

介观量子点体系的自旋极化输运

(申请清华大学物理学博士学位论文)

培养单位 物理系

学 科 物理学

研 养 单 位 吕 海 峰

指 导 教 师 郭 永 教 授

二〇〇八年四月

介观量子点体系的自旋极化输运

Spin-polarized transport in mesoscopic quantum dot systems

Dissertation Submitted to
Tsinghua University
in partial fulfillment of the requirement
for the degree of
Doctor of Science

by

Lü Haifeng
(Physics)

Dissertation Supervisor: Professor Guo Yong

April, 2008

关于学位论文使用授权的说明

本人完全了解清华大学有关保留、使用学位论文的规定，即：清华大学拥有在著作权法规定范围内学位论文的使用权，其中包括：（1）已获学位的研究生必须按学校规定提交学位论文，学校可以采用影印、缩印或其他复制手段保存研究生上交的学位论文；（2）为教学和科研目的，学校可以将公开的学位论文作为资料在图书馆、资料室等场所供校内师生阅读，或在校园网上供校内师生浏览部分内容；（3）根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》，向国家图书馆报送可以公开的学位论文。

本人保证遵守上述规定。

（保密的论文在解密后遵守此规定）

作者签名： _____ 导师签名： _____

日 期： _____ 日 期： _____

摘要

自旋电子学是一门新兴的交叉学科，其中心主题是通过操控载流子的自旋自由度或同时操控载流子的自旋和电荷两个自由度来实现信息的加工、处理和存储。同时，基于量子点结构的固态量子计算被认为是最有应用前景的量子计算方案。本文首先概述了自旋电子学的研究进展，对量子点体系的输运性质和自旋相关的物理特性做了说明，介绍了自旋轨道耦合效应。随后主要讨论了自旋轨道耦合效应和圆偏振光对体系自旋输运性质的影响。

利用有限 U 的赝玻色子近似，研究了含有 Rashba 自旋轨道耦合效应的量子点在近藤区的自旋积累、自旋极化输运和散粒噪声性质。发现自旋轨道耦合会导致近藤峰和 Fano 型电导的劈裂。自旋轨道耦合可以增加或减小 Fano 因子，这取决于量子点能级和两端化学势的高低。

提出了基于自旋轨道耦合效应三终端纯自旋流量子结构。这个结构由三个正常金属电极耦合一个具有 Rashba 自旋轨道耦合的量子点组成。其机理是利用三终端器件的分流性质，在这个结构中可以获得完全极化、甚至纯的自旋流。这个装置未用到磁性电极和外磁场，因此在实验上更易实现。

研究了二能级 Rashba 量子点的泵浦自旋流及噪声。在一个量子点体系中，Rashba 自旋轨道效应会导致能级间的自旋翻转，基于这个效应提出了一种自旋场效应管，这个器件由一个二能级 Rashba 量子点耦合两个平行排列的铁磁端口组成，通过泵浦调节 Rashba 自旋轨道耦合强度来产生纯自旋流。泵浦的强度和频率可以由一个外加门电压来调控。进一步指出大偏压下的电荷流散粒噪声可用来探测哪种翻转机制占主导地位，进而确认泵浦的电流为纯自旋流。

研究了由圆偏振光驱动的二能级量子点在顺序隧穿区域的自旋极化输运。这个器件不需要外加磁场和铁磁注入，而且工作在特定的能级和化学势位置，即注入端的化学势介于量子点二能级之间，输出端化学势低于二能级。为了获得高极化度的自旋电流，可以设计非对称的端口耦合，即电子注入强度远大于输出强度。此外，自旋相关的散粒噪声可由光场非单调地调制。

关键词： 自旋轨道耦合； 纯自旋流； 自旋泵浦； 散粒噪声； 圆偏振光

摘 要

Abstract

Spintronics refers to the study of the role played by electron (and more generally nuclear) spin in solid state physics, and possible devices that specifically exploit spin properties instead of or in addition to charge degrees of freedom. In addition, spin-based quantum dot quantum computation is considered as the most applicable quantum computer scheme. In this dissertation, we first present the recent developments in spintronics and mesoscopic quantum dot systems, and introduce the spin-resolved electron transport properties of quantum dot systems. Then we discuss the spin-polarized transport induced by the spin-orbit interactions (SOI) and circularly polarized laser field in some quantum dot devices. The spin-resolved shot noise and the corresponding Fano factor are also analyzed.

