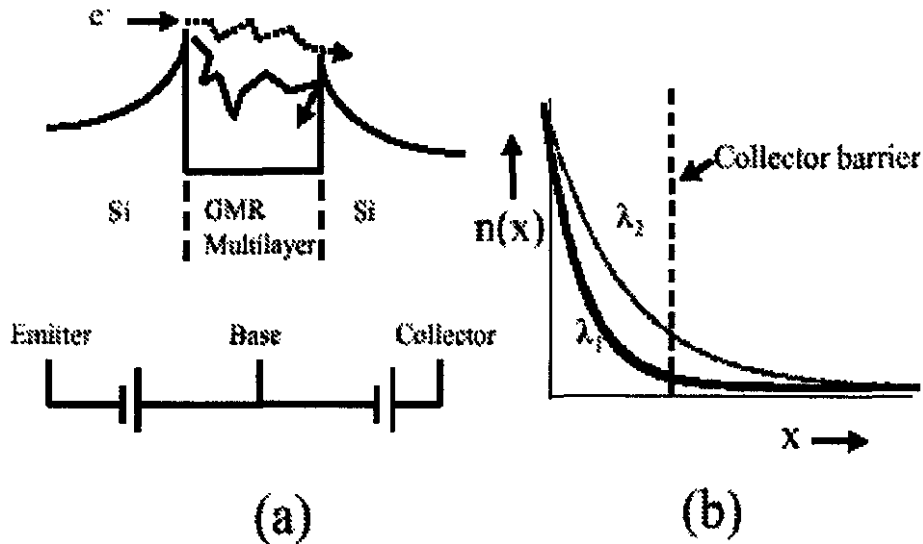


图 2.11: (a)Monsma晶体管：把传统的半导体与铁磁金属物质相结合。(b)两种自旋的平均能量作为距离的函数的变化情况，粗线代表的是两种自旋在反铁磁排列的磁层中的曲线(都发生强烈的散射)，细线代表的是在铁磁排列的磁层中的曲线（只有一种发生强烈的散射）。

Monsma 晶体管的设计方案的提出是自旋电子学器件设计发展过程中的重要的一步，它第一次将自旋非对称物质与半导体结合在一起。不过在 Monsma 晶体管中，半导体的作用仅仅只是用来产生势垒以把电场屏蔽于设备中和自旋有关的部分之外。为了完全发挥半导体自旋电子学的潜在功能，我们还需要研究、制造出一些能够利用半导体本身的和自旋输运有关的性质的器件。

2.8.4 自旋极化电流注入发射极 (SPICE) 晶体管

传统的三极管能够实现电流增益的部分原因是基极两边的结吸收了偏置电压因而把电场屏蔽在基极之外，基极内部只有很小的电场。流经基极的电流主要是依靠基极两边的载流子浓度梯度驱动的，只有很少一部分是由电场引起的。从发射极注入的电子在

第二章 自旋电子学的基本概念

基极中向集电极扩散，在基极和集电极边缘，由于基极和集电极之间的电势差，大部分载流子从集电极流出，只有少部分载流子由于扩散的无规性从基极流出。因此集电极电流 I_C 远大于基极电流 I_B ，电流增益 $\beta = I_C/I_B$ 就非常大。

把自旋极化的电流输运集成到上面所说的半导体三极管中去就可以得到一个新的自旋电子学器件的设计方案——自旋极化电流注入发射极（Spin Polarized Injection Current Emitter—SPICE）晶体管。Gregg 等人最早提出 SPICE 的概念 [49, 50]，在他们的设计中，SPICE 晶体管的构造和传统的三极管相近，不过在基极和集电极之间加上一个低矫顽场的软铁磁性材料，其磁矩方向可以通过外磁场加以调节；而在发射极和基极之间加上一个硬磁性材料薄层。从发射极注入的电流通过硬磁性层的过滤产生自旋极化，然后在基极中扩散到基极和集电极之间的软磁性材料层。显然，能够通过这一层的载流子数目和载流子和这个薄层之间的相对自旋取向有关。因此这个晶体管从整体上看是一个具有比较好的功放能力的晶体管，同时它的功放参数又可以通过外磁场来加以控制的。这种晶体管的最初的设计原型显示出一定的鼓舞人心的性质。不过由于界面散射以及我们前面提到的迁移率不匹配的物质之间的自旋注入效率很低等原因，这个晶体管对自旋的依赖性并不太强[50]。

最初的 SPICE 晶体管中铁磁层是在直接插在掺杂的硅做的基极的，这样会在界面上形成金属的硅化物，减低器件的性能。这些缺点可以通过改变设计以及在发射极和基极之间插入一个薄的隧穿势垒（比如 $p-n$ 结，Schottky 势垒，或者自旋隧穿结）来解决，这样安排之后可以减少硅化物的形成，同时也可以克服直接的欧姆注入效率低下的困难。利用这种隧穿结改造之后的 SPICE 晶体管变种的初步结果比较令人满意的[12]，不过要对这个设备进行优化以及更好的认识这个设备的行为还有大量的工作要做。特别要指出的是，由于在这个纯粹的依靠半导体本身的自旋输运的器件来说，自旋在半导体中的扩散长度对设计和认识 SPICE 晶体管结构是十分重要的。各种条件比如杂质和掺杂浓度，温度对自旋扩散长度的影响在器件设计中都是需要加以考虑的。

第三章

用动力学定理研究自旋相干的方法及其 结果综述

在2.3讨论的三种自旋去相位机制或者是自旋翻转项散射或者被当成自旋翻转散射处理，而自旋守恒散射，比如通常意义的 Coulomb 散射、电声子散射、电子-非磁性杂质散射都不会导致自旋去相位。这些自旋去相位机制都是建立在单粒子近似上的，通过 Fermi 黄金规则计算出其自旋驰豫时间。在目前已有的有限的测量自旋去相位时间的实验结果中，有些可以用这些理论来解释；而另外一些实验现象则和理论不符合，特别是在 n -型材料中，理论和实验有很大的定量或者定性的差别。此外对这些机制的讨论都只局限于平衡态附近，得到的大多是定性的结果，而且对不同条件下的性质也没有加以充分的研究。更为重要的是，这些机制都是单体近似的结果，完全忽略了多体效应。而根据 Wu 提出的理论，多体效应导致的非均匀扩展 (Inhomogeneous Broadening) 和自旋守恒散射结合也可以产生自旋去相位[141, 142, 143, 144, 145, 146]。

Wu 首先提出了一个动力学理论来描述在本征的 $\text{ZnSe}/\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ 量子阱中的自旋演化[141]。在这个系统中外加了一个按照 Voigt 配置的磁场。非平衡的电子、空穴等离子气由圆偏振的激光产生。基于四自旋子带（两个自旋分别为 $\pm\frac{1}{2}$ 导带以及两个自旋为 $\pm\frac{3}{2}$ 的重空穴带）模型，Wu 等人建立了一套动力学 Bloch 方程并通过解这个 Bloch 方程自洽地计算了在屏蔽 Coulomb 散射和电子-空穴交换作用下导致的光学退相干以及自旋驰豫。随后 Wu 等人把这个理论推广到 n 型体 GaAs[142] 和 GaAs [110] 量子阱系统中[143]，研究了由 DP 效应导致的自旋 dephasing。他们计算表明，在考虑了多体效应之后，可以得到很多不同于单粒子近似的结果。

下面我们简要回顾一下用动力学定理研究自旋相干和自旋去相位的方法和结果[141, 142, 143, 144, 145, 146]。

3.1 四自旋子带模型

Wu 和 Metiu 首先使用动力学 Bloch 方程研究在 $\text{ZnSe}/\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ 量子阱中的光学和自旋相干[141, 145]。

量子阱沿 z 方向生长，在 x 方向上施加一个中等大小的磁场 B 。由于量子阱中的张力和束缚势的作用，轻重两个空穴带发生很大的能级分裂[147, 148]，重空穴子带的能量最高，在一般情况下只有重空穴带有空穴占据。这种张力和束缚势的作用同时也引起空穴的自旋自由度发生二维量子化，使得在外加磁场中重空穴的两个自旋相反的子带之间的能级分裂只与磁场的 z 分量 B_z 有关，而不象在通常的系统中是正比于总磁场大小的[147, 148, 149]。Martin 等人证明了在外加磁场下轻重两个空穴子带的能级等价于一个自旋 $S = \frac{3}{2}$ 的离子在四方对称的环境中的能级：

$$H = g\mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} + \frac{\Delta E}{2} [S_z^2 - S(S+1)], \quad (3.1)$$

其中 ΔE 为轻重两个空穴子带之间由于张力和束缚势引起的能级分裂 [148]。

由于轻重两个空穴子带之间有很大的能级分裂，可以通过适当选择泵浦光的频率，使得只有重空穴带上的电子能够被激发到导带上。基于这种考虑，Wu 等人使用只考虑导带和重空穴价带的四子带模型来讨论量子阱中的光激发以及光学和自旋去相位问题。如图 3.1 所示，按照自旋取向的不同，导带和价带都可以分为两个子带，其自旋在 z 轴分量分别为 $\pm\frac{1}{2}$ 和 $\pm\frac{3}{2}$ 。在磁场和激光作用下，并考虑到方程 (3.1)，系统的 Hamiltonian 为：

$$H = \sum_{\mu k \sigma} \varepsilon_{\mu k} C_{\mu k \sigma}^\dagger C_{\mu k \sigma} + H_B + H_E + H_I \quad (3.2)$$

其中 $\mu = c$ 或者 v ，分别代表价带和导带。 $\varepsilon_{c k \sigma}(\varepsilon_{v k})$ 则是导带（价带）中动量为 k 的电子能量。 $\varepsilon_{c k} = E_g/2 + k^2/2m_e \equiv E_g/2 + \varepsilon_{e k}$ ， $\varepsilon_{v k} = -E_g/2 - k^2/2m_h \equiv -E_g/2 - \varepsilon_{h k}$ ，其中 m_h 和 m_e 表示重空穴和电子的有效质量。 E_g 为带隙， σ 为自旋指标，对导带电子 $\sigma = \pm\frac{1}{2}$ 而对价带电子 $\sigma = \pm\frac{3}{2}$ 。

H_B 表示磁场的作用。在不考虑 DP 效应时，它等于

$$H_B = g\mu_B \mathbf{B} \cdot \sum_{\mu k \sigma \sigma'} (\mathbf{S}_\mu)_{\sigma \sigma'} C_{\mu k \sigma}^\dagger C_{\mu k \sigma'}, \quad (3.3)$$

式中 μ_B 为 Bohr 磁矩， \mathbf{S}_μ 为子带 μ 的自旋矩阵。 H_E 表示电子—空穴于光场 $E_\sigma(t)$ 的偶极作用，其中 $\sigma = \pm$ 是光的圆偏振性。由于选择性定则，重空穴带中自旋为 $3/2(-3/2)$ 的电子只能吸收左旋光子从而被激发到自旋为 $1/2(-1/2)$ 的导带上。因此

$$H_E = -d \sum_{\mathbf{k}} [E_-(t) c_{c\mathbf{k}\frac{1}{2}}^\dagger c_{v\mathbf{k}\frac{3}{2}} + H.C.] - d \sum_{\mathbf{k}} [E_+(t) c_{c\mathbf{k}-\frac{1}{2}}^\dagger c_{v\mathbf{k}-\frac{3}{2}}]. \quad (3.4)$$

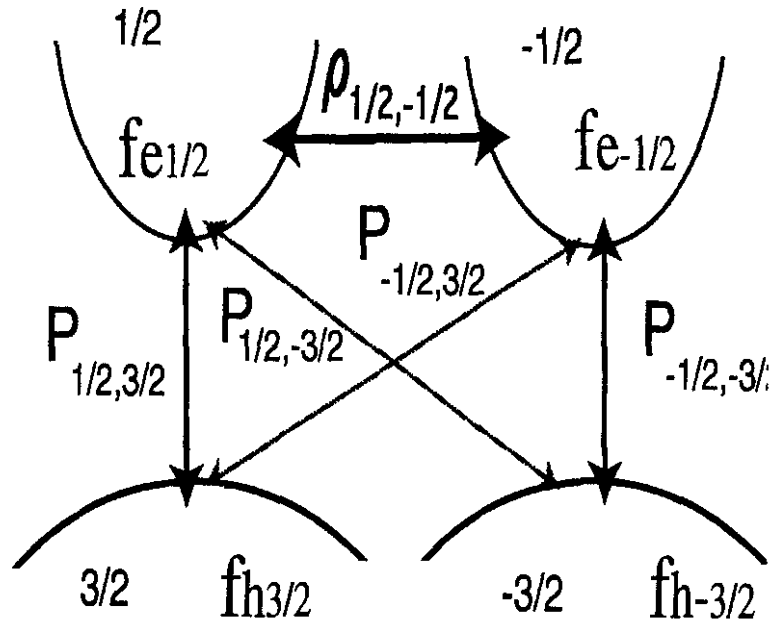


图 3.1: 四自旋子带模型

方程中 d 为光学偶极矩矩阵元。光场可以进一步写成 $E_\sigma(t) = E_\sigma^0(t) \cos(\omega t)$, 其中 ω 为光脉冲的中心频率。 $E_\sigma^0(t)$ 为宽度为 δt 的高斯脉冲 $E_\sigma^0(t) = E_\sigma^0 e^{-t^2/\delta t^2}$ 。

H_I 是相互作用 Hamiltonian, 它包括了自旋守恒散射, 比如通常意义上的 Coulomb 散射、电声子散射、电子—非磁性杂质散射。这些散射的 Hamiltonian 和总自旋对易。除此之外还有自旋翻转散射, 比如由于 BAP 效应导致的自旋翻转 Coulomb 散射以及由 EY 效应导致的自旋翻转电—声子散射、自旋翻转电子—非磁性杂质散射。

从 Hamiltonian 表达式 (3.2) 可以看出, 激光脉冲导致电子从价带跃迁到导带, 从而引入导带和价带之间的光学极化 (相干) $P_{k\frac{1}{2}\frac{3}{2}} \equiv e^{i\omega t} \langle c_{vk\frac{3}{2}}^\dagger c_{ck\frac{1}{2}} \rangle$ 和 $P_{k-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}} \equiv e^{i\omega t} \langle c_{vk-\frac{3}{2}}^\dagger c_{ck-\frac{1}{2}} \rangle$ 。同时由于磁场作用, 导带电子会从一个自旋子带跃迁到另外一个自旋子带, 从而进一步产生自旋相干 $\rho_{cck\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \equiv \langle c_{ck-\frac{1}{2}}^\dagger c_{ck\frac{1}{2}} \rangle$ 以及光学禁戒相干 $P_{k\frac{1}{2}-\frac{3}{2}} \equiv e^{i\omega t} \langle c_{vk-\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^\dagger c_{ck\frac{1}{2}} \rangle$ 和 $P_{k-\frac{1}{2}\frac{3}{2}} \equiv e^{i\omega t} \langle c_{vk\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}^\dagger \rangle$ 。由于 $(S_v^x)_{\pm\frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2}} = 0$, 因此在 Voigt 配置下磁场不能够使得重空穴带上的电子产生翻转。因此重空穴带上的自旋相干 $\rho_{vvk\frac{3}{2}-\frac{3}{2}} \equiv \langle c_{vk-\frac{3}{2}}^\dagger c_{vk\frac{3}{2}} \rangle$ 只能通过轻空穴为中介来产生。由于轻重空穴能级分裂很大, 在磁场不大的时候不足以使得轻重空穴相互转换, 因此这一项非常小, 可以忽略不计。这几种相干以及在这四个子带上的电子 / 空穴分布就是要通过动力学方程自洽求解

的。为清楚起见，我们把这些量也标在图 3.1 上。

3.2 动力学方程

应用非平衡 Green 函数方法 [150, 151]，Wu 和 Metiu 得到半导体中的 Bloch 方程：

$$\dot{\rho}_{\mu\nu k\sigma\sigma'} = \dot{\rho}_{\mu\nu k\sigma\sigma'}|_{\text{coh}} + \dot{\rho}_{\mu\nu k\sigma\sigma'}|_{\text{scatt}}. \quad (3.5)$$

这里 $\rho_{\mu\nu k\sigma\sigma'}$ 是单粒子密度矩阵。其对角项 $\rho_{\mu\mu k\sigma\sigma} = f_{\mu k\sigma}$ 是 μ 子带上动量为 k 、自旋为 σ 的分布函数。 $f_{ck\sigma} \equiv f_{ek\sigma}$ 是导带电子分布函数； $f_{vk\sigma} = 1 - f_{hk\sigma}$ 为价带电子分布，其中 $f_{hk\sigma}$ 代表重空穴的分布函数。非对角项就是上节中定义的不同子带之间的极化（相干）， $\rho_{c\nu k\sigma\sigma'} = P_{k\sigma\sigma'} e^{-i\omega t}$ 是价带—导带光学极化，下标中的第一个 σ 是电子自旋指标， $\sigma = \pm\frac{1}{2}$ ，而第二个是空穴的自旋指标， $\sigma' = \pm\frac{3}{2}$ ；而 $\rho_{cck\sigma\sigma'}$ 是自旋相干。方程右边的 $\dot{\rho}_{\mu\nu k\sigma\sigma'}|_{\text{coh}}$ 和 $\dot{\rho}_{\mu\nu k\sigma\sigma'}|_{\text{scatt}}$ 分别是相干项和散射项，它们的具体形式依赖于相互作用 Hamiltonian H_I 。通过求解方程 (3.5) 即可得到电子 / 空穴分布函数以及这些相干随时间的演化。

3.3 Faraday 旋转角和自旋去相位

前面提到了目前实验上主要是通过测量 Faraday 旋转角来测量自旋去相位 [37, 38, 39]。测量 Faraday 旋转角的实验使用两束相干的脉冲激光，第一束用来泵浦，产生自旋极化，它是传播方向为 k_1 的圆偏振光。第二束用来探测，它是传播方向为 k_2 的平面偏振光，它和泵浦光在时间上延迟 τ ，强度上也远远弱于泵浦光。泵浦光和探测光的光场可以分别写为 $E_{\text{pump}}^0(t) = E_-^0(t)$ ，以及 $E_{\text{prob}}^0(t) = E_{\text{prob},-}^0(t-\tau) + E_{\text{prob},+}^0(t-\tau) \equiv \chi[E_-^0(t-\tau) + E_+^0(t-\tau)]$ ，其中 $\chi \ll 1$ 。

Faraday 旋转角可以用下式计算[93, 95]：

$$\Theta_F(\tau) = C \sum_{\mathbf{k}} \int \text{Re} \left[\bar{P}_{\mathbf{k}\frac{1}{2}\frac{3}{2}}(t) E_{\text{prob},-}^{0*}(t-\tau) - \bar{P}_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}}(t) E_{\text{prob},+}^{0*}(t-\tau) \right] dt, \quad (3.6)$$

其中 $\bar{P}_{k\sigma\sigma'}$ 表示在探测方向（即 k_2 ）上的光学跃迁； C 是一个常数。

自旋去相位时间由 Faraday 旋转角的包络线的斜率来确定，但是求 Faraday 角需要对光学极化做多次投影 [152, 153]，需要耗费大量的计算时间。因此 Wu 等人用自旋相干的非相干和一

$$\rho(t) = \sum_{\mathbf{k}} |\rho_{cck\frac{1}{2}\frac{1}{2}}| \quad (3.7)$$

一的包络线的斜率来定义不可逆的自旋去相位时间。这类似于光学中用极化的非相干和

$$P_{\sigma\sigma}(t) = \sum_{\mathbf{k}} |P_{\mathbf{k}\sigma\sigma}(t)| \quad (3.8)$$

来定义不可逆的光学去相位[154, 150, 155]。

3.4 本征 ZnSe/Zn_{1-x}Cd_xSe 量子阱中由于 BAP 效应导致的自旋去相位

Wu 和 Metiu 首先讨论了 ZnSe 量子阱中由 BAP 效应导致的自旋去相位 [141, 145]。从 2.3.4 中的讨论我们知道，在本征半导体中电子—空穴散射很重要，自旋去相位主要是由电子—空穴之间的自旋翻转散射导致的。在半导体中电子—空穴之间的自旋翻转散射主要是 BAP 效应。Wu 同时假设在样品中没有杂质，这样就不必讨论电子—杂质散射。另外由于 ZnSe/Zn_{1-x}Cd_xSe 的带隙很宽，EY 效应不显著，由电声子散射导致的自旋去相位要远低于 BAP 效应的结果，因此相互作用 Hamiltonian 可以写成[145]：

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mu\nu \\ \mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q} \\ \sigma\sigma'}} V_{\mathbf{q}} c_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\nu\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^{\dagger} c_{\nu\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mu\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q} \\ \sigma\sigma'}} U_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'-\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\nu\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^{\dagger} c_{\nu\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (3.9)$$

上式中的第一项是自旋守恒 Coulomb 作用；第二项是由 BAP 效应导致的自旋翻转 Coulomb 散射，它描述了一个波矢为 \mathbf{k} 自旋为 $-\sigma$ 的导带电子经过散射其波矢变成 $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ 而自旋被翻转为 σ ，于此同时有一个原先波矢为 \mathbf{k}' 自旋为 σ' 价带电子波矢变成 $\mathbf{k}' - \mathbf{q}$ 而自旋保持不变的散射过程。这个散射使得电子自旋发生翻转。这种散射的矩阵元 $U_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ 可以按照文献[156]计算得到。Wu 等人还讨论了电子空穴交换自旋交换作用导致的自旋去相位[141]。这个作用是把 Coulomb 作用做相对论展开得到的，在 ZnSe 这个材料中其作用并不重要[145]。因此只要考虑 BAP 效应。

Bloch 方程(3.5)中的相干项可以写成：

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right|_{\text{coh}} &= 2\delta_{\sigma, \frac{1}{2}} \text{Im} \left\{ \left[d E_-^{0*}(t)/2 + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} P_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\frac{3}{2}}^* \right] P_{\mathbf{k}\sigma\frac{3}{2}} \right\} \\ &\quad + 2\delta_{\sigma, -\frac{1}{2}} \text{Im} \left\{ \left[d E_+^{0*}(t)/2 + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} P_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma-\frac{3}{2}}^* \right] P_{\mathbf{k}\sigma-\frac{3}{2}} \right\} \\ &\quad - 2\text{Im} \left\{ \left[g\mu_B B/2 - \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \rho_{c\mathbf{k}\mathbf{k}+\mathbf{q}-\sigma\sigma} \right] \rho_{c\mathbf{k}\sigma-\sigma} \right\}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

第三章 用动力学定理研究自旋相干的方法及其结果综述

其中 $d \operatorname{Im}[E_{\pm}^{0*}(t)P_{k\sigma\pm\frac{3}{2}}]\delta_{\sigma,\pm\frac{1}{2}}$ 是在激光脉冲作用下的激发率。如前所述, 选择定则规定了光学跃迁只能在自旋方向相同的导带和价带之间发生, 这个选择定则由 δ -函数 $\delta_{\sigma,\pm\frac{1}{2}}$ 来保证; 方程右边头两个花括号里面的其余几项由电子—空穴吸引产生的对激发光场的修正, 可以看出是对 Rabi 频率 $d E_{\pm}^0(t)$ 的局域场交换修正。第三个花括号里面的头一项是磁场引起的电子自旋翻转, 而第二项则是对 Zeeman 频率 $g\mu_B B$ 的交换修正。注意到, 如果 $\operatorname{Im}\rho_{cck\sigma-\sigma} \equiv 0$, 就不可能产生自旋翻转, 因此称 $\rho_{cck\sigma-\sigma}$ 为自旋相干。另外还有 $\rho_{cck\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = \rho_{cck-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ 。类似的, 空穴分布函数的运动中的相干项为:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f_{hk\sigma}}{\partial t} \right|_{\text{coh}} &= 2\delta_{\sigma,\frac{3}{2}} \operatorname{Im} \left\{ [d E_{-}(t)^*/2 + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} P_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\frac{1}{2}\sigma}^*] P_{\mathbf{k}\frac{1}{2}\sigma} \right\} \\ &\quad + 2\delta_{\sigma,-\frac{3}{2}} \operatorname{Im} \left\{ [d E_{+}(t)^*/2 + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} P_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\frac{1}{2}\sigma}^*] P_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}\sigma} \right\}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

空穴和电子运动方程的相干项不同在于空穴没有自旋翻转项。这还是由于 $(S_v^x)_{\pm\frac{3}{2},\pm\frac{3}{2}} = 0$, 因此磁场不能使得空穴产生自旋翻转。

带间光学极化的相干项为:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial P_{k\sigma\sigma'}}{\partial t} \right|_{\text{coh}} &= -i\delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k})P_{k\sigma\sigma'} \\ &\quad + i\delta_{\sigma,\pm\frac{1}{2}}\delta_{\sigma',\pm\frac{3}{2}} \left[d E_{\mp}(t)/2 + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} P_{\mathbf{k}+\mathbf{q}(\pm\frac{1}{2})(\pm\frac{3}{2})} \right] (1 - f_{e\mathbf{k}\pm\frac{1}{2}} - f_{h\mathbf{k}\pm\frac{3}{2}}) \\ &\quad - i\delta_{\sigma,\pm\frac{1}{2}}\delta_{\sigma',\mp\frac{3}{2}} \left[\frac{d}{2} E_{\pm}(t)\rho_{cck(\pm\frac{1}{2})(\pm\frac{1}{2})} - \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} P_{\mathbf{k}+\mathbf{q}(\pm\frac{1}{2})(\mp\frac{3}{2})} (1 - f_{e\mathbf{k}\pm\frac{1}{2}} - f_{h\mathbf{k}\mp\frac{3}{2}}) \right] \\ &\quad - i \left(g\mu_B B/2 - \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \rho_{cck+\mathbf{q}\sigma-\sigma'} \right) P_{\mathbf{k}-\sigma\sigma'} - i \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} P_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\sigma\sigma'} \rho_{cck\sigma-\sigma}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

其中第一项是极化的自由演化, 其调幅频率为

$$\delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{e\mathbf{k}} + \varepsilon_{h\mathbf{k}} - \Delta_0 - \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} (f_{e\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} + f_{h\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'}), \quad \Delta_0 = \omega - E_g. \quad (3.13)$$

公式(3.12)第二项是经过激子修正的泵浦产生率。形如 $\delta_{\sigma\pm\frac{1}{2}}\delta_{\sigma'\pm\frac{3}{2}}$ 表示 $\delta_{\sigma\frac{1}{2}}\delta_{\sigma'\frac{3}{2}}$ 或者 $\delta_{\sigma-\frac{1}{2}}\delta_{\sigma'-\frac{3}{2}}$ 。形如 $\delta_{\sigma\frac{1}{2}}\delta_{\sigma'-\frac{3}{2}}$ 的所有的交叉项由于选择定则是被禁戒的。第三项表示光场和自旋相干以及光学禁戒相干的耦合; 其中光场和光学禁戒相干的耦合是由 Coulomb 作用中的 Fock 项引起的局域修正产生的。 $-ig\mu_B B/2P_{\mathbf{k}-\sigma\sigma}$ 是由于磁场作用导致的光学相干和光学禁戒相干之间的耦合。(3.12) 中其它的项是 Coulomb 作用对 Zeeman 频率的 Hartree-Fock 修正。而自旋相干的时间演化的相干部分为:

$$\left. \frac{\partial \rho_{cck\sigma-\sigma}}{\partial t} \right|_{\text{coh}} = i \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} (f_{e\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - f_{e\mathbf{k}+\mathbf{q}-\sigma}) \rho_{cck\sigma-\sigma}$$

第三章 用动力学定理研究自旋相干的方法及其结果综述

$$\begin{aligned}
 & +i\delta_{\sigma\pm\frac{1}{2}} \left[d E_{\mp}(t)/2 + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} P_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma\pm\frac{3}{2}} \right] P_{\mathbf{k}-\sigma\pm\frac{3}{2}}^* \\
 & -i\delta_{\sigma\pm\frac{1}{2}} \left[d E_{\mp}^*(t)/2 + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} P_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\sigma\pm\frac{3}{2}}^* \right] P_{\mathbf{k}\sigma\pm\frac{3}{2}} \\
 & +i \left(g\mu_B B/2 - \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \rho_{cck+\mathbf{q}\sigma-\sigma} \right) (f_{ek\sigma} - f_{ek-\sigma}), \quad (3.14)
 \end{aligned}$$

其中第一项是Coulomb作用的Hartree项对自旋相干的贡献。从方程(3.10)和(4.36)可以看出, 自旋相干导致了电子在自旋向上和向下两个子带之间振荡, 同时这两个子带之间的粒子数分布不平衡也会产生自旋相干。另外从方程(4.36)也可以看到泵浦脉冲也会产生自旋相干, 不过由于是通过和禁戒跃迁之间的耦合实现的, 比起磁场的效果, 其作用可以忽略不计。

电子、空穴以及光学相干的散射项的具体表达式可以参看文献[145], 这里只写出散射对自旋相干的表达式。自旋守恒 Coulomb 散射对自旋相干散射的贡献为:

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{\partial \rho_{cck\sigma-\sigma}}{\partial t} \right|_{\text{scat}}^{\text{Coul}} &= \left\{ - \sum_{\substack{j=e,h \\ \mathbf{q}\mathbf{k}'\sigma'}} V_{\mathbf{q}}^2 2\pi \delta(\varepsilon_{ek-\mathbf{q}} - \varepsilon_{ek} + \varepsilon_{jk'} - \varepsilon_{jk'-\mathbf{q}}) \right. \\
 & \left[(f_{ek-\mathbf{q}\sigma} \rho_{cck\sigma-\sigma} + \rho_{cck-\mathbf{q}\sigma-\sigma} f_{ek-\sigma} + \sum_{\sigma''} P_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma\sigma''} P_{\mathbf{k}-\sigma-\sigma''}^*) (f_{jk'\sigma'} - f_{jk'-\mathbf{q}\sigma'}) \right. \\
 & + \rho_{cck\sigma-\sigma} ((1 - f_{jk'\sigma'}) f_{jk'-\mathbf{q}\sigma'} - \sum_{\sigma''} P_{\mathbf{k}'\sigma'\sigma''} P_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'\sigma''}^* - \delta_{j=e} \rho_{cck'\sigma'-\sigma'} \rho_{cck'-\mathbf{q}-\sigma'\sigma'}) \\
 & \left. \left. + \rho_{cck\sigma-\sigma} ((1 - f_{jk'\sigma'}) f_{jk'-\mathbf{q}\sigma'} - \sum_{\sigma''} P_{\mathbf{k}'\sigma'\sigma''} P_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'\sigma''}^* - \delta_{j=e} \rho_{cck'\sigma'-\sigma'} \rho_{cck'-\mathbf{q}-\sigma'\sigma'}) \right] \right\} \\
 & - \{ \mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k}' \leftrightarrow \mathbf{k}' - \mathbf{q} \}. \quad (3.15)
 \end{aligned}$$

不难证明,

$$\sum_{\mathbf{k}} \left. \frac{\partial \rho_{cck\sigma-\sigma}}{\partial t} \right|_{\text{scat}}^{\text{Coul}} = 0 \quad (3.16)$$

这表明自旋守恒 Coulomb 散射对自旋去相位没有贡献。自旋相干由于 BAP 效应导致的自旋翻转 Coulomb 散射的表达式为

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{\partial \rho_{cck\sigma-\sigma}}{\partial t} \right|_{\text{scat}}^{\text{BAP}} &= - \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}'\sigma'} |U_{\mathbf{k}',\mathbf{k}-\mathbf{q}}|^2 2\pi \delta(\varepsilon_{ek} - \varepsilon_{ek-\mathbf{q}} + \varepsilon_{hk'} - \varepsilon_{hk'-\mathbf{q}}) \\
 & \left[(1 - f_{ek-\mathbf{q}\sigma}) f_{hk'-\sigma} (1 - f_{hk'-\mathbf{q}\sigma}) + f_{ek-\mathbf{q}\sigma} (1 - f_{hk'-\sigma}) f_{hk'-\mathbf{q}\sigma} \right. \\
 & \left. + f_{ek-\mathbf{q}\sigma} (1 - f_{hk'\sigma}) f_{hk'-\mathbf{q}\sigma} + (1 - f_{ek-\mathbf{q}\sigma}) f_{hk'\sigma} (1 - f_{hk'-\mathbf{q}\sigma}) \right] \rho_{cck\sigma-\sigma}. \quad (3.17)
 \end{aligned}$$

从这个方程可以看到 $\sum_{\mathbf{k}} \left. \frac{\partial \rho_{cck\sigma-\sigma}}{\partial t} \right|_{\text{scat}}^{\text{BAP}} \neq 0$, 因此这一项对自旋自旋翻转有贡献。

第三章 用动力学定理研究自旋相干的方法及其结果综述

动力学方法得到的结果也可以回到前人常用的用 Fermi 黄金规则得到的结果。从方程(3.17)，我们可以定义波矢为 \mathbf{k} 的电子的自旋去相位时间：

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_s(\mathbf{k})} = & \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}'\sigma'} |U_{\mathbf{k}',\mathbf{k}-\mathbf{q}}|^2 2\pi\delta(\varepsilon_{\mathbf{e}\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{e}\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{h}\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{h}\mathbf{k}'-\mathbf{q}}) \\ & [(1 - f_{\mathbf{e}\mathbf{k}-\mathbf{q}-\sigma})f_{\mathbf{h}\mathbf{k}'-\sigma}(1 - f_{\mathbf{h}\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma}) + f_{\mathbf{e}\mathbf{k}-\mathbf{q}-\sigma}(1 - f_{\mathbf{h}\mathbf{k}'-\sigma})f_{\mathbf{h}\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma} \\ & + f_{\mathbf{e}\mathbf{k}-\mathbf{q}-\sigma}(1 - f_{\mathbf{h}\mathbf{k}'\sigma})f_{\mathbf{h}\mathbf{k}'-\mathbf{q}-\sigma} + (1 - f_{\mathbf{e}\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma})f_{\mathbf{h}\mathbf{k}'\sigma}(1 - f_{\mathbf{h}\mathbf{k}'-\mathbf{q}-\sigma})], \end{aligned} \quad (3.18)$$

在这个表达式中电子和空穴的分布函数都随时间变化，必须通过解动力学方程得到。所以这个去相位时间目前还无法求出。假设泵浦光光强很弱，激发出来的自旋分布的不平衡很小，而且电子是非简并的，上式可以化为：

$$\frac{1}{2\tau_s(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}'\sigma'} |U_{\mathbf{k}',\mathbf{k}-\mathbf{q}}|^2 2\pi\delta(\varepsilon_{\mathbf{e}\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{e}\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{h}\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{h}\mathbf{k}'-\mathbf{q}}) f_{\mathbf{h}\mathbf{k}'\sigma'}(1 - f_{\mathbf{h}\mathbf{k}'-\mathbf{q}-\sigma'}). \quad (3.19)$$

比较 (2.59) 和 (3.19) 我们可以看到在上述条件下，用动力学方程方法得到的自旋驰豫时间和用 Fermi 黄金规则得到的结果是一致的。

上面得到的驰豫时间 $\tau_s(\mathbf{k})$ 是依赖于波矢的，为了得到总的自旋去相位时间，我们仍然需要把 $-\rho_{\mathbf{c}\mathbf{c}\mathbf{k}\sigma-\sigma}/\tau_s(\mathbf{k})$ 当作散射项来解动力学方程。此外，在得到 $1/\tau_s(\mathbf{k})$ 时，我们假设电子、空穴分布不随时间改变，而且电子是非简并的，当这些假设不成立时，就必须求解动力学方程来求自旋去相位时间。

Wu 等人通过数值求解动力学方程的方法详细研究了电子空穴自旋交换作用[141]和 BAP 效应[145]导致的自旋去相位。在此我们简要介绍 BAP 效应的作用。数值计算所用的物质参数列于文献[145]中。值得一提的是在计算中 Wu 等人把 Lander 因子 g 取为 1.3 而非实验上通过测量 Faraday 旋转角的频率测出 1.1[37]。图3.2是他们的一个数值计算结果，其中磁场 $B = 4$ T，由激光激发的总粒子数为 $3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。这个图说明了左旋偏振的泵浦光源在光脉冲尺度 (100fs) 内把电子从自旋向上的重空穴价带激发到自旋向上的导带上，同时引入光学相干。在 Coulomb 散射作用下，光学相干在2-3个皮秒之内就衰减为0。在磁场作用下，导带电子在自旋向上和向下两个态之间振荡，自旋相干也随之振荡。由于自旋去相位，振荡幅度不断衰减。导带中自旋向上和向下的电子数趋于平衡，而自旋相干则渐渐消失。当时间超过 20 ps 时，自旋向上和向下的导带电子数差别已经可以忽略，自旋相干也近乎为零。

另外，BAP 效应也引起 g 因子红移。从图3.2可以看到振荡周期约为 $T = 15.72$ ps。从 $2\pi/T = g_{\text{eff}}\mu_B B$ 可以求得 $g = 1.13$ ，这个数值和开始使用的 $g = 1.3$ 有一个偏移，而与实验上用 Faraday 旋转角的周期测得的有效 g 因子相近。

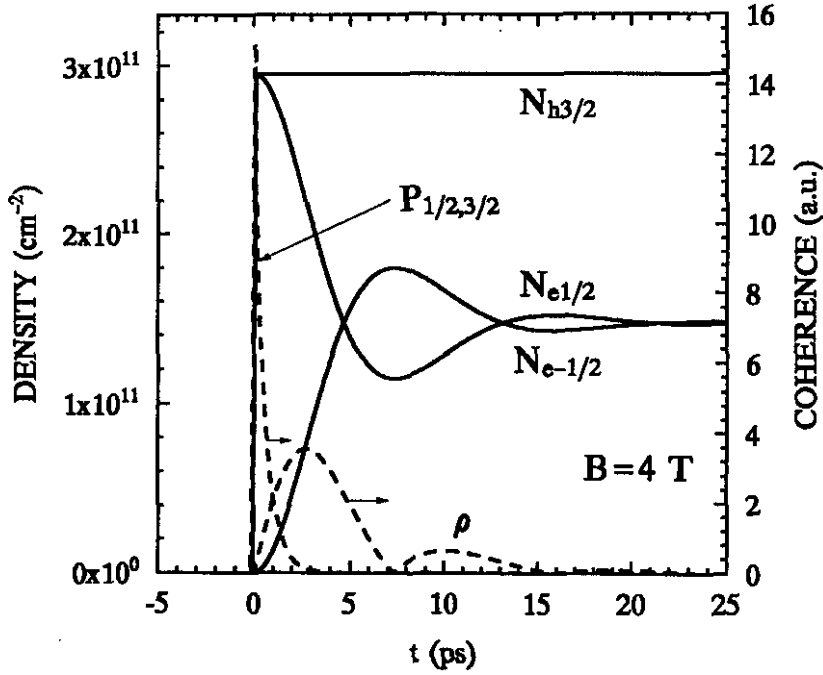


图 3.2: 磁场 $B = 4 \text{ T}$ 时, 不同自旋取向的导带电子粒子数密度 $N_{e\sigma}(t)$ 和重空穴粒子数密度 $N_{h\sigma_{3/2}}(t)$ (实线)、光学极化的非相干和 $P_{\frac{1}{2},\frac{3}{2}}$ 以及自旋相干的非相干和 $\rho(t)$ (虚线) 与时间的关系。其中各个相干的坐标轴画在图的右边。