By using the finite-U slave-boson approach, we study theoretically the spin accumulation, spin-dependent transport, and the shot noise in a magnetic semiconductor quantum dot induced by the Rashba SOI in the Kondo regime. It is shown that the Rashba SOI causes the splitting of the Kondo peak and more conductance dips appear in the Fano-type conductance. It is found that the Rashba SOI can increase or decrease the Fano factor, which depends on the dot level and the chemical potentials in both leads.

We propose a spin device with three normal metal leads via a quantum dot in the presence of Rashba SOI, which operates independently on a magnetic field or ferromagnetic metals. It is shown that a pure spin current or a fully spin-polarized current can be obtained by modulating one of the voltages applied to three terminals. It is further demonstrated the dependence of the pure spin current on the strength of Rashba spin-orbit interaction and on the configuration of the three leads.

The pumped spin current and current noise spectra are analyzed theoretically in a two-level Rashba dot connected to two ferromagnetic electrodes with parallel magnetic configuration. It is found that the interlevel spin flips induced by the Rashba SOI can generate a pure spin current, whose strength is determined by both the energy spacing between two levels and the spin-flip strength. It is further pointed out

that the total charge current noise at a finite bias voltage can be used to determine whether the pumped current is a pure spin type or not.

The pumped spin current and current noise spectra are analyzed theoretically in a two-level quantum dot system, where the dot is irradiated by circularly polarized laser field. The device operates at a certain chemical potential configuration in the absence of the magnetic field and the ferromagnetic spin injection. The spin-resolved shot noise can be modulated by the laser field nonmonotonously and always indicates a sub-Poissonian type.

Key words: spin-orbit interaction; pure spin current; spin pumping; shot noise; circularly polarized light

目 录

| | |
|---|----|
| 第 1 章 绪论 | 1 |
| 1.1 自旋电子学研究进展 | 1 |
| 1.1.1 传统固体电子学发展的极限 | 1 |
| 1.1.2 自旋电子器件的优点 | 2 |
| 1.1.3 自旋电子学的发展 | 3 |
| 1.1.4 当前自旋电子学研究的基本问题 | 4 |
| 1.2 量子点体系的输运性质 | 8 |
| 1.2.1 量子点的实验制备 | 8 |
| 1.2.2 量子点的两个基本特征 | 10 |
| 1.2.3 顺序隧穿和共隧穿 | 11 |
| 1.2.4 近藤效应 | 13 |
| 1.2.5 Aharonov-Bohm 效应和 Fano 效应 | 15 |
| 1.2.6 散粒噪声 | 19 |
| 1.3 自旋轨道耦合效应 | 20 |
| 1.3.1 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合效应 | 21 |
| 1.3.2 量子点内的自旋轨道耦合效应 | 24 |
| 1.4 本论文的研究目标和结构安排 | 26 |
| 第 2 章 Rashba 量子点中的近藤效应和自旋极化输运 | 27 |
| 2.1 引言 | 27 |
| 2.2 理论模型和计算公式 | 28 |
| 2.3 结果讨论 | 32 |
| 2.3.1 自旋积累 | 32 |
| 2.3.1 极化电导 | 34 |
| 2.3.3 散粒噪声和 Fano 因子 | 38 |
| 2.4 小结 | 41 |
| 第 3 章 基于自旋轨道耦合效应的三终端自旋结构 | 43 |
| 3.1 引言 | 43 |
| 3.2 三终端器件中的纯自旋流 | 44 |

| | | |
|-----------------------|----------------------------|----|
| 3.3 | 理论模型 | 45 |
| 3.4 | 结果讨论 | 47 |
| 3.5 | 小结 | 50 |
| 第 4 章 | 二能级 Rashba 量子点的泵浦纯自旋流..... | 51 |
| 4.1 | 引言 | 51 |
| 4.2 | 理论模型和计算 | 52 |
| 4.3 | 结果讨论 | 56 |
| 4.4 | 小结 | 59 |
| 第 5 章 | 圆偏振光驱动自旋极化输运..... | 61 |
| 5.1 | 引言 | 61 |
| 5.2 | 理论模型 | 62 |
| 5.3 | 自旋电流 | 66 |
| 5.4 | 自旋相关的散粒噪声 | 69 |
| 5.5 | 小结 | 71 |
| 第 6 章 | 总结与展望..... | 73 |
| 参考文献 | | 75 |
| 致谢与声明 | | 88 |
| 个人简历、在学期间发表的学术论文与研究成果 | | 89 |