Wu 等人也比较了动力学方程和驰豫时间近似得到的结果之间的差别。他们的结果显示于图 3.3。图中比较了用完全的散射公式计算出的自旋相干随时间演化以及用驰豫时间近似 (驰豫时间由公式 (3.19) 确定) 来描述自旋相干中的散射项的结果。结果表明, 这两种方法得到的自旋去相位速度和有效 g 因子都不同。他们进一步分析了方程 (3.19) 成立的条件, 指出了只有在电子密度非常低, 其分布接近于 Boltzmann 分布的情况下 (比如说在 p 型半导体中) 才适用。对于电子密度很高, 如 n 型半导体或者在强激光激发下的本征半导体, 必须要自洽的求解动力学方程才能得到准确结果。

3.5 自旋守恒散射导致的自旋去相位

如前所述, 人们普遍相信因为自旋守恒散射相互作用 Hamiltonian 是和总自旋算符对易的, 所以不会导致自旋去相位。这可以按如下方式证明 [144, 145]。对于自旋守恒散射有如下性质:

$$\sum_{\mathbf{k}} \left. \frac{\partial \rho_{cck\sigma\sigma'}}{\partial t} \right|_{\text{scat}} \equiv 0. \quad (3.20)$$

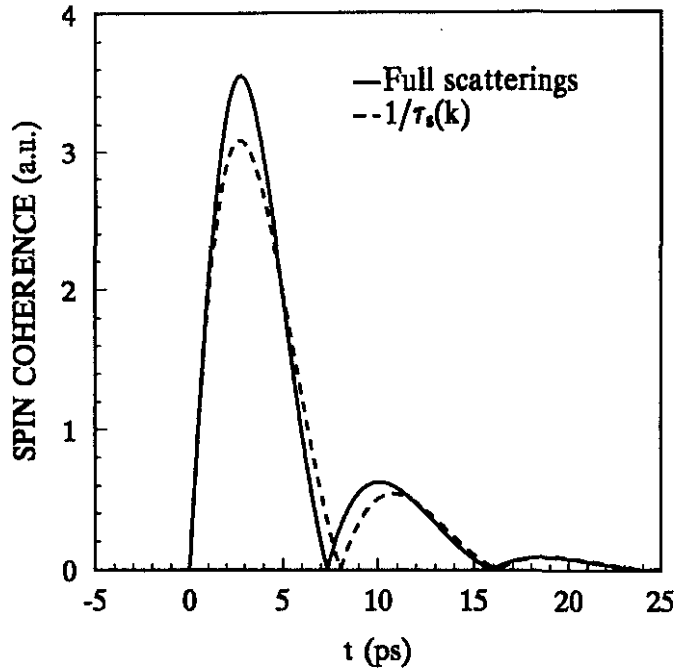


图 3.3: 自旋相干 $\rho(t)$ 随时间的演化, 实线为考虑了完整的散射自洽求解的结果; 虚线为用驰豫时间 $1/\tau_s(\mathbf{k})$ [方程(3.19)] 近似取代自旋相干中的散射的结果。

由方程 (3.5)、(3.10)、(4.36) 可知, 当时间远大于泵浦脉冲宽度时 (此时方程(3.10)和(4.36)中与 E_σ 有关的项为零), 有如下关系:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{cck\sigma-\sigma} = -(g\mu_B B)^2 \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{cck\sigma-\sigma}, \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \text{Re} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{cck\sigma-\sigma} = 0. \quad (3.22)$$

这个表达式说明了在没有自旋去相位机制的时候, 自旋相干将无衰减的振荡。不过对于光学相干的运动方程中的所有自旋守恒散射[150, 157]同样可以得到:

$$\sum_{\mathbf{k}} \left. \frac{\partial P_{\mathbf{k}\sigma\sigma'}}{\partial t} \right|_{\text{scat}} \equiv 0, \quad (3.23)$$

但是这些散射确实引起了光学去相位。Wu 等人指出了自旋去相位和光学去相位这两个问题的区别在于它们运动方程中的相干项[144, 143]。光学相干的相干项中有一项 $\delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k})$, 它是 $\epsilon_{c\mathbf{k}}$ 和 $\epsilon_{h\mathbf{k}}$ 的函数, 这一项给光学相干引入了非均匀扩展。这种导致不同光学偶极矩之间相位相消的扩展和上面所说的散射结合, 就将导致不可逆的光学去相位。而对于自旋演化的相干项, 因为不存在类似的依赖于载流子动量的项, 所以散

射本身并不引起自旋去相位。因此，为了使得自旋守恒散射能够产生不可逆的自旋散射，必须在自旋相干中引入非均匀扩展。

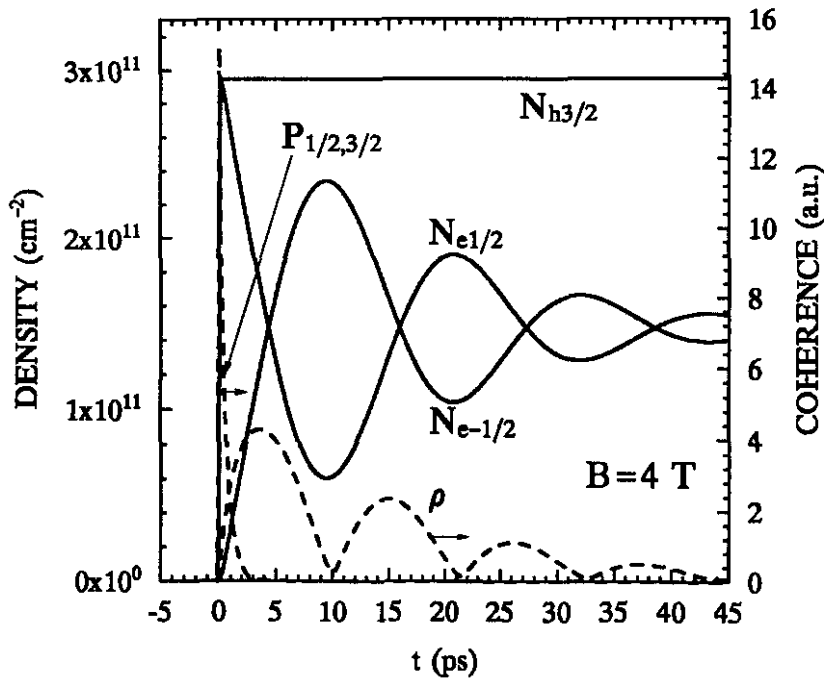


图 3.4: 磁场 $B = 4 \text{ T}$ 时, 不同自旋取向的导带电子粒子数密度 $N_{e\sigma}(t)$ 和重空穴粒子数密度 $N_{h\sigma_{3/2}}(t)$ (实线)、光学极化的非相干和 $P_{1/2,3/2}$ 以及自旋相干的非相干和 $\rho(t)$ (虚线) 与时间的关系。其中各个相干的坐标轴画在图的右边。

他们进一步指出[144] 在自旋相干中引入非均匀扩展有两种办法, 一是 DP 效应给出了一个等效磁场 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 就是 \mathbf{k} 的函数, 因而提供了一个非均匀扩展, 这个效应将在以后详细讨论; 另外一个是通过考虑依赖于能量 E 的 g 因子。实验上发现在半导体中 g 因子并不是一个常数。在 III—V 族半导体中, 其带边 g 因子的值小于自由电子的 g 因子值 (2), 当电子能量增加, g 因子向自由电子值靠近。在很小的能量范围内, 能量为 E 的电子的 g 因子可以近似的写成[158, 159, 160, 161, 162, 163, 164]

$$g(E) = \beta E + g_0. \quad (3.24)$$

这个关系就引入了自旋相干的非均匀扩展, 使得只要有散射就会引起自旋去相位, 而不一定非得是自旋翻转散射。

Wu 等人利用这个关系计算了只考虑自旋守恒 Coulomb 散射, 而不考虑其它自旋翻转散射 (比如 BAP 项等) 时的自旋去相位 [144, 145]。他们结果如图3.4所示。在这个计算中, 所用的参数和上一小节中计算 BAP 效应导致的自旋去相位问题中所用的一

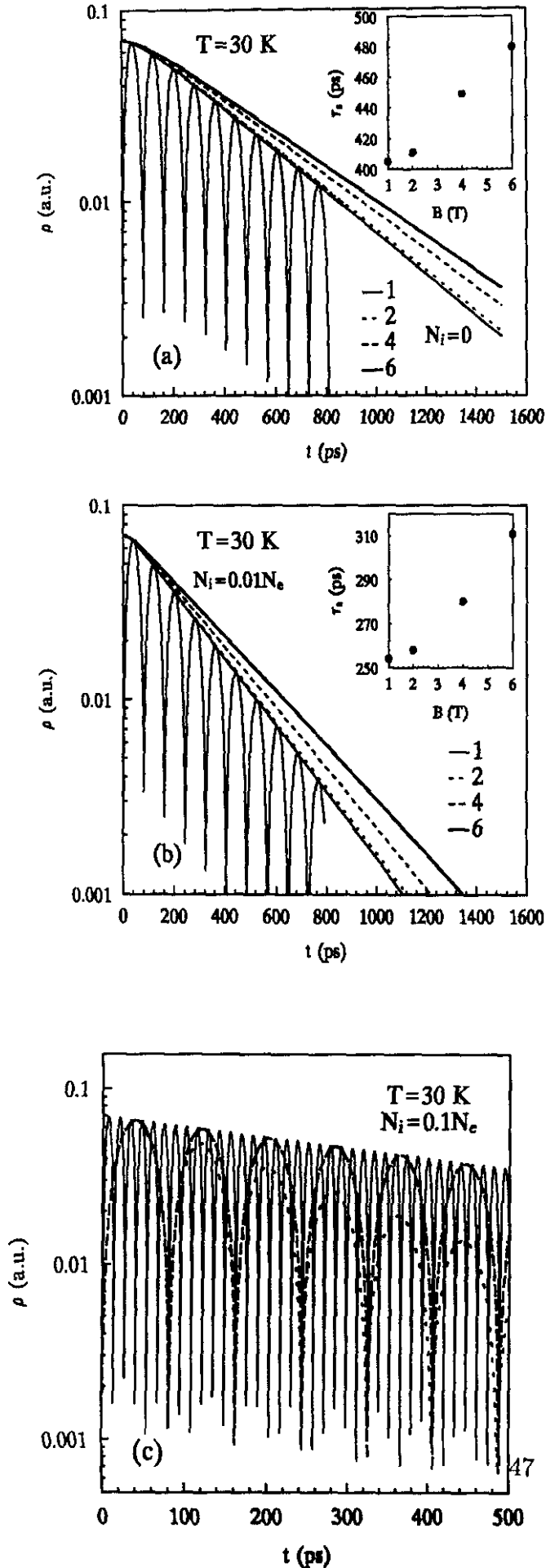


图 3.5: $T = 30$ K 下不同掺杂浓度时电子浓度 $N_e = 10^{23} \text{m}^{-3}$ 的 GaAs 体材料中自旋相干的非相干和 $\rho(t)$ 和时间的关系 (a) $N_i = 0$; (b) $N_i = 0.01N_e$; (c) $N_i = 0.1N_e$ 。(a) 和 (b) 中的振荡的线是 $B = 1$ T 时的 $\rho(t)$ 曲线; 直线是分别为 $B = 1$ (细实线), 2 (点线), 4 (虚线), 6 T (粗实线) 时 ρ 的包络线, 自旋去相位时间以磁场 B 的函数画在 (a) 和 (b) 中的插图。(c) 中实线: $B = 6$ T; 虚线: $B = 1$ T; 点线: $N_i = 0.01N_e$, $B = 1$ T。

样，所不同的只是目前这个计算中用的 g 因子是依赖于能量的，并且只考虑了自旋守恒 Coulomb 散射，而没有自旋翻转散射。类似于图3.2，在这个图中光学相干也是很快的就衰减到零，而自旋相干则慢慢衰减。因此，此图充分显示了在存在非均匀扩展的情况下，自旋守恒的散射也会引起自旋去相位。

3.6 GaAs 体材料中的自旋去相位

Wu 等人也讨论了在 n 型半导体中的 DP 效应导致的自旋去相位。

对于 n 型半导体，由于存在大量的电子（其浓度至少要高于激发起来的空穴一个量级），空穴可以很快地和电子复合，导致空穴的寿命要远低于本征半导体中的空穴寿命。因此当激发起来的空穴被电子复合之后，BAP 效应就不再起作用，自旋去相位机制主要是 DP 效应（在某些情况下 EY 效应也会起作用）。

由于 n 型半导体中的自旋去相位时间要远大于光学去相位时间（最大只有几个皮秒），并且实验使用的泵浦光源脉冲宽度非常短（100fs），因此在研究 n 型半导体中的自旋去相位可以不考虑光学去相位过程。可以假设在 $t = 0$ 时，所有的光学相干以及激光激发起来的电子—空穴对已经消失，激光对系统的作用只是使得导带中自旋向上和自旋向下的电子数不同。因此，Wu 等人只考虑图3.1中的两个自旋不同的导带。

考虑 DP 效应后，方程 (3.2) 中的 H_B 现在修改为：

$$H_B = \sum_{\mathbf{k}\sigma\sigma'} [g\mu_B \mathbf{B} + \mathbf{h}(\mathbf{k})] \frac{\vec{\sigma}_{\sigma\sigma'}}{2} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma'}. \quad (3.25)$$

其中 \mathbf{k} 为三维动量矢量。对于三维材料， $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 主要是 BIA 项，有时候也称为 Dresselhaus 项[58]，其表达式如公式 (2.4) 所示。相互作用 Hamiltonian 包括自旋守恒 Coulomb 散射，自旋守恒电声子相互作用以及自旋守恒电子—非磁性杂质散射，它们的具体表达式可以参考[150, 151]。

Wu 等人用非平衡 Green 函数方法推导出 Bloch 方程(3.5)，不过此时的电子分布函数时间演化方程的相干部分为：

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} f_{e\mathbf{k}\sigma} \right|_{\text{coh}} = -2\sigma \left\{ \text{Im} [g\mu_B B - 2 \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^* + h_x(\mathbf{k})] \rho_{\mathbf{k}} + h_x(\mathbf{k}) \text{Re} \rho_{\mathbf{k}} \right\}, \quad (3.26)$$

式中 $V_{\mathbf{q}} = 4\pi e^2 / [\epsilon_0(q^2 + \kappa^2)]$ 为三维 Coulomb 作用矩阵元， $\kappa = 6\pi e^2 N_e / (\epsilon_0 E_F)$ 为静态屏蔽常数，其中 N_e 为总电子数， E_F 为总 Fermi 能，而 ϵ_0 为静态介电常数。记号

第三章 用动力学定理研究自旋相干的方法及其结果综述

$\rho_{\mathbf{k}} \equiv \rho_{c\mathbf{k}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$ 。方程 (3.26) 右边表示电子自旋围绕磁场 \mathbf{B} 、DP 效应产生的有效磁场 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 以及 Coulomb 作用的 Fock 项导致的局域磁场的进动。自旋相干的相干项为

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{\text{coh}} = & -ih_z(\mathbf{k})\rho_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} [ig\mu_B B - i \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + ih_x(\mathbf{k}) + h_y(\mathbf{k})] (f_{c\mathbf{k}\frac{1}{2}} - f_{c\mathbf{k}-\frac{1}{2}}) \\ & + i \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} (f_{c\mathbf{k}+\mathbf{q}\frac{1}{2}} - f_{c\mathbf{k}+\mathbf{q}-\frac{1}{2}})\rho_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

散射项的表达式可以参看文献[142, 145]。在 $t = 0$ 时刻，初始条件取为

$$\rho_{\mathbf{k}}(t = 0) = 0, \quad (3.28)$$

$$f_{c\mathbf{k}\sigma}(t = 0) = \frac{1}{\exp[(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu_{\sigma})/k_B T] + 1}, \quad (3.29)$$

其中 μ_{σ} 是自旋为 σ 的电子的化学势。 $\mu_{\frac{1}{2}} \neq \mu_{-\frac{1}{2}}$ 表明了载流子在两个自旋子带中的分布是不平衡的。

应当注意的是，尽管我们把方程 (3.26) 和 (3.27) 称为运动方程的相干项，但自旋去相位恰恰也是在这一项中的 DP 项导致的。如果在方程中置 $\mathbf{h}(\mathbf{k}) = 0$ ，可以如前证明自旋守恒的 Coulomb、电-声子、电子-非磁性杂质散射不会导致自旋去相位的。DP 项提供了两种自旋去相位渠道：一是单电子模型中所讨论的那样，DP 项是高度各向异性的，这种各项异性的有效磁场和自旋守恒散射结合产生一个有效的自旋翻转散射，并导致了自旋去相位[29, 34]；另外一个渠道是由于 DP 项是依赖于波矢 \mathbf{k} 的，因此自然提供了非均匀扩展，由前节讨论，这种非均匀扩展和自旋守恒散射结合也导致自旋去相位[142, 145, 143, 146]。到目前为止，大多数讨论 DP 效应导致自旋去相位的研究工作都只考虑第一个渠道[29, 34, 165]，而不考虑第二个渠道。同时考虑 DP 效应的这两个自旋去相位机制需要自洽的求解 Bloch 方程。

Wu 等人通过数值方法自洽求解 Bloch 方程的办法讨论了在 GaAs 体材料中的由于 DP 效应和自旋守恒的电子-声子、电子-非磁性杂质离子的散射共同作用导致的自旋去相位[142, 145]；并比较了在 GaAs (100) 量子阱中 DP 的两个作用导致的自旋去相位[143]；同时讨论了非均匀扩展在 GaAs (110) 量子阱引起的自旋去相位，在这个系统中由于 DP 各向异性不存在[29, 166, 167, 168, 86]，自旋去相位完全是由 DP 项的非均匀扩展引起的。他们的主要结论罗列如下。

3.6.1 GaAs 体材料中 DP 效应导致的自旋去相位

- Wu 等人计算了不同磁场、不同掺杂浓度下 GaAs 体材料中的自旋去相位，他们计算结果如图3.5所示。他们发现自旋去相位时间非常敏感的依赖于杂质浓度 N_i 。

给定温度（这样电—声子散射就确定了），当杂质浓度从0提高到 $0.01N_c$ 时，自旋去相位时间减小；但是如果杂质浓度进一步提高到 $0.1N_c$ 时，自旋去相位时间又变长。这是由于散射的两重效果导致的。一方面由于DP项的各向异性，散射导致了自旋去相位；另一方面，电子—杂质散射也会使得电子的动量空间分布更随机，因此减少了各向异性，从而减少了自旋去相位。这两个效应综合到一起使得随掺杂浓度升高，自旋去相位时间先减小；当杂质浓度超过某个临界点之后，第二个效果开始占主导，自旋去相位时间就随杂质浓度升高而升高。

- Wu 等人同时考查了温度对自旋去相位的影响，结果如图3.6和图3.7所示。他们的结果表明在没有杂质或者杂质浓度非常低的时候，温度升高，自旋去相位时间减少；然而在有中等掺杂情况下，温度升高反而使得自旋去相位时间变长。这个结果和单电子模型得到的结果不一致，因为在单电子模型下自旋去相位时间总是随温度升高而降低[29, 34]。这个性质还是由于电子—杂质散射可以使得系统各向同性的效果造成的。当温度升高时，由于电子—杂质散射更加有效，因此减弱了DP的各向异性造成的后果，使得自旋去相位时间变长。

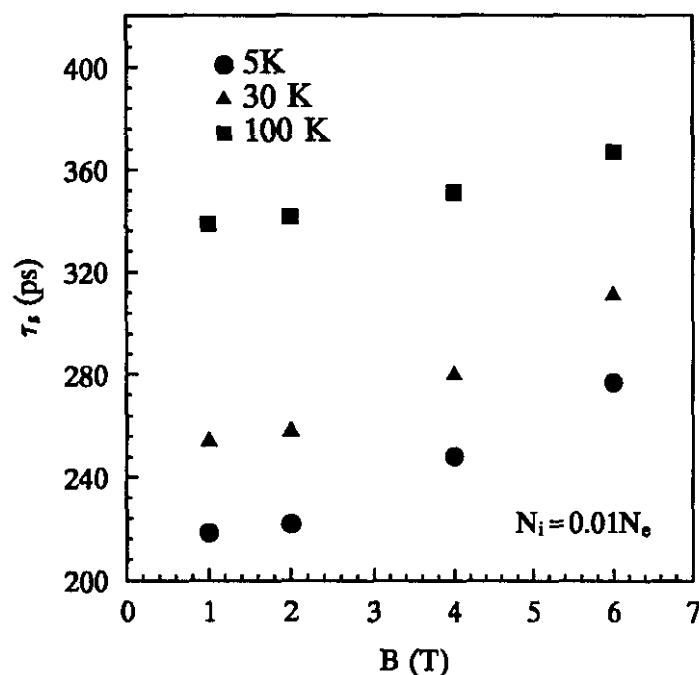


图 3.6: 不同温度下电子浓度 $N_e = 10^{23} \text{ m}^{-3}$ 的 GaAs 体材料中的自旋去相位时间和磁场的关系。其中 $N_i = 0.01N_e$ 。

- 在考查不同电子浓度下的自旋去相位时间之后，Wu 等人发现 DP 效应随载流子

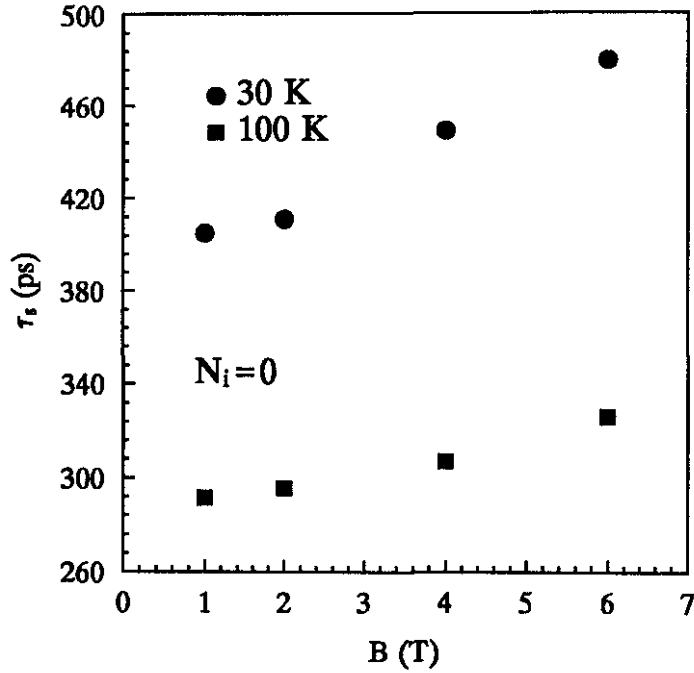


图 3.7: 不同温度下电子浓度 $N_e = 10^{23} \text{m}^{-3}$ 的 GaAs 体材料中的自旋 dephasing 时间和磁场的关系。其中 $N_i = 0$ 。

浓度升高而升高，从而使得自旋去相位时间降低。这和实验观测结果一致[39]。其结果如3.6和3.8所示。

- 他们的结果表明自旋去相位时间和外加磁场有关。外加磁场增大，自旋去相位时间也随之增长。这是因为磁场的存在使得电子自旋绕磁场进动，从而抑制了它们绕 DP 效应产生的有效磁场的进动，使得自旋寿命变长[34]。此外磁场还会造成电子在动量也产生进动，使得电子在动量空间的分布更均匀[34, 142]。这个效果也使得自旋寿命变长。在电子浓度比较高的情况下，自旋去相位时间和磁场的关系与实验上观测结果一致[39]。

3.6.2 n 型 GaAs $\langle 100 \rangle$ 量子阱中的 DP 效应导致的自旋去相位

Wu 从 Bloch 方程 (3.5) 出发，在驰豫时间近似下，得到了只考虑 DP 的各向异性和电子杂质散射导致的自旋去相位时间[143]。用这种办法得到这个自旋去相位时间和用单电子模型得到的自旋寿命相同 [29, 34, 165]。在此基础上他比较了从求解 Bloch 方程得到的考虑了多体效应的自旋去相位时间和用单电子模型得到的结果之间的差异。他的结果如图 3.9 所示。从图中可以看到，从多体理论计算得到的自旋去相位时间要比单电

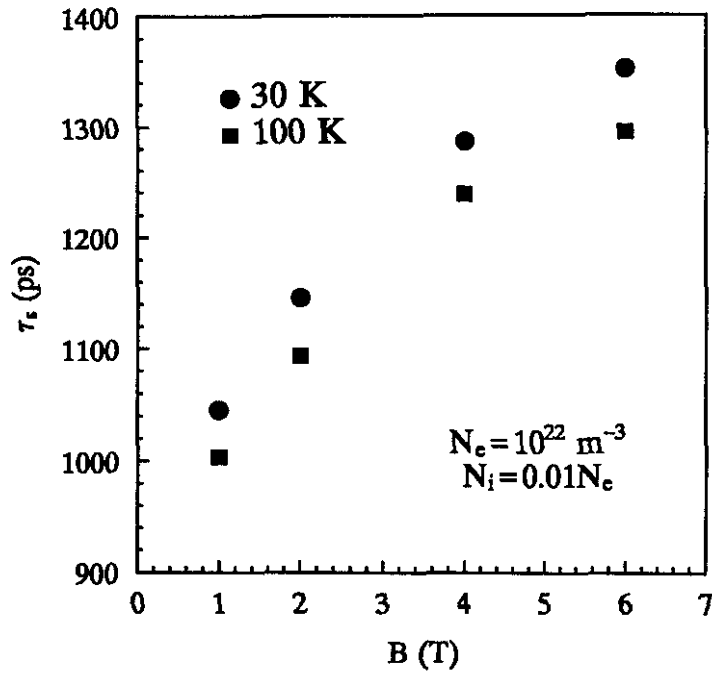


图 3.8: 不同温度下电子浓度 $N_e = 10^{22} \text{m}^{-3}$ 的 GaAs 体材料中的自旋去相位时间和磁场的关系。其中 $N_i = 0.01N_e$ 。

子模型得到的自旋寿命要小好几倍。这两者之间的差别就源于 DP 效应的第二种自旋去相位渠道，即 DP 项导致的非均匀扩展。此外，比较两个模型得到的自旋去相位时间大小，我们可以看到，由 DP 项的非均匀扩展导致的自旋去相位要强于它的各向异性导致的自旋去相位。因此在 n 型半导体中的自旋去相位问题中，多体效应非常重要，必须使用多体理论来考查这个体系，而不能单靠单体理论。

3.6.3 n 型 GaAs $\langle 110 \rangle$ 量子阱中的 DP 效应导致的自旋去相位

在单电子模型中，当电子自旋极化方向指向 $\langle 110 \rangle$ 方向时，DP 项的各向异性被消除，因此 DP 效应不会导致自旋去相位[29, 166, 167, 168, 86]。但 Wu 的计算结果表明，考虑了非均匀扩展之后，即使是 $\langle 110 \rangle$ 方向的量子阱中，DP 项也一样会导致自旋去相位[146]。他们的计算结果如图3.10所示。

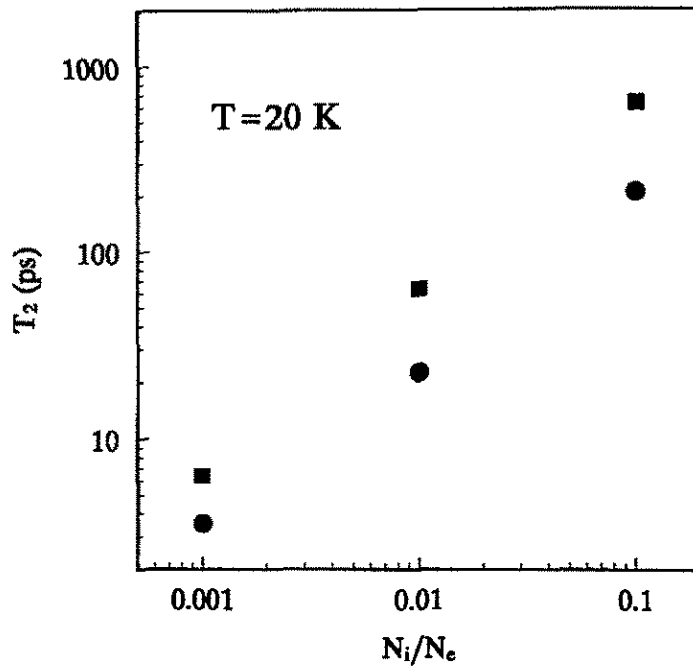


图 3.9: 从多体理论计算得到的自旋去相位时间 (●) 以及从单电子模型得到的自旋去相位时间 (■) 和杂质浓度的关系。

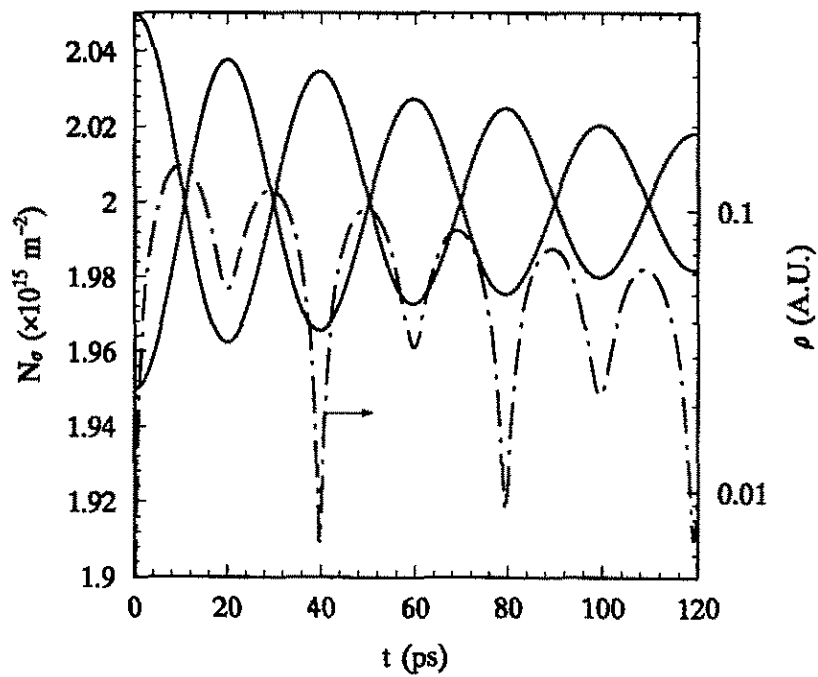


图 3.10: (110)量子阱中的自旋向上和自旋向下的电子密度 $N_\sigma(t)$ (实线) 以及自旋相干的非相干和 $\rho(t)$ (点划线) 的时间演化。

第四章

n 型 GaAs $\langle 100 \rangle$ 量子阱中自旋去相位

4.1 动力学方程

下面我们转入研究 n 型 GaAs $\langle 100 \rangle$ 量子阱中的自旋去相位问题。如前所述，在 n 型半导体中的自旋去相位机制主要是 DP 效应。Wu 等人的研究表明，在讨论 n 型 GaAs 材料中 DP 效应引起的自旋去相位问题时，多体效应导致的自旋去相位是非常重要的，要完全理解 n -型半导体中的自旋去相位问题，必须从多体理论出发来研究它。他们详细讨论了在各种不同条件下 GaAs 体材料中的自旋去相位。但是由于三维体系中数值求解 Bloch 方程的计算量太大，他们得到的只是一些定性结果[142]。在本章中，我们把 Wu 等人得到的 Bloch 方程应用于讨论准二维体系中，研究 n -型 GaAs $\langle 100 \rangle$ 量子阱中的自旋去相位问题，在准二维系统中，由于维数降低，可以大大降低计算量，从而得到更为精确的结果。此外，我们也考虑了电子-电子 Coulomb 散射的影响，这使得我们得以考虑大自旋极化下的自旋去相位。

4.1.1 Hamiltonian

我们讨论的系统是一个 n 型 GaAs $\langle 100 \rangle$ 量子阱，其阱宽为 a ，生长方向为 z ，在 x 方向上施加了一个大小适度的磁场 \mathbf{B} 。由于量子阱的约束，电子在 z 方向上的运动是量子化的。假设量子阱是一个宽度为 a 的无穷深的势阱，那么电子在 z 方向上的本征函数为

$$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi z}{a} \quad (0 \leq z \leq a, \quad n = 1, 2, 3, \dots), \quad (4.1)$$

相应的本征能量为

$$\varepsilon_n = \frac{1}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2, \quad (4.2)$$

m^* 为电子有效质量。电子在平行于阱的方向上的运动是自由的，其本征态可以用其动量 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 来描述。此外电子还有一个自旋自由度，其本征态用自旋在 z 方向上的分量 $\sigma_z = \sigma$ 表示， $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ 。这样， z 方向上的子带指标 n ， x - y 平面上的波矢 \mathbf{k} 以及 z 方向上的自旋分量 σ 一起组成一组描述电子态的完备基 $|nk\sigma\rangle$ 。我们进一步假设不同子带之间的能级间距足够大，使得只有最低子带上有电子占据，并且不同子带之间的跃迁可以忽略不计。在此情况下我们只需要考虑最低子带。计入 DP 项之后，系统的 Hamiltonian 为：

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma\sigma'} \left\{ \varepsilon_{\mathbf{k}} + [g\mu_B \mathbf{B} + \mathbf{h}(\mathbf{k})] \cdot \frac{\vec{\sigma}_{\sigma\sigma'}}{2} \right\} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma'} + H_I. \quad (4.3)$$

其中 $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger (c_{\mathbf{k}\sigma})$ 为波矢为 \mathbf{k} 自旋为 σ 的电子的产生（湮灭）算符； $\varepsilon = k^2/2m^*$ 是波矢为 \mathbf{k} 的电子的动能； $\vec{\sigma}$ 为 Pauli 矩阵。 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 是 DP 项，在量子阱中包括两个部分：Dresselhaus 项 [58] 和 Rashba 项 [59, 60]。Dresselhaus 项是由于闪锌矿晶格没有体反演中心导致的，即第一节中提到的 BIA 项，在量子阱中这样项的表达式为 [169, 170]：

$$h_x^{\text{BIA}} = \gamma k_x (k_y^2 - \langle k_z^2 \rangle), \quad h_y^{\text{BIA}} = \gamma k_y (\langle k_z^2 \rangle - k_x^2), \quad h_z = 0. \quad (4.4)$$

γ 为公式 (2.5) 所定义的与半导体能带结构有关的常数； $\langle k_z^2 \rangle$ 为算符 $-(\frac{\partial}{\partial z})^2$ 对电子最低子带本征态的平均值，其值为 $(\frac{\pi}{a})^2$ 。Rashba 项由沿量子阱生长方向上的自洽势不对称性引起的，就是第一节中提到的 SIA 项。其表达式为

$$h_x^{\text{SIA}}(\mathbf{k}) = \alpha k_y, \quad h_y^{\text{SIA}}(\mathbf{k}) = -\alpha k_x, \quad h_z^{\text{SIA}}(\mathbf{k}) = 0. \quad (4.5)$$

方程中系数 α 的大小和量子阱的界面电场成正比：

$$\alpha = \alpha_0 e E_z, \quad (4.6)$$

其中 α_0 和能隙以及有效质量成反比 [61]。对于窄带半导体如 InAs，主要的自旋去相位机制是 Rashba 项；而对于 GaAs 这样的宽带半导体 Dresselhaus 项占主导。由于我们讨论的是 GaAs 量子阱中的自旋去相位，因此可以只考虑 Dresselhaus 项。

相互作用 Hamiltonian H_I 由电子—非磁性杂质散射 H_{ei} ，电声子作用 H_{ep} ，电子—电子 Coulomb 作用 H_{ee} 组成。它们的表达式在而成量子化形式下分别为 [150, 151]：

$$H_{ei} = \sum_{\mathbf{k}q\sigma} u_q c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (4.7)$$

其中

$$u_q = \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \frac{4\pi Z_i e^2}{\kappa_0 (q^2 + q_z^2)} I(iq_z) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_\alpha} \quad (4.8)$$

为电子—杂质散射的散射矩阵元。 \mathbf{R}_α 为第 α 个杂质的位置， Z_i 为杂质带电荷数，在此可以假设 $Z_i = 1$ ； κ_0 为静态介电常数；

$$I(iq_z) = -\frac{\pi^2 \sin y}{y(y^2 - \pi^2)} \quad (y = \frac{q_z a}{2}) \quad (4.9)$$

为形状因子。

$$H_{ep} = \sum_{\mathbf{k}qz\lambda\sigma} g_{qz\lambda} \phi_{qz\lambda} c_{\mathbf{k}+q\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (4.10)$$

其中 $\phi_{qz\lambda} = a_{qz\lambda} + a_{-q-z\lambda}^\dagger$ ， $a_{qz\lambda}^\dagger$ ($a_{qz\lambda}$) 是波矢为 $\mathbf{Q} = (q, q_z)$ 的 λ 支声子的产生（湮灭）算符。对于 GaAs，我们考虑一支纵向光学声子（LO）、一支横向形变势声学声子（LD）以及两支横向压电势声学声子（TP）[171]。电子—LO 声子的散射矩阵元为

$$|g_{qz,LO}|^2 = \frac{4\pi\Omega_{LO}^{3/2}}{\sqrt{2\mu}Q^2} e^2 \sqrt{\frac{\mu}{2\Omega_{LO}}} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0}\right) |I(iq_z)|^2, \quad (4.11)$$

κ_∞ 为光学介电常数， Ω_{LO} 为光学声子频率；LD 声子和电子的散射矩阵元为

$$|g_{qz,LD}|^2 = \frac{\Xi^2 Q}{2dv_{st}} |I(iq_z)|^2, \quad (4.12)$$

Ξ 是声学形变势， d 是 GaAs 的质量密度， v_{st} 为纵向声速，色散关系为 $\Omega_{QLD} = Qv_{st}$ ；TP 声子和电子的散射矩阵元为

$$|g_{qz,TP}|^2 = \frac{32\pi^2 e^2 e_{14}^2}{\kappa_0^2 dv_{st} Q^5} [q_x^2 q_y^2 + q_y^2 q_z^2 + q_z^2 q_x^2 - (3q_x q_y q_z)^2 / Q^2] |I(iq_z)|^2, \quad (4.13)$$

e_{14} 为压电常数， v_{st} 为纵向声速，相应的色散关系为 $\Omega_{QTP} = Qv_{st}$ 。电子—电子 Coulomb 相互作用为

$$H_{ee} = \sum_{\substack{\mathbf{q}\mathbf{k}\mathbf{k}' \\ \sigma\sigma'}} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (4.14)$$

$V_{\mathbf{q}}$ 为二维屏蔽 Coulomb 作用矩阵元

$$V_{\mathbf{q}} = 4\pi e^2 / [\kappa_0(q + q_0)], \quad (4.15)$$

其中 $q_0 = 2e^2 m^* / (\kappa_0 \sum_{\sigma} f_{\mathbf{k}=0,\sigma})$ 为屏蔽常数。

4.1.2 动力学方程

动力学方程可以通过非平衡 Green 函数办法导出[150, 151, 172, 173, 174, 175]。定义如下闭路 Green 函数

$$G_{\mathbf{k},\sigma\sigma'}(t_1, t_2) = -i \langle T_C \{ c_{\mathbf{k}\sigma}(t_1) c_{\mathbf{k}\sigma'}^\dagger(t_2) \} \rangle, \quad (4.16)$$

第四章 N 型 GAAS (100) 量子阱中自旋去相位

其中时间 t_1 、 t_2 以及时序算符 T_C 定义在闭路 C 上。密度矩阵 $\rho_{k\sigma\sigma'}(t)$ 和闭路 Green 函数的关系为

$$\rho_{k\sigma\sigma'}(t) = \langle c_{k\sigma}^\dagger(t) c_{k\sigma'}(t) \rangle = -iG_{k,\sigma\sigma'}^<(t, t), \quad (4.17)$$

其对角项 $\rho_{k\sigma\sigma}(t)$ 为波矢为 k 自旋为 σ 的分布函数,

$$\rho_{k\sigma\sigma}(t) = f_{k\sigma}(t), \quad (4.18)$$

而非对角项 $\rho_{k\sigma-\sigma}(t)$ 则是自旋相干。对自旋相干有如下关系

$$\rho_{q\sigma-\sigma}(t) = \rho_{k-\sigma\sigma}^*(t), \quad (4.19)$$

因此我们可以定义

$$\rho_{\mathbf{k}}(t) \equiv \rho_{\mathbf{k}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}(t) \quad (4.20)$$

为自旋相干。

这个非平衡 Green 函数的自能为

$$\Sigma_{k,\sigma\sigma'}(t_1, t_2) = \Sigma_{k,\sigma\sigma'}^{\text{coh}}(t_1) \delta(t_1 - t_2) + \Sigma_{k,\sigma\sigma'}^{\text{scatt}}(t_1, t_2). \quad (4.21)$$

式中自能的相干部分为

$$\Sigma_{k,\sigma\sigma'}^{\text{Coh}}(t) = [g\mu_B \mathbf{B} + \mathbf{h}(\mathbf{k})] \cdot \frac{\vec{\sigma}_{\sigma\sigma'}}{2} + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{k}\sigma\sigma'}(t), \quad (4.22)$$

上式第一项是外加磁场和 DP 效应产生有效磁场引起的, 而第二项则是电子—电子 Coulomb 作用在 Hartree-Fock 近似下的自能修正。自能的散射部分包括三个部分,

$$\Sigma_{k,\sigma\sigma'}^{\text{scatt}}(t_1, t_2) = \Sigma_{k,\sigma\sigma'}^{\text{ei}}(t_1, t_2) + \Sigma_{k,\sigma\sigma'}^{\text{ep}}(t_1, t_2) + \Sigma_{k,\sigma\sigma'}^{\text{ee}}. \quad (4.23)$$

$\Sigma_{k,\sigma\sigma'}^{\text{ei}}(t_1, t_2)$ 是电子—杂质相互作用的自能, 在 Born 近似下, 对杂质做位型平均, 其表达式为

$$\Sigma_{k,\sigma\sigma'}^{\text{ei}}(t_1, t_2) = \sum_{\mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma\sigma'}(t_1, t_2). \quad (4.24)$$

其中

$$|U_{\mathbf{q}}|^2 = N_i \sum_{q_z} \left| \frac{4\pi Z_i e^2}{\kappa_0(q^2 + q_z^2)} I(iq_z) \right|^2, \quad (4.25)$$

N_i 为杂质浓度。 $\Sigma_{k,\sigma\sigma'}^{\text{ep}}(t_1, t_2)$ 是电声子作用的自能, 在 Born 近似下,

$$\Sigma_{k,\sigma\sigma'}^{\text{ep}}(t_1, t_2) = i \sum_{\mathbf{q}q_z\lambda} |g_{\mathbf{q}q_z\lambda}|^2 G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma\sigma'}(t_1, t_2) D_{\mathbf{q}q_z\lambda}(t_1, t_2). \quad (4.26)$$

式中 $D_{\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}(t_1, t_2)$ 是声子 Green 函数, 假设声子处于平衡态, $D_{\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}(t_1, t_2)$ 可以用形如下式的自由声子 Green 函数 $D_{\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}^0(t_1, t_2)$ 代替:

$$D_{\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}^{0<}(t_1, t_2) = -i[(N_{\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda} + 1)e^{i\Omega_{\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}(t_1-t_2)} + N_{\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}e^{-i\Omega_{\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}(t_1-t_2)}], \quad (4.27)$$

$$D_{\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}^{0>}(t_1, t_2) = -D_{\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}^{0<}(t_1, t_2)^*, \quad (4.28)$$

其中

$$N_{\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda} = \frac{1}{e^{\Omega_{\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}/T} - 1} \quad (4.29)$$

是声子分布函数。 $\Sigma_{\mathbf{k},\sigma\sigma'}^{\text{ee}}(t_1, t_2)$ 是电子-电子 Coulomb 散射的自能, 在无规相近似下, 其表达式为

$$\Sigma_{\mathbf{k},\sigma_1\sigma_2}^{\text{ee}}(t_1, t_2) = \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}'\sigma_1'\sigma_2'} |V_{\mathbf{q}}|^2 G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma_1\sigma_2}(t_1, t_2) G_{\mathbf{k}'\sigma_1'\sigma_2'}(t_1, t_2) G_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma_2'\sigma_1'}(t_2, t_1). \quad (4.30)$$

根据以上结果, 应用 Dyson 方程, 可以得到如下 Kadanoff-Baym 方程,

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_1} (G_{\mathbf{k}\sigma\sigma_1}^0(t_1))^{-1} G_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma'}^<(t_1, t_2) &= \sum_{\sigma_1} \Sigma_{\mathbf{k}\sigma\sigma_1}^{\text{coh}}(t_1) G_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma'}^<(t_1, t_2) \\ &+ \int dt_3 \sum_{\sigma_1} \left[\Sigma_{\mathbf{k},\sigma\sigma_1}^{\text{scatt}r}(t_1, t_3) G_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma'}^<(t_3, t_2) + \Sigma_{\mathbf{k},\sigma\sigma_1}^{\text{scatt}l}(t_1, t_3) G_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma'}^>(t_3, t_2) \right] \end{aligned} \quad (4.31)$$

以及

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_1} G_{\mathbf{k}\sigma\sigma_1}^<(t_1, t_2) (G_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma'}^0(t_2))^{-1} &= \sum_{\sigma_1} G_{\mathbf{k}\sigma\sigma_1}^<(t_1, t_2) \Sigma_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma'}^{\text{coh}}(t_2) \\ &+ \int dt_3 \sum_{\sigma_1} \left[G_{\mathbf{k}\sigma\sigma_1}^r(t_1, t_3) \Sigma_{\mathbf{k},\sigma_1\sigma'}^{\text{scatt}l}(t_3, t_1) + G_{\mathbf{k}\sigma\sigma_1}^<(t_1, t_3) \Sigma_{\mathbf{k},\sigma_1\sigma'}^{\text{scatt}a}(t_3, t_2) \right], \end{aligned} \quad (4.32)$$

其中 $G_{\mathbf{k}\sigma\sigma'}^0(t)$ 为自由电子 Green 函数,

$$(G_{\mathbf{k}\sigma\sigma'}^0(t))^{-1} = (i\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (4.33)$$

把(4.31)和(4.32)相减, 令 $t_1 = t_2 = t$, 并使用推广的 Kadanoff-Baym 假设[176, 177, 150], 经过一番计算得到如下 Bloch 动力学方程:

$$\dot{\rho}_{\mathbf{k},\sigma\sigma'} = \dot{\rho}_{\mathbf{k},\sigma\sigma'}|_{\text{coh}} + \dot{\rho}_{\mathbf{k},\sigma\sigma'}|_{\text{scatt}}. \quad (4.34)$$

其中相干项为

$$\left. \frac{\partial f_{\mathbf{k},\sigma}}{\partial t} \right|_{\text{coh}} = -2\sigma \{ [g\mu_B B + h_x(\mathbf{k})] \text{Im}\rho_{\mathbf{k}} + h_y(\mathbf{k}) \text{Re}\rho_{\mathbf{k}} \} + 4\sigma \text{Im} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^* \rho_{\mathbf{k}}, \quad (4.35)$$

和

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{\text{coh}} &= \frac{1}{2} [ig\mu_B B + ih_x(\mathbf{k}) + h_y(\mathbf{k})] (f_{\mathbf{k}\frac{1}{2}} - f_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}}) \\ &\quad + i \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} [(f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\frac{1}{2}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\frac{1}{2}}) \rho_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (f_{\mathbf{k}\frac{1}{2}} - f_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}})]. \end{aligned} \quad (4.36)$$

而散射项为:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f_{\mathbf{k},\sigma}}{\partial t} \right|_{\text{scatt}} &= \left\{ -2\pi \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\lambda} g_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\lambda}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \Omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\lambda}) [N_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\lambda} (f_{\mathbf{k}\sigma} - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}) + f_{\mathbf{k}\sigma} (1 - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}) \right. \\ &\quad \left. - \text{Re}(\rho_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^*)] - 2\pi N_i \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) [f_{\mathbf{k}\sigma} (1 - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}) - \text{Re}(\rho_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^*)] \right. \\ &\quad \left. - 2\pi \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}'\sigma'} V_{\mathbf{q}}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}) \left[(1 - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}) f_{\mathbf{k}\sigma} (1 - f_{\mathbf{k}'\sigma'}) f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{2} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^* (f_{\mathbf{k}'\sigma'} - f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}) + \frac{1}{2} \rho_{\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^* (f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma} - f_{\mathbf{k}\sigma}) \right] \right\} \\ &\quad - \{ \mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k}' \leftrightarrow \mathbf{k}' - \mathbf{q} \}, \end{aligned} \quad (4.37)$$

以及

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{\text{scatt}} &= \left\{ \pi \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\lambda} g_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\lambda}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \Omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\lambda}) [\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (f_{\mathbf{k}\frac{1}{2}} + f_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}}) \right. \\ &\quad \left. + (f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\frac{1}{2}} + f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\frac{1}{2}} - 2) \rho_{\mathbf{k}} - 2N_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\lambda} (\rho_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] \right. \\ &\quad \left. + \pi N_i \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) [(f_{\mathbf{k}\frac{1}{2}} + f_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}}) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - (2 - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\frac{1}{2}} - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\frac{1}{2}}) \rho_{\mathbf{k}}] \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}'} \pi V_{\mathbf{q}}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}) \left((f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\frac{1}{2}} \rho_{\mathbf{k}} + \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} f_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times (f_{\mathbf{k}'\frac{1}{2}} - f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\frac{1}{2}} + f_{\mathbf{k}'-\frac{1}{2}} - f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}-\frac{1}{2}}) + \rho_{\mathbf{k}} [(1 - f_{\mathbf{k}'\frac{1}{2}}) f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\frac{1}{2}} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (1 - f_{\mathbf{k}'-\frac{1}{2}}) f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\frac{1}{2}} - 2\text{Re}(\rho_{\mathbf{k}'}^* \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] - \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} [f_{\mathbf{k}'\frac{1}{2}} (1 - f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\frac{1}{2}}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (1 - f_{\mathbf{k}'-\frac{1}{2}}) f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}-\frac{1}{2}} - 2\text{Re}(\rho_{\mathbf{k}'}^* \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}})] \right) \right\} \\ &\quad - \{ \mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k}' \leftrightarrow \mathbf{k}' - \mathbf{q} \}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

由于我们只关心自旋去相位问题, 而不在意自旋极化是如何产生, 因此, 我们可以忽略自旋极化的产生过程, 而直接假设在 $t = 0$ 时刻, 两个自旋子带上的电子都各自处于平衡的 Fermi 分布, 自旋相干为零, 即有如下初始条件:

$$f_{\mathbf{k}\sigma}(t = 0) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu_{\sigma})/T_e} + 1}, \quad (4.39)$$

以及

$$\rho_{\mathbf{k}} = 0. \quad (4.40)$$

其中 μ_{σ} 为自旋为 σ 的电子的化学势，它们满足粒子数方程

$$\sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}(t=0) = N_{\sigma}(t=0), \quad (4.41)$$

$N_{\sigma}(t=0)$ 为 $t=0$ 时刻自旋为 σ 的电子数。

Bloch 动力学方程 (4.34)–(4.38) 和初始条件 (4.39)–(4.41) 就构成一组完备的方程，通过求解这组方程得到 $f_{\mathbf{k}\sigma}(t)$ 和 $\rho_{\mathbf{k}}(t)$ 随时间的变化，我们就可以研究不同条件下的自旋去相位。

4.2 数值求解动力学方程的方法

从动力学 Bloch 方程的形式我们可以看到，这是一组非线性微分—积分方程，所有的未知量都在散射项里出现。由于 DP 项 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 的各向异性作用， $f_{\mathbf{k}\sigma}$ 将不会保持 Fermi 分布。DP 项总是电子分布偏离 Fermi 分布，而散射项则使得电子在动量空间的随机分布。因此必须自洽地求解包括这两个部分的 Bloch 动力学方程来得到电子分布函数以及自旋相干。这种自洽的求解方程的方法只能靠数值计算方法来进行。

波矢 \mathbf{k} 是一个准连续的量，在做数值计算的时候需要把波矢空间离散化。为了提高计算精度和计算方便， \mathbf{k} 空间的离散化是在极坐标中进行的，每个 \mathbf{k} 用一个径向长度 $k \in [0, \infty)$ 和一个角度 $\theta \in [0, 2\pi)$ 表示。在计算中对 k 取一个截断 $K_{\text{cut}} = \sqrt{2m^*E_{\text{cut}}}$ ，并按照能量均匀分隔（为了准确计算能量守恒，即散射项中的 δ 函数）把区间 $[0, K_{\text{cut}}]$ 分成 N 等分。这样 k 的格点就取为

$$k = 0, \sqrt{1/N}K_{\text{cut}}, \sqrt{2/N}K_{\text{cut}}, \dots, \sqrt{(N-1)/N}K_{\text{cut}}, K_{\text{cut}}. \quad (4.42)$$

截断能量 E_{cut} 选取适当的值使得所有初始分布函数值不是非常小（比如说大于 $10^{-3} \times f_{\mathbf{k}=0, \frac{1}{2}}$ ）的 \mathbf{k} 点都包括在这个范围里头。对 θ 我们将其在 $[0, 2\pi)$ 之间做 M 等分，其格点取值分别为[142]

$$\theta = 0, 2\pi/M, 3\pi/M, \dots, (M-2)2\pi/M, (M-1)2\pi/M. \quad (4.43)$$

按照这个分割，总格点数为 $N \times M$ 。对于一个典型计算， E_{cut} 取为 10 倍的 Fermi 能 E_F ， k 的格点数取为 100，角度的格点数取为 32，总格点数为 $100 \times 32 = 3200$ ，就可以

保证有足够的精度。相比之下，在三维情况中，如果每个坐标方向上取 N 个分割点，那么需要 $(2N - 1)^6$ 个格点，即使取 $N = 7$ 这个极为粗糙的分割，也需要 4.8×10^6 个格点[142]，远远大于二维情况。因此在三维情况下，由于目前条件的限制（比如计算机的内存和计算速度），不能得到定量结果，只能得到定性结果[142]。而在二维情况下，由于维数的降低，我们可以较少的格点就得到比较高的精度，因此可以得到更为准确的定量结果[178]。

确定格点选取之后，Bloch 动力学方程就变成了 $f_{k_n, \theta_m, \frac{1}{2}}(t)$, $f_{k_n, \theta_m, -\frac{1}{2}}(t)$, $\rho_{k_n, \theta_m}(t)$ (k_n 和 θ_m 分别取 (4.42) 和 (4.43) 确定的格点) 的关于时间的非线性微分方程组。为了保证精度，我们用四阶 Runge-Kutta 法来求解这组微分方程组 [179]，并且时间步长足够小（典型值大约取为由磁场决定的周期的 $1/20$ ）。

按照以上说明的算法，我们通过数值计算方法自洽地求解动力学 Bloch 方程来研究电子在自旋向上和向下两个子带之间的运动。类似于以前的工作[141, 154]，我们也利用自旋相干的非相干和 $\rho(t) = \sum_{\mathbf{k}} |\rho_{\mathbf{k}}(t)|$ 的包络的斜率来确定不可逆的自旋去相位。在所有计算中我们都包括了电声子作用；不同杂质浓度下电子—杂质散射（有时候会取杂质浓度 $N_i = 0$ ，即不考虑杂质散射）。另外，除非特别说明，在所有计算中也包括了电子—电子 Coulomb 散射。我们只研究温度比较高时的情况，这时电声子散射中只有电子—光学声子散射有贡献，电子—声学声子的作用相比而言非常小，可以忽略不计，因此在计算中我们并不包括声学声子散射的贡献。在计算时，量子阱的宽度取为 7.5 nm 这个比较典型的值；除了比较自旋去相位时间和电子浓度 N_e 的关系之外，总电子浓度总是取为 $4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ，以接近于实验中实际可能的电子浓度[37, 38, 39]；如无特别声明，外加磁场大小取为 4 T。数值计算时所用的物质参数列于表 4.1[180]。在计算中 m_{cv} 的大小取为自由电子的质量 [57]。

κ_{∞}	10.8	κ_0	12.9
ω_{LO}	35.4 meV	m^*	$0.067 m_0$
Δ	0.341 eV	E_g	1.55 eV
g	6.5[181]	α_0	5.33 \AA^2

表 4.1: 数值计算中使用的物质参数

我们的结果将在下面几节中详细说明。

4.3 数值计算结果

4.3.1 自旋信号的时间演化

我们首先研究自旋信号随时间的演化过程。在图 4.1 中我们画出了温度为 200 K 下的 GaAs 量子阱中自旋向上和自旋向下两个子带的电子数以及自旋相干的非相干和随时间演化的图。在这个计算中我们取杂质浓度为 0，并且不考虑电子—电子之间的相互作用。在 $t = 0$ 时，初始极化 $P = (N_{\frac{1}{2}} - N_{-\frac{1}{2}})/(N_{\frac{1}{2}} + N_{-\frac{1}{2}}) = 2.5\%$ 。从图中我们可以看到，由于磁场和 DP 项产生的有效磁场 $\hbar(\mathbf{k})$ 的作用，自旋向上子带中过剩的电子从 $t = 0$ 时刻开始向自旋向下子带翻转。同时自旋相干 ρ 开始积累。经过了大约 0.67 皮秒 (ps)，两个自旋子带之间的电子数变成一样，而自旋相干达到其最大值。在这之后，自旋相干开始反作用，使得自旋向下的电子数目开始超过自旋向上电子数目，同时自旋相干减小。大约到了 1.3 ps， ρ 达到最小，而两个自旋子带之间的电子数目差再次达到最大，不过此时是自旋向下电子数目超过自旋向上电子。如果系统中不存在自旋退相干机制，第二个峰的高度将位于 $t = 0$ 时刻的第一个峰持平，振荡将持续不断的维持下去。在外加磁场比较大的时候，振荡的周期 T 主要由外加磁场确定，

$$T = 2\pi/(g\mu_B B). \quad (4.44)$$

DP 效应对周期影响很小，而 HF 项对周期没有影响[145]。然而由于自旋退相干，这个振荡变成衰减振荡，第二个峰高度会稍低于第一个峰。这种振荡将以周期 T 持续下去直到自旋退相干使得振幅减少到零为止。造成过剩电子数目衰减的原因来源于两个方面：一是由于磁场和 DP 效应产生的等效磁场 $\hbar(\mathbf{k})$ 作用，电子自旋会围绕这个总的磁场进动，由于 $\hbar(\mathbf{k})$ 的非均匀性，波矢不同的电子的进动的方向和速度都不一样，从而造成干涉效果，使得净过剩电子数目减少。这种干涉导致峰的衰减对于有限系统而言是可逆的，它并没有减少自旋相干，因此不导致自旋相干的非相干和衰减；另外一个原因是 DP 效应和自旋守恒散射一起作用，从而导致了自旋相干不可逆的散失。后面这个作用使得净过剩电子数减少，同时也使得自旋相干的非相干和衰减。因此我们可以通过求得自旋相干的非相干和来区分干涉效应导致的自旋信号的衰减和由于自旋去相位导致的自旋信号的衰减[154, 150, 142]，从而得到自旋去相位时间。

在图 4.2 中，我们以实线形式画出了考虑电子—电子 Coulomb 散射之后的两个自旋子带中的电子密度和自旋相干的非相干和随时间演化的关系。在计算中使用的参数和图 4.1 中使用的一样。图 4.1 中得到的不考虑 Coulomb 散射的结果在此图中用虚线重新画出，以做比较。从图中我们可以看出，在头三个振荡中 ($t < 4$ ps)，考虑和不考虑

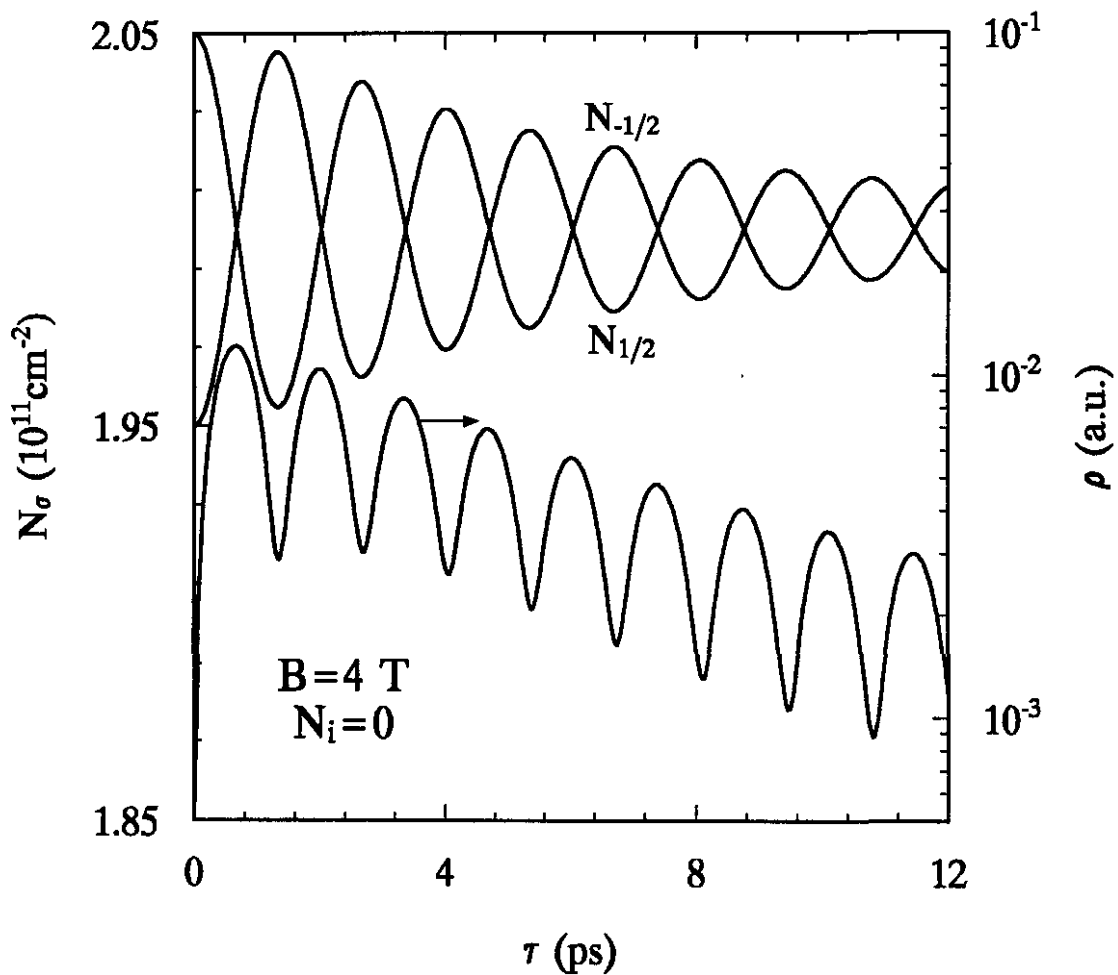


图 4.1: GaAs 量子阱中自旋向上和自旋向下的电子密度 N_σ 以及自旋相干的非相干和 ρ 与时间 t 的关系。本图的计算中不计入 Coulomb 散射, 初始极化 $P = 2.5\%$, 温度 $T = 200$ K; 自旋相干的坐标画于图的右边。

Coulomb 散射得到的结果几乎没有区别。而随时间增加, 考虑 Coulomb 散射的结果渐渐偏离不考虑 Coulomb 散射的结果。考虑 Coulomb 散射之后, 两个自旋子带之间的过剩电子浓度以及自旋相干的非相干和衰减速度都要比不考虑 Coulomb 散射的要快。

我们已经知道 Coulomb 散射只是在电子分布函数偏离 Fermi 分布时有重要作用。在头几个皮秒中, 两个自旋子带中的电子在磁场的作用下翻转到自旋相反方向的子带中去。由于 DP 效应产生的 k 空间中的电子分布函数的非均匀性非常小, 电子分布函数依然接近于 Fermi 分布。因此在头几个皮秒中, 考虑和不考虑 Coulomb 散射得到的结果并没有多少区别。但是随时间增长, DP 效应的作用不断积累, 电子分布函数越来越偏离 Fermi 分布, Coulomb 散射越来越重要, 从而导致了考虑 Coulomb 散射的结果越来越偏离不考虑 Coulomb 散射的结果。Wu 等人指出了 DP 效应导致的自旋去相位来源于两个方面[142]: 一个是由于 DP 项的各向异性, 这个效应和自旋守恒散射结合起来导致了一个等效的自旋翻转散射, 从而产生自旋去相位。对于这种情况, 增加其它的散射机制使得动量弛豫增强, 因而降低了自旋去相位速度[34, 29, 143]。Glazov 和 Ivchenko 指出, 尽管电子-电子 Coulomb 散射对动量弛豫没有贡献, 依照类似于前人的分析[34, 29, 143], 也会降低自旋去相位; 另外一个原因是 DP 项引入了非均匀扩展, 这 and 自旋守恒散射结合起来提供了另外一个自旋去相位渠道[142, 146, 141, 143, 145]。考虑 Coulomb 散射相当于增加了一个自旋去相位的渠道, 因此使得自旋去相位速度增快。我们通过自洽求解动力学 Bloch 方程, 因而同时包括了这两个方面的贡献。得到的结果表明, 第二个效应是更为重要的, 因此包含了 Coulomb 散射就使得自旋去相位增加。

4.3.2 初始自旋极化强度对自旋去相位时间的影响

现在我们开始研究初始自旋极化强度对自旋去相位时间的影响。由于我们的理论是一个多体理论, 在计算中包含了所有的散射, 特别是电子-电子 Coulomb 散射, 我们可以研究初始自旋极化强度很大时候的自旋去相位。

在图4.3(a)和4.3(b)中, 我们分别画出了杂质浓度 $N_i = 0$ 和 $N_i = 0.1 N_0$ 时不同温度下的 GaAs 量子阱中的自旋去相位时间 τ 与初始自旋极化 P 的关系。从图上我们可以看出, 最显著的特征是在低温下、没有杂质散射的量子阱中在 τ - P 曲线上有一个很大的反常峰。在温度为 120 K 时, τ 先是随 P 缓慢上升, 当 P 大于 15% 之后, τ 随 P 增加而迅速增大, 到了 $P = 70\%$ 左右, τ 达到其最高, 在这个反常峰上的自旋去相位时间高于初始极化很低情况下的自旋去相位时间的 6 倍; 此后自旋极化进一步增加反而使得自旋去相位时间减少。随着温度升高, τ 随自旋极化增加速度的速度减缓, 反常峰

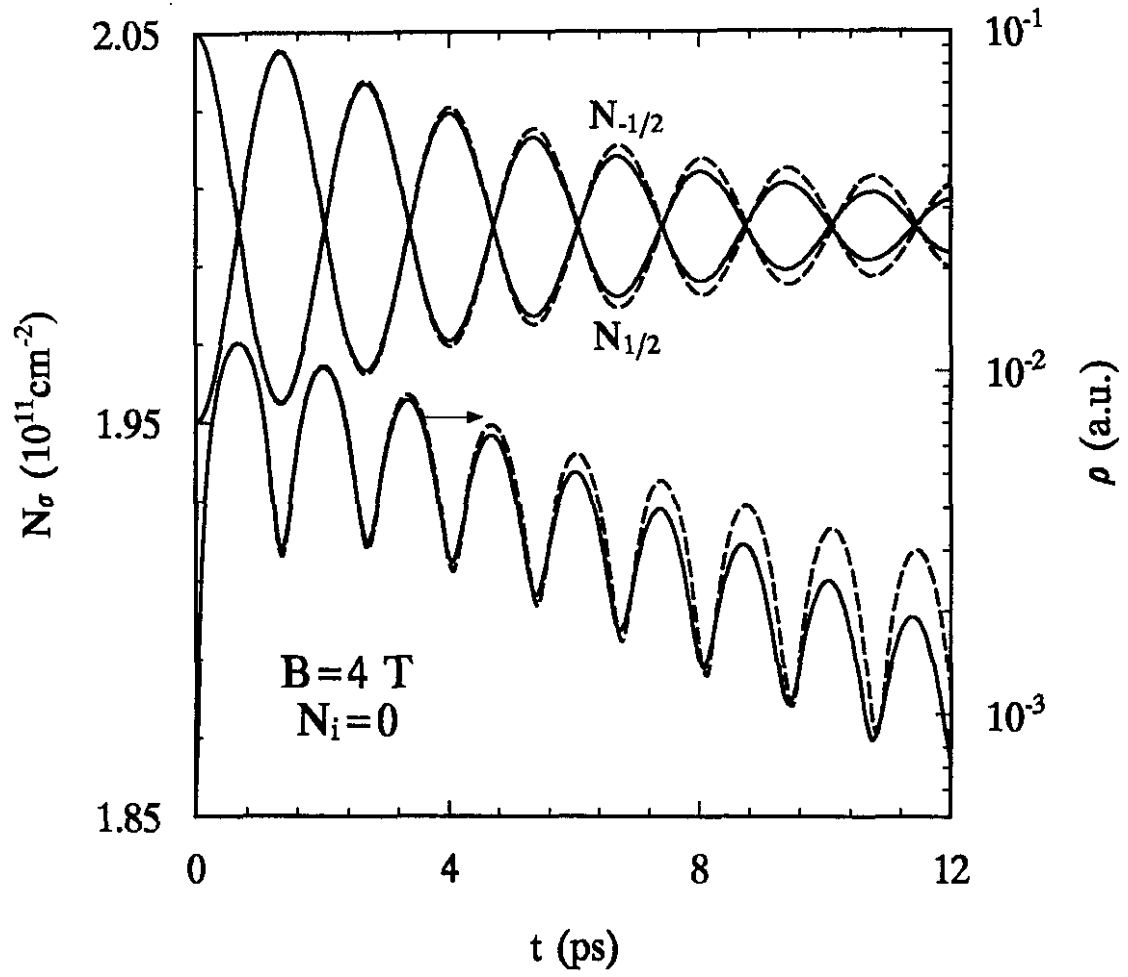


图 4.2: GaAs 量子阱中自旋向上和自旋向下的电子密度 N_σ 以及自旋相干的非相干和 ρ 与时间 t 的关系。实线为考虑电子-电子 Coulomb 作用的结果，虚线为不考虑 Coulomb 作用的结果。初始极化 $P = 2.5\%$ ，温度 $T = 200 \text{ K}$ ；自旋相干的坐标画于图的右边。

的高度不断下降, 峰的位置也向高初始自旋极化的区域移动。温度升高到 150 K 时, 峰的高度比起 $T = 120$ K 时降低了大约 30 %; 而温度升高至 $T = 200$ K 或者更高, τ 随 P 增加而单调上升, 已经无法观察到峰了。

低温、无杂质散射样品中的 τ - P 曲线中的快速增加和反常峰都起源于电子-电子相互作用, 特别是出现在 Bloch 方程相干项中的 HF 自能修正 (方程(4.35) 和(4.36) 的最后一项)。如果在计算中把 HF 项丢弃掉, 那么 τ - P 曲线中的迅速增加以及非常峰都消失了。我们已经知道在没有自旋去相位机制时, HF 项和自旋守恒散射一起作用不会改变自旋信号随时间的演化关系, 更不会导致自旋信号衰减, 因此 HF 项本身对自旋去相位没有直接影响[144, 145]。不过 HF 项也相当于一个有效磁场, 它可以改变电子在 k 空间中的运动及其自旋进动, 因此和 DP 项结合会影响自旋去相位。在一般文章或者书本中讨论的小自旋极化情况下, HF 项的贡献非常微弱。但是随着初始自旋极化增大, HF 项贡献越来越大。在适当的自旋极化下, HF 项的贡献的大小可以和出现于 Bloch 动力学方程相干项中的 DP 项以及外加磁场的贡献可以相比, 从而抵销了 DP 项的各向异性, 导致自旋去相位时间变长。另外, 这种反常峰的行为类似于共振效应。由于 HF 项和 DP 项都依赖于波矢 k , 共振是被展宽的。如果初始自旋极化进一步增加, HF 项将超过共振条件, 其结果是自旋去相位时间开始下降。

从 HF 项的表达式我们可以看出, 当温度升高时, 每个态上的粒子占据数减小, 分布函数大小降低, 从而导致了 HF 项展宽更大, 大小也随之减小。因此为了达到共振条件, 需要有更大的初始极化。结果就如我们画出的图中所示, 温度升高时反常峰的高度降低, 并且峰的位置也移向初始自旋极化高的区域。但是如果温度升得足够高, 即使初始自旋极化高达 100 % 也无法使得 HF 项达到共振条件, 非常峰因此消失, τ - P 曲线表现为单调上升。

当引入杂质之后, τ - P 曲线的行为表现得和没有杂质时很不一样。从图 4.3(b) 中我们可以看到, 在杂质浓度比较高时 (比如说 $N_i = 0.1 N_c$), τ 仍然随 P 的增加而快速增长, 虽然其增长速度要大大低于无杂质散射情况。杂质除了减小 τ - P 曲线的增长速度之外, 还会破坏反常峰。从图中可以明确看出在我们研究的温度范围内 τ - P 曲线中的峰都消失了, 自旋去相位时间随初始自旋极化增加而单调上升。

为了进一步了解在不同条件下杂质散射对自旋去相位的作用, 我们计算了 GaAs 量子阱中在不同杂质浓度、不同温度下的自旋去相位时间, 结果画于图 4.4(a) 和 4.4(b) 中。从图中我们可以很清楚的看出, 在低温时候杂质使得 τ - P 曲线中的非常峰被抹平, 同时使得非常峰的位置移向高初始自旋极化区域。这是由于杂质散射使得 HF 项的贡献减小, 因此共振效果也要减小。同时, 为了达到最大共振需要更大的初始自

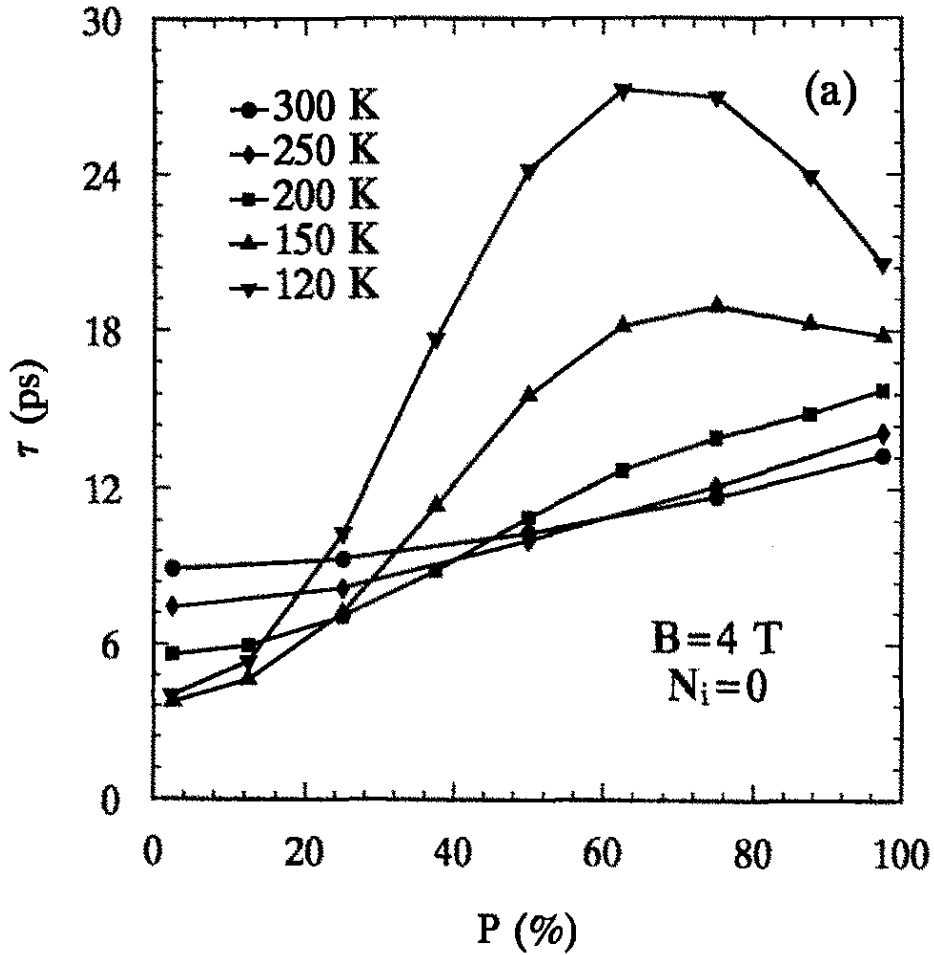


图 4.3(a): 杂质浓度 $N_i = 0$ 时, 不同温度下的 GaAs 量子阱中的自旋去相位时间 τ 与初始自旋极化 P 的关系。下三角(\blacktriangledown): $T = 120 \text{ K}$; 上三角(\blacktriangle): $T = 150 \text{ K}$; 方块(\blacksquare): $T = 200 \text{ K}$; 菱形(\blacklozenge): $T = 250 \text{ K}$; 圆(\bullet): $T = 300 \text{ K}$. 为清楚见, 图中画出了点间连线。

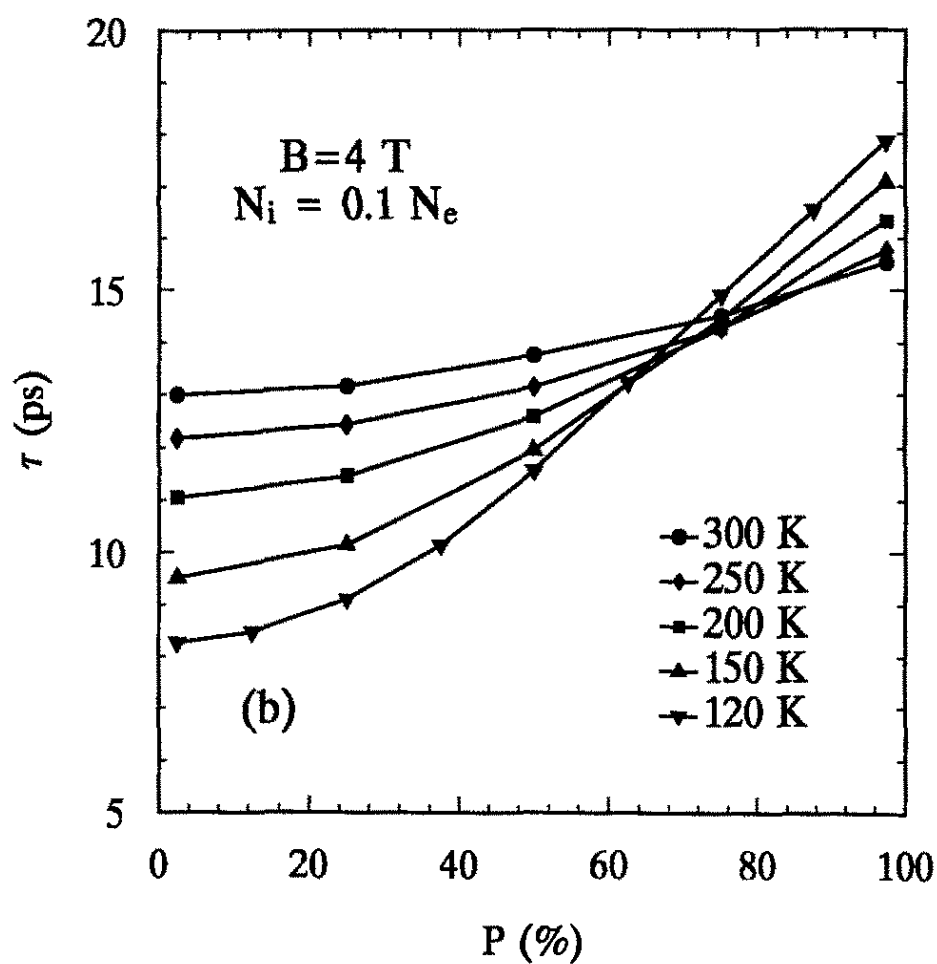


图 4.3(b): 杂质浓度 $N_i = 0.1 N_e$ 时, 不同温度下的 GaAs 量子阱中的自旋去相位时间 τ 与初始自旋极化 P 的关系。下三角(▼): $T = 120 \text{ K}$; 上三角(▲): $T = 150 \text{ K}$; 方块(■): $T = 200 \text{ K}$; 菱形(◆): $T = 250 \text{ K}$; 圆(●): $T = 300 \text{ K}$. 为清楚见, 图中画出了点间连线。