第 1 章 绪论

1.1 自旋电子学研究进展

在量子力学诞生不久，人们便认识到电子不仅带有质量和基本电荷，还带有内禀自旋。被束缚在固体中的电子同时负载电荷和自旋并伴随着轨道自由度几种属性。传统的电子学完全忽略了电子自旋，这使人们在探索未来半导体工业发展时有了新的契机和可能的研究方向。自旋电子学旨在利用电子自旋而非传统的电子电荷为基础，探讨研发新一代电子产品的可能性^[1]。本节我们将简单介绍自旋电子学的动机、物理基础以及研究内容，并重点介绍最近有关自旋流探测的理论和实验进展。

1.1.1 传统固体电子学发展的极限

传统微电子学研究的是通过电场来调制半导体中数目不等的电子和空穴亦即多数载流子和少数载流子的输运过程为基础，进而实现各种不同的功能。但同样作为电子基本属性的自旋，除了材料磁性和简单的能级简并外，在电子工业领域却未受到足够的重视。伴随着上世纪 70 年代集成电路的出现，单个微处理器的尺寸迅速减小，强劲地推动了半导体和信息工业的迅速发展。单位面积内半导体晶片的晶体管和电阻数目基本遵循着摩尔定理，即每 12 个月翻一番。至今，各类电子产品，特别是计算机的普及彻底改变了人类的生活和工作。与此同时，这种迅速发展也使半导体晶片上的晶体管快速逼近纳米尺度。随着半导体晶体管的尺寸的进一步减小，半导体芯片的原子尺度的限制和小尺度引起的焦耳能耗已成为大规模集成电路的两大难以克服的物理限制因素。由于这个原因，基于电荷操控的微电子学在不远的将来很难有更大的发展空间。为了突破这一发展极限，科技界近年来开始探索是否存在可以取代传统微电子技术的、基于全新的物理原理的新的固体电子技术。基于自旋操作的自旋电子学在这种情况下便应运而生。

1.1.2 自旋电子器件的优点

1988 年巨磁阻 (GMR) 效应的发现标志着自旋电子学研究的开端^[2,3]。GMR 效应发现后的短短几年内, 美国 IBM 公司就把这一效应成功应用到计算机硬盘读写磁头的设计上面, 制造出高密度和超高密度的磁记录读写磁头, 极大地促进了计算机产业的发展^[4,5]。而目前正在研制中的 GMR 随机存储器(MRAM)也具有许多优点, 如非挥发性, 功耗低, 存储速度快等。据预测, 实用性的 MRAM 将在不久面世。这也将引起计算机内存储器产业的飞跃发展。随着基于铁磁金属多层膜的自旋电子学在电子技术上的成功应用, 最近几年来自旋电子学的研究已开始从基于铁磁金属多层膜的磁电子学过渡到基于半导体材料的半导体自旋电子学。通过对半导体材料中电子自旋属性的开发、利用和实施积极的操控, 可以研制出很多与传统的半导体电子器件工作原理完全不同的新型半导体自旋电子器件, 实现很多传统半导体电子器件不可以实现的功能, 如量子计算机等^[6]。

电荷相互作用的能量在 eV 量级, 而自旋相互作用在 meV 量级, 因此基于电子自旋性质的逻辑运算的功率损耗要远小于基于电荷性质的功耗; 由于在半导体中电子的自旋相干弛豫时间相对于电荷弛豫是很长的, 在室温下达到了 ns 量级, 自旋相干扩散长度达到 100nm, 其远长于金属中电子的自旋相干长度^[1], 使我们更期待半导体在自旋电子学的发展中起到更大的作用。和传统的半导体电子器件相比, 半导体自旋电子器件在物理原理上将具有许多优点, 如数据处理速度快、能耗少、集成度高和信息不丢失等。由电子自旋取向构成的双态量子系统, 改变电子自旋取向要比改变电子运动状态要容易得多、快得多, 因此利用电子的自旋自由度作为信息的载体或量子位, 在量子信息和量子计算方面具有诱人的应用前景。