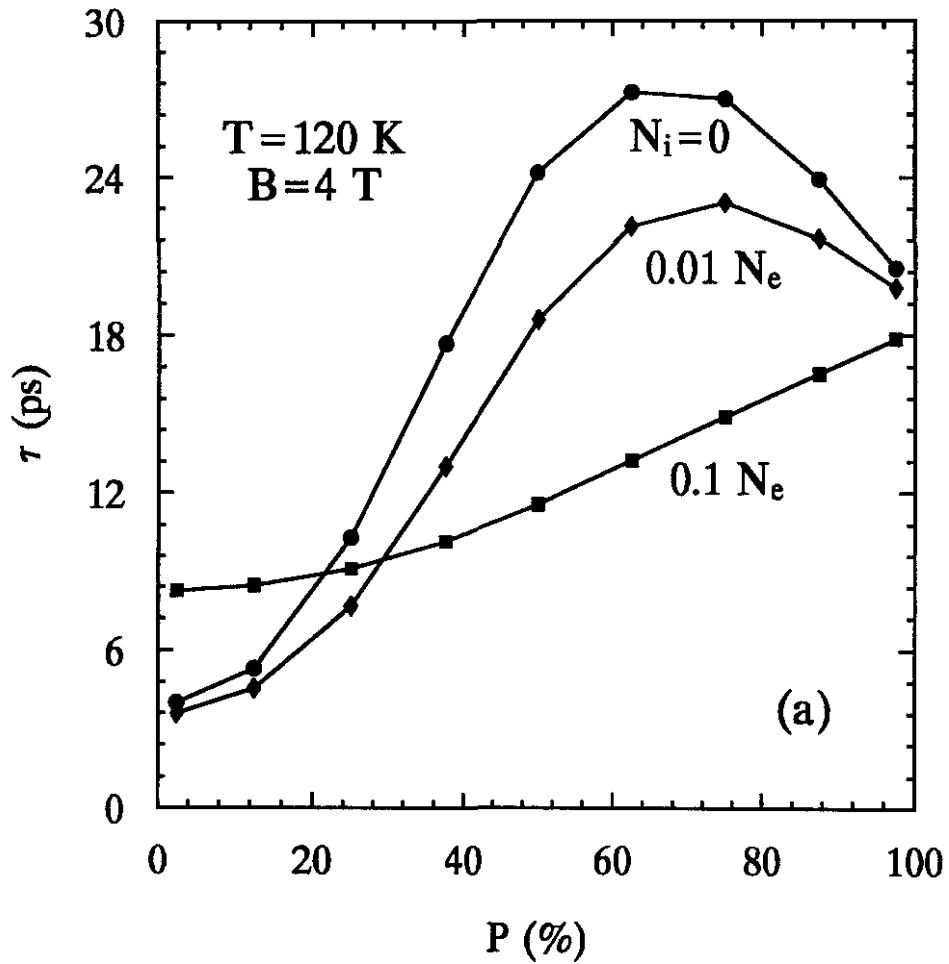


图 4.4(a): 温度 T 为 120 K 时不同杂质浓度下 GaAs 量子阱中的自旋去相位时间 τ 和初始自旋极化 P 的关系。圆(\bullet): $N_i = 0$; 菱形(\blacklozenge): $N_i = 0.01 N_e$; 方块(\blacksquare): $N_i = 0.1 N_e$ 。为清楚见, 图中画出了点间连线。

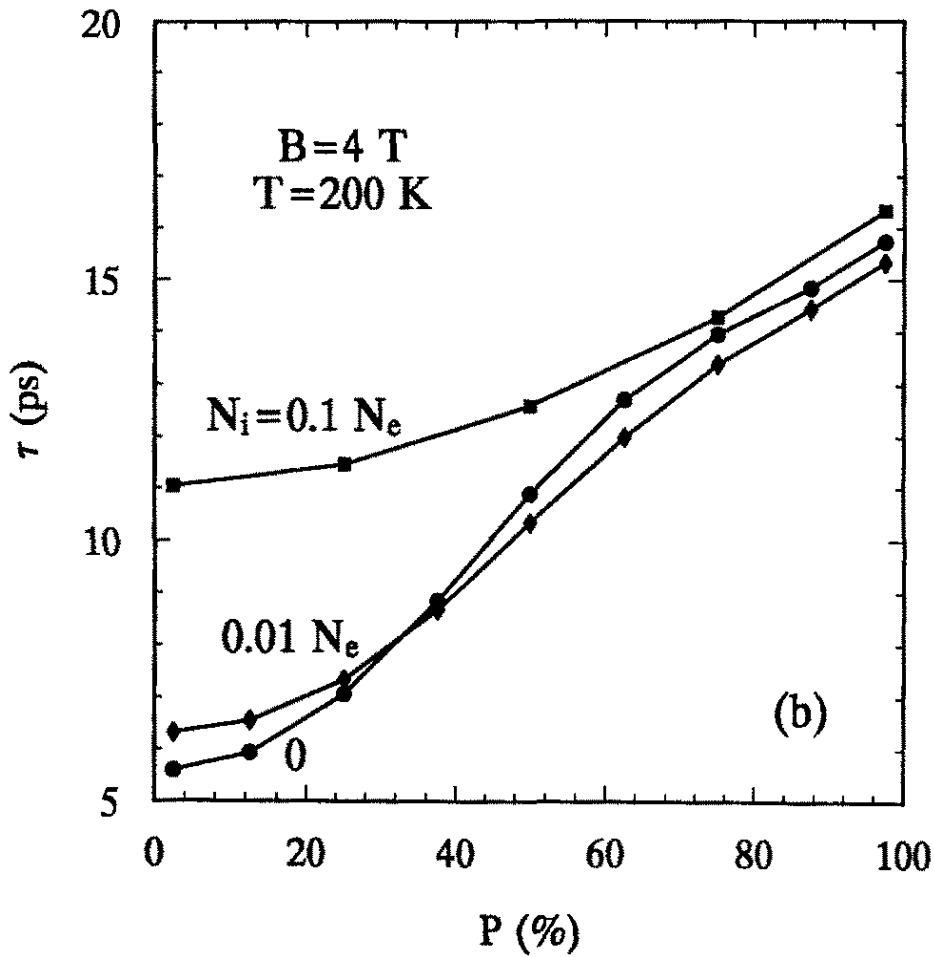


图 4.4(b): 温度 T 为 200 K 时不同杂质浓度下 GaAs 量子阱中的自旋去相位时间 τ 和初始自旋极化 P 的关系。圆(●): $N_i = 0$; 菱形(◆): $N_i = 0.01 N_e$; 方块(■): $N_i = 0.1 N_e$ 。为清楚见, 图中画出了点间连线。

旋极化，结果就使得共振峰的位置移向高初始自旋极化区域。当杂质浓度高达 $0.1N_c$ 时，HF 项被减少得太多，以至于无法形成共振峰。

此外，还需注意的是，在 120 K 温度下的低自旋极化区域中，引入杂质后 τ 先是下降；但是随着杂质浓度的继续增加（比如说从 $N_i = 0.01N_c$ 增加到 $N_i = 0.1N_c$ ）， τ 又会升高。Wu 等人指出 [142]，杂质散射对自旋去相位的影响有两个方面：一方面，电子—杂质散射和 DP 效应的各向异性结合给出了一个有效的自旋翻转散射 [29, 142]，同时通过和 DP 效应提供的非均匀扩展结合给出了一个新的自旋去相位渠道 [142, 144, 146, 143]。这个作用增强了自旋去相位。另一方面，这个散射也使得电子在动量空间重新分布，使得电子分布更为均匀。因此电子—杂质散射可以抑制 DP 项引起的各向异性，从而抑制有效自旋翻转散射，导致了自旋去相位减小。我们的结果显示了，在低温低极化时，当杂质浓度比较低的时候，杂质散射增加自旋去相位的作用更大，因此使得自旋去相位时间减小。当杂质浓度升高时，电子—杂质散射破坏 DP 项的各向异性的作用增大，因此自旋去相位时间随之升高。这个特征和图 4.4(b) 所示的高温情况有所不同。在高温时，自旋去相位时间总是随杂质浓度升高而升高。这是由于随着温度升高，DP 项导致的非均匀扩展减小（详见下节）。因此电子—杂质散射的第二个效果一直占主导，结果就是散射使得去相位减少而去相位时间随杂质浓度升高而升高。

4.3.3 自旋去相位时间和温度的依赖关系

上面我们讨论了在不同温度下自旋去相位和初始自旋极化的依赖关系，现在我们转入研究在不同初始自旋极化下的自旋去相位时间和温度的关系。从图 4.3(a) 和 4.3(b) 中我们可以看到，在低极化区间，自旋去相位时间 τ 随温度升高而升高；但在高极化区，自旋去相位时间 τ 随温度升高而降低。对于中间的区域， τ 和温度的关系非常复杂，不能使用温度的单调函数来描述它们之间的关系。在某些条件下， τ 对温度并不敏感，比如在 $P = 75\%$ ， $N_i = 0.1N_c$ 时，自旋去相位时间在不同温度下几乎保持不变。

为了更清楚地看出自旋去相位对温度的依赖关系，我们把图 4.3(a) 和 4.3(b) 所示 τ 在不同杂质浓度和不同初始自旋极化下表示成温度 T 的函数，重新画于 4.5(a) 和 4.5(b)。从图中可以看出，在低初始自旋极化下，对于所有的杂质浓度来说，自旋去相位时间都系统地随温度上升而上升。这个性质和按照以前只考虑 DP 的各向异性的简化模型来处理 DP 效应得到的结果是相反的。根据以前简化模型，当温度升高时，有更多的电子分布于波矢比较大的状态上，使得 DP 效应增强，因此自旋去相位时间应当随温度的升高而降低 [29, 34, 165, 182]。类似于第 2.3.2 节的讨论，在二维情况

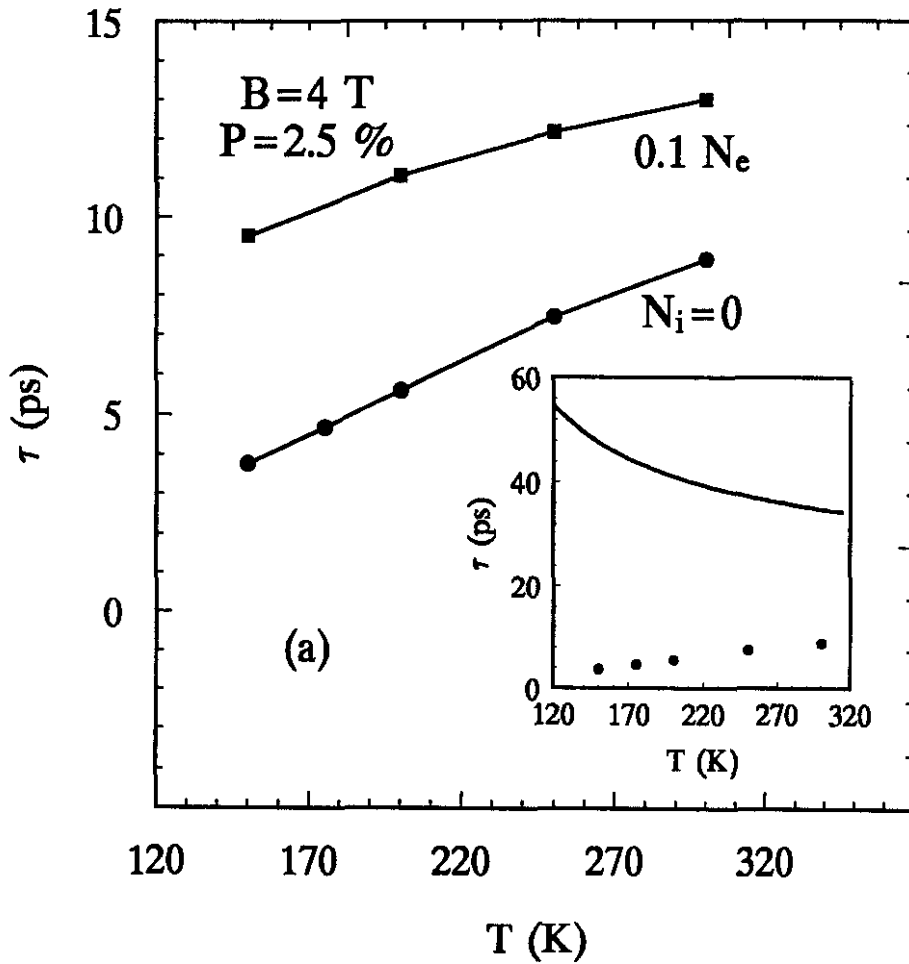


图 4.5(a): 初始自旋极化 $P = 2.5\%$ 时 GaAs 量子阱中的自旋 dephasing 时间 τ 和温度 T 的关系。圆 (●): $N_i = 0$; 方块 (■): $N_i = 0.1 N_e$ 。为清楚见, 图中画出了点间连线。插图是由前人简化模型预言的自旋去相位时间 (实线) 和我们模型所预言的去相位时间 (圆点) 的比较。

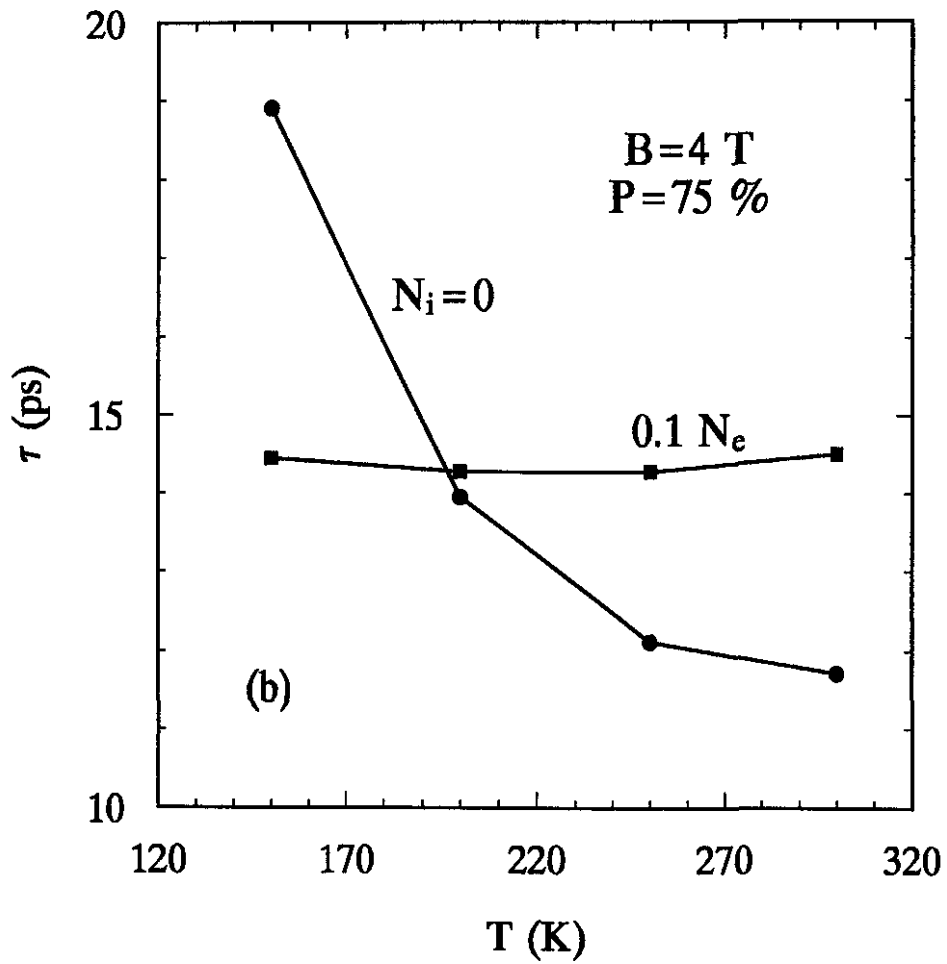


图 4.5(b): 初始自旋极化 $P = 75\%$ 时 GaAs 量子阱中的自旋 dephasing 时间 τ 和温度 T 的关系。圆(●): $N_i = 0$; 方块(■): $N_i = 0.1 N_e$ 。为清楚见, 图中画出了点间连线。

下, 自旋去相位时间为[143, 165, 166]:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\int_0^\infty dE_k (f_{k+\frac{1}{2}} - f_{k-\frac{1}{2}}) \Gamma(k)}{\int_0^\infty dE_k (f_{k+\frac{1}{2}} - f_{k-\frac{1}{2}})}, \quad (4.45)$$

其中

$$\Gamma(k) = 2\tau_1(k) \left[(\gamma(k_z^2))^2 k^2 - \frac{1}{2} \gamma(k_z^2) k^4 + \frac{1 + \tau_3(k)/\tau_1(k)}{16} \gamma^2 k^6 \right] \quad (4.46)$$

而

$$\tau_n^{-1}(k) = \int_0^{2\pi} \sigma(E_k, \theta) [1 - \cos(n\theta)] d\theta. \quad (4.47)$$

$\sigma(E_k, \theta)$ 表示微分散射界面。作为一个比较, 我们把由以前的简化模型预言的和由我们现在用多体理论预言的自旋去相位时间画在图4.5(a)的插图中。从这个插图中我们可以看到, 由以前的模型预言的自旋去相位时间要比我们理论给出的自旋去相位时间高出一个数量级。除此之外, 以前模型预言的去相位时间随温度升高而迅速下降, 而在我们的理论中, 它随温度略有点上升。

最近的实验表明, 当 n 型量子阱体系出于 DP 效应占主导的温度范围内时, 自旋去相位时间随温度升高稍有点上升[183] 或者随温度变化几乎不改变 [184]。另外, Song 等人最近的计算表明按照以前简化的方法来处理 DP 效应得到的自旋去相位时间和实验结果有很大的偏差。对于 GaAs 体材料, 他们得到的理论预言的自旋去相位时间大约要大于实验数据一个量级[185]。

因此, 我们可以看到, 从我们的多体理论得到结果不仅在定性上要优于以前的简化模型, 而且在定量上也比它要好。我们的理论之所以比以前的模型精确的主要原因在于以前的模型是建立在单粒子图像上的, 没有考虑到由 DP 项的内在非均匀扩展导致的去相位。这种自旋去相位机制完全是一种多体效应[142, 146, 143, 144, 145]。比较从两个模型得到的自旋去相位时间, 我们可以发现由非均匀扩展导致的自旋去相位是非常重要的。在我们计算的情况中, 自旋去相位由非均匀扩展主导。因此不难理解为什么用以前的简化模型得到的自旋去相位要比实验慢许多。

在考虑了非均匀扩展导致的自旋去相位之后, 自旋去相位时间和温度之间的依赖关系就很好理解了: 当温度升高时, 由于在波矢空间中电子分布得更为广泛, 每个波矢状态上分布的电子数减小, 因此非均匀扩展相应减少。其结果就是在低极化区域自旋去相位时间随温度升高而升高。另外, 需要注意的是, 在温度改变时, 非均匀扩展

的变化是比较微弱的。因此，除了在共振峰附近，自旋去相位时间只是轻微的随温度改变而改变。

在初始自旋极化比较高、HF 项贡献比较大的区域内讨论温度对自旋去相位的影响时，除了上面提到的两个效应之外，我们还需要考虑 HF 和温度的依赖关系。总体说来，由于这几个因素的综合作用，自旋去相位时间和温度的关系过于复杂，无法用一个单调函数来描述它们之间的关系。在图 4.5(b) 中我们画出在 $P = 75\%$ （接近于图 4.3(a) 所示的反常峰附近）这个特殊极化下的自旋去相位时间和温度的关系图。从图中我们可以看到，在没有杂质的系统中，当温度升高时，由于 HF 项减小，共振被消除，自旋去相位时间随之急剧下降。相反地，在杂质浓度 $N_i = 0.1N_c$ 的系统中，HF 项的贡献不如在没有杂质的系统中重要，自旋去相位时间对温度并不敏感。

4.3.4 自旋去相位和磁场的依赖关系

现在我们开始研究自旋去相位和磁场的依赖关系。在图 4.6 中，我们画出了在不同杂质浓度，不同初始自旋极化下的自旋去相位时间和外加磁场的关系。可以看到，在我们研究的所有情况中，自旋去相位时间总是随外加磁场的增加而增加的。这是由于受外加磁场作用，电子自旋会绕这个磁场做 Larmor 进动。这种有序的进动会抑制电子自旋围绕有效磁场 $\hbar(\mathbf{k})$ 进行的近乎无序的进动 [34, 186]，从而抑制了自旋去相位，导致自旋去相位时间随磁场增大而增长。对于三维的情况，除了电子自旋绕磁场的 Larmor 进动之外，磁场还会引起电子自身在动量空间中绕其进动。这个进动限制了电子在动量空间中的运动，从而在动量空间中引入了额外的对称性 [34, 142, 186]，因此进一步降低了自旋去相位。但是对于二维情况，由于电子动量在 z 方向上的分量被量子化，电子动量绕磁场的进动被抑制。因而可以预期在二维体系中这种效应不如三维体系中重要。

从图 4.6 中可以看出，磁场对自旋去相位的作用除了上面说的效果之外，还会增强 HF 项的作用。根据前面的讨论，在高自旋极化区域，HF 项具有非常重要的作用。HF 项相当于提供了另外一个磁场，会进一步一致 DP 项 $\hbar(\mathbf{k})$ 的作用，造成了 τ - B 曲线随磁场增加而上升得更快。为更清楚看出外加磁场和 HF 项的共同作用对自旋去相位的影响，我们在图 4.7 中画出了自旋去相位时间和初始自旋极化的关系。从图中可以看出，随磁场升高， τ 随 P 的增大的速度也加快。而且 τ - P 曲线中的共振峰的位置也随磁场的增加而向右移动。这是因为当磁场增大时，为了达到共振条件需要更大的 HF 项，因此也需要更大的初始自旋极化，才能满足条件。当磁场大到 8 T，对于所有可能达到的自旋极化都不可能达到共振条件。其结果就是在 τ - P 曲线中没有共振峰，自旋去相位时间随极化单调上升。

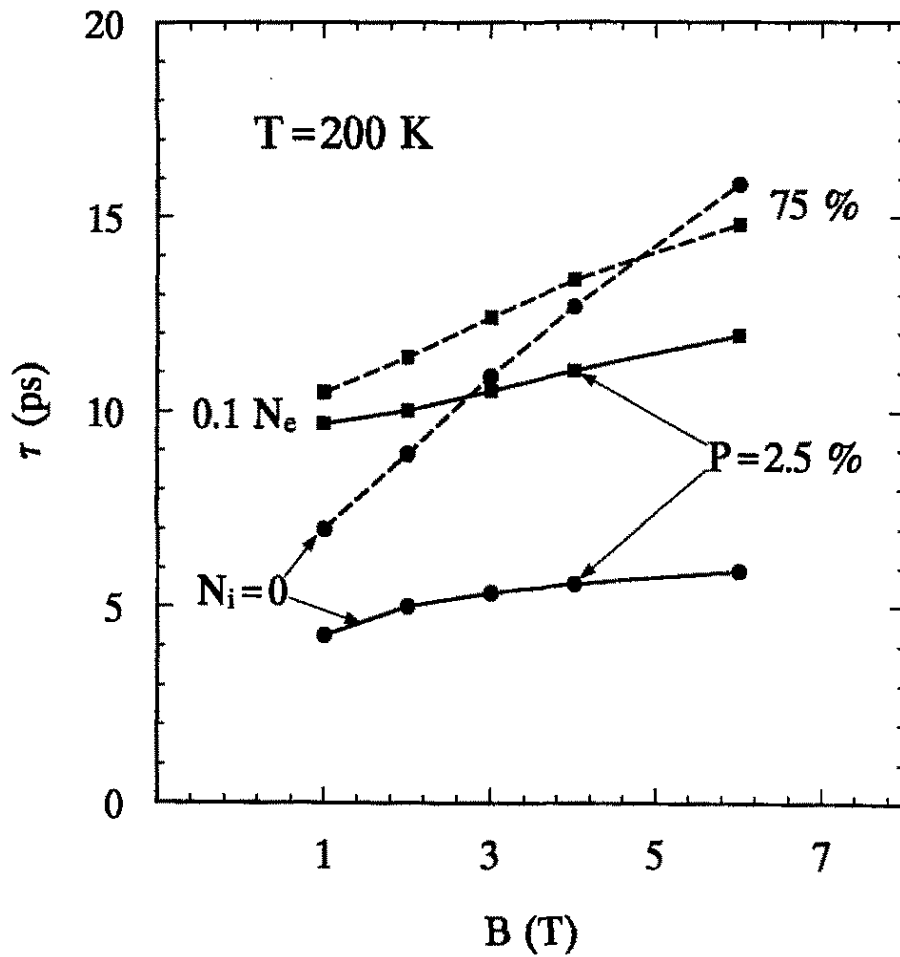


图 4.6: GaAs 量子阱中不同自旋极化、不同杂质浓度下自旋去相位时间和外加磁场的关系。带圆点的实线: $N_i = 0, P = 2.5\%$; 带方块的实线: $N_i = 0.1N_e, P = 2.5\%$; 带圆点的虚线: $N_i = 0, P = 75\%$; 带方块的虚线: $N_i = 0.1N_e, P = 75\%$ 。

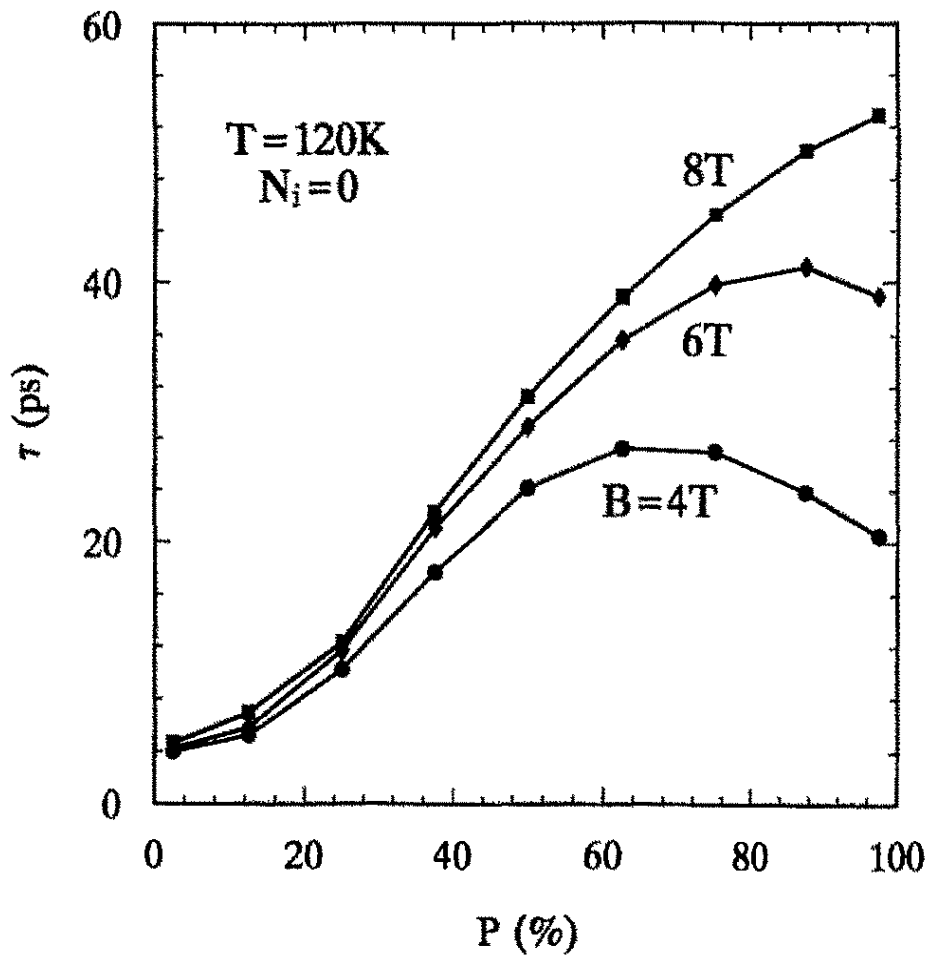


图 4.7: GaAs 量子阱中不同外磁场下自旋去相位时间和初始极化的关系。圆点(\bullet): $B=4$ T; 菱形(\blacklozenge): $B=6$ T; 方块(\blacksquare): $B=8$ T.

4.3.5 自旋去相位和电子密度的依赖关系

我们转入研究电子密度和自旋去相位的关系。我们计算了一个 GaAs 量子阱中不同自旋极化下的自旋去相位时间和电子浓度的关系，结果如图 4.8 所示。从图中可以看出，在低自旋极化时候，当电子浓度从 $N_e = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 增加到 $N_e = 40 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 时，自旋去相位时间随之从 $\tau = 7.8 \text{ ps}$ 降低到 $\tau = 2 \text{ ps}$ 。这是由于当电子浓度升高时，更多的电子分布在动量大的状态上。而 DP 项是随动量的增大而增大的，所以电子浓度增加就会增强 DP 项的作用，从而导致自旋去相位时间减小。但是对于自旋极化比较高时，比如说在我们考查的 $P = 75\%$ 的情况下，去相位时间先是从 $N_e = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 的 12.6 ps 增加到 $N_e = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 的 14.3 ps 。但是当电子浓度进一步增加时，自旋去相位时间又开始减小。这是因为当电子浓度升高时，每个态上的电子占据数 $f_{k\sigma}$ 都增加，因此 HF 项也随之增长。即电子浓度升高造成 HF 项和 DP 项都增大，当电子浓度升高到某一个恰当的浓度时，HF 项、DP 项和外加磁场一起作用正好达到共振条件，因此自旋去相位时间升到最高。当电子浓度进一步增加时，共振条件消失，而由于 DP 项增加导致的自旋去相位增强的效果占主导，自旋去相位时间又随电子浓度升高而下降。

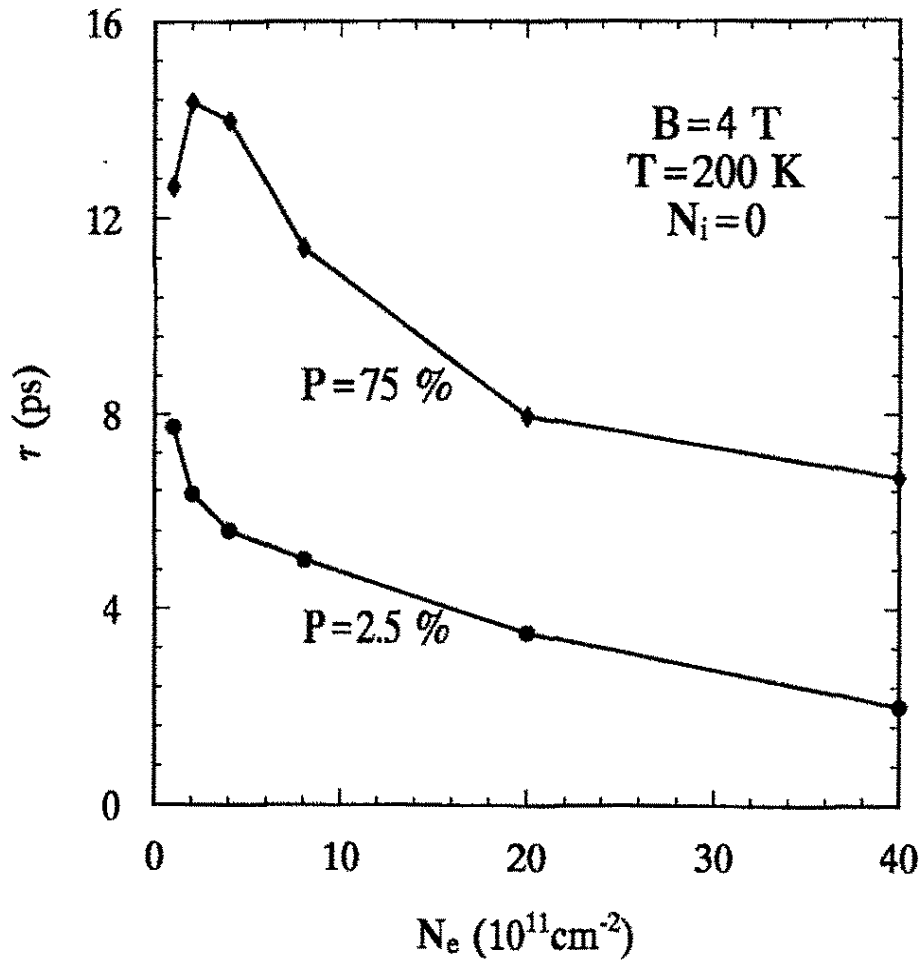


图 4.8: 不同自旋极化下 GaAs 量子阱中的自旋去相位时间和总电子密度的关系, $T = 200 \text{ K}$, $B = 4 \text{ T}$, $N_i = 0$, $P = 2.5\%$ (●); $P = 75\%$ (◆)。

第五章

GaAs 量子阱中自旋输运

第二类自旋电子器件，比如自旋晶体管、自旋阀等，是利用电子自旋做信息载体来实现它们的功能的，因此在这类器件中会涉及到自旋极化的电子在外加电场驱动下或者通过扩散的方式从一个地方输运到另外一个地方的问题。因此研究在各种条件下自旋极化电子的输运行为对实现和优化这类器件具有非常重要的意义。目前自旋输运的研究工作大部分集中在如何提高自旋注入效率[187, 98, 99, 113, 114, 115, 116, 118, 119, 120, 121, 122, 123, 124, 125, 126, 127, 128, 129]。除此之外，实验上还有少量的有关自旋相干在经过宏观长的距离的输运之后仍然得以保持的报导[38, 90, 188]。在理论方面，绝大部分的工作都是建立在近独立电子模型（QIEM）上的，以此模型为基础建立有关自旋极化电流的扩散方程，从而得到纵向自旋去相位长度（通常又称为自旋扩散长度）。这些研究主要集中于漂移—扩散输运范围[189, 12, 190, 191, 192, 193, 194, 195]。在这些理论中造成电子自旋驰豫的机制是由自旋翻转散射，如果没有自旋翻转散射，在无外加磁场的样品中自旋极化不会有衰减。到目前为止，只有极少量的工作是应用多体方法来研究自旋输运的，比如Takahashi 曾经应用多体动力学方程并使用驰豫时间近似来考虑由散射导致的自旋驰豫，从而计算自旋扩散[196, 197]。

5.1 漂移—扩散方程

下面我们先介绍目前研究自旋输运使用最广的基于近独立电子模型的漂流—扩散方程方法[189, 12, 190, 191, 192, 193, 194, 195]。这种方法和把自旋类比为电荷，使用在半导体中常用的研究双极输运的方法来研究自旋输运[198, 190]。考虑 n 型半导体（ p 型半导体可以类似处理），假设系统是均匀的、没有空间电荷分布，那么对于自旋向上和自

旋向下的电子，其在位置 \mathbf{R} 处的电流密度分别为

$$\mathbf{j}_{\uparrow}(\mathbf{R}) = \sigma_{\uparrow} \mathbf{E} + eD_{\uparrow} \nabla n_{\uparrow}(\mathbf{R}), \quad (5.1)$$

$$\mathbf{j}_{\downarrow}(\mathbf{R}) = \sigma_{\downarrow} \mathbf{E} + eD_{\downarrow} \nabla n_{\downarrow}(\mathbf{R}), \quad (5.2)$$

这两个方程右边的第一项是在电场 \mathbf{E} 的驱动下产生的漂移电流， $\sigma_s (s = \uparrow, \downarrow)$ 是自旋为 s 的电子的电导；第二项为由于某种自旋的电子在不同位置上的浓度不同导致电子扩散产生的电流，其中 $-e$ 为电子电荷， D_s 为自旋为 s 的电子的扩散系数，为简单起见可以假设它们和自旋无关，即 $D_{\uparrow} = D_{\downarrow} = D$ ，而 $n_s(\mathbf{R})$ 代表在位置 \mathbf{R} 处的密度。自旋为 s 的电导为

$$\sigma_s = n_s(\mathbf{R}) e \mu_s, \quad (5.3)$$

式中 μ_s 为迁移率，为了简单起见也可以假设迁移率和电子的自旋方向无关 $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow} = \mu$ 。在有自旋翻转散射的时候，由于自旋翻转散射导致的电子数目的改变分别为

$$\left. \frac{\partial n_{\uparrow}(\mathbf{R})}{\partial t} \right|_{\text{SF}} = -\frac{n_{\uparrow}(\mathbf{R})}{\tau} + \frac{n_{\downarrow}(\mathbf{R})}{\tau}, \quad (5.4)$$

$$\left. \frac{\partial n_{\downarrow}(\mathbf{R})}{\partial t} \right|_{\text{SF}} = -\frac{n_{\downarrow}(\mathbf{R})}{\tau} + \frac{n_{\uparrow}(\mathbf{R})}{\tau}, \quad (5.5)$$

在这里使用了驰豫时间近似， $1/\tau$ 表示自旋向上（向下）的电子被散射成自旋向下（向上）电子的速率。由连续性要求，有

$$\frac{\partial n_{\uparrow}(\mathbf{R})}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{j}_{\uparrow}(\mathbf{R}) - \frac{n_{\uparrow}(\mathbf{R})}{\tau} + \frac{n_{\downarrow}(\mathbf{R})}{\tau}, \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial n_{\downarrow}(\mathbf{R})}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{j}_{\downarrow}(\mathbf{R}) - \frac{n_{\downarrow}(\mathbf{R})}{\tau} + \frac{n_{\uparrow}(\mathbf{R})}{\tau}, \quad (5.7)$$

把电流表达式 (5.1) 和 (5.2) 代入，并把 (5.6) 和 (5.7) 相减，并考虑到在空间电荷均匀的系统 $\nabla \cdot \mathbf{E} \equiv 0$ ，得到

$$\begin{aligned} \frac{\partial [n_{\uparrow}(\mathbf{R}) - n_{\downarrow}(\mathbf{R})]}{\partial t} &= \mu \mathbf{E} \cdot \nabla [n_{\uparrow}(\mathbf{R}) - n_{\downarrow}(\mathbf{R})] + D \nabla^2 [n_{\uparrow}(\mathbf{R}) - n_{\downarrow}(\mathbf{R})] \\ &\quad - \frac{n_{\uparrow}(\mathbf{R}) - n_{\downarrow}(\mathbf{R})}{\tau}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

假设电场沿 x 轴方向，并且在 $x = 0$ 处有一恒定的自旋极化的流注入，即边界条件为

$$n_{\uparrow}(0) - n_{\downarrow}(0) \equiv \text{const}, \quad (5.9)$$

当系统达到稳态时, $\partial[n_{\uparrow}(\mathbf{R}) - n_{\downarrow}(\mathbf{R})]/\partial t \equiv 0$, 不难得到方程(5.8)的解为:

$$[n_{\uparrow}(\mathbf{R}) - n_{\downarrow}(\mathbf{R})] = [n_{\uparrow}(0) - n_{\downarrow}(0)]e^{-x/L}, \quad (5.10)$$

其中 L 为注入长度,

$$L = \left[\frac{E\mu}{D} + \sqrt{\left(\frac{E\mu}{D}\right)^2 + \frac{1}{L_s^2}} \right]^{-1}, \quad (5.11)$$

而 L_s 是外电场 $E = 0$ 时的注入长度 (即扩散长度),

$$L_s = \sqrt{D\tau}. \quad (5.12)$$

从方程的解(5.10)的形式我们可以看到, 在恒定注入而达到稳态的情况下, 自旋极化随位置指数下降, 当位置超过注入长度 L 时, 自旋极化已经大大减小。注入长度和外加电场有关, 当外加电场方向和注入流方向一致时, 注入长度增大; 反之则注入长度减小。当外场降为零时, 注入长度由扩散系数和自旋翻转散射的驰豫时间之积决定。

尽管 Flatte 等人声称上面所描述的近独立电子模型可以解释在扩散输运中里测量到的各种有关自旋寿命的实验事实[199], 但是人们对近独立电子模型是否足以解释半导体中的自旋输运的实验结果以及多体过程是否重要仍然抱有相当的疑问[6]。从上面的推导中我们看到近独立电子模型把自旋类比为电荷, 应用驰豫时间近似来描述自旋去相位过程。在这个假设中, 过剩的自旋向上 (向下) 的电子被散射到自旋向下 (向上) 的状态之后, 就不会再回到自旋向上 (向下) 的状态。由于产生电子-空穴对需要很大的能量, 电子-空穴复合之后就不会再产生新的电子-空穴对, 因此在讨论电输运时类似的假设是合理的。但是在讨论自旋输运时, 由于电子自旋在外加磁场或者 DP 效应产生的有效磁场作用下很容易翻转成另外一种状态, 这个假设有可能不是很合理的。另外, 我们从 Wu 等人的工作和第四章中讨论的结果可以看到, 在研究 n 型半导体中的自旋去相位问题时, 多体效应非常的重要, 在某些情况下多体效应产生的去相位甚至是体系中主要的自旋去相位机制。因此可以预计多体效应在 n 型半导体中的自旋输运也会扮演重要的角色。从下一节开始我们把第四章中的多体理论推广到具有空间不均匀性的系统中, 用来研究 n 型 GaAs 量子阱中的自旋输运问题。

5.2 模型和动力学方程

和第四章中一样, 我们研究的体系是在一个阱宽为 a 的 n 型 GaAs (100) 量子阱, 其生长方向为 z 轴方向。在 x 方向上施加一个大小适当的外磁场 \mathbf{B} 以及外电场 \mathbf{E} 。电子的

状态有 z 方向上的子带指标 n ，二维波矢 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 以及自旋指标 σ 来表示。我们同样假设 z 方向上的子带分离得足够远，可以只考虑最低子带。由于是在 n 型材料中，自旋去相位机制主要是 DP 机制[29]。在考虑了 DP 项之后，量子阱中电子的 Hamiltonian 为

$$H = \sum_{\sigma\sigma'} \int dx \psi_{\sigma'}^{\dagger}(x) \left\{ -\frac{\nabla^2}{2m^*} \delta_{\sigma\sigma'} + [g\mu_B \mathbf{B} + \mathbf{h}(-i\nabla)] \cdot \frac{\vec{\sigma}_{\sigma\sigma'}}{2} + \Psi(\mathbf{r}) \right\} \psi_{\sigma'}(x) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int dx_1 dx_2 \psi_{\sigma}^{\dagger}(x_1) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(x_2) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \psi_{\sigma'}(x_2) \psi_{\sigma}(x_1) + H_I, \quad (5.13)$$

其中 $\psi_{\sigma}(x)$ 是自旋 z 分量为 σ 的电子的场算符。 $x = (\mathbf{r}, t)$ 为时空点。 $\vec{\sigma}$ 是 Pauli 矩阵。

GaAs 量子阱中的 DP 项 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 的表达式见公式(4.4)-(4.6)。和考查自旋去相位问题不同的是，我们这里同时考虑了 Rashba 项的影响。Hamiltonian 表达式 (5.13) 中的 $\Psi(\mathbf{r})$ 是电势。它满足 Poisson 方程：

$$\nabla_{\mathbf{r}}^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = -e[n(\mathbf{r}, t) - n_0(\mathbf{r})]/\kappa_0, \quad (5.14)$$

其中 κ_0 是静态介电常数。

$$n(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma} \langle \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{\sigma}(x) \rangle \quad (5.15)$$

是在时刻 t 位置 \mathbf{r} 处的电子密度。 $n_0(\mathbf{r})$ 则表示背景正电荷密度。Hamiltonian 表达式 (5.13) 中的第二项为电子—电子 Coulomb 相互作用 H_{ee} ，其中 $V(\mathbf{r})$ 代表 Coulomb 势。和第四章中一样，相互作用 Hamiltonian H_I 由电子—LO 声子相互作用 H_{LO} ，电子—声学声子相互作用 H_{AC} ，以及电子—非磁性杂质散射 H_i 组成。它们的表达式见第四章或者文献[150, 200]。

定义如下 Green 函数：

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_2 t_2) = -i \langle T_c \{ \psi_{\sigma}(\mathbf{r}_1 t_1) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}_2 t_2) \} \rangle. \quad (5.16)$$

应用非平衡 Green 函数方法，Green 函数 (5.16) 满足方程

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_1} [(G_{\sigma\sigma_1}^0(\mathbf{r}_1, t_1))^{-1} - \Psi(\mathbf{r}_1, t_1) \delta_{\sigma, \sigma_1}] G_{\sigma_1 \sigma'}^<(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_2 t_2) = \\ \sum_{\sigma_1} \Sigma_{\sigma\sigma_1}^{\text{Coh}}(\mathbf{r}_1, t_1) G_{\sigma_1 \sigma'}^<(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_2 t_2) \\ + \sum_{\sigma_1} \int d\mathbf{r}_3 dt_3 \Sigma_{\sigma\sigma_1}^{\text{Scatt}r}(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_3 t_3) G_{\sigma_1 \sigma'}^<(\mathbf{r}_3 t_3, \mathbf{r}_2 t_2) \end{aligned}$$

$$+ \sum_{\sigma_1} \int dr_3 dt_3 \Sigma_{\sigma\sigma_1}^{\text{Scatt} <}(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_3 t_3) G_{\sigma_1 \sigma'}^a(\mathbf{r}_3 t_3, \mathbf{r}_2 t_2) \quad (5.17)$$

以及

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_1} G_{\sigma\sigma_1}^<(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_2 t_2) [(G_{\sigma_1 \sigma'}^0(\mathbf{r}_2, t_2))^{-1} - \Psi(\mathbf{r}_2, t_2) \delta_{\sigma_1, \sigma'}] = \\ \sum_{\sigma_1} G_{\sigma\sigma_1}^<(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_2 t_2) \Sigma_{\sigma_1 \sigma'}^{\text{Coh}}(\mathbf{r}_2, t_2) \\ + \sum_{\sigma_1} \int dr_3 dt_3 G_{\sigma\sigma_1}^r(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_3 t_3) \Sigma_{\sigma_1 \sigma'}^{\text{Scatt} <}(\mathbf{r}_3 t_3, \mathbf{r}_2 t_2) \\ + \sum_{\sigma_1} \int dr_3 dt_3 G_{\sigma\sigma_1}^<(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_3 t_3) \Sigma_{\sigma_1 \sigma'}^{\text{Scatt} <}(\mathbf{r}_3 t_3, \mathbf{r}_2 t_2) \end{aligned} \quad (5.18)$$

其中 $G_{\sigma\sigma'}^0(\mathbf{r}, t)$ 是自由电子 Green 函数,

$$[G_{\sigma\sigma'}^0(\mathbf{r}, t)]^{-1} = (i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m^*} \nabla_{\mathbf{r}}^2) \delta_{\sigma, \sigma'}. \quad (5.19)$$

Σ^{Coh} 和 Σ^{Scatt} 分别为自能的相干部分和散射部分。把 (5.17) 和 (5.20) 两式相减, 得

$$\begin{aligned} [(G^0)^{-1} - \Psi - \Sigma^{\text{Coh}}, G^<](\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_2 t_2) = \\ (\Sigma^{\text{Scatt} r} G^< + \Sigma^{\text{Scatt} <} G^a - G^r \Sigma^{\text{Scatt} <} - G^< \Sigma^{\text{Scatt} r})(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_2 t_2). \end{aligned} \quad (5.20)$$

其中 G 和 Σ 表示 $G_{\sigma\sigma'}$ 和 $\Sigma_{\sigma\sigma'}$ 组成的矩阵, 而符号 $(AB)(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_2 t_2)$ 表示

$$(AB)(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_2 t_2) = \int dr_3 dt_3 A(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_3 t_3) B(\mathbf{r}_3 t_3, \mathbf{r}_2 t_2). \quad (5.21)$$

令

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \quad (5.22)$$

把 Green 函数转化到这个新坐标系下

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t_1, t_2) \equiv G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2} t_1, \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2} t_2), \quad (5.23)$$

对 \mathbf{r} 做 Fourier 变换, 得到 Wigner 坐标下的 Green 函数

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t_1, t_2) = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t_1, t_2) \quad (5.24)$$

把方程 (5.20) 转化到 Wigner 坐标下, 利用梯度展开[150, 200]:

$$(AB)(\mathbf{R}, \mathbf{k}; t_1, t_2) = A(\mathbf{R}, \mathbf{k}; t_1, t_2) B(\mathbf{R}, \mathbf{k}; t_1, t_2)$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{i}{2} \nabla_{\mathbf{R}} A(\mathbf{R}, \mathbf{k}; t_1, t_2) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} B(\mathbf{R}, \mathbf{k}; t_1, t_2) \\
 & - \frac{i}{2} \nabla_{\mathbf{k}} A(\mathbf{R}, \mathbf{k}; t_1, t_2) \cdot \nabla_{\mathbf{R}} B(\mathbf{R}, \mathbf{k}; t_1, t_2) \quad (5.25)
 \end{aligned}$$

以及推广的 Kadanoff-Baym 假设, 并令 $t_1 = t_2 = t$, 我们得到如下 Bloch 动力学方程:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} & - \frac{1}{2} \{ \nabla_{\mathbf{R}} \bar{\varepsilon}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t), \nabla_{\mathbf{k}} \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \} + \frac{1}{2} \{ \nabla_{\mathbf{k}} \bar{\varepsilon}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t), \nabla_{\mathbf{R}} \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \} \\
 & - \left. \frac{\partial \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{Coh}} = \left. \frac{\partial \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{Scatt}} \quad (5.26)
 \end{aligned}$$

其中 $\rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \equiv G^<(\mathbf{R}, \mathbf{k}; t, t)$ 为单粒子密度矩阵。其对角项为在 t 时刻位于 \mathbf{R} 处波矢为 \mathbf{k} 的电子分布函数 $\rho_{\sigma\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) = f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)$; 非对角项 $\rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)$ 为自旋子带之间的极化, 也称为自旋相干。准粒子能量 $\bar{\varepsilon}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)$ 具有如下表达式

$$\bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) = \varepsilon_{\mathbf{k}} \delta_{\sigma\sigma'} + [g\mu_B \mathbf{B} + \mathbf{h}(\mathbf{k})] \cdot \frac{\vec{\sigma}_{\sigma\sigma'}}{2} - e\Psi(\mathbf{R}, t) + \Sigma_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t). \quad (5.27)$$

在此 $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2/2m^*$ 是自由电子的能谱;

$$\Sigma_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) = - \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}(\mathbf{R}, t) \rho_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{q}, t) \quad (5.28)$$

是 Hartree-Fock 能量。 $V_{\mathbf{q}}(\mathbf{R}, t)$ 是 Coulomb 矩阵元, 在空间非均匀的二维体系中, $V_{\mathbf{q}}(\mathbf{R}, t)$ 形如下式,

$$V_{\mathbf{q}}(\mathbf{R}, t) = \sum_{q_z} \frac{4\pi e^2}{\kappa_0 [\mathbf{q}^2 + q_z^2 + \kappa^2(\mathbf{R}, t)]} |I(iq_z)|^2, \quad (5.29)$$

其中 $\kappa(\mathbf{R}, t) = 2e^2 m^* / [\kappa_0 \sum_{\sigma} f_{\sigma}(\mathbf{R}, k=0, t)]$ 是屏蔽长度的倒数。形状因子的表达式由公式 (4.9) 给出。方程 (5.26) 中的 $\partial \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) / \partial t|_{\text{Coh}}$ 和 $\partial \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) / \partial t|_{\text{Scatt}}$ 分别是相干项和散射项。

动力学 Bloch 方程 (5.26) 左边的头三项和 Boltzmann 方程中的漂移项类似, 不过在这里加了自旋相干 $\rho_{\sigma-\sigma}$, DP 项和 HF 自能修正的影响。相干项 $\partial \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) / \partial t|_{\text{Coh}}$ 描述了电子自旋在经过电场和电子-电子相互作用修正之后的外磁场和 DP 效应产生的有效磁场 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 作用下的进动。对于电子分布函数而言, 它们的表达式形如

$$\left. \frac{\partial f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{Coh}} = -2\text{Im}[\bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)] \quad (5.30)$$

而对于自旋相干, 其表达式为

$$\left. \frac{\partial \rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{Coh}} = i[\bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) - \bar{\varepsilon}_{-\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)] \rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)$$

$$+ i\bar{\epsilon}_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)[f_{-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) - f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)] \quad (5.31)$$

散射项 $\partial f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)/\partial t|_{\text{Scatt}}$ 和 $\partial \rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)/\partial t|_{\text{Scatt}}$ 的表达式的形式与空间均匀体系中的相应的散射项 (4.37) 和 (4.38) 一致, 只是要把方程 (4.37) 和 (4.38) 中的电子分布函数以及自旋相干换成于位置 \mathbf{R} 有关的电子分布函数和自旋相干, 为清楚起见, 我们重复如下,

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \Big|_{\text{Scatt}} &= \left\{ -2\pi \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda} |g_{\mathbf{q}\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \Omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}) \right. \\ &\times \left[N_{\mathbf{q}\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda} (f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) - f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t)) + f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \right. \\ &\left. (1 - f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t)) - \text{Re}(\rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)\rho_{\sigma-\sigma}^*(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t)) \right] \\ &- 2\pi N_i \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}}^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \left[f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)(1 - f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t)) - \text{Re}(\rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \right. \\ &\left. \times \rho_{\sigma-\sigma}^*(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t)) \right] - 2\pi \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}\sigma'} V_{\mathbf{q}}^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}) \\ &\times \left[(1 - f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t))f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)(1 - f_{\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}', t))f_{\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}'-\mathbf{q}, t) \right. \\ &- f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t)(1 - f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t))f_{\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}', t)(1 - f_{\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}'-\mathbf{q}, t)) \\ &+ \text{Re}(\rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t)\rho_{-\sigma\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t))(f_{\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}', t) - f_{\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}'-\mathbf{q}, t)) \\ &\left. + \text{Re}(\rho_{\sigma'-\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}', t)\rho_{-\sigma'\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}'-\mathbf{q}, t))(f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) - f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t)) \right] \left. \right\} \\ &- \left\{ \mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}' \leftrightarrow \mathbf{k}'-\mathbf{q} \right\} \quad (5.32) \end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \Big|_{\text{Scatt}} &= \left\{ -\pi \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda} g_{\mathbf{q}\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \Omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}) \right. \\ &\times \left[(f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) + f_{-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t))\rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t) \right. \\ &+ (f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t) + f_{-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t) - 2)\rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \\ &\left. - 2N_{\mathbf{q}\mathbf{q}\mathbf{z}\lambda}(\rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) - \rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t)) \right] \\ &- \pi N_i \sum_{\mathbf{q}\lambda} U_{\mathbf{q}}^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \left[(f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) + f_{-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t))\rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t) \right. \\ &\left. - (2 - f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t)f_{-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, t))\rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \right] \\ &- \pi \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}\sigma'} V_{\mathbf{q}}^2 \pi \delta(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left\{ (f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{q}, t)\rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) + \rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{q}, t)f_{-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)) \right. \\
 & \times (f_{\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}', t) - f_{\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}' - \mathbf{q}, t)) + \rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \left[(1 - f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}', \sigma', t)) \right. \\
 & \times f_{\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}' - \mathbf{q}, t) - \rho_{\sigma'-\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}', t)\rho_{-\sigma'\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}' - \mathbf{q}, t) \left. \right] \\
 & - \rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{q}, t) \left[f_{\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}' - \mathbf{q}, t)(1 - f_{\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{q}, t)) \right. \\
 & \left. \left. - \rho_{\sigma'-\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}', t)\rho_{-\sigma'\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}' - \mathbf{q}, t) \right] \right\} \\
 & - \left\{ \mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k}' \leftrightarrow \mathbf{k}' - \mathbf{q} \right\}. \tag{5.33}
 \end{aligned}$$

方程 (5.26)-(5.33) 和特定的边界条件以及初始条件结合起来组成了一套完备的动力学方程。只要求解这套动力学方程我们就可以研究半导体中的自旋输运。

5.3 简化的动力学方程

一般的动力学 Bloch 方程形式上过于复杂，无法得到其解析解。我们先研究两种可以得到精确解的简化情况。

我们先从 Bloch 方程 (5.26) 推导出近独立电子模型下的扩散方程。这可以按照如下方式进行：DP 机制形成了一个有效磁场，它可以使得电子的自旋向上（向下）的电子翻转到自旋向下（向上）的状态上去。DP 项和散射结合起来导致了横向的自旋去相位。我们使用驰豫时间近似来描述这个过程自旋去相位过程，并舍弃掉自旋相干 $\rho_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)$ 以及 DP 项，以避免重复计算 DP 机制的作用。由此可得如下的简化形式的 Bloch 方程

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} & - \nabla_{\mathbf{R}} \bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) - \nabla_{\mathbf{k}} \bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{R}} f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \\
 & = - \frac{f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) - f_0(\mathbf{R}, \mathbf{k})}{\tau}, \tag{5.34}
 \end{aligned}$$

其中 τ 为自旋去相位时间， $f_0(\mathbf{R}, \mathbf{k})$ 代表在平衡态时候的电子分布函数。把上式对所有 \mathbf{k} 求和，我们就得到自旋为 σ 的电子的连续性方程，

$$\frac{\partial n_{\sigma}(\mathbf{R}, t)}{\partial t} - \frac{1}{e} \nabla_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{J}_{\sigma}(\mathbf{R}, t) = - \frac{n_{\sigma}(\mathbf{R}, t) - n_0(\mathbf{R})}{\tau_s}, \tag{5.35}$$

其中 $n_{\sigma}(\mathbf{R}, t) = \sum_{\mathbf{k}} f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)$ 为在 t 时刻位于 \mathbf{R} 的自旋为 σ 的电子密度， $n_0(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{k}} f_0(\mathbf{R}, \mathbf{k})$ 是在平衡下相应的电子密度。 $\mathbf{J}_{\sigma}(\mathbf{R}, t) = \sum_{\mathbf{k}} (-e) \mathbf{v}_{\sigma\mathbf{k}} f_{\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)$ 是自旋为 σ

第五章 GAAS 量子阱中自旋输运

电流。和自旋有关的速度为 $\mathbf{v}_{\sigma\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{k}} \bar{\epsilon}_{\sigma\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)$ 。把 Bloch 方程乘上 $\mathbf{v}_{\sigma\mathbf{k}}$ ，保留到最低项（即忽略和自旋相干 $\rho_{\sigma-\sigma}$ 有关的项），并用另外一个驰豫时间近似来描述散射，对 \mathbf{k} 求和之后即得到在静态时的电流

$$\mathbf{J}_{\sigma}(\mathbf{R}, t) = n_{\sigma}(\mathbf{R}, t) e \mu \mathbf{E}(\mathbf{R}, t) + e D \nabla_{\mathbf{R}} n_{\sigma}(\mathbf{R}, t), \quad (5.36)$$

其中 μ 和 D 分别代表了电子的迁移率和扩散系数。方程 (5.35) 和 (5.36) 就是在近独立电子模型下得到的自旋漂移—扩散方程 (5.1)–(5.7) [189, 12, 191, 195]。在电场为零的时候，由这个方程的解得到的自旋信号在扩散方向上指数衰减。从推导中我们可以看到，造成衰减的原因是 DP 项和散射一起作用导致的自旋去相位。如果没有这个自旋去相位，即 $\tau = \infty$ ，自旋信号将随扩散一直保持下去而不产生衰减。

从上面的这个扩散方程的推导过程我们可以看到，对 \mathbf{k} 求和之后， $\nabla_{\mathbf{R}} \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)$ 中的系数对 \mathbf{k} 的倚赖关系都被去掉了。在研究电荷输运的时候，由于电荷不会不停的在正负电荷之间转变，这种作法不会引起多少问题；但是在自旋输运的时候，自旋取向不同的电子在磁场（外加磁场或者 DP 机制产生的有效磁场）作用下会不停的相互翻转，输运系数对 \mathbf{k} 的这种依赖关系可能造成额外的自旋退相干。

为了更好的了解这个效应，我们现在讨论另外一个简化的 Bloch 方程。我们考查当方程 (4.34) 中舍弃 DP 项 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 、HF 自能修正以及各种散射项被舍弃的情况。假设自旋扩散沿 x 方向上，当外加电场为零，系统达到静态时的方程为

$$\frac{k_x}{m^*} \partial_x f_{\sigma}(x, \mathbf{k}) + g \mu_B B \text{Im}[\rho_{\sigma, -\sigma}(x, \mathbf{k})] = 0, \quad (5.37)$$

$$\frac{k_x}{m^*} \partial_x \rho_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}) - i \frac{g \mu_B B}{2} \Delta f_{\sigma}(x, \mathbf{k}) = 0. \quad (5.38)$$

这里我们取磁场 \mathbf{B} 沿 x 方向。 $\Delta f_{\sigma}(x, \mathbf{k}) = f_{\sigma}(x, \mathbf{k}) - f_{-\sigma}(x, \mathbf{k})$ ，是在 x 点处波矢为 \mathbf{k} 的自旋取向不同的电子之间的不平衡部分。我们假设在 $x = 0$ 处有一个恒定的自旋极化流注入，且两个自旋取向相反的电子的分布都是平衡的 Fermi 分布函数，即

$$f_{\sigma}(0, \mathbf{k}) = f_{\sigma}^0(\mathbf{k}) = \{\exp[(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_{\sigma})/T] + 1\}^{-1}, \quad (5.39)$$

其中 T 为温度， μ_{σ} 是自旋为 σ 的化学势。自旋相干在 $x = 0$ 处取为 0，

$$\rho_{\sigma-\sigma}(0, \mathbf{k}) \equiv 0. \quad (5.40)$$

连立简化的 Bloch 方程 (5.37)，(5.38) 以及边界条件 (5.39) 和 (5.40)，容易解得

$$\Delta f_{\sigma}(x, \mathbf{k}) = \Delta f_{\sigma}^0(\mathbf{k}) \cos \frac{g \mu_B B m^* x}{k_x}, \quad (5.41)$$

$$\rho_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}) = \frac{i}{2} \Delta f^0(\mathbf{k}) \sin \frac{g\mu_B B m^* x}{k_x}. \quad (5.42)$$

方程 (5.41) 和 (5.42) 清楚的表明输运系数对 k 的依赖关系对在扩散方向上的自旋进动的影响。对于每一个固定的 k_x ，自旋沿扩散方向以固定的周期做无衰减进动。但是 k_x 不同的电子，其进动的周期不同。在界面 $x = 0$ 处，所有电子的相位都是相同的。但是由于不同 k_x 的电子其自旋进动速度不同，导致了在 $x \neq 0$ 的位置上不同 k_x 的电子的相位不同。而不同自旋取向的电子数之差为所有波矢的分布函数之差的总和，即 $\Delta N(x) = \sum_{\mathbf{k}} \Delta f_{\sigma}(x, \mathbf{k})$ 。因此，相位不同会使得不同电子自旋会相互抵销，导致自旋信号衰减。

这个效果可以从图 5.1 中看出。在这个图中我们画出了自旋向上和自旋向下电子密度 $N_{\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} f_{\sigma}(x, \mathbf{k})$ 随位置 x 的变化。在边界 $x = 0$ 处，电子密度分别为 $N_{1/2}(0) = 2.05 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 和 $N_{-1/2}(0) = 1.95 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。在计算是我们取磁场 $B = 1 \text{ T}$ ，温度 $T = 200 \text{ K}$ 。为了看出横向的自旋去相位有多大，我们在这张图上同样画出了自旋相干的非相干和 $\rho(x) = \sum_{\mathbf{k}} |\rho_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}(x, \mathbf{k})|$ 。我们已经知道真正的耗散和不同波矢之间的干涉都会导致自旋相互的衰减。这种衰减总称为退相干。由于干涉导致的衰减是不同波矢的电子之间进动速度不同而导致相位不同引起。对于有限系统，这使得电子可逆的失去它们之间的相干。而对于真正的耗散，电子间的相干会永远丢失[154, 201]。我们使用去相位来描述这种不可逆的退相干过程。自旋相干的非相干和的衰减只体现了系统不可逆的衰减过程，因此可以用来把不可逆的衰减和由干涉效应导致的衰减区分开来。从这张图上我们可以看到有干涉效应导致的纵向退相干。另外，我们还可以看到 $\rho(x)$ 并不随距离衰减。这一点和方程 (5.41) 以及 (5.42) 中没有散射，衰减完全是由于干涉效应导致的这个事实一致。从这两个简化的模型中我们可以得出结论：尽管近独立电子模型在过去的几十年中在研究自旋简并的电子输运 / 扩散问题时非常成功，但它在研究自旋输运问题上还有一些不足之处。因此使用多体理论来研究自旋输运问题是非常重要的。

5.4 静态时的自旋扩散

现在我们转向 GaAs 量子阱中包含了 DP 项、HF 自能修正以及各种散射在内的自旋扩散问题。扩散方向沿量子阱平面内。我们使用类似于文献 [202, 203] 描述的迭代的办法来自洽地数值求解动力学 Bloch 方程 (5.26)–(5.33) 和 Poisson 方程 (5.14) 组成的连立方程组。在目前的研究中，计算散射项 (5.32) 和 (5.33) 时我们只考虑电-声子和电子-杂质散射。在这个计算中暂时不考虑电子-电子 Coulomb 作用。我们知道，在系统偏离

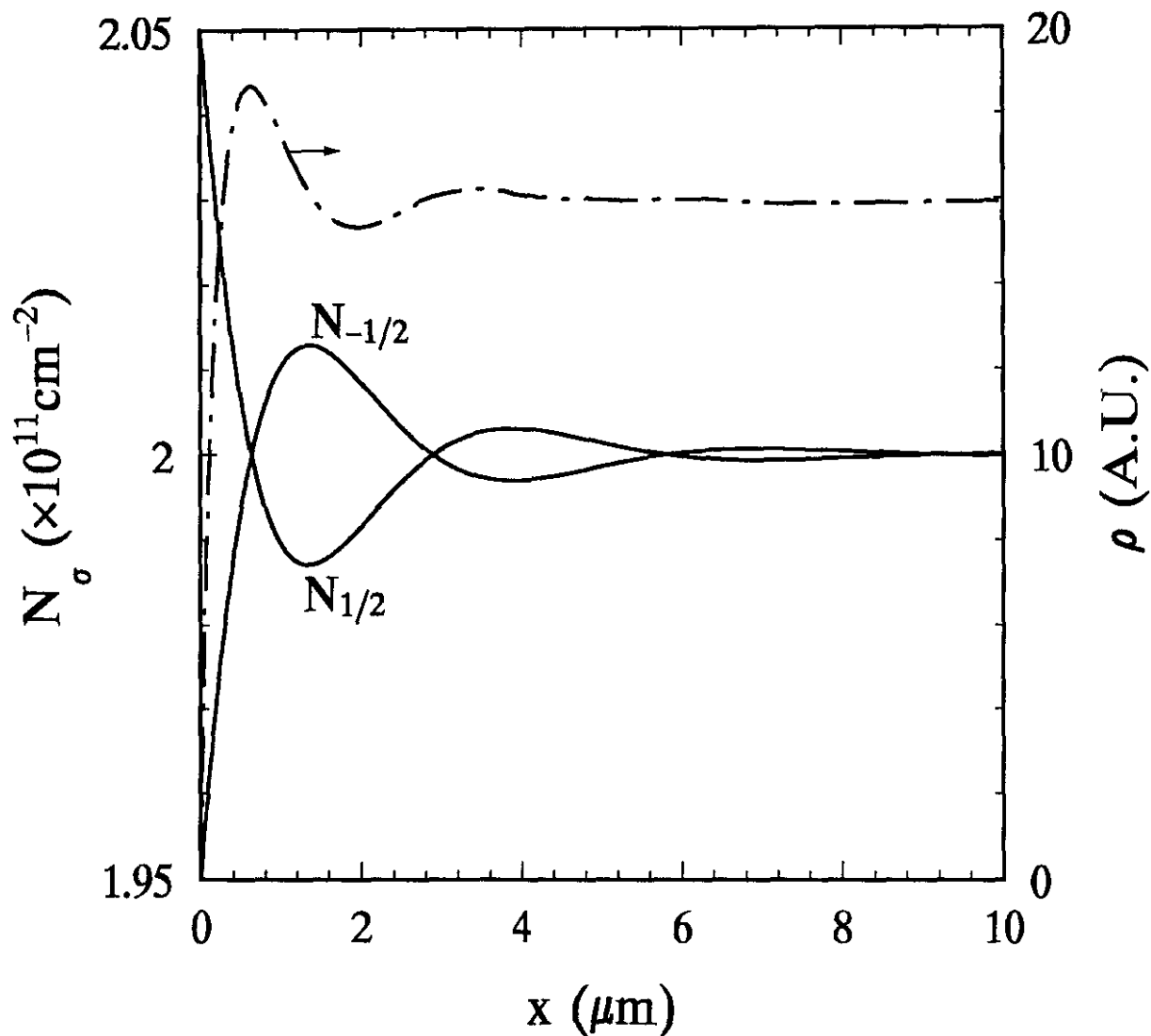


图 5.1: 自旋向上和向下子带上的电子密度 (实线) 以及自旋相干的非相干和 (虚线) 和距离 x 的关系。 $B = 1$ T。注: 自旋相干的坐标画于图的右侧。

平衡态比较小时，电子—电子散射并不太强，忽略电子—电子之间的 Coulomb 作用影响比较微弱。而且当体系温度偏离 Fermi 温度比较远的时候，Coulomb Drag 效应也比较小[204]。因此我们的研究将局限于自旋极化比较小，并且温度偏离 Fermi 温度比较远的情况。我们进一步把考察的范围限制在温度比较高的区域内，这样在计算电—声子散射的时候，我们可以只考虑电子—光学声子散射。

我们选一个比较典型的阱宽 $a = 7.5 \text{ nm}$ ，GaAs 的物质参数和表 4.1 中取的一样。由于 GaAs 是一个宽禁带半导体，主要的自旋去相位机制是 Dresselhaus，因此如果没有特别说明，我们并不考虑 Rashba 项。

我们首先研究在 $x = 0$ 处有一个恒定的自旋极化流注入情况下的电子自旋沿 x 轴的静态输运。假设界面为欧姆接触，而且我们假设输运是线性的，即外加电场非常小，热电子效应不重要的情况。我们同时假设在这种注入下，电子在边界的分布函数为漂移 Fermi 函数：

$$f_{\sigma}(0, \mathbf{k}, t) \equiv f_{\sigma}^0(\mathbf{k}) = \frac{1}{\exp[(\epsilon_{\mathbf{k}} - m^* v_d - \mu_{\sigma})/T] + 1}, \quad (5.43)$$

其中 $v_d = \mu E$ 是漂移速度， μ 是电子的线性迁移率，它的表达式可以在许多课本或者文献中找到[205, 171]。而在边界处的自旋相干取为零：

$$\rho_{\sigma-\sigma}(0, \mathbf{k}, t) \equiv 0. \quad (5.44)$$

需要说明的是，我们选取的这种边界条件是对刚刚通过欧姆接触进入到我们要研究的半导体区域的自旋极化了的电子的一种近似描述。在没有电场的时候，从界面流入的只是自旋极化流，而没有净电荷输入，体系各处均保持电中性。事实上，这个边界条件描述的并不一定非得是从界面注入注入的情况，它也可以描述在半导体中心由持续性的圆偏振光产生的自旋极化的扩散。

我们的主要结果如图 5.2—5.7 所示。在所有的这些计算中，两个自旋子带上的总电子密度取为 $N_e = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ，在界面 $x = 0$ 处自旋向上的电子密度高于自旋向下的电子密度 $0.1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。我们所选取的这个自旋极化和目前得到的从铁磁金属到半导体中的注入效率量级上一致[206]。这个计算是在我们自己搭建的“Beowulf”计算机集群上用并行的方法进行计算的。对于一个典型的计算，使用 16 个 AMD Athlon XP1800+ CPU 结点来运算的话，大约需要花 60 个小时可以得到一条曲线。

5.4.1 $E = 0$ 的自旋扩散

在图 5.2 中我们画出了自旋向上和自旋向下两个子带的电子密度和位置 x 的关系。在这个计算中，杂质浓度 N_i 为零，外加电场 E_0 也为零。从图中我们可以看到，和我们在

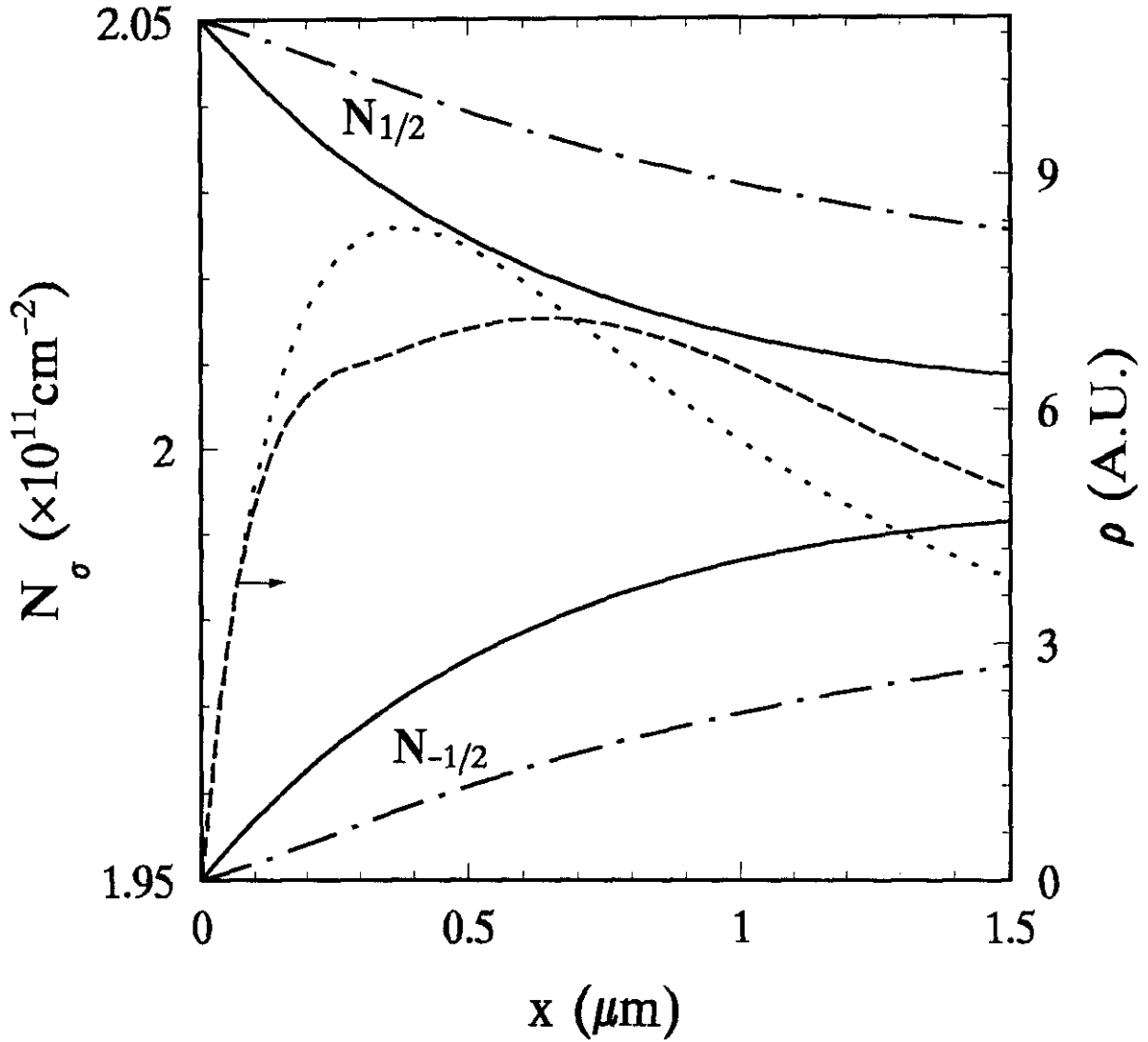


图 5.2: 自旋向上和自旋向下子带上的电子密度和自旋相干的非相干和随距离的变化。实线和虚线分别是完整的 Bloch 方程的解得到的电子密度以及自旋相干；点线和点划线则分别是不考虑干涉作用得到的电子密度和自旋相干。注：自旋相干的坐标画于图的右侧。

简化的模型中得到的结果类似，自旋向上的电子的过剩部分在扩散方向上迅速衰减。这个快速的衰减主要是由于非均匀展宽导致的退相干造成的。原因和我们在处理第二个简化模型时一样。把 $\varepsilon_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)$ 表达式 (5.27) 代入到 Bloch 方程 (5.26) 中，可以看到 Bloch 的头三项化为：

$$\begin{aligned}
 & \partial_t \rho_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) + e \partial_x \psi(\mathbf{R}, t) \partial_{k_x} \rho_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1} \left[\partial_x \Sigma_{\sigma\sigma_1}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \partial_{k_x} \rho_{\sigma_1\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) + \partial_{k_x} \rho_{\sigma\sigma_1}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \partial_x \Sigma_{\sigma_1\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \right] \\
 & + \frac{k_x}{m} \partial_x \rho_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) + \frac{1}{4} \left[\partial_x (h_x(\mathbf{k}) - i\sigma h_y(\mathbf{k})) \partial_x \rho_{-\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \right. \\
 & \left. + \partial_{k_x} (h_x(\mathbf{k}) + i\sigma' h_y(\mathbf{k})) \partial_x \rho_{\sigma-\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \right] \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1} \left[\partial_{k_x} \Sigma_{\sigma\sigma_1}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \partial_x \rho_{\sigma_1\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) + \partial_x \rho_{\sigma\sigma_1}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \partial_{k_x} \Sigma_{\sigma_1\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \right]. \quad (5.45)
 \end{aligned}$$