目前自旋电子学还处于基础研究的阶段, 但它一出现即展示出诱人的前景和应用价值, 是目前凝聚态物理和材料物理研究的一个重要领域。利用电子自旋而非传统的电子电荷为基础, 对传统的微电子学进行全面的革新, 不仅对信息工业有着重要影响, 而且对电子输运和调控等基础物理研究提出了新的挑战。

1.1.3 自旋电子学的发展

1988 年, Baibich 等人发现在 FeCr 磁性多层膜中, 磁阻率在 $T = 4.2K$ 时可达到 50%, 这是当时所知的最高值的 10 倍以上^[2,6,7]。在这个实验中, 铁磁性的铁层由非铁磁性的铬层隔开, 铁磁层通过非铁磁层反铁磁般地耦合起来。当外加磁场时, 铁磁层会沿一个方向极化。当铁磁层反铁磁般地耦合时, 它的电阻大于加上外场后的结果。铁磁层间的反铁磁耦合的强弱与非铁磁铬层的厚度有关。

1990 年, Parkin 等人^[8]发现层间反铁磁耦合的强弱随中间层的厚度振荡, 因此巨磁阻效应是可调控的。巨磁阻效应并不依赖于电流相对于磁化强度的方向, 而是取决于邻近铁磁层磁化强度的相对方向。一个最重要的特征是, 当中间隔离层的厚度大于电子的平均自由程(约 10nm)后, 巨磁阻效应就消失了。这表明相邻铁磁层决定了自旋散射机制。由于磁性和非磁性膜的厚度在电子的平均自由程内, 当磁性层中磁化强度平行时, 会增加电子的平均自由程, 反平行时, 会减弱电子的平均自由程, 这就导致了巨磁阻效应。这个效应成功地应用于敏感的磁探头设计, 极大地提高了磁探头的灵敏度。超薄多层磁性金属薄膜中巨磁阻效应(GMR)的发现, 也被认为是自旋电子学研究的开端。从此人们开始意识到量子自旋及其输运在电子仪器的研究和应用中的重要性。后来还发现了磁阻率更高的隧穿磁阻效应(TMR)^[9]。这些效应已广泛应用于磁感应器等商业产品中。

在巨磁阻效应发现后不久, 美国普渡大学的 Datta 和 Das 提出自旋场效应晶体管(Spin Field Effect transistor)的概念^[10]。这种晶体管由两个铁磁电极连接一个半导体通道组成。一般这个半导体通道是由半导体异质结形成的二维电子气。由于采用铁磁端口, 进入通道的电子是自旋极化的。通过自旋轨道耦合效应电子自旋的进动可由外加的门电压来控制。当电子隧穿出通道, 如果电子自旋与接收端电极的极化方向一致, 电子就可顺利地进入电极。反之, 当电子自旋与极化方向相反, 电子将被反射回通道。这就实现了晶体管的开关功能。而传统的晶体管则是由门电压来控制电子的运动方向, 从而实现电流的导通与切断。自旋场效应晶体管利用门电压来操纵电子自旋的进动, 而传统晶体管是利用门电压来改变电子的运动方向。相比之下, 改变电子自旋方向所需的能量远比用于改变电子运动方向要小, 效率更高。但是, 由于自旋轨道耦合的不易控制以及界面注入效率