因此，在包含 $\partial_t \rho_{\sigma\sigma'}$ 的方程中， $\partial_x \rho_{\sigma\sigma'}$ ， $\partial_x \rho_{\sigma-\sigma'}$ ， $\partial_x \rho_{-\sigma\sigma'}$ 之前的系数分别为

$$\frac{k_x}{m^*} + \frac{1}{2} \partial_{k_x} [\Sigma_{\sigma\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) + \Sigma_{\sigma'\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)], \quad (5.46)$$

$$\frac{1}{2} \partial_{k_x} [h_x(\mathbf{k}) + i\sigma h_y(\mathbf{k}) + \Sigma_{\sigma-\sigma}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)], \quad (5.47)$$

$$\frac{1}{2} \partial_{k_x} [h_x(\mathbf{k}) - i\sigma' h_y(\mathbf{k}) + \Sigma_{-\sigma'\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)], \quad (5.48)$$

它们都是依赖于 \mathbf{k} 的。和简化的输运模型得到的结果类似，这些输运系数对 \mathbf{k} 的依赖性会导致非均匀扩展，使得不同电子自旋之间相互干涉，造成退相干和自旋信号衰减。系统中的其它的去相位效应，比如方程 (5.30) 以及 (5.31) 中的 DP 和自旋守恒的电子-LO 声子散射一起作用产生的去相位，也对自旋信号衰减有贡献。此外，我们指出非均匀扩展和自旋守恒散射结合也可以导致自旋去相位[145, 143, 146]。因此，上面所说的非均匀扩展在有电子-LO 声子散射时也会引起自旋去相位。为了比较由干涉效应和 DP 项以及 LO 声子散射共同作用导致的去相位造成的衰减哪个更重要一些，我们把方程 (5.46)-(5.48) 中的所有 k 替换成 $k = k_F$ (k_F 为电子的 Fermi 波矢)，这样就去掉了这些输运系数和 \mathbf{k} 的依赖关系，也去掉了由于干涉效果导致的自旋信号衰减。因此这样处理过之后得到的自旋信号衰减都是由于自旋去相位造成的。我们对这个简化的情况也做了数值计算，结果同样画于图 5.2 中。从图上我们可以看到，纯粹由于去相位效果造成的自旋极化的衰减要比包括了干涉导致的退相干造成的衰减慢许多。我们在图 5.2 中还画出了用这两种方法计算得到的自旋相干的非相干和 ρ 随位置的变化。从图上我们可以看到，两个自旋相干 ρ 都随距离缓慢地衰减。并且当 $x > 1 \mu\text{m}$ 时，它们的

衰减速度相差不远。这个结果进一步验证了我们说的造成自旋极化衰减的主要原因是干涉效应。

磁场的影响

我们下一步要考查的问题是在 Voigt 配置下的外加磁场（即沿 x 轴方向）对自旋扩散的影响。温度为 200 K 下， $B = 2$ T 时的计算结果以实线形式画于图 5.3 中。从图中可以看到，由于磁场的作用，在扩散方向上，自旋向上的电子会翻转到自旋向下状态。自旋向上的电子密度先是在扩散方向上减小，在离界面大约 $0.6 \mu\text{m}$ 处达到其最小值，然后又开始上升，使得自旋相反的两种电子的密度趋于平衡。这两个自旋子带上的电子密度在距离界面大约 $0.4 \mu\text{m}$ 的地方有一个交叉。比较施加了外磁场的结果（实线）和没有外磁场的结果（虚线），我们可以看到，在有外场时自旋信号的衰减速度要比没有外场时快得多。在有外场时，自旋信号在经过第一个振荡（其位置大约在离界面 $1 \mu\text{m}$ 远）之后就几乎完全消失。这个效果也主要是干涉效应导致的。从我们的简化模型中我们可以看到，波矢为 \mathbf{k} 的电子沿 x 轴方向上的振荡的“频率”为 $\mu_B B m^*/\hbar k_x$ ，这个“频率”正比于磁场，磁场越大，干涉效果就越强烈。当外加磁场达到 2 T 时，振荡“频率”主要由外加磁场决定，而当外加磁场比较小或者没有外加磁场时，“频率”就由 DP 项产生的有效磁场 $B_{\text{eff}} = |\hbar(\mathbf{k})|/g$ 控制，这个有效磁场要远小于 1 T，而且在 k 小的时候尤其如此。因此在有外加磁场的时候，自旋信号的衰减速度要快于没有外加磁场情况下的衰减速度。需要注意的是，尽管磁场极大的增强了对退相干造成的衰减，但它对去相位产生的衰减的影响的效果不是很显著，而且由于磁场对去相位有抑制作用[142, 178]，它甚至会减少去相位造成的衰减。这一点可以从自旋相干的非相干和随距离的变化（我们也画在图 5.3 上）中看出。图中显示出了，当 $x > 1 \mu\text{m}$ 时， $B = 0$ 和 $B = 2$ T 对应的 ρ 的衰减速度相差不多，而且 $B = 2$ T 时的 $\rho-x$ 曲线衰减得略微慢一点。

杂质对自旋扩散的影响

在图 5.4 中我们以实现形式画出了一个杂质浓度为 $N_i = 0.4 N_e$ 的量子阱中的两个自旋子带的电子密度以及自旋相干的非相干和随位置的变化。为了比较，我们把在图 5.2 中得到的结果以虚线的形式在这个图上再画出来。根据目前的近独立电子模型 [12, 207] 的结论，当体系中含有杂质时，由于杂质存在，电子碰撞频率增强，自由程变短，因此减小了扩散系数，导致了自旋注入长度减小。但是，我们很清楚的从图 5.4 上看到，和原先模型预言的结果相反，自旋注入长度由于杂质的存在反而增大了。造成这个结

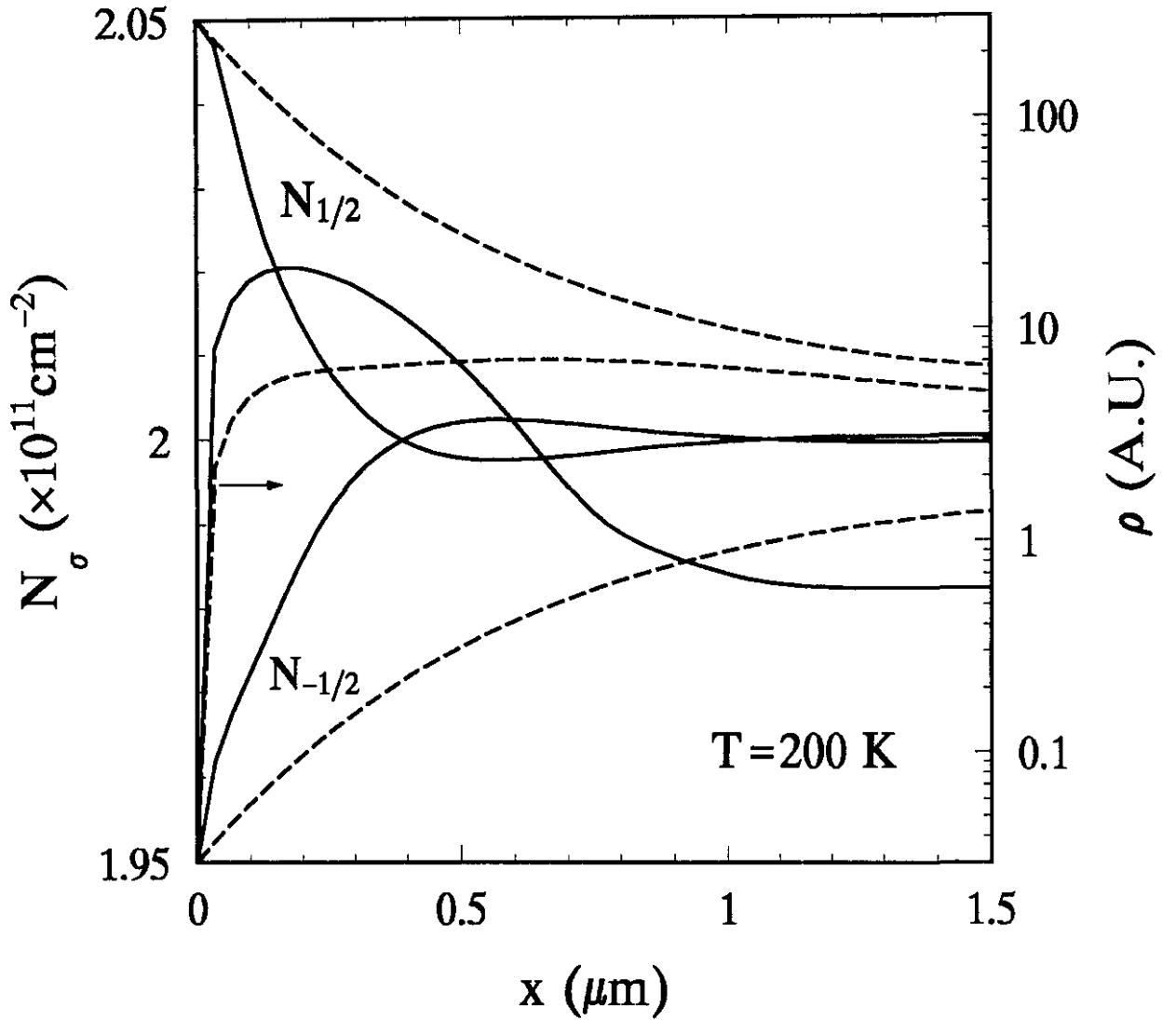


图 5.3: 杂质浓度为零时, 不过外磁场下自旋向上和自旋向下子带上的电子密度和自旋相干的非相干和随距离的变化。实线: $B = 2 \text{ T}$ 时的电子密度和自旋相干; 虚线: $B = 0$ 时的电子密度和自旋相干。注: 自旋相干的坐标画于图的右侧。

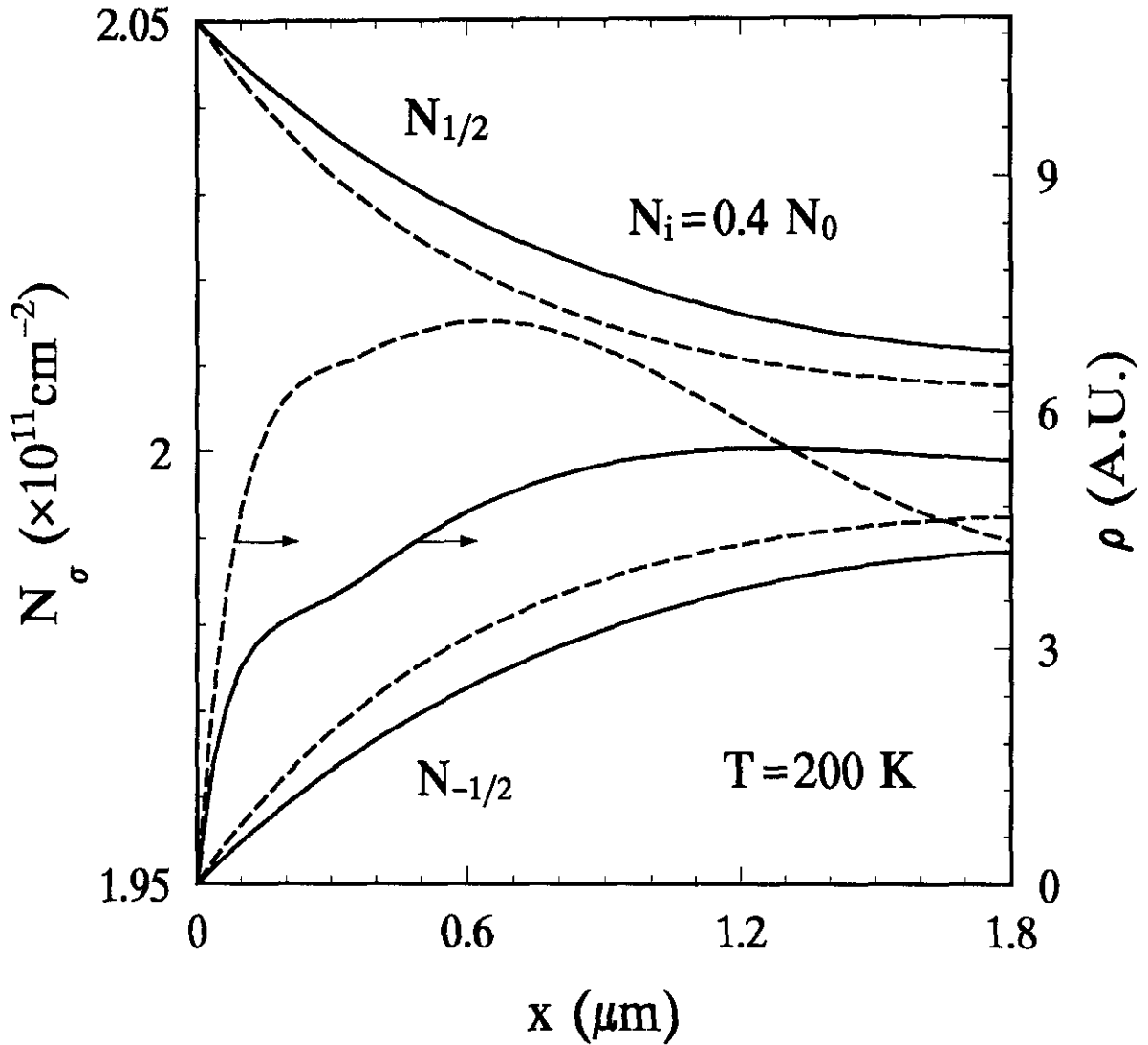


图 5.4: 不同杂质浓度下的自旋向上和自旋向下子带上的电子密度和自旋相干的非相干和随位置的变化。实线: $N_i = 0.4 N_0$ 时的电子密度和自旋相干; 虚线: $N_i = 0$ 时的电子密度和自旋相干。注: 自旋相干的坐标画于图的右侧。

果的原因是原来建立在近独立电子模型基础上的结果只考虑了电子-杂质散射的一个作用,即使得电子自由程变短,而没有考虑到电子-杂质散射还会对自旋去相位造成影响。从第四章的结果我们可以看到,电子-杂质散射会减小自旋去相位,使得自旋去相位时间变长 [34, 142, 178]。这个效应会使得自旋注入长度变长。从图 5.4 上显示出的 ρ 和距离的关系曲线,我们也可以看到在有杂质的情况下, ρ 随距离的衰减速度要远低于没有杂质时候的衰减速度。这清楚的表明了自旋去相位造成的衰减被大大削弱了。因为在我们的理论中把杂质对自旋输运的两个方面的因素都包括进去,所以我们得到的是这两个因素对自旋输运问题的综合影响。我们的计算结果预示了,在没有外加电场时,引入杂质后,自旋寿命的增长使得自旋注入长度变大的效果比较重要一些。

温度对自旋输运的影响

在图 5.5 中,我们画出了在 $T = 120, 200$ 和 300 K 时的两个自旋子带之间的电子密度和距离 x 的关系。自旋相干的非相干和画在插图中。根据原先的近独立电子模型,当温度升高时,电子受到碰撞的频率升高,电子自由程减小,因此扩散系数也减小,结果导致了自旋注入长度相应的减小。然而我们可以从图 5.5 中看到从我们理论得到的计算结果表明自旋信号的衰减速度在温度高时变慢,因此自旋注入长度随温度的升高而升高。仔细分析可以发现温度对自旋输运的影响具有三个方面的效果:第一个效果就是近独立电子模型考虑的那样,当温度升高,电子扩散系数减小,从而导致了自旋信号衰减速度变快,即自旋注入长度随温度升高而变小;第二个效果是温度对自旋寿命的影响,当温度升高时,自旋寿命略微上升 [142, 178] (这可以从插图中的自旋相干的非相干和在 $x > 1 \mu\text{m}$ 处的衰减速度看出),这个效应导致了自旋信号衰减速度变慢;第三个效果是温度对干涉效应的影响。当温度变化时电子分布函数也会随之改变,从而使得干涉效应也相应的被改变。从第 5.3 节的简化模型我们可以看到 k_x 小的电子对干涉效应的贡献最大。当温度升高时,更多的电子分布在能量高的状态上。因此,当温度升高时,具有小 k_x 的电子分布函数变小,从而干涉效应相应减小。所以,由干涉效应导致的自旋信号衰减的速度也随温度升高而减小。我们的结果表明了由后两个原因造成的自旋信号衰减速度减小的效应要强于由于电子扩散系数减小而造成的自旋信号衰减速度增快的效应。

5.4.2 $E \neq 0$ 的情况

现在我们转入研究在自旋扩散方向上有一个外加电场 $\mathbf{E} = E\hat{e}_x$ 时候的自旋输运。我们

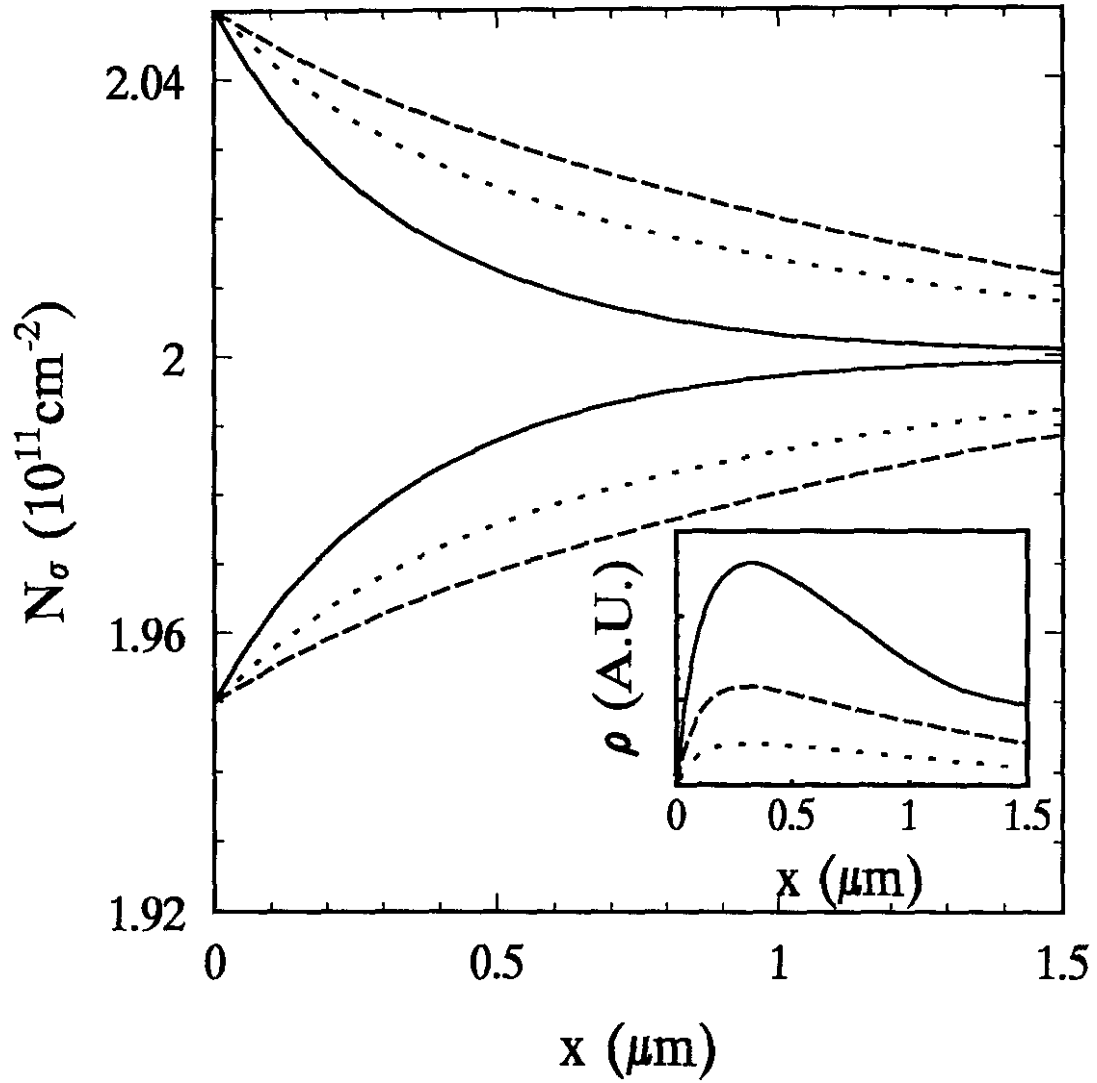


图 5.5: 不同温度下的自旋向上和自旋向下子带上的电子密度和自旋相干的非相干和随距离的变化。实线: $T = 120$ K; 点线: $T = 200$ K; 虚线: $T = 300$ K。插图中用同样的线条画出了相应的自旋相干的非相干和随位置的变化。

首先考虑无杂质时的 GaAs 量子阱 ($N_i = 0$)。在图 5.6 中我们画出了外加电场 $E = 25$ V/cm 时, 两个自旋子带上的电子密度和位置 x 的关系。在图上我们还画出了 ρ 和位置的关系。为了和没有外加电场时的情况做一个比较, 我们把 $E = 0$ 时得到的结果用虚线画在同一张图上。从图中我们可以看到, 在有不为零的外加电场时, 自旋信号随位置的衰减速度比没有外加电场时的衰减速度要慢得多。比如说, 在 $x = 1 \mu\text{m}$ 处, 电场为 25 V/cm 时的自旋信号衰减大约只有电场为零时的一半。因此在有外加电场时, 在输运中, 自旋信号得以保持的距离比没有电场时要长得多。这个结果和 Kikkawa 等人发现在电场作用下, 自旋扩散的距离变长的实验结果 [39] 以及从金属铁到 GaAs 的自旋注入强烈的依赖于电流的实验结果相吻合 [208]。

这个结果可以解释如下: 在外电场作用下, 电子获得一个不为零的质心漂移速度 $v_d = \mu E$ 。如果这个漂移速度的方向和自旋扩散方向一致的话, 电子在扩散方向上运动得更快, 经过同一段距离所需的时间就比没有电场时要少, 因此自旋随距离的衰减也相应变小。这一点也可以从图上的自旋相干的非相干和 ρ 随距离的衰减情况得到验证。自旋信号的衰减速度在外加电场作用下变慢这个定性结果也可以从近独立电子模型中得到 [191, 192, 193]。

众所周知的是杂质散射会降低电子迁移率 μ 。在施加了同样的电场情况下, 有杂质的样品的电子迁移速度要低于没有杂质时的电子迁移速度。因此, 和电场为零的时候相比, 在讨论杂质对自旋输运的影响时除了要考虑原来说的两个效应之外, 还需要考虑杂质对电子迁移率的影响。而从前面的结果我们可以看到在电子的迁移速度对自旋注入长度的影响甚为重要, 因此有可能在施加了外电场之后, 杂质会减小自旋注入长度, 而不象在零电场时使得自旋注入长度增加。

为了考查在有外加电场时杂质对自旋输运的影响, 我们计算了在 $N_i = 0.4 N_c$ 的 GaAs 量子阱在 $E = 25$ V/cm 时的自旋输运。计算得到的自旋向上和自旋向下两个子带的电子密度画在图 5.7 中。为了比较, 我们还画出了杂质浓度为零, 以及电场为零时的情况。在图中, 用虚线画出的曲线其杂质浓度都为零, 而用实线画出的曲线其杂质浓度为 $0.4 N_c$; 粗线条的曲线其电场为 25 V/cm, 而用细线条画出的曲线其电场为零。比较这些曲线, 我们不难看出, 在有杂质时, 施加电场之后自旋注入长度也变长了 (从细实线变到粗实线)。这个变化趋势和没有杂质时是一样的 (从细虚线到粗虚线)。但是在施加了外加电场之后, 有杂质时的自旋注入长度和没有杂质时相比是变短了 (从粗虚线到粗实线), 于电场为零时杂质使得注入长度增加的情况 (从细虚线到细直线) 正好相反。

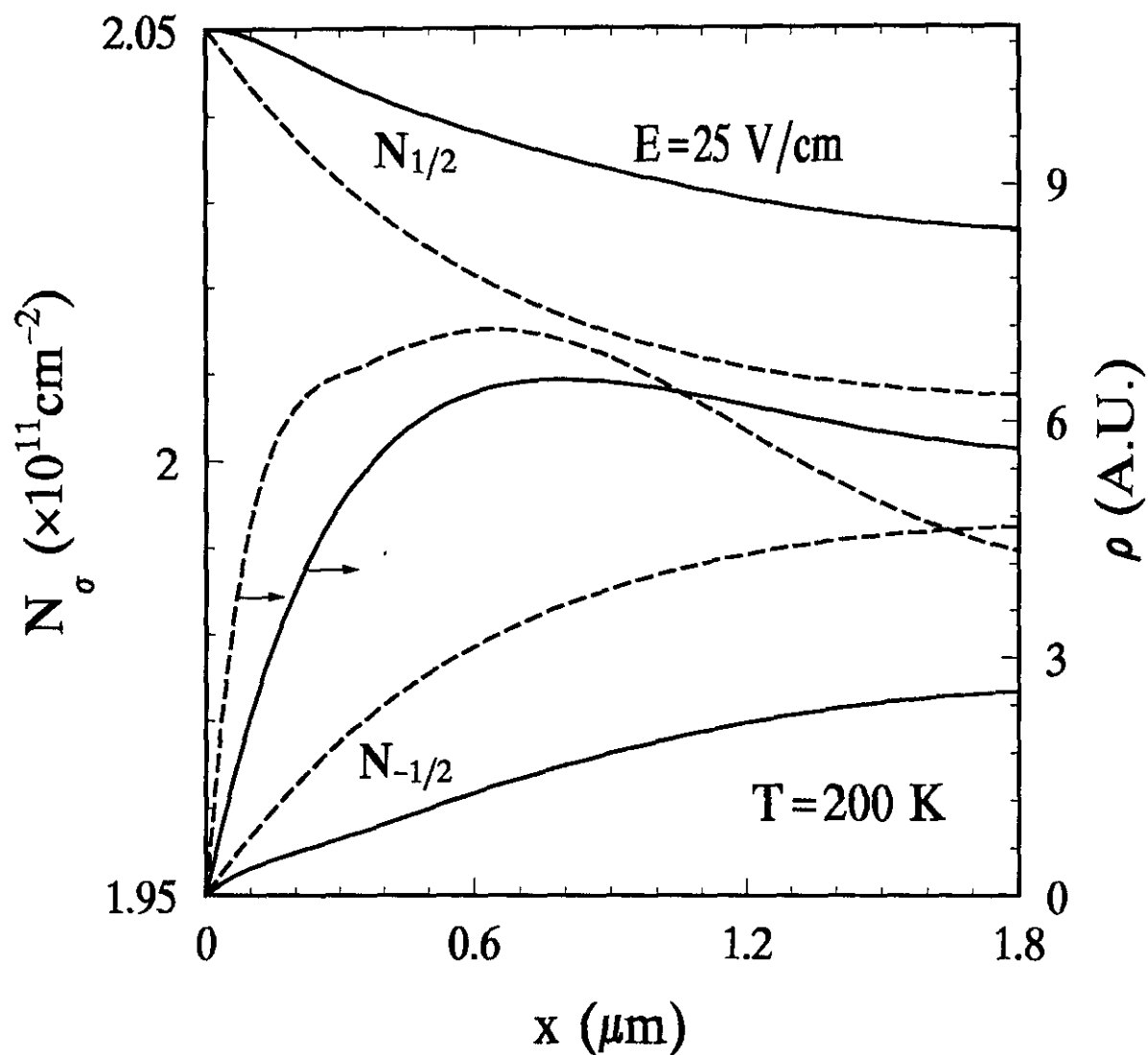


图 5.6: 不同外电场作用下的自旋向上和自旋向下子带上的电子密度和自旋相干的非相干和随距离的变化。实线: $E = 25 \text{ V/cm}$ 时的电子密度和自旋相干; 虚线: $E = 0$ 时的电子密度和自旋相干。注: 自旋相干的坐标画于图的右侧。

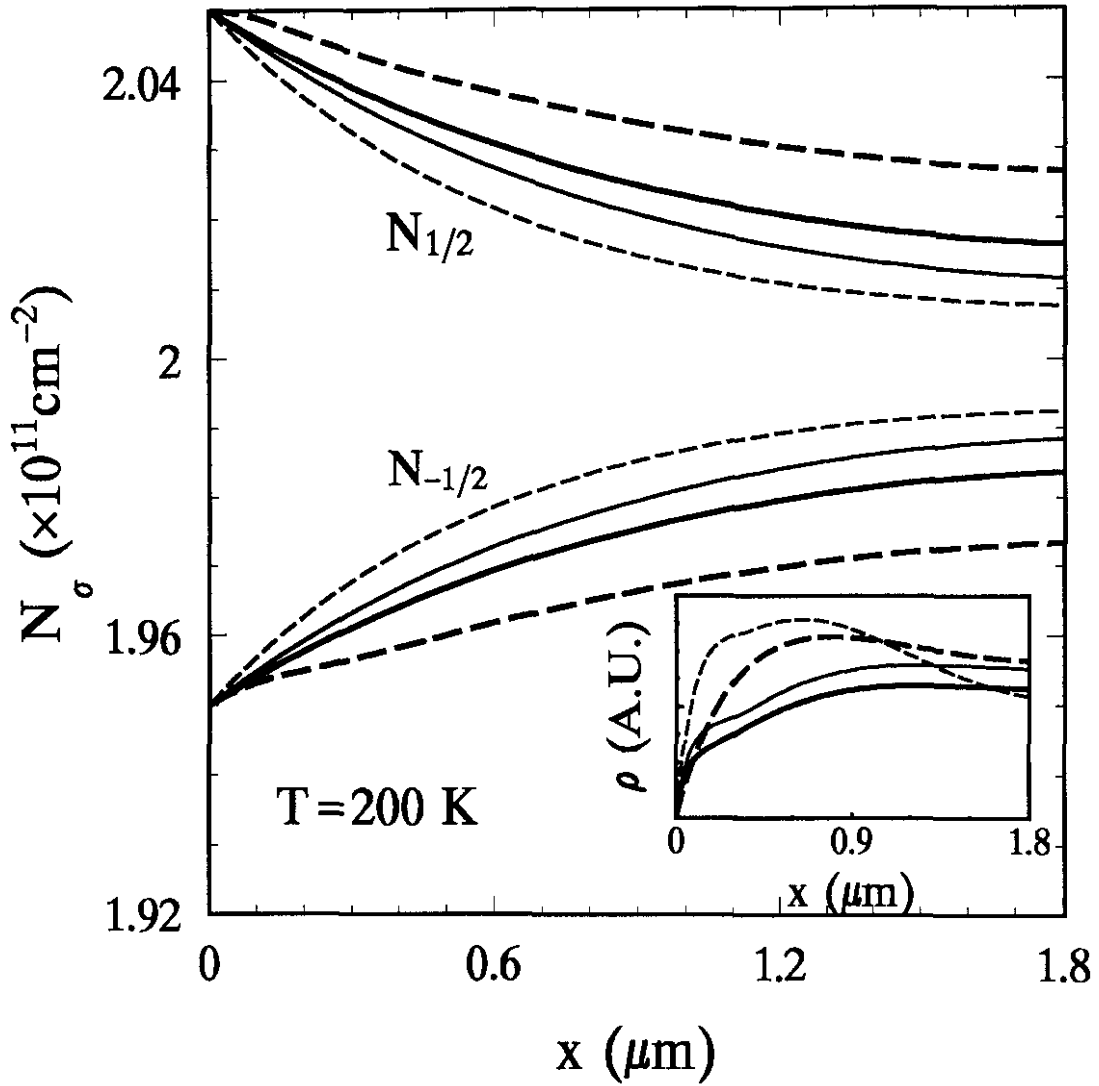


图 5.7: 不同杂质浓度、不同外电场作用下的自旋向上和自旋向下子带上的电子密度和自旋相干的非相干和随距离的变化。粗实线: $E = 25 \text{ V/cm}$ 和 $N_i = 0.4 N_e$ 时的电子密度; 细实线: $E = 0$ 和 $N_i = 0.4 N_e$ 时的电子密度; 粗虚线: $E = 25 \text{ V/cm}$ 和 $N_i = 0$ 时的电子密度; 细虚线: $E = 0$ 和 $N_i = 0$ 时的电子密度。相应的自旋相干以同样的线条画于插图中。

5.4.3 有Rashba项时的结果

我们现在考虑界面电场 E_z 对自旋输运的影响。前面我们说过在 GaAs 量子阱中，Rashba 项对 DP 项的贡献的重要性不如 Dresselhaus 项。不过由于 Rashba 项是正比于界面电场 E_z 的，我们可以通过一个外加的偏置电场来调节，因此我们可以通过外加一个很大的场来增强 Rashba 效应，从而展示其作用。我们计算了在 $E_z = 10^3, 10^5, 5 \times 10^5$ V/cm 这三个不同的偏置电场下的自旋扩散。计算得到的自旋向上和向下的子带上的电子密度的结果用实线画在图 5.8 上。沿扩散方向上的电场取为零。在计算中，自旋一轨道常数 α_0 取为 5.33 \AA^2 [165]。零偏置电场时的结果也用虚线画在同一张图上，以便做比较。从图上我们可以看到，随着偏压电场的增大，自旋信号随距离衰减的速度增高。这个效果是由于随偏置电场的增大，Rashba 效应增强，自旋去相位也随之增大。此外，由于 DP 项产生的有效磁场也增大，因此干涉效果增强。这两个效果的综合结果就导致了自旋信号衰减速度随配置电场增大而增大。

5.4.4 自旋扩散长度

近独立电子模型预言了自旋极化在扩散方向上随距离按公式 (5.10) 指数衰减，其衰减的速度由注入长度 L_s 描述。在外加电场为零的时候，注入长度为 $L_s = \sqrt{D\tau_s}$ 。其中扩散系数 D 由散射决定 [190, 193]。我们在 5.3 里说过这种简化模型把不同 k 之间的干涉这种多体效应丢弃了。计入多体效应之后，我们可以把从多体理论计算得到的两个自旋子带上的电子密度之差当成距离 x 的函数，并用公式 (5.10) 来拟合，由此我们可以得到同时考虑了干涉效应以及去相位效应之后的注入长度。通过比较由公式 (5.10) 拟合我们计算结果得到的注入长度以及用近独立电子模型得到的注入长度之间的差异，我们可以大体上估计出干涉效应对自旋输运的影响。

从我们计算结果拟合出来的注入长度列于表 5.1 中。在此表中，也列出了由近独立电子模型预言的注入长度 $\sqrt{D\tau_s}$ 以做比较。在计算经典的注入长度时，我们使用了文献 [190] 中的公式 (3) 来计算扩散系数 D 。而自旋驰豫时间 τ_s 则是按照第四章中计算的空间均匀体系中的自旋去相位时间来计算得到的 [142, 178]，不过为了和我们现在的计算得到一致的结果，我们在计算这组自旋驰豫时间时使用的波矢空间的分割点是和我们计算输运时取的代表点一样。这个表表明了除了有杂质的情况下，从完全的多体理论计算得到的注入长度普遍要比近独立电子模型预言的自旋注入长度要短。而且，还应该注意在考虑了 Rashba 效应之后，我们计算得到的自旋注入长度随界面电场减小的速度要比近独立电子模型的结果快得多。这进一步验证了我们所说的在高（有效）磁场作用下，退相干效果更为重要。此外，我们还需要注意到我们得到的自旋注入长度

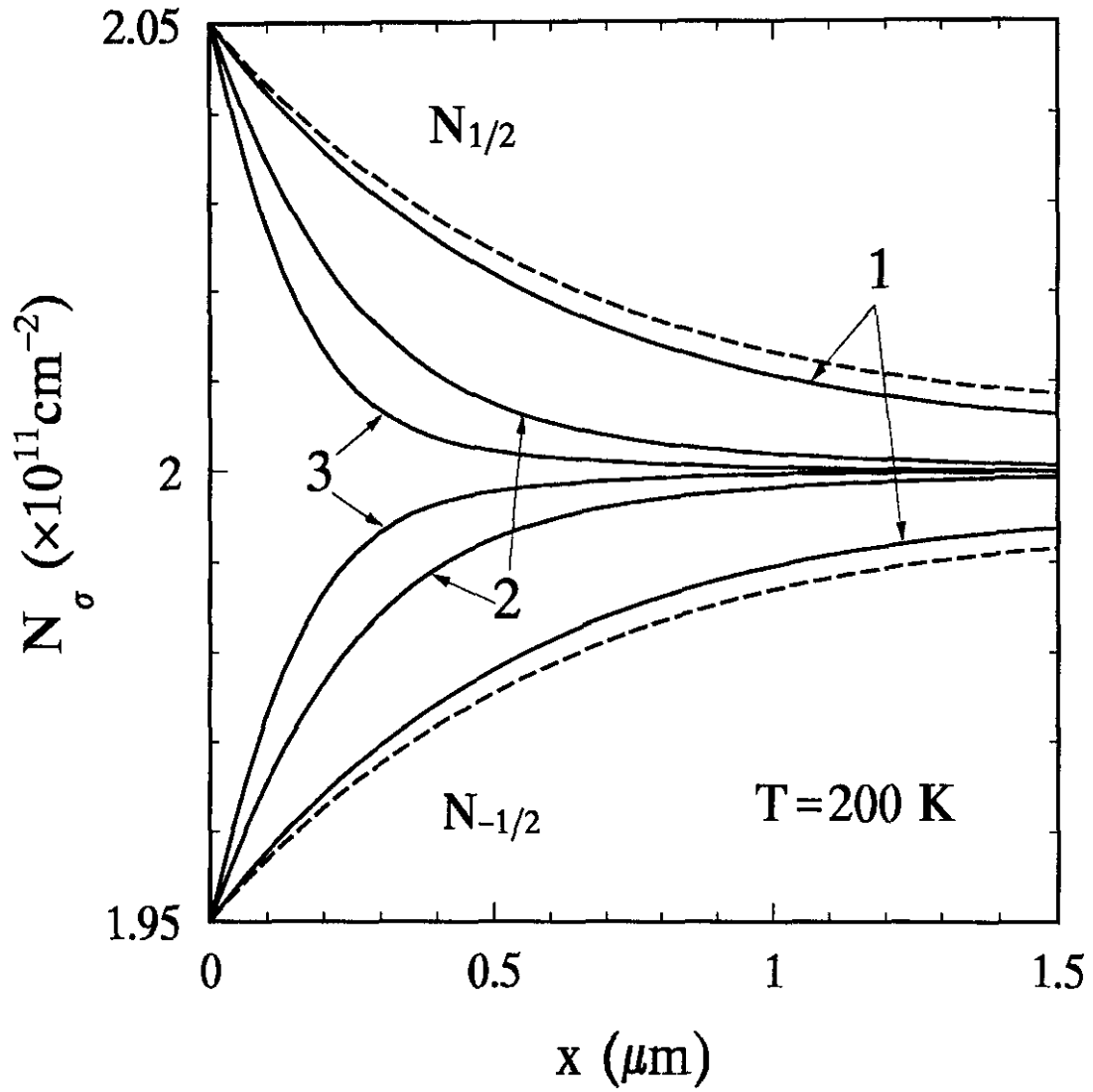


图 5.8: 不同偏置电压下的自旋向上和自旋向下子带上的电子密度和自旋相干的非相干和随距离的变化。实线 1: $E_z = 1 \times 10^3 \text{ V/cm}$; 实线 2: $E_z = 1 \times 10^5 \text{ V/cm}$; 实线 3: $E_z = 5 \times 10^5 \text{ V/cm}$; 虚线: $E_z = 0$ 。