等因素，目前实验上还未实现这种自旋场效应管。但是利用自旋轨道耦合效应来产生自旋电流和自旋积累已经在很多实验上实现^[1]。

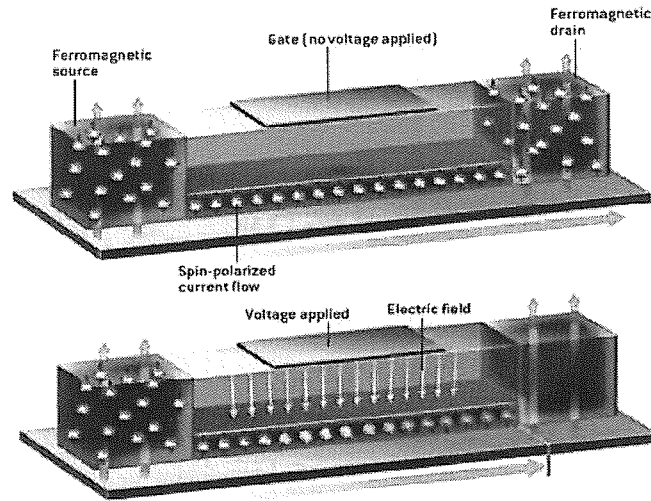


图 1.1 Datta-Das 自旋场效应管。

在前面提到的两个例子中，一个是金属薄膜的巨磁阻效应，一个是半导体的场效应晶体管。近十几年来，金属的自旋电子学器件得到了快速发展和广泛应用，成为自旋电子学研究的一股重要的推动力。2007 年的诺贝尔物理学奖授予了法国物理学家 Fert 和德国物理学家 Grunberg 以表彰他们发现了巨磁阻效应，这充分肯定了巨磁阻效应的发现对自旋电子学的影响。另一方面，由于半导体中电子的自旋相干长度远长于金属中电子的自旋相干长度，使我们更期待半导体在自旋电子学的发展中起到更大的作用。

1.1.4 当前自旋电子学研究的基本问题

自旋电子学是一门新兴的交叉学科，其中心主题就是对固体电子系统中电子的自旋自由度进行有效地操作和控制。自旋电子学的研究目的就是要理解电子自旋和其存在的固体系统之间的相互作用，并利用这些特性制造利用电子自旋属性工作的电子器件。目前对自旋电子学的研究还处在基

基础研究阶段，研究重点集中于半导体材料中电子的自旋注入和自旋动力学性质^[11,12]。

当前自旋电子学研究主要关注着以下几个基本问题：(1)自旋的有效注入，即怎样产生并转移极化的电子；(2)自旋的操控，特别是弱磁场，甚至纯电场的操作电子自旋；(3)自旋电流的测量，其中心任务是对产生自旋流的性质（如极化度、噪声、相干状态等）进行简捷的探测和度量^[12]。接下来我们对这样几个问题分别讨论。

自旋注入通常是指自旋极化电流从自旋源(磁性材料)输入到非磁导体或半导体的过程，此过程通常伴随着自旋极化的衰减，因此，注入的效率的高低尤为重要。基于自旋的各种器件，如存储器、自旋晶体管和自旋量子计算机等^[13]，都需要有较强的自旋极化电流注入，还要求在电子输运中有较长的自旋弛豫时间。

在自旋注入的研究初期，自旋注入效率很低^[14,15]。直至目前有效的自旋注入依然是实验物理和材料科学研究的重要课题。通常的自旋注入分为欧姆注入、隧道注入、弹道电子注入和热注入几种。欧姆注入也称扩散注入，这种方法是在铁磁金属和半导体之间形成一个欧姆式接触，进而产生自旋极化电流。但是典型的金属一半导体的欧姆式接触是在掺杂的半导体表面，从而引起了载流子的自旋翻转散射，造成了自旋极化度的损失。由于半导体和铁磁电极电导率的失配，这种注入方式的效率非常低。到目前为止，只有在 $T < 10K$ 下，实现 4.5%极化的报道。Schmidt 提出^[16]的电导率失配模型，认为自旋注入的效率依赖于半导体和铁磁电极的电导率的比例。一般情况下自旋注入效率小于 0.01%，只有当铁磁材料的极化率接近 100%的时候才会产生有效的注入。

隧道注入^[17]采用 STM 的铁磁针尖通过真空隧穿能得到有效的自旋注入，隧道结的边界还会出现自旋累积。采用铁磁电极的金属/绝缘层/半导体隧穿二极管或者是金属/半导体 Schottky 势垒二极管可能成为自旋注入的有效的方法。

弹道电子自旋注入^[18]是在弹道输运区注入铁磁/半导体的界面。铁磁金属的两个自旋子带和半导体导带的差异决定了界面处弹道电子传输概率是自旋相关的。实验上表明铁磁/非磁金属弹道点接触的自旋注入效率可以达到 40%。

热电子注入^[19]是采用自旋极化的热电子(能量远大于 E_f), 通过一个隧道结注入到铁磁金属(注入热电子的能量通过调节隧道结的偏压来调节)。由于不同取向的自旋电子的非弹性平均自由程有很大的差异, 热电子通过铁磁金属就可以产生大于 90%的极化率的电流。