Curves	L_s (μm)	D	τ_s (ps)	$\sqrt{D\tau_s}$ (μm)
Fig. 5.2, solid curve	0.7	0.114	16.0	1.35
Fig. 5.3, solid curve	1.0	0.022	23.4	0.72
Fig. 5.5, dashed curve 1	0.8	0.088	20.0	1.32
Fig. 5.5, solid curve 3	0.4	0.25	9.0	1.5
Fig. 5.8, solid curve 1	0.61	0.114	15.6	1.33
Fig. 5.8, solid curve 2	0.26	0.114	12.0	1.17
Fig. 5.8, solid curve 3	0.15	0.114	4.0	0.68

表 5.1: 自旋扩散长度

和温度的依赖关系和近独立电子模型得到的结果正好相反。近独立电子模型预言了电子注入长度随温度增加而缩小，但是在考虑了干涉效应对温度的依赖关系之后，从我们的多体理论出发我们发现自旋扩散长度随温度升高是增大的。

5.5 自旋极化的瞬态扩散

在上面我们应用了多体理论研究了静态情况下的自旋扩散 / 输运。事实上，我们的这个理论也可以用来研究具有自旋极化的电子波包（下面我们把它简称为自旋包）随时间的演化关系。在本节里，我们就用这个理论来研究 n 型 GaAs 量子阱中的自旋包随时间演化的问题。我们假设在 $t = 0$ 时刻在一个无穷大的 n 型 GaAs 量子阱中有一中心位于 $x = 0$ 处的 Gauss 型自旋包： $\Delta N(x) = N_{1/2}(x) - N_{-1/2}(x) = \Delta N_0 e^{-x^2/\sigma^2}$ 。波包的宽度取为 $\sigma = 0.15 \mu\text{m}$ ， $t = 0$ 时刻中心位置的粒子数不平衡部分为 $\Delta N_0 = 10^{10} \text{cm}^{-2}$ 。假设初始的自旋相关都是零： $\rho_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t = 0) = 0$ 。量子阱中的电子密度还是取为 $4 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ ，和我们在研究静态自旋输运时取的电子密度一样。

自旋包随时间的演化有两个过程：一个自旋包由于去相位随时间衰减；同时，由于空间不均匀，它也会发生扩散。对于原来的近独立电子模型中电子自旋极化随在空间不均匀体系中随时间演化方程为 (5.8)。在电场为零时，扩散方向为 x 时，运用我们的初始条件不难求得这个方程的解为：

$$\Delta N(x, t) = \Delta N_0 \frac{\sigma}{\sqrt{\sigma^2 + 4Dt}} e^{-\frac{x}{\sigma} - \frac{x^2}{\sigma^2 + 4Dt}} \quad (5.49)$$

对于我们的理论，由于无法求得解析解，我们用数值计算方法得到自旋极化以及自旋相干随时间和位置的演化。我们的结果画在图 5.9(a) 和 5.9(b) 中，其中图 5.9(a) 画出

的是两个自旋子带上的电子密度之差 $\Delta N = |N_{1/2} - N_{-1/2}|$ 和时间及位置的关系，图 5.9(b) 画出的则是 ρ 和时间及位置的关系。由于自旋包关于 $x = 0$ 对称，我们只画出 $x \geq 0$ 的部分。作为一个比较，我们还在图 5.9(c) 中画出由近独立电子模型预言的结果。

从图中我们可以看到，我们的多体动力学理论和近独立电子模型都预言了在 $x < 0.12 \mu\text{m}$ 区域内，由于去相位/退相干以及扩散自旋信号一开始都非常迅速的衰减了。过了 5 皮秒之后，扩散开始变得不是特别重要了，因此在这个区间内自旋信号衰减速度变慢，去相位/退相干造成的衰减开始占主导。在区间 $0.12 \mu\text{m} < x < 0.5 \mu\text{m}$ 内，在最开始的 2 皮秒中自旋信号先是由于从 $x < 0.12 \mu\text{m}$ 区域内的扩散而得到增强。在超过 2 皮秒之后， $x < 0.12 \mu\text{m}$ 区间内的自旋极化衰减了很多，由它流向 $x > 0.12 \mu\text{m}$ 区域的自旋极化变慢。因此在去相位/退相干以及扩散的共同作用下， $0.12 \mu\text{m} < x < 0.5 \mu\text{m}$ 区间内的自旋极化开始衰减。对于 $x > 0.5 \mu\text{m}$ 的区间，两个模型都预言了自旋信号在经过一段时间输运之后可以传到离中心距离超过 $0.15 \mu\text{m}$ 的区域。不过由于近独立电子模型舍弃了自旋相干 $\rho_{\sigma-\sigma}$ 、DP 项和 HF 项来简化问题，并且用驰豫时间近似来处理自旋去相位，所以由我们的模型和这个简化模型得到的自旋包随时间演化的细节上有很多不同之处。比如说，我们得到的结果表明，在 $0.45 \mu\text{m} < x < 0.5 \mu\text{m}$ 这个区间内，对于某个固定的坐标 x ，自旋极化随时间演化的曲线上有一些小的振荡，而在近独立电子模型得到的结果中则没有这些振荡。这些振荡是由于扩散，去相位以及由于 DP 项造成的自旋翻转的共同作用导致的结果。而在近独立电子模型中用驰豫时间近似取代了 DP 项造成的去相位，没有考虑到自旋翻转，所以不可能得到这些振荡。

两个模型之间最大的不同之处在于从我们多体理论得到的结果中自旋极化在沿自旋扩散方向上有振荡。为了更清楚的看出这个效应，我们在图 5.9(d) 上单独画出了在 $t = 0, 1.1, 5.7, 10.3 \text{ ps}$ 时两个自旋子带上的电子密度差 ΔN 随 x 的变化。从这张图上我们可以清楚的看出当 $t > 3.5$ 皮秒时，自旋极化在空间上的振荡。这是因为在自旋包的输运中，自旋包内部由于 DP 效应导致自旋进动从而产生了自旋相干 $\rho_{\sigma-\sigma}(x, k, t)$ ，而这些自旋相干输运由于扩散，很快就传输到自旋包外，从而导致了在 $x > 0.55 \mu\text{m}$ 区域内产生自旋相干积累。这些自旋相干建立起了一个有效的局域磁场，并且可以使得自旋向上（向下）的电子翻转到自旋向下（向上），因此就导致了在自旋扩散时自旋极化信号随位置的振荡。而这些结论在只考虑了纵向的自旋扩散的近独立电子模型中是无法得到的。

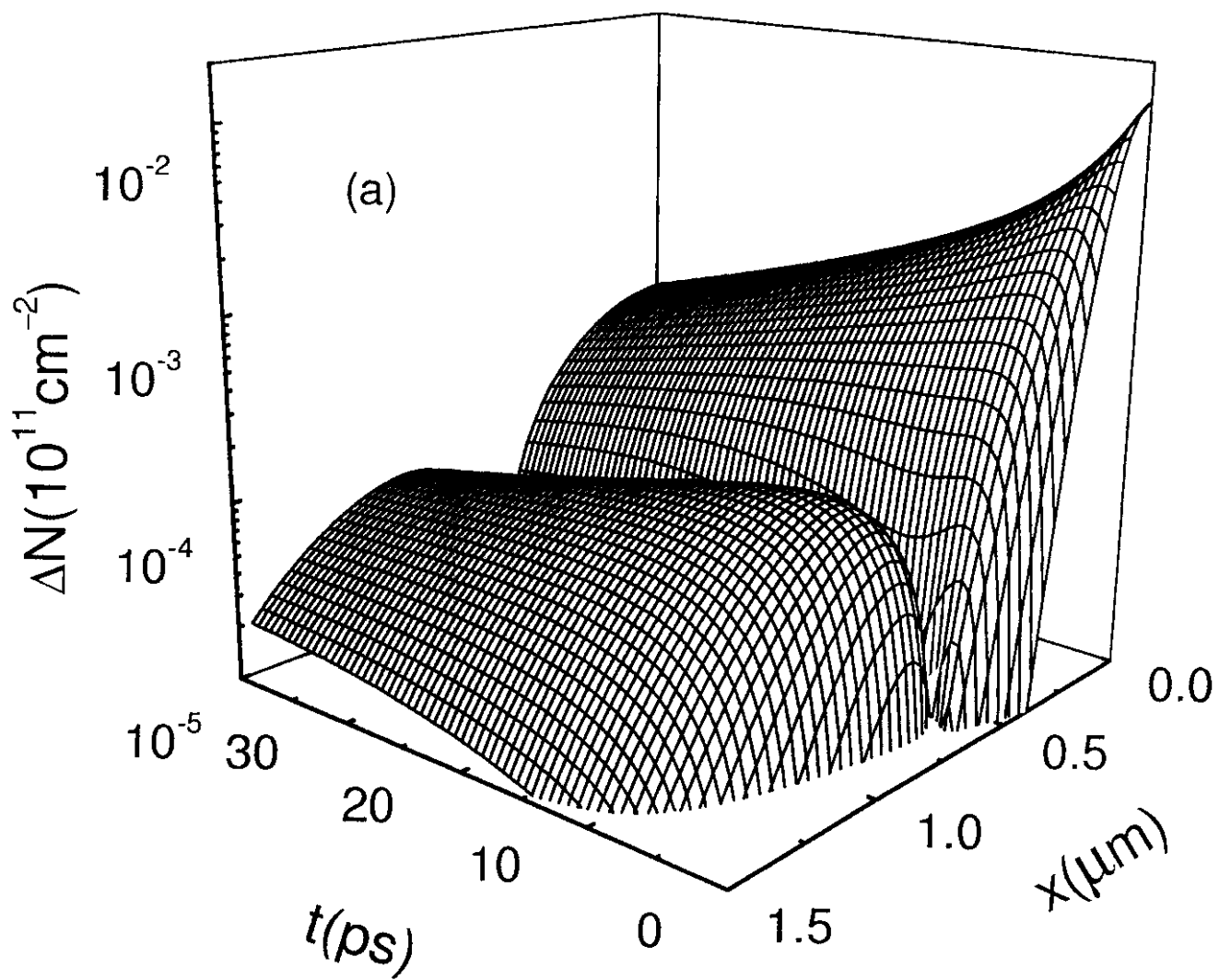


图 5.9(a): 自旋向上和自旋向下子带之间的电子密度差随距离和时间的变化。

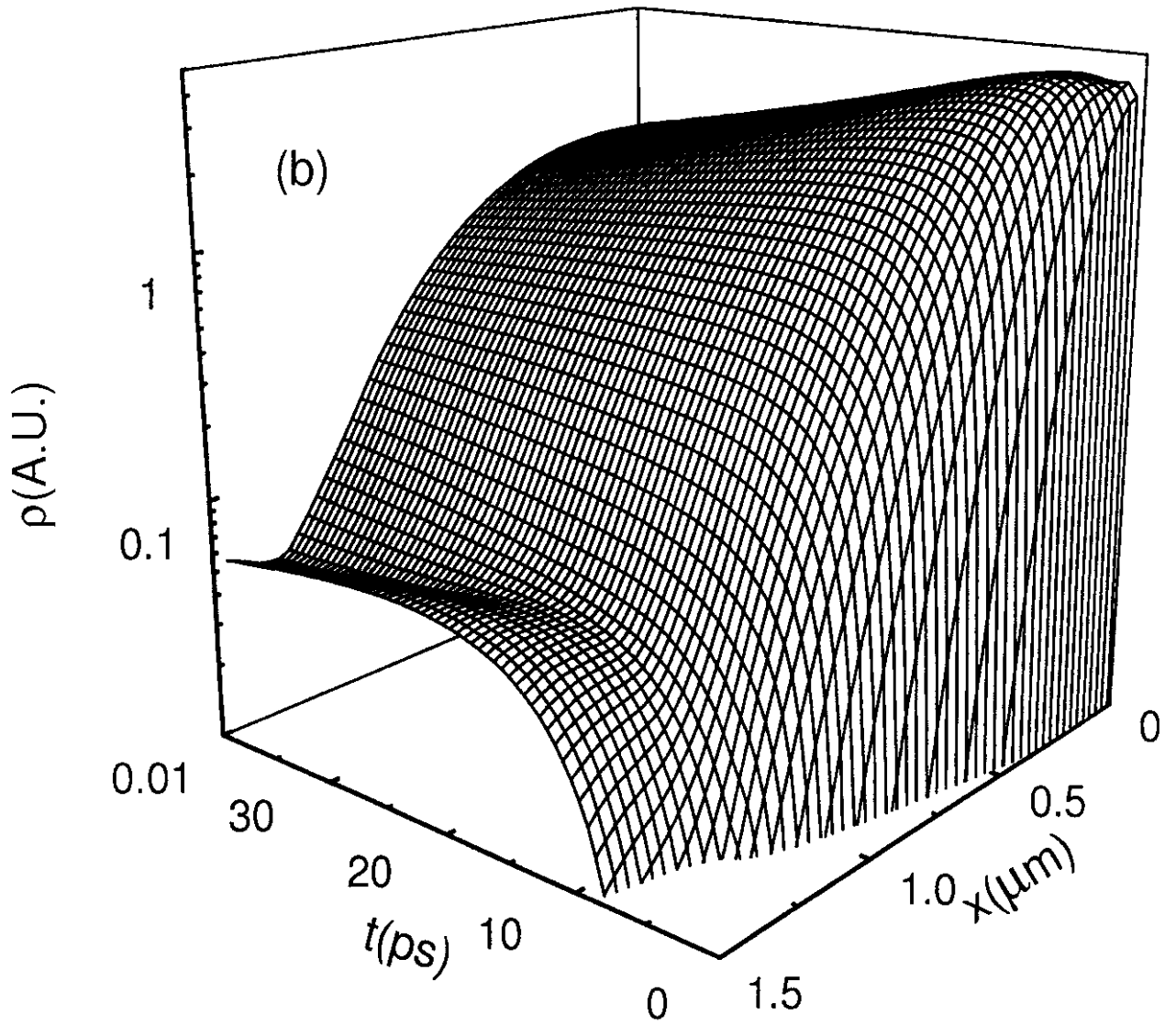


图 5.9(b): 自旋相干的非相干和随距离和时间的变化。

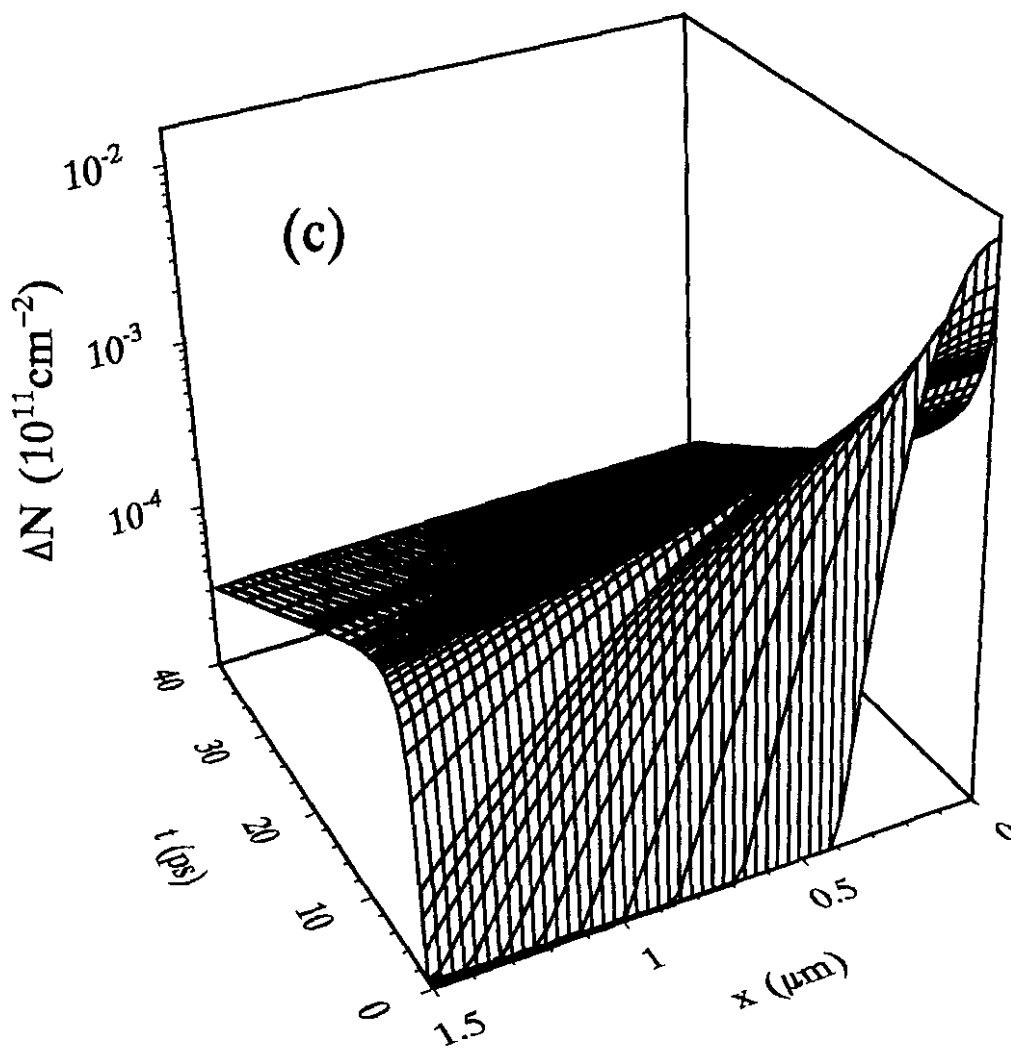


图 5.9(c): 单体理论预言的自旋向上和自旋向下子带之间的电子密度之差与距离和时间的关系。

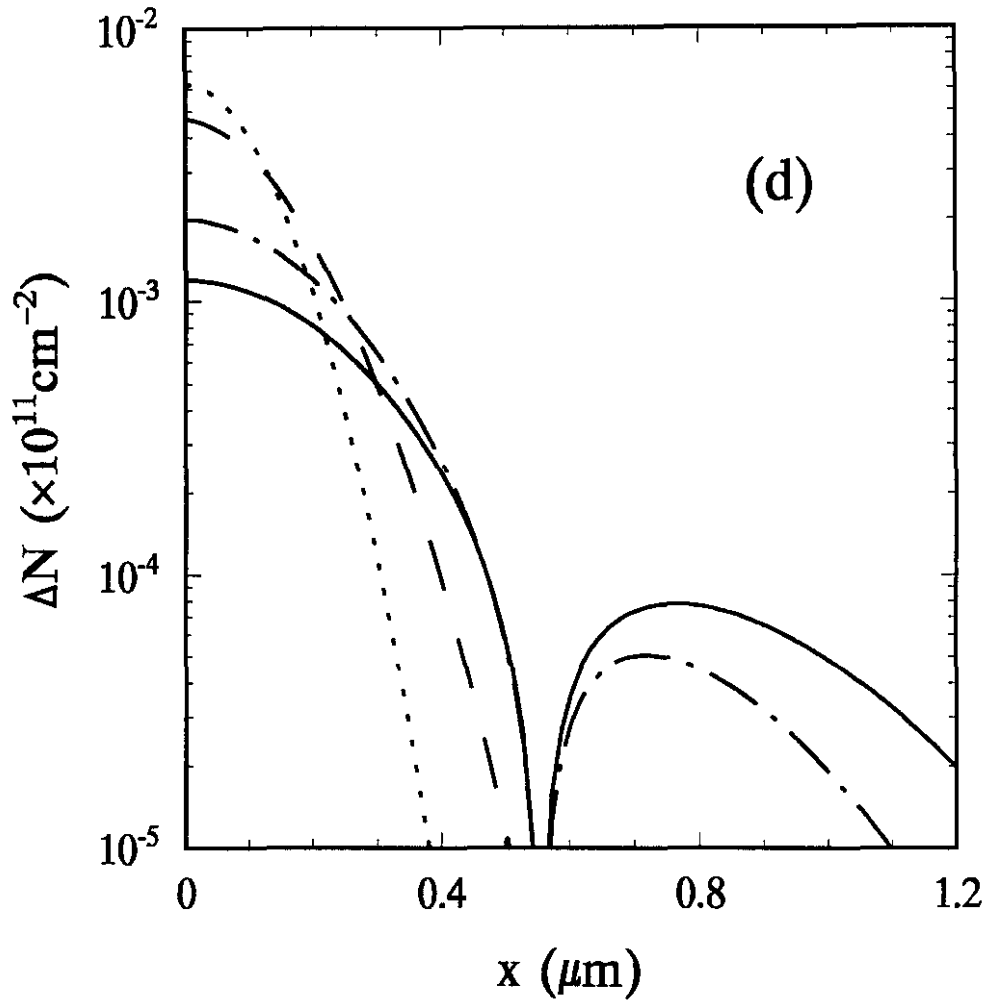


图 5.9(d): 自旋向上和自旋向下子带之间的电子密度之差与距离的关系: $t = 0$ (点线); $t = 1.1$ ps (虚线); $t = 5.3$ ps (点划线); $t = 10.7$ ps (实线)。

第六章

总结

在本文的开头部分我们介绍了有关半导体中有关自旋电子学的基本概念，以及对半导体中自旋驰豫和自旋去相位（dephasing）现象的研究历史和最新进展。同时还介绍了有关自旋注入和自旋输运的最新研究情况，以及有关自旋电子学器件设计的方案。紧接着我们对利用多体动力学方程研究半导体自旋进动去相位的方法，特别是 Wu 等人的研究成果做了概要的综述。

然后我们把 Wu 等人的理论推广用于 n 型 GaAs (100) 量子阱中，系统地计算了 n 型 GaAs 量子阱中在施加了 Voigt 配置的外磁场作用下由于 DP 效应导致的自旋去相位。从非平衡 Green 函数出发，利用推广的 Kadanoff-Baym 假设，我们推导出一套建立在两自旋子带模型上的动力学 Bloch 方程。在方程中我们包括了电子-声子散射、电子-非磁性杂质散射以及电子-电子相互作用。通过数值方法自洽地求解这一套动力学 Bloch 方程，我们研究了各个自旋子带上电子密度以及自旋相干（即自旋向上子带和自旋向下子带的电子之间的相关）随时间的演化。通过拟合自旋相干的非相干求和随时间演化的包络线的斜率我们得到自旋去相位时间。由此我们详细的计算了初始自旋极化、温度、掺杂浓度、磁场和电子浓度对这个去相位时间的影响。和前人在单粒子模型上研究自旋去相位的方法——因而只能考虑有效的自旋翻转散射——不同的是，我们的模型包含了多体效应对自旋去相位的贡献。事实上，在实验研究的自旋极化范围内对于 n 型半导体来说，这个多体效应造成的去相位甚至于比有效的自旋翻转散射更重要。另外，在我们的多体理论中包含了所有的散射，特别是考虑了电子-电子 Coulomb 散射，我们能够计算很大的初始自旋极化（可以高达 100%）下的自旋去相位。

我们的计算表明自旋去相位时间 τ 随着初始自旋极化的增加而增加。此外，在低温低杂质浓度时在 τ 和初始自旋极化 P 的曲线上有一个很大的反常共振峰。如果提高

温度或者杂质浓度，反常峰的位置会逐渐向初始自旋极化高的位置移动，而且反常峰高度也会迅速的降低直至峰完全消失。相反的是，如果增大磁场的值，反常峰将得到增强，不过峰的位置还是向初始极化高的方向移动。我们发现，这个巨大的反常共振峰是来源于电子-电子 Coulomb 作用中的 HF 项的贡献。在一定的自旋极化下，HF 项的贡献的大小可以和 Bloch 方程中的相干项里的 DP 项以及磁场相比拟，从而达到共振。由于这个共振是 HF 项，DP 项以及磁场的共同作用，因此共振峰的大小和位置会受到所有对这三项有作用的因素，比如温度、杂质散射、磁场以及电子密度的影响。在给定杂质浓度下，温度升高，HF 项减小，结果就造成 $\tau-P$ 曲线变平缓，峰的位置向高初始自旋极化方向移动；在没有杂质的情况下，温度升高到 200 K 时，HF 项的影响已经降低得太多以至于无法达到共振，因此反常峰也随之消失。而给定温度下改变掺杂浓度也有类似情况：当杂质浓度提高时，HF 项减小，共振效应也变小；杂质浓度提高到 $0.1 N_c$ 时，HF 下降太利害以至于在我们研究的所有温度范围那无法形成共振。而提高磁场则对 HF 有增强作用，因此当磁场增大时，自旋去相位时间随初始极化的增加的速度加快，峰的高度也升高。而且由于磁场变强，为了达到共振，需要更大的 HF 项，因此峰的位置也相应的向高初始极化方向移动。当磁场增加到 8 T 后，峰的位置将移动到所有可能的极化区域之外，因此在整个可能的初始极化强度的区间内将无法看到反常峰。

在小自旋极化区域内，我们发现自旋去相位时间随温度升高而升高。这个结果是和以前使用的简化的单粒子模型得到的自旋去相位时间随温度升高而减小的结论相反。而且由我们的多体模型预言的自旋去相位时间要比用单粒子模型得到的结果要快一个量级。其原因是 DP 效应本身同时引入了非均匀扩展，它和自旋守恒散射结合也会导致自旋去相位。这个去相位机制纯粹是由于多体效应导致的。在我们研究的条件下，自旋去相位主要是由多体去相位机制主导。在温度升高时，非均匀扩展变小，因此自旋去相位时间变长。我们的这个结果在定量上和定性上都与实验结果比较一致。

我们同时还对电子-杂质散射对自旋去相位的影响做了研究。我们的结果表明对于低自旋极化的电子，在温度为 120 K 时，自旋去相位时间在杂质浓度 N_i 从 0 升高到 $0.01 N_c$ 时先是下降；然而当杂质浓度进一步增加到 $0.1 N_c$ 时，自旋去相位时间再次上升。而到了温度为 200 K 情况，自旋去相位时间总是随杂质浓度升高而升高。这个有意思的结果是由于散射在去相位中扮演的双重角色导致的。一方面散射提高了额外的自旋去相位渠道，因而增强了自旋去相位；另一方面，散射也会导致电子状态，使之在动量空间分布得更加均匀，因此减低了 DP 项的各向异性效果，降低了自旋去相位。在低温区域，DP 项引人的非均匀扩作用比较强，散射使得电子分布各向同性的作用相

对弱一些，因而刚刚引入杂质时自旋去相位时间先被杂质散射减低。当杂质浓度达到 $0.1 N_c$ 时，第二个效果增强，自旋去相位时间随杂质浓度升高。而在高温区域，非均匀扩展效果变小，结果第一个效应就比较小，自旋去相位时间总是随杂质浓度升高而升高。

在高自旋极化区域，散射对自旋去相位的影响除了上面所说的两种效应之外，还会影响到 HF 项。这导致了在高自旋极化下各种条件对自旋去相位的影响更为复杂。通常情况下在高自旋极化区域内是无法使用一个单调的函数来描述自旋去相位对杂质浓度以及温度的依赖关系。对于 $P = 75\%$ 这个靠近于低温的反常峰的特殊极化强度，在没有杂质时自旋去相位时间由于共振消除而随温度急剧下降；而在 $N_i = 0.1 N_c$ 时，自旋去相位时间基本不随温度改变。

由于磁场引起电子自旋围绕它进动，这种进动会抑制电子绕 DP 项产生的有效磁场 $\hbar(k)$ 的进动，因此会减小自旋去相位。同时，磁场会增强 HF 项，这相当于增加了另外一个磁场，因而进一步抑制了 DP 效应。这解释了在高自旋极化区域， $\tau-B$ 曲线上更快。我们的计算也表明了当电子浓度升高，更多的电子分布在动量大的状态上，结果就增强了 DP 项，导致自旋去相位时间减小。

我们还进一步把动力学 Bloch 方程推广到空间非均匀的体系中，并通过求解动力学 Bloch 方程来研究 n 型 GaAs (100) 量子阱中的自旋扩散和自旋输运问题。在这个计算中我们也自洽地考虑了多体效应、空间不均匀性以及自旋去相位/退相干对自旋输运的影响。

我们重新检查了广泛使用的近独立电子模型并指出其不足之处。我们提出了一个重要的自旋退相干效应，它是基于在扩散方向上具有不同波矢的电子/自旋之间的干涉效应。在我们的文中也被称为“非均匀扩展”。这个效应由多体效应导致的，因而在通用的单电子模型中未被考虑。我们的结果表明即使不考虑散射项的影响，这种非均匀扩展自身就可以引起自旋退相干。我们的结果表明在研究自旋输运时应用多体理论是非常必要的，而仅仅使用单电子模型是不够的。

我们进一步从多体理论出发来研究包含了 DP 效应以及各种散射在内的自旋扩散/输运问题。通过数值的方法自洽地求解了动力学 Bloch 方程以及 Poisson 方程的联立方程组，我们研究了在各种各样条件下的恒定注入情况的静态自旋输运。在我们的理论中自洽的包括了各种散射对电荷迁移率及自旋极化的影响。因此无需任何驰豫时间假定。我们的计算表明在施加了一个小的外电场之后，电子具有一个净漂移速度，因此自旋扩散长度大大的增长。在施加了外电场时，掺杂样品的注入长度要小于没有掺杂样品。不过在无外加电场时，自旋注入长度反而被杂质散射增长。这个结果和

第六章 总结

单电子模型的结果完全相反，我们讨论了我们的结果和单电子近似结果的定性上的异同，指出杂质散射对自旋输运具有三个方面的影响：即减小扩散系数、迁移率以及增长自旋去相位时间。前二者使得自旋扩散长度变小，而最后一个因素使得扩散长度变大。在不加外电场时，因为不需要考虑迁移率的变化，最后一个因素占主导，因此加上杂质之后扩散长度变长；在施加了外电场之后，前二者共同起作用，导致扩散长度变短。我们还研究了在 Voigt 配置（磁场方向沿扩散方向）下的磁场以及在量子阱生长方向上施加电场对自旋扩散的影响。在磁场作用下，自旋极化在扩散方向上呈现振荡行为，并且在干涉效应下迅速衰减。由于干涉效应导致的衰减比自旋去相位强很多，因此在磁场作用下，自旋注入长度大大减小。而在生长方向上施加电场则使 Rashba 效应增强，同时增大退相干和去相位机制，导致了自旋扩散长度变短。同时我们还研究了在不同温度下的自旋输运问题。我们发现当温度升高时，由于 $k_x = 0$ 附近的这些对干涉效应贡献最大的电子分布函数减小导致了干涉效应相应减小，结果自旋扩散长度随温度升高而升高，这与单电子模型给出的结果全然相反。

我们同时演示了自旋包随时间的演化。在自旋包中心的自旋信号由于扩散和去相位总是随时间衰减；而在偏离中心的自旋信号先是上升，然后下降。更有意思的是，我们发现在没有外加磁场时，在远离初始自旋极化包处的自旋极化会和初始极化包中的自旋极化相反，这是由于在初始的自旋极化包之外的位置上由中心位置扩散出来以及自旋进动产生的自旋相干 $\rho_{\sigma-\sigma}$ 与 DP 效应结合会产生一个相对来说比较大的局部磁场，在此磁场作用下，在初始的自旋极化包之外的位置上的自旋信号的符号会于初始的自旋包中的极化方向。我们还发现在某些位置上自旋信号会随时间振荡。这些结果是以前的单电子模型所不能预言的。

附录 A

自旋输运 Bloch 方程的数值解法

在这个附录里，我们简要的说明一下在求解自旋输运的 Bloch 方程时说使用的数值方法。

为了清楚起见，我们把描述沿 x 方向输运的 Bloch 方程按照如下方式重新写出：

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f_\sigma(x, \mathbf{k}, t)}{\partial t} &= 2\text{Im}[\bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t)\rho_\sigma^*(x, \mathbf{k}, t)] \\
 &+ \frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}}{\partial x} \frac{\partial f_\sigma(x, \mathbf{k}, t)}{\partial k_x} - \frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x, \mathbf{k}, t)}{\partial k_x} \frac{\partial f_\sigma(x, \mathbf{k}, t)}{x} \\
 &+ \text{Re}\left\{ \frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t)}{\partial x} \frac{\partial \rho_\sigma^*(x, \mathbf{k}, t)}{\partial x} - \frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t)}{\partial k_x} \frac{\partial \rho_\sigma^*(x, \mathbf{k}, t)}{\partial x} \right\} \\
 &+ f_\sigma^{\text{scatt}}(x, \mathbf{k}, t; \{f_\sigma(t)\}, \{f_{-\sigma}(t)\}, \{\rho_\sigma(t)\}), \tag{A.1}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho_\sigma(x, \mathbf{k}, t)}{\partial t} &= -i[\bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x, \mathbf{k}, t) - \bar{\varepsilon}_{-\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t)]\rho_\sigma(x, \mathbf{k}, t) \\
 &- i\bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t)[f_{-\sigma}(x, \mathbf{k}, t) - f_\sigma(x, \mathbf{k}, t)] \\
 &+ \frac{1}{2}\left[\frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x, \mathbf{k}, t)}{\partial x} + \frac{\partial \bar{\varepsilon}_{-\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t)}{\partial x}\right]\frac{\partial \rho_\sigma(x, \mathbf{k}, t)}{\partial k_x} \\
 &- \frac{1}{2}\left[\frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x, \mathbf{k}, t)}{\partial k_x} + \frac{\partial \bar{\varepsilon}_{-\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t)}{\partial k_x}\right]\frac{\partial \rho_\sigma(x, \mathbf{k}, t)}{\partial x} \\
 &+ \frac{1}{2}\frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t)}{\partial x}\left[\frac{\partial f_\sigma(x, \mathbf{k}, t)}{\partial k_x} + \frac{\partial f_{-\sigma}(x, \mathbf{k}, t)}{\partial k_x}\right] \\
 &- \frac{1}{2}\frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t)}{\partial k_x}\left[\frac{\partial f_\sigma(x, \mathbf{k}, t)}{\partial k_x} + \frac{\partial f_{-\sigma}(x, \mathbf{k}, t)}{\partial k_x}\right] \\
 &+ \rho_{\sigma-\sigma}^{\text{scatt}}(x, \mathbf{k}, t; \{f_\sigma(t)\}, \{f_{-\sigma}(t)\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t)\}) \tag{A.2}
 \end{aligned}$$

附录 A 自旋输运 BLOCH 方程的数值解法

在不计算电子-电子 Coulomb 散射时，散射项为，

$$\begin{aligned}
 f_{\sigma}^{\text{scatt}}(x, \mathbf{k}, t; \{f_{\sigma}(t)\}, \{f_{-\sigma}(t)\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t)\}) = & \\
 & \left\{ -2\pi \sum_{\mathbf{k}' q_z \lambda} |g_{\mathbf{k}-\mathbf{k}' q_z \lambda}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \Omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}' q_z \lambda}) \right. \\
 & \left[N_{\mathbf{k}-\mathbf{k}' q_z \lambda} (f_{\sigma}(x, \mathbf{k}, t) - f_{\sigma}(x, \mathbf{k}', t)) + f_{\sigma}(x, \mathbf{k}, t) (1 - f_{\sigma}(x, \mathbf{k}', t)) \right. \\
 & \left. - \text{Re}(\rho_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t) \rho_{\sigma-\sigma}^*(x, \mathbf{k}', t)) \right] \\
 & - 2\pi N_i \sum_{\mathbf{k}'} |U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} \left[f_{\sigma}(x, \mathbf{k}, t) (1 - f_{\sigma}(x, \mathbf{k}', t)) \right. \\
 & \left. - \text{Re}(\rho_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t) \rho_{\sigma-\sigma}^*(x, \mathbf{k}', t)) \right] \left. \right\} \\
 & - \{\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}'\} \tag{A.3}
 \end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_{\sigma-\sigma}^{\text{scatt}}(x, \mathbf{k}, t; \{f_{\sigma}(t)\}, \{f_{-\sigma}(t)\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t)\}) = & \\
 & \left\{ -\pi \sum_{\mathbf{k}' q_z \lambda} g_{\mathbf{k}-\mathbf{k}' q_z \lambda}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \Omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}' q_z \lambda}) \right. \\
 & \left[(f_{\sigma}(x, \mathbf{k}, t) + f_{-\sigma}(x, \mathbf{k}, t)) \rho_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}', t) \right. \\
 & + (f_{\sigma}(x, \mathbf{k}', t) + f_{-\sigma}(x, \mathbf{k}', t) - 2) \rho_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t) \\
 & \left. - 2N_{\mathbf{k}-\mathbf{k}' q_z \lambda} (\rho_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t) - \rho_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}', t)) \right] \\
 & - \pi N_i \sum_{\mathbf{k}' \lambda} |U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} \\
 & \left[(f_{\sigma}(x, \mathbf{k}, t) + f_{-\sigma}(x, \mathbf{k}, t)) \rho_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}', t) \right. \\
 & \left. - (2 - f_{\sigma}(x, \mathbf{k}', t) + f_{-\sigma}(x, \mathbf{k}', t)) \rho_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, t) \right] \left. \right\} \\
 & - \{\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}'\} \tag{A.4}
 \end{aligned}$$

其中

$$\bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma'}(x, \mathbf{k}, t) = \varepsilon_{\sigma\sigma'}(x, \mathbf{k}, t) + \Sigma_{\sigma\sigma'}^s(x, \mathbf{k}, t), \tag{A.5}$$

$$\varepsilon_{\sigma\sigma'}(x, \mathbf{k}, t) = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} \delta_{\sigma, \sigma'} + [g\mu_B \mathbf{B} + \mathbf{h}(\mathbf{k})] \cdot \vec{\sigma}_{\sigma\sigma'} / 2 + U(x, t), \tag{A.6}$$

$$\Sigma_{\sigma\sigma'}^s(x, \mathbf{k}, t) = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \rho_{\sigma\sigma'}(x, \mathbf{k}', t) \tag{A.7}$$

附录 A 自旋输运 BLOCH 方程的数值解法

电势能 $U(x, t)$ 为,

$$U(x, t) = -e\psi(x, t), \quad (\text{A.8})$$

而电势 $\psi(x, t)$ 满足 Poisson 方程,

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} = \frac{e}{\varepsilon_0} [n_e(x, t) - n_+(x)], \quad (\text{A.9})$$

其中 $n_e(x, t)$ 为电子密度,

$$n_e(x, t) = \frac{1}{a} \sum_{\mathbf{k}\sigma} f_\sigma(x, \mathbf{k}, t), \quad (\text{A.10})$$

$n_+(x)$ 为正电荷背景密度。我们计算的范围选取为 $x \in [0, L]$, 如果在此区间上施加了一个电场 E , 那么电势的边界条件为:

$$\psi(0, t) \equiv 0, \quad (\text{A.11})$$

$$\psi(L, t) \equiv EL. \quad (\text{A.12})$$

分布函数和自旋相干的边界条件和初值条件分别取为:

$$f_\sigma(0, \mathbf{k}, t) \equiv \frac{1}{\exp((\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu_\sigma)/T_e) + 1}, \quad (\text{A.13})$$

$$\rho_{\sigma-\sigma}(0, \mathbf{k}, t) \equiv 0, \quad (\text{A.14})$$

和

$$f_\sigma(x, \mathbf{k}, 0) = f_\sigma(0, \mathbf{k}, 0), \quad (\text{A.15})$$

$$\rho_{\sigma-\sigma}(x, \mathbf{k}, 0) = 0, \quad (\text{A.16})$$

目前我们研究自旋在无穷长样品里的输运, 因此, 我们不去确定 $x = L$ 处的分布函数和自旋相干, 而是让它们自由变化。

为了数值求解 Bloch 方程, 我们需要把连续的坐标空间和波矢空间离散化。坐标变量 x 的选取为间隔均匀的分割点,

$$x_i = i(L/N) \quad (i = 0, 1, 2, \dots, N); \quad (\text{A.17})$$

而动量空间变量 (k_x, k_y) 则按照能量均匀分割来选取分割点,

$$k_x^l = \text{sign}(l) \sqrt{|l| E_{\text{cut}}/N_k}, \quad (l = -N_k, -N_k + 1, \dots, N_k - 1, N_k), \quad (\text{A.18})$$