自旋流并不是一个守恒量。随着电流在时空的传输, 电子的自旋会随电子运动而发生进动。由于自旋本身不像电荷那样是守恒的, 现在所定义的自旋流都是不守恒的。最近, 自旋流的非守恒性导致有关自旋流定义这样一个自旋电子学最基本问题的争论^[7]。在半导体中电子的自旋相干长度为几个至几百个微米之间, 因此自旋流的应用尺度应在介观或纳米尺度的电子器件中。此外, 实验发现半导体异质结中自旋相干长度是可通过外场来调节的^[1], 这也提供了一种有效操作自旋的方式。

对于单自旋的操作和自旋探测, 目前最有效的方法都是运用光学方法^[20-26]。偏振光操控电子自旋是重要的传统半导体技术。光学方法的优越性在于光具有很好的定位和可操作性。Schalom 及合作者^[23]运用时间分辨光学测量技术来研究半导体量子点的自旋的相干性, 通过飞秒时间分辨法拉第旋转来监控载流子的自旋相干性。此项技术能够清晰地观测到在飞秒尺度下自旋的进动和弛豫的情况, 从而为研究自旋的各种细致的进动行为提供了一种重要的手段。目前, 对于处于偏振态光子的存储和读取也已经在量子点体系中实现^[26]。

在半导体的光跃迁过程中, 光子和电子交换能量, 也交换动量和自旋。动量和自旋都和能量一样。在光吸收的过程中, 电子获得光子的能量, 跃迁到高能态。由于光子的动量几乎为零, 动量守恒跃迁前后的电子态具有相同的动量。而跃迁前后电子和光子的总角动量也是守恒的。半导体的带间光吸收, 是把价带中的电子激发到导带, 因而光吸收产生电子-空穴对。在这个过程中, 电子总角动量的改变完全源于光子。例如总角动量为 $3\hbar/2$ 的电子吸收一个自旋为 $-\hbar$ 的光子被激发成总角动量为 $\hbar/2$ 的电子。对于光子而言, 其自旋方向是沿着光的传播方向。所谓左右旋的定义, 也是当迎面对着光的传播方向时, 所看到的光波中电矢量是为左旋或右旋。光学自旋注入, 例如光学极化和光学泵浦, 通过圆偏振光将价带中特定自旋状态的电子泵浦到导带从而导致自旋极化电流。左旋和右旋的偏振光具有相同的角量子数和相反的磁量子数, 当电子吸收光子时不仅总能量守恒而且角动

量也要守恒。通过自旋轨道耦合^[27,28]电子的自旋被极化了。由于这种方法的高效率，光学自旋注入方法被广泛应用于电子自旋的驰豫、自旋相干驰豫和自旋极化输运。介观体系的光致极化输运也吸引了广泛的注意。

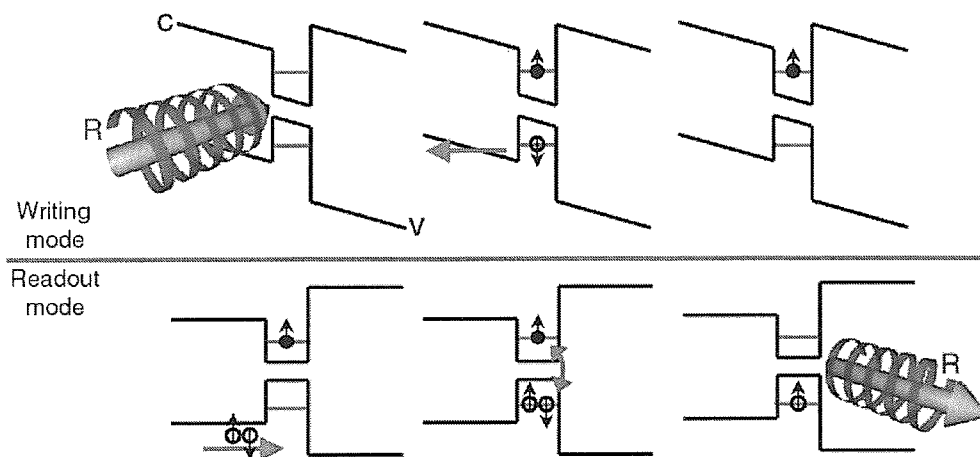


图 1.2 实验上已实现的量子点中偏振光的存储和读取^[26]。

自旋电子学和自旋依赖的量子信息过程提供了变革今日的电子器件到自旋器件的可能性。为实现这样的目的，一个最基本的问题是怎样有效控制单个电子不同自旋态间的转化和制备任意比特的初态。这件事情通常要涉及到磁共振技术，即要用到共振的磁场。然而，在半导体器件内制造强的交变磁场需要特殊的微波腔和微加工技术。相比之下，产生电场要容易得多，仅仅由一个外加电场就够了。此外，这也能提供更大的空间选择性，这很便于未来的单自旋加工。因此利用电场来操作自旋是人们非常希望做到的一件事情^[29,30]。尽管电场不直接耦合电子自旋，但是非直接的耦合依然可以操作自旋，或者利用自旋轨道效应来操作自旋。这其中一些机制已经被用来操作二维电子气上的自旋，但是用其来操作单个电子的自旋依然和实验有很大的距离。

自旋电子学是一门有着广泛应用前景和重要研究价值的学科，为微电子和磁学开拓出更大的发展空间。目前自旋电子学还有大量的器件、物理方面的问题有待解决，自旋电子学和自旋器件的突破将为微电子、纳电子器件以至整个信息科学领域展现全新的图景。

1.2 量子点体系的输运性质

介观体系，是指几何尺度相当于或小于位相相干长度的物理体系，其介于宏观体系和微观体系之间^[31,32]。在低温下，相位相干长度可以达到微米量级。当电子的运动被局域在这样小一个尺度范围内时会呈现出很多新奇的物理现象^[32,33]。量子点是人造的小量子体系，其尺度小于电子的相位相干长度。在量子点内，电子在三个维度的运动都被限制在一个德布罗意波长以内。典型的量子点是在半导体材料中尺度小于 1 微米的受限区域。在本节中，我们将分别介绍量子点的实验制备、量子点的基本特征和量子点体系的输运性质。

1.2.1 量子点的实验制备

目前，基于半导体材料的量子点生长工艺主要有以下几种^[33]。

自组织生长量子点^[34]：当稀薄层表面材料生长在不同材料制成的衬底上时，由于不同半导体材料的晶格不匹配，表面层是不平整的，而只能以孤岛的形式存在于衬底表面而形成量子点。在这种结构中，载流子可以被限制在 10nm 的尺度中。这种方法可以大规模的生长量子点，在量子点激光器应用方向上有很大的潜力。其缺点是量子点的尺寸均匀性及排列周期性很难调控。

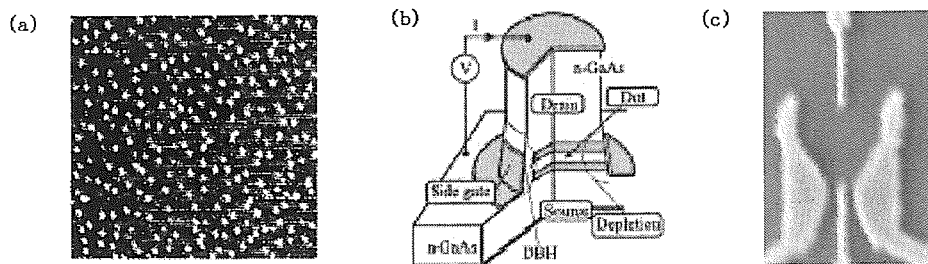


图 1.3 三种量子点体系。(a) 生长在 GaAs 衬底上的 InAs 自组织量子点的 AFM 俯视图^[34]；(b) 纵向量子点剖面图^[35]；(c) 基于二维电子气的点接触的工艺的横向量子点^[36]。

蚀刻量子阱形成量子点^[35]：使用电子束蚀刻二维量子阱来产生量子点。这种方法可以测量单个或者两个耦合量子点的电输运性质，并可以把量子点内的电子数目控制在一个很小的范围内。这种方法的缺点是电子束光刻的分辨率极限使得不能把量子点做得过小，同时易在离子蚀刻过程中