附录 A 自旋输运 BLOCH 方程的数值解法

$$k_y^m = \text{sign}(m) \sqrt{|m| E_{\text{cut}} / N_k}, \quad (m = -N_k, -N_k + 1, \dots, N_k - 1, N_k), \quad (\text{A.19})$$

$$(\text{A.20})$$

这样子选取分割点之后，对函数 $f(\mathbf{k})$ 在波矢空间的求和变为：

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} f(k_x, k_y) \rightarrow \sum_{l,m} \frac{W_l W_m}{(2\pi)^2} f(k_x^l, k_y^m) \quad (\text{A.21})$$

其中 W_l 和 W_m 是权重，

$$W_l = \sqrt{\frac{|l|+1}{N_k} E_{\text{cut}}} - \sqrt{\frac{|l|}{N_k} E_{\text{cut}}}, \quad (l = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N), \quad (\text{A.22})$$

$$W_l = 2\sqrt{\frac{1}{N_k} E_{\text{cut}}}, \quad (l = 0). \quad (\text{A.23})$$

对时间 t 也按照均匀分割来离散化，

$$t_h = 0, \Delta t, 2\Delta t, 3\Delta t, \dots \quad (\text{A.24})$$

我们按照向前微商的办法对 Bloch 方程做离散化，

$$\begin{aligned} & \frac{f_{\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - f_{\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_h)}{\Delta t} = \\ & f_{\sigma}^{\text{coh}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\}) \\ & + f_{\sigma}^{\text{drive}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\}) \\ & + f_{\sigma}^{\text{scatt}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\}). \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

其中

$$\begin{aligned} & f_{\sigma}^{\text{coh}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\}) \\ & = 2\text{Im}[\bar{\epsilon}_{\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \rho_{\sigma}^*(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})] \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

当 $i = 1, 2, \dots, N-2, N-1$ 时，

$$\begin{aligned} & f_{\sigma}^{\text{drive}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\}) \\ = & \frac{\bar{\epsilon}_{\sigma\sigma}(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \bar{\epsilon}_{\sigma\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{2\Delta x} \Delta_{k_x^l} f_{\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \\ & - \Delta_{k_x^l} \bar{\epsilon}_{\sigma\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \frac{f_{\sigma}(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - f_{\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{2\Delta x} \end{aligned}$$

附录 A 自旋输运 BLOCH 方程的数值解法

$$\begin{aligned}
 & + \operatorname{Re} \left\{ \frac{\bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{2\Delta x} \Delta_{k_x^l} \rho_{\sigma}^*(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \right. \\
 & \left. - \Delta_{k_x^l} \bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \frac{\rho_{\sigma}^*(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \rho_{\sigma}^*(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{2\Delta x} \right\} \quad (\text{A.27})
 \end{aligned}$$

而在 $i = N$ 这个边界时,

$$\begin{aligned}
 & j_{\sigma}^{\text{drive}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\}) \\
 = & \frac{\bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{\Delta x} \Delta_{k_x^l} f_{\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \\
 & - \Delta_{k_x^l} \bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \frac{f_{\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - f_{\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{\Delta x} \\
 & + \operatorname{Re} \left\{ \frac{\bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{\Delta x} \Delta_{k_x^l} \rho_{\sigma}^*(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \right. \\
 & \left. - \Delta_{k_x^l} \bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \frac{\rho_{\sigma}^*(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \rho_{\sigma}^*(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{\Delta x} \right\} \quad (\text{A.28})
 \end{aligned}$$

同样的,

$$\begin{aligned}
 & \frac{\rho_{\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \rho_{\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_h)}{\Delta t} \\
 = & \dot{\rho}_{\sigma-\sigma}^{\text{coh}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\}) \\
 & + \dot{\rho}_{\sigma-\sigma}^{\text{drive}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\}) \\
 & + \dot{\rho}_{\sigma-\sigma}^{\text{scatt}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\}) \quad (\text{A.29})
 \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
 & \dot{\rho}_{\sigma-\sigma}^{\text{coh}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\}) \\
 = & -i [\bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \bar{\varepsilon}_{-\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})] \rho_{\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \\
 & -i \bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) [f_{-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - f_{\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})] \quad (\text{A.30})
 \end{aligned}$$

在 $i = 1, 2, \dots, N-2, N-1$ 时,

$$\begin{aligned}
 & \dot{\rho}_{\sigma-\sigma}^{\text{drive}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\}) \\
 = & \frac{1}{2} \left[\frac{\bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{2\Delta x} \right. \\
 & \left. + \frac{\bar{\varepsilon}_{-\sigma-\sigma}(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \bar{\varepsilon}_{-\sigma-\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{2\Delta x} \right] \Delta_{k_x^l} \rho_{\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \\
 & - \frac{1}{2} [\Delta_{k_x^l} \bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) + \Delta_{k_x^l} \bar{\varepsilon}_{-\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})]
 \end{aligned}$$

附录 A 自旋输运 BLOCH 方程的数值解法

$$\begin{aligned}
 & \times \frac{\rho_s(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \rho_s(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{2\Delta x} \\
 & + \frac{1}{2} \frac{\bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{2\Delta x} \\
 & \times [\Delta_{k_x^l} f_\sigma(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) + \Delta_{k_x^l} f_{-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})] \\
 & - \frac{1}{2} \Delta_{k_x^l} \bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \left[\frac{f_\sigma(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - f_\sigma(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{2\Delta x} \right. \\
 & \left. + \frac{f_{-\sigma}(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - f_{-\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{2\Delta x} \right] \tag{A.31}
 \end{aligned}$$

而在边界 $i = N$ 时,

$$\begin{aligned}
 & \dot{\rho}_{\sigma-\sigma}^{\text{drive}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_\sigma(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\}) \\
 = & \frac{1}{2} \left[\frac{\bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{\Delta x} \right. \\
 & \left. + \frac{\bar{\varepsilon}_{-\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \bar{\varepsilon}_{-\sigma-\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{\Delta x} \right] \Delta_{k_x^l} \rho_\sigma(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \\
 & - \frac{1}{2} [\Delta_{k_x^l} \bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) + \Delta_{k_x^l} \bar{\varepsilon}_{-\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})] \\
 & \times \frac{\rho_s(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \rho_s(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{\Delta x} \\
 & + \frac{1}{2} \frac{\bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{\Delta x} \\
 & \times [\Delta_{k_x^l} f_\sigma(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) + \Delta_{k_x^l} f_{-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})] \\
 & - \frac{1}{2} \Delta_{k_x^l} \bar{\varepsilon}_{\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \left[\frac{f_\sigma(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - f_\sigma(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{\Delta x} \right. \\
 & \left. + \frac{f_{-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - f_{-\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})}{\Delta x} \right] \tag{A.32}
 \end{aligned}$$

其中 $\Delta_{k_x^l} f(k_x^l)$ 是 $\partial_{k_x} f(k_x)$ 的离散化结果, 在我们的计算中取为:

$$\Delta_{k_x^l} f_{k_x^l} = \begin{cases} \frac{f(k_x^l) - f(k_x^{l+1})}{k_x^l - k_x^{l+1}}, & (l = -N_k, -N_k + 1, \dots, -2, -1); \\ \frac{f(k_x^l) - f(k_x^{l-1})}{k_x^l - k_x^{l-1}}, & (l = 0); \\ \frac{f(k_x^l) - f(k_x^{l-1})}{k_x^l - k_x^{l-1}}, & (l = 1, 2, \dots, N_k - 1, N_k). \end{cases} \tag{A.33}$$

而对于散射项 $\dot{\rho}_{\sigma-\sigma}^{\text{scatt}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_\sigma(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\})$ 以及 $\dot{\rho}_{\sigma-\sigma}^{\text{scatt}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_\sigma(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}(t_{h+1})\})$ 只要按照 (A.2) 把 (A.3) 和 (A.4) 离散化, 同时把 (A.3) 和 (A.4) 两式的 δ -函数用如下的高斯函数替代:

$$\delta(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi\delta E}} \exp(-x^2/(\delta E)^2) \tag{A.34}$$

附录 A 自旋输运 BLOCH 方程的数值解法

其中 δE 一般的取值范围为 $0.2 \sim 0.4 E/N_k$ 。

Poisson 方程在离散之后为

$$\frac{\psi(x_{i+1}, t_{h+1}) + \psi(x_{i-1}, t_{h+1}) - 2\psi(x_i, t_{h+1})}{\Delta x^2} = \frac{e}{\epsilon_0} [n_e(x_i, t_{h+1}) - n_+(x_i, t_{h+1})] \quad (\text{A.35})$$

数值求解 Bloch 方程的过程如下，

1. $h = 0$ ，根据初值条件设置初始的分布函数 $f_\sigma(x_i, k_x^l, k_y^m, t_h)$ ，以及自旋相干 $\rho_{\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_h)$ ；

2. $h \rightarrow h+1$ ，令 $p = 0$ ，设置第一步迭代的值

$$f_\sigma^{(p)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) = f_\sigma(x_i, k_x^l, k_y^m, t_h) \quad (\text{A.36})$$

$$\rho_\sigma^{(p)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) = \rho_\sigma(x_i, k_x^l, k_y^m, t_h) \quad (\text{A.37})$$

3. 利用 Gauss 消元法解出边界条件为 $\psi(x_0, t) \equiv 0$ 和 $\psi(x_N, t) \equiv EL$ 的 Poisson 方程，得到电子密度为

$$n_e(x_i, t_{h+1}) = \sum_{lm\sigma} \frac{W_l W_m}{(2\pi)^2} f_\sigma^{(p)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \quad (i = 1, 2, 3, \dots, N-1) \quad (\text{A.38})$$

时的电势 $\psi(x_i, t_{h+1})$ 。

4. 利用公式 (A.25)-(A.34) 计算出

$f_{\sigma-\sigma}^{\text{coh}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_\sigma^{(p)}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\})$
 $\dots \hat{\rho}_{\sigma-\sigma}^{\text{scatt}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_\sigma^{(p)}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\})$ 并利用以下公式得到下一个迭代结果，

$$\begin{aligned} f_\sigma^{(p+1)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) &= (1 - \delta) f_\sigma(x_i, k_x^l, k_y^m, t_h) \\ &+ \frac{\delta}{2} (1 - \delta_{i,N}) f_\sigma(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_h) + \frac{\delta}{2} (1 + \delta_{i,N}) f_\sigma(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_h) \\ &+ \Delta t \left(f_\sigma^{\text{coh}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_\sigma^{(p)}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}) \right. \\ &+ f_\sigma^{\text{drive}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_\sigma^{(p)}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}) \\ &\left. + f_\sigma^{\text{scatt}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_\sigma^{(p)}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}) \right) \quad (\text{A.39}) \end{aligned}$$

和

$$\rho_\sigma^{(p+1)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) = (1 - \delta) \rho_\sigma(x_i, k_x^l, k_y^m, t_h)$$

附录 A 自旋输运 BLOCH 方程的数值解法

$$\begin{aligned}
& + \frac{\delta}{2}(1 - \delta_{i,N})\rho_{\sigma}(x_{i+1}, k_x^l, k_y^m, t_h) + \frac{\delta}{2}(1 + \delta_{i,N})\rho_{\sigma}(x_{i-1}, k_x^l, k_y^m, t_h) \\
& + \Delta t \left(\rho_{\sigma-\sigma}^{\text{coh}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}) \right. \\
& + \rho_{\sigma-\sigma}^{\text{drive}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}) \\
& \left. + \rho_{\sigma-\sigma}^{\text{scatt}}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}; \{f_{\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}, \{f_{-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}, \{\rho_{\sigma-\sigma}^{(p)}(t_{h+1})\}) \right) \quad (\text{A.40})
\end{aligned}$$

其中 δ 是为了保证解的稳定性而增加的“粘滞”项，一般取为 $0.1 \sim 0.2$ 。

5. 判断迭代是否收敛，如果

$$\{|f_{\sigma}^{(p+1)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - f_{\sigma}^{(p)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})|\}, \quad (\text{A.41})$$

$$\{|f_{-\sigma}^{(p+1)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - f_{-\sigma}^{(p)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})|\}, \quad (\text{A.42})$$

$$\{|\rho_{\sigma-\sigma}^{(p+1)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \rho_{\sigma-\sigma}^{(p)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1})|\} \quad (\text{A.43})$$

中的最大值小于某个特定的值 Δ_1 ，则迭代收敛，继续下一步；否则令 $p \rightarrow p + 1$ 回到步骤 3 继续迭代。

6. 把迭代的结果当成是下一个时间点的分布函数和自旋相干，

$$f_{\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) = f_{\sigma}^{(p+1)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \quad (\text{A.44})$$

$$f_{-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) = f_{-\sigma}^{(p+1)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \quad (\text{A.45})$$

$$\rho_{\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) = \rho_{\sigma-\sigma}^{(p+1)}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) \quad (\text{A.46})$$

判断系统是否达到稳定，如果

$$\{|f_{\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - f_{\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_h)\}, \quad (\text{A.47})$$

$$\{|f_{-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - f_{-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_h)\}, \quad (\text{A.48})$$

$$\{|\rho_{\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_{h+1}) - \rho_{\sigma-\sigma}(x_i, k_x^l, k_y^m, t_h)\} \quad (\text{A.49})$$

中的最大值小于某个特定值 Δ_2 ，那么认为系统达到稳定，得到的分布函数和自旋相干就是静态输运时候的结果；否则回到步骤 2，继续下一时间点的迭代。

附录 B

半导体热电子输运部分工作的简介

我们把电子气的初态选择为相对于实验室坐标系静止的态并重新推导了电子受到的摩擦力以及电子气向外传输能量的速率的表达式。在我们的计算中包含了电场的高阶修正。我们得到的摩擦力和能量传输率的表达式和原来平衡方程理论中得到的表达式形式上一致，不过我们得到的电子分布函数不同于原来平衡方程理论中使用的漂移 Fermi 分布函数。我们详细讨论了这个分布函数，并且在驰豫时间近似下得到一个简单的分布函数表达式。我们得到的这个分布函数在电场的一阶近似下就是漂移 Fermi 分布函数。利用平衡方程和这个新的分布函数表达式，我们计算了在强简并情况下杂质引起的电阻，并比较了从我们理论以及从原来的平衡方程得到的结果。计算表明，在电场比较小的时候，两个理论得到的结果是一致的；而在电场比较大的时候，我们的结果和原来的结果相差很多[209]。我们进一步把平衡方程理论和新的分布函数应用于计算 GaAs-AlGaAs 异质结中的二维电子气的迁移率。在计算中，我们还把原来平衡方程理论中使用的裸声子频率用重整化后的声子频率代替。从我们理论计算得到的迁移率和实验结果相比，符合程度要高于原来的平衡方程理论[210, 211]。在此基础上我们进一步考虑了声子因为接受电子传递的能量而导致温度升高的效应。我们使用热声子假设替代原来平衡方程理论中的两温度模型，即假设声子处于热平衡中，并使用牛顿传热公式得到平衡时候的声子温度。由此计算出的电子迁移率和实验几乎完全符合[212]。我们同时还推导出了在电场和磁场同时作用下的平衡方程形式，数值计算的结果表明，即使是在磁场比较小的范围内从我们的理论得到的迁移率也是和磁场有关的。相反的，在经典极限下，原来的平衡方程理论得到的电子迁移率是不依赖于磁场的[213]。

参考文献

- [1] D. Grundler, *Physics World* **15**, 39 (2002).
- [2] T. Dietl, *Acta Phys. Polon. A* **100** (Suppl.), 139 (2001), [cond-mat/0201279].
- [3] S. D. Sarma, *American Scientist* **89**, 516 (2001).
- [4] D. D. Awschalom and J. M. Kikkawa, *Physics Today* **52**, 33 (1999).
- [5] S. A. Wolf, *J. Supercond.: Incorporing Novel Mechanism* **13**, 195 (2000).
- [6] S. A. Wolf *et al.*, *Science* **294**, 1488 (2001).
- [7] D. D. Awschalom, M. E. Flatte, and N. Samarth, *Scientific American* **286**, 66 (2002).
- [8] M. Baibich *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).
- [9] J. Barnas *et al.*, *Phys. Rev. B* **42**, 8110 (1990).
- [10] J. M. Daughton *et al.*, *IEEE Trans. Magn.* **30**, 4608 (1994).
- [11] G. Prinz, *Science* **282**, 1660 (1998).
- [12] M. Ziese and M. J. Thornton, *Spin Electronics* (Springer, Berlin, 2001).
- [13] J. F. Gregg *et al.*, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **35**, R121 (2002).
- [14] A. Moser *et al.*, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **35**, R157 (2002).
- [15] J. S. Moodera *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3273 (1995).
- [16] T. Miyazaki *et al.*, *J. Magn. Magn. Mater.* **151**, 403 (1995).

参考文献

- [17] M. Tondra *et al.*, J. Appl. Phys. **83**, 6698 (1998).
- [18] S. D. Sarma *et al.*, Solid State Commun. **119**, 207 (2001).
- [19] L. M. K. Vandersypen *et al.*, cond-mat/0207059 (unpublished).
- [20] S. D. Sarma *et al.*, cond-mat/0006369 (unpublished).
- [21] M. N. Leuenberger *et al.*, Phys. Rev. Lett. **89**, 207601 (2002).
- [22] N. F. Mott, Proc. R. Soc. **153**, 699 (1936).
- [23] A. Fert and I. A. Campbell, Phys. Rev. Lett. **21**, 1190 (1968).
- [24] A. Fert and I. A. Campbell, J. Phys. F **6**, 849 (1976).
- [25] A. Barthelemy and A. Fert, Phys. Rev. B. **43**, 13124 (1991).
- [26] R. J. Elliot, Phys. Rev. **96**, 266 (1954).
- [27] Y. Yafet, Phys. Rev. **85**, 478 (1952).
- [28] Y. Yafet, in *Solid State Physics*, edited by F. Seitz and D. Turnbull (Academic, New York, 1963), Vol. 14.
- [29] M. I. D'yakonov and V. I. Perel', Zh. Eksp. Teor. Fiz. **60**, 1954 (1971), [Sov. Phys.-JETP **38**, 1053 (1971)].
- [30] G. L. Bir, A. G. Aronov, and G. E. Pikus, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **69**, 1382 (1975), [Sov. Phys.-JETP **42**, 705 (1975)].
- [31] G. Lampel, Phys. Rev. Lett. **20**, 491 (1968).
- [32] R. R. Parsons, Phys. Rev. Lett. **23**, 1132 (1969).
- [33] A. I. Ekimov and V. I. Safarov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. Pis'ma **12**, 293 (1970).
- [34] F. Meier and B. P. Z. (Eds), *Optical Orientation* (North-Holland, Amsterdam, 1984).
- [35] D. Z. Garbuzov, A. I. Ekimov, and V. I. Safarov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. Pis'ma **13**, 36 (1971), [JETP Lett. **13**, 495].

参考文献

- [36] A. H. Clark, R. D. Burnham, D. J. Chadi, and R. M. White, *Phys. Rev. B* **12**, 5758 (1975).
- [37] J. M. Kikkawa, I. P. Smorchkova, N. Samarth, and D. D. Awschalom, *Science* **277**, 1284 (1997).
- [38] J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom, *Nature* **397**, 139 (1998).
- [39] J. Kikkawa and D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4313 (1998).
- [40] S. Datta and B. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990).
- [41] M. Johnson, *Science* **260**, 320 (1993).
- [42] M. Johnson, *Mat. Sci. and Eng. B* **31**, 199 (1995).
- [43] M. Johnson, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 1435 (1993).
- [44] D. J. Monsma *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 5260 (1995).
- [45] D. J. Monsma, R. Vlutters, and J. C. Lodder, *Science* **281**, 407 (1998).
- [46] J. C. Lodder *et al.*, *J. Magn. Magn. Mater.* **198**, 119 (1999).
- [47] M. Amman, K. Mullen, and E. Ben-Jacob, *J. Appl. Phys.* **65**, 339 (1989).
- [48] S. Altimeyer, B. Spangenberg, and H. Kurz, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 569 (1995).
- [49] J. F. Gregg and P. D. Sparks, 1997, british Patent 9608716.8.
- [50] J. F. Gregg, 2000, british Patent 0006142.4.
- [51] L. Allen and J. H. Eberly, *Optical Resonance and Two-level Atoms* (Wiley, NewYork, 1975).
- [52] R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism* (McGraw-Hill, NewYork, 1970).
- [53] O. Madelung, *Physics of III-V Compounds* (Wiley, NewYork, 1964).
- [54] E. O. Kane, *J. Phys. Chem. Solids* **1**, 182 (1975).
- [55] E. O. Kane, *J. Phys. Chem. Solids* **1**, 249 (1975).

参考文献

- [56] G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (Halsted Press, Jerusalem, London).
- [57] A. G. Aronov, G. E. Pikus, and A. N. Titkov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **84**, 1170 (1983), [*Sov. Phys.-JETP* **57**, 680 (1983)].
- [58] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
- [59] Y. A. Bychkov and E. Rashba, *J. Phys. C* **17**, 6039 (1984).
- [60] Y. A. Bychkov and E. Rashba, *Sov. Phys. JETP Lett.* **39**, 78 (1984).
- [61] G. Lommer, F. Malcher, and U. Rössler, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 728 (1988).
- [62] G. E. Pikus and G. L. Bir, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **60**, 195 (1971), [*Sov. Phys.-JETP* **33**, 108 (1971)].
- [63] S. T. Pavlov and Y. A. Firsov, *Fiz. Tverd. Tela* **7**, 2634 (1965), [*Sov. Phys. Solid State* **7**, 2131 (1966)].
- [64] S. T. Pavlov, *Fiz. Tverd. Tela* **8**, 900 (1966).
- [65] V. N. Abakumov and I. N. Yassievich, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **61**, 2571 (1971), [*Sov. Phys.-JETP* **34**, 1375 (1972)].
- [66] J. N. Chazalviel, *Phys. Rev. B* **11**, 1555 (1975).
- [67] M. I. D'yakonov and V. I. Perel', *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **65**, 362 (1973), [*Sov. Phys. JETP* **38**, 177 (1974)].
- [68] W. Hanle, *Z. Phys.* **30**, 93 (1924).
- [69] E. L. Ivchenko, *Fiz. Tverd. Tela* **15**, 1566 (1973), [*Sov. Phys. Solid State* **15**, 1048 (1973)].
- [70] B. P. Zakharchenya *et al.*, *Fiz. Tverd. Tela* **18**, 230 (1973).
- [71] D. Garbuzov, A. I. Ekimov, and V. I. Safarov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz. Pis'ma* **13**, 36 (1971), [*JETP Lett.* **13**, 495].

参考文献

- [72] A. N. Titkov, E. I. Chaikina, E. M. Komova, and N. G. Ermakova, *Sov. Phys. Semicond.* **15**, 345 (1981).
- [73] A. H. Clark, R. D. Burnham, D. J. Chadi, and R. M. White, *Solid. State Commun.* **20**, 385 (1976).
- [74] V. I. Marushak, T. V. Lagunova, M. N. Seepanova, and A. N. Titkov, *Fiz. Tverd. Tela* **25**, 2140 (1983).
- [75] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, *Zh. Eksp. Teor. Fiz. Pis'ma* **13**, 206 (1971).
- [76] C. B. à La Guillaume, P. Lavallard, and R. Bichard, in *Proc. 12th Int. Conf. On the Physics of Semiconductors*, edited by M. Pilkuhn (Teubner, Stuttgart, 1974), p. 766.
- [77] V. I. Safarov and A. N. Tikov, in *Proc. 15th Int. Conf. On the Physics of Semiconductors*, edited by S. Tanaka and Y. Toyozawa (Komiya Printing Co., Tokyo, 1980), p. 623.
- [78] J. Wagner *et al.*, *Phys. Rev. B* **47**, 4786 (1993).
- [79] T. C. Damen *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3432 (1991).
- [80] J. J. Baumberg *et al.*, *Phys. Rev. B* **50**, 7689 (1994).
- [81] J. J. Baumberg *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 717 (1994).
- [82] A. P. Heberle, W. W. Rühle, and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3887 (1994).
- [83] C. Buss, R. Frey, C. Flyizanis, and J. Cibert, *Solid State Commun.* **94**, 543 (1995).
- [84] C. Buss *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4123 (1997).
- [85] H. Ohno, *Science* **281**, 951 (1998).
- [86] Y. Ohno *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4196 (1999).
- [87] S. A. Crooker *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2814 (1996).
- [88] S. A. Crooker *et al.*, *Phys. Rev. B.* **56**, 7574 (1996).

参考文献

- [89] J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom, *Science* **287**, 473 (2000).
- [90] I. Malajovich *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1015 (2000).
- [91] J. M. Kikkawa, J. A. Gupta, I. Malajovich, and D. D. Awschalom, *Physica E* **9**, 194 (2001).
- [92] M. Faraday, *Phil. Mag.* **29**, 153 (1846).
- [93] N. Linder and L. J. Sham, *Physica E* **2**, 412 (1998).
- [94] L. J. Sham, T. Östreich, and K. Schönhammer, *Physica E* **2**, 388 (1998).
- [95] T. Östreich, K. Schönhammer, and L. J. Sham, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4698 (1995).
- [96] J. A. Gupta, D. D. Awschalom, X. Peng, and A. P. Alivisatos, *PRB* **59**, R10421 (1999).
- [97] F. G. Monzon and M. Roukes, *J. Magn. Magn. Mater.* **198-199**, 632 (1999).
- [98] S. Gardelis *et al.*, *Phys. Rev. B* **60**, 7764 (1999).
- [99] C. M. Hu *et al.*, *Phys. Rev. B* **63**, 125333 (2001).
- [100] M. Johnson and R. H. Silsbee, *Phys. Rev. B* **35**, 4959 (1987).
- [101] P. C. van Son *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2271 (1987).
- [102] T. Valet and A. Fert, *Phys. Rev. B* **48**, 7099 (1993).
- [103] S. Hershfield and H. L. Zhao, *Phys. Rev. B* **56**, 3296 (1997).
- [104] G. Schmidt *et al.*, *Phys. Rev. B* **62**, R4790 (2000).
- [105] R. A. de Grot *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 202 (1983).
- [106] J. W. Dong *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 1443 (1999).
- [107] S. M. Watts *et al.*, *Phys. Rev. B* **61**, 9621 (2000).
- [108] F. J. Jedema, A. T. Filip, and B. J. van Wees, *Nature* **410**, 345 (2001).
- [109] J. J. Vershijjs, M. A. Bari, and J. M. D. Coey, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 026601 (2001).

参考文献

- [110] R. J. Soulen *et al.*, Science **282**, 85 (1998).
- [111] C. P. Beam and D. S. Rodbell, Phys. Rev. **126**, 104 (1962).
- [112] H. Akinaga *et al.*, J. Mag. Soc. Jpn. **22**, 451 (2001).
- [113] J. C. Egues, Phys. Rev. Lett. **80**, 4578 (1998).
- [114] M. Oestreich *et al.*, Appl. Phys. Lett. **74**, 1251 (1999).
- [115] Y. Ohno *et al.*, Nature **402**, 790 (1999).
- [116] R. Fiederling *et al.*, Nature **402**, 787 (1999).
- [117] E. I. Rashba, Phys. Rev. B **62**, R16267 (2000).
- [118] S. F. Alvarado and P. Renaud, Phys. Rev. Lett. **68**, 1387 (1992).
- [119] P. V. Dorpe *et al.*, cond-mat/0208325 (unpublished).
- [120] V. F. Motsnyi, Appl. Phys. Lett. **81**, 265 (2002).
- [121] L. C. Chen *et al.*, J. Vac. Sci. Tech. B **18**, 2057 (2000).
- [122] H. J. Zhu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 016601 (2001).
- [123] G. Kirzenow, Phys. Rev. B **63**, 054422 (2001).
- [124] D. Grundler, Phys. Rev. B **63**, R161307 (2001).
- [125] S. K. Upadhyay *et al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3247 (1998).
- [126] S. K. Upadhyay *et al.*, Appl. Phys. Lett. **74**, 3881 (1999).
- [127] D. Monsma *et al.*, Phys. Rev. Lett. **74**, 5260 (1995).
- [128] R. Jansen *et al.*, J. Appl. Phys. **89**, 7431 (2001).
- [129] W. H. Rippard and R. A. Buhrman, Phys. Rev. Lett. **84**, 971 (2000).
- [130] M. Johnson, Phys. Rev. B **58**, 9635 (1998).
- [131] P. R. Hammar *et al.*, Phys. Rev. Lett. **83**, 203 (1999).

参考文献

- [132] P. R. Hammar and Johnson, *Phys. Rev. B* **61**, 7207 (2000).
- [133] M. Johnson, *Physica E* **10**, 472 (2001).
- [134] M. Governale and U. Zülicke, *Phys. Rev. B* **66**, 073311 (2002).
- [135] D. K. Young *et al.*, cond-mat/0201337 (unpublished).
- [136] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, and T. Enoki, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1335 (1997).
- [137] T. Schäpers *et al.*, *J. Appl. Phys.* **83**, 4324 (1998).
- [138] A. Bournel, P. Dollfus, P. Brouno, and P. Hesto, *Eur. Phys. J. AP* **4**, 1 (1998).
- [139] A. Cabbibo *et al.*, *J. Vac. Sci. Technol. A.* **15**, 1215 (1997).
- [140] G. Meier and T. Matsuyama, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 1315 (2000).
- [141] M. W. Wu and H. Metiu, *Phys. Rev. B* **61**, 2945 (2000).
- [142] M. W. Wu and C. Z. Ning, *phys. stat. sol. B* **222**, 523 (2000).
- [143] M. W. Wu, *J. Phys. Soc. Jap.* **70**, 2195 (2001).
- [144] M. W. Wu and C. Z. Ning, *Eur. Phys. J. B.* **18**, 373 (2000).
- [145] M. W. Wu, *J. Supercond.: Incorporing Novel Mechanism* **14**, 245 (2001), cond-mat/0109258.
- [146] M. W. Wu and M. Kuwata-Gonokami, *Solid State Commun.* **121**, 509 (2002).
- [147] S. K. Haywood *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 922 (1989).
- [148] R. W. Martin *et al.*, *Phys. Rev. B* **42**, 9237 (1990).
- [149] Y. Iye *et al.*, *Phys. Rev. B* **33**, 5854 (1986).
- [150] Haug and A. P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors* (Springer-Verlag, Berlin, 1996).
- [151] G. D. Mahan, *Many-particle Physics* (Plenum, New York, 1981).
- [152] L. Bányai, E. Reitsamer, and H. Haug, *J. Opt. Soc. Am. B* **13**, 1278 (1996).

参考文献

- [153] M. Lindberg, R. Binder, and S. W. Koch, *Phys. Rev. A* **45**, 1865 (1996).
- [154] T. Kuhn and F. Rossi, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 977 (1992).
- [155] H. Haug and S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors* (Springer, Berlin, 1996).
- [156] M. Z. Malalle, E. A. de Andrada e Silva, and L. J. Sham, *Phys. Rev. B* **47**, 15776 (1993).
- [157] W. W. Chow and S. W. Koch, *Semiconductor-Laser Fundamentals* (Springer, Berlin, 1999).
- [158] C. Pidgeon, D. Mitchell, and R. Brown, *Phys. Rev.* **154**, 737 (1967).
- [159] B. McCombe and R. Wagner, *Phys. Rev. B* **4**, 1285 (1971).
- [160] D. Stein, K. von Klitzing, and G. Weimann, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 13 (1983).
- [161] G. Lommer, F. Malcher, and U. Rössler, *Phys. Rev. B* **32**, 6965 (1985).
- [162] H. Mayer and U. Rossler, *Phys. Rev. B* **44**, 9048 (1991).
- [163] M. Yang *et al.*, *Phys. Rev. B* **47**, 6807 (1993).
- [164] M. Yang *et al.*, *Phys. Rev. B* **47**, 1691 (1993).
- [165] N. S. Averkiev, L. E. Golub, and M. Willander, *J. Phys.: Cond. Mat.* **14**, R271 (2002).
- [166] W. H. Lau, J. T. Oberg, and M. E. Flatté, *Phys. Rev. B* **64**, 161301 (2001).
- [167] T. F. Boggess *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 1333 (2000).
- [168] T. Adachi, Y. Ohno, F. Matsukura, and H. Ohno, *Physica E* **10**, 36 (2001).
- [169] R. Eppenga and M. F. H. Schuurmans, *Phys. Rev. B* **37**, 10923 (1988).
- [170] E. L. Ivchenko and G. E. Pikus, *Superlattices and Other Heterostructures* (Springer, Berlin, 1995).

参考文献

- [171] X. L. Lei and N. J. M. Horing, *International Journal of Modern Physics B* **6**, 805 (1992).
- [172] L. P. Kadanoff and G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (Benjamin, New York, 1962).
- [173] L. P. Keldysh, *Sov. Phys. JETP* **20**, 1018 (1965).
- [174] J. Rammer and H. Smith, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 323 (1986).
- [175] J. Rammer, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 781 (1991).
- [176] P. Lipavský, V. Špička, and B. Velický, *Phys. Rev. B* **34**, 6933 (1986).
- [177] H. Haug, *Phys. Status Solidi (b)* **173**, 139 (1992).
- [178] M. Q. Weng and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **66**, (2002), in press.
- [179] W. H. Press, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, Cambridge, 1988).
- [180] O. Madelung, M. Schultz, and H. W. (eds.), *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Landolt-Börnstein, New Series* (Springer-Verlag, Berlin, 1982), Vol. 17.
- [181] 对于平行于阱的磁场来说二维量子阱的Landé因子 g 要比三维情况大很多[C. T. Liang, C. G. Smith, M. Y. Simmons, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. B* **64**, 233319 (2001); I. L. Drichko, A. M. Diakonov, V. V. Preobrazenskii, I. Yu. Smitnov, and A. I. Thropov, *Physica B* **284**, 1732 (2000); A. Usher, R. J. Nicholas, J. J. Harris, and C. T. Foxon, *Phys. Rev. B* **41**, 1129 (1990); R. J. Nicholas, R. J. Haug, K. V. Klitzing, and W. Weimann, *Phys. Rev. B* **37**, 1294 (1988); F. F. Fang and P. J. Stiles, *Phys. Rev.* **174**, 823 (1968)]。这里我们把 g 因子的数值取为0.5, 接近于Nicholas等人测出的实验值[R. J. Nicholas, R. J. Haug, K. V. Klitzing, and W. Weimann, *Phys. Rev. B* **37**, 1294 (1988)], 而不是在三维情况下常用的0.44。不过这个数值都是在低温情况下测量的结果, 在高温情况下没有这方面的实验报导。不过即使以后有实验证明在高温下量子阱中的 g 因子数值和三维的值接近, 我们的结论也只需要相应的改成是高温的结果, 也就是说我们文中讨论的 $B = 4\text{ T}$ 的情况相应的改成 $B = 59\text{ T}$ 。在实验上可以通过脉冲磁场来获得这

参考文献

- 么大的磁场，而且其稳定的时间比我们得到的自旋驰豫时间要好几个量级[M. Respaud, A. Llobet, C. Frontera, C. Ritter, J. M. Broto, H. Rakoto, M. Goiran, and J. L. Garcia-Munoz, *Phys. Rev. B* **61**, 9014 (2000); V. A. Kulbachinskii, N. Miura, H. Nakagawa, H. Arimoto, T. Ikaida, P. Lostak, and C. Drasar, *Phys. Rev. B* **59**, 15733 (1999)].
- [182] M. I. Dyakonov and V. Y. Kachorovskii, *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* **20**, 178 (1986), [*Soviet Phys. - Semicond.* **20**, 110 (1986)].
- [183] D. Hägele *et al.*, *Physica B* **272**, 338 (1999).
- [184] A. Malinowski *et al.*, *Phys. Rev. B* **62**, 13034 (2000).
- [185] P. H. Song and K. W. Kim, *Phys. Rev. B* **66**, 035207 (2002).
- [186] F. X. Bronold, I. Martin, A. Saxena, and D. L. Smith, cond-mat/0208139 (unpublished).
- [187] F. G. Monzon and M. Roukes, *J. Magn. Magn. Mater.* **198-199**, 632 (1999).
- [188] B. T. Jonker, Y. D. Park, and B. R. Bennett, *Phys. Rev. B* **62**, 8180 (2000).
- [189] G. Schmidt *et al.*, *Phys. Rev. B* **62**, R4790 (2000).
- [190] M. E. Flatté and J. M. Byers, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4220 (2000).
- [191] I. Žutić, J. Fabian, and S. D. Sarma, *Phys. Rev. B* **64**, 121201 (2001).
- [192] I. Žutić, J. Fabian, and S. D. Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 066603 (2002).
- [193] Z. G. Yu and M. E. Flatté, cond-mat/0201425 (unpublished).
- [194] Z. G. Yu and M. E. Flatté, cond-mat/0201425 (unpublished).
- [195] I. Martin, cond-mat/0201481 (unpublished).
- [196] Y. Takahashi, K. Shizume, and N. Masuhara, *Phys. Rev. B* **60**, 4856 (1999).
- [197] Y. Takahashi, K. Shizume, and N. Masuhara, cond-mat/0012318 (unpublished).
- [198] R. A. S. (ed.), *Semiconductors* (Cambridge University Press, New York, 1978).

参考文献

- [199] M. Flatte, J. Byers, , and W. Lau (unpublished).
- [200] J. Rammer and H. Smith, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 323 (1986).
- [201] X. D. Hu, R. de Sousa, and S. D. Sarma, cond-mat/0108339 (unpublished).
- [202] B. H. Floyd and Y. L. L. Coz, *J. Appl. Phys.* **76**, 7889 (1996).
- [203] Y. L. L. Coz, Ph.D. thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1988.
- [204] I. D'Amico and G. Vignale, *Phys. Rev. B* **65**, 085109 (2002).
- [205] E. M. Conwell, *Solid State Physics* (Academic Press, New York, 1967), Vol. suppl. 9.
- [206] C. Hu *et al.*, *Phys. Rev. B* **63**, 125333 (2001).
- [207] A. Fert, J.-L. Duvail, and T. Valet, *Phys. Rev. B* **52**, 6513 (1995).
- [208] A. Hanbichi *et al.*, *Appl. Phys. Lett* **80**, 1240 (2002).
- [209] H. S. Wu, X. X. Huang, and M. Q. Weng, *phys. stat. sol. (b)* **204**, 747 (1997).
- [210] H. S. Wu and M. Q. Weng, *phys. stat. sol. (b)* **214**, 107 (1999).
- [211] M. Q. Weng and H. S. Wu, *ACTA PHYSICA SINICA (Overseas Edition)* **8**, 682 (1999).
- [212] M. Q. Weng and H. S. Wu, *phys. stat. sol. (b)* **221**, 831 (2000).
- [213] M. Q. Weng and H. S. Wu, *Commun. Theor. Phys.* **38**, 370 (2002).