引入缺陷。此外，这种工艺步骤复杂，点内的电子数目和量子点和外界耦合都不容易调控。

基于异质结构界面二维电子气的点接触工艺制备量子点^[36]：首先在距离二维电子气层大约几十到上百纳米量级的表面利用电子束蚀刻的方法构造一些金属电极，然后在这些电极加上负偏压使其下的电子气被耗尽，形成正电性的势垒层。通过调节电极的排列和偏置电压，就可以在二维电子气上隔离出单个或多个量子点，并可以控制量子点和金属电极的耦合强度。这种方法是目前制备半导体量子点的主流方法。由于量子点只在电极的附近产生，这种方法可以同时制备有限多个量子点，并且可以知道测量的是通过哪一个量子点的电学输运性质；可以通过静电场和磁场来调节体系的各个参数，比如量子点内离散能级的间距、离散能级与电极的耦合强度、量子点内的库仑排斥能大小、不同量子点之间的隧穿耦合和库仑排斥相互作用能等。这种工艺使人们可以按照期望生长各种相互作用的量子点体系，来研究基本的物理规律和实现不同的应用功能。

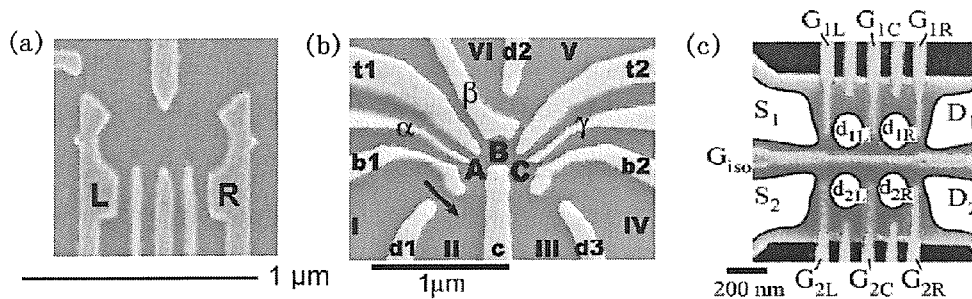


图 1.4 未来可能应用于固态量子计算的三种量子点体系。(a) 双量子点体系^[41]；(b) 可能用于实现三量子位的三量子点体系^[42]；(c) 相互作用的双量子点体系^[43]，两体系间由一高势垒隔开。

此外，实验上将单个或少数几个分子与电极相连来形成介观输运体系^[37]。这类体系中心区的电子能级也是分立的，所以它也属于量子点的范畴。作为核心元件的分子既可以是很小的无机分子，也可以是有有机大分子，如足球烯、有机聚合物、碳纳米管等。常见的分子晶体管按中心分子材料一般分为 C_{60} 分子晶体管^[38]，碳纳米管分子晶体管^[39]和有机聚合物分子晶体

管^[40]。与传统的半导体量子点相比，通常分子的大小在亚纳米到几百纳米的范围，这意味着分子晶体管将是电子器件所能达到的最小尺度。分子间特有的相互作用可以被用来引导它们自组织形成想要的纳米结构，而且可以利用分子的识别技术来控制电子的输运性质。由于分子晶体管的可选择性，这类器件有着广泛的应用前景。在理论发面，这一类器件常用来研究介观体系的电声子相互作用。

1.2.2 量子点的两个基本特征

量子点和原子具有非常相似的物理特征，这是量子点的基本特征之一^[44]。量子点在三个方向的限制使点内会形成零维的离散能谱，有限数目个电子填充在这些能级上，电子数目通常在 0 到几百个，有点像原子的电子壳层模型。电子在量子点内的填充也和真正的原子类似，服从洪特规则、第一激发态存在三重态。所以量子点又被称作人造原子。但是和原子相比，量子点内的大多特征参数都是可以通过实验进行调节和选择的。当量子点外接电极时，就构成了一个输运体系。当体系的温度 $k_B T$ 远远小于离散能级间距和点内库仑相互作用能时，量子点中的电子数目是确定的，此时电子只能一个一个地通过量子点，所以在这种情况下量子点源-漏这种结构又被称作单电子晶体管。

库仑阻塞效应是量子点的另一个基本特征^[45]。量子点的尺寸一般在几至几百纳米之间。在这么小的尺度内，电子间的库仑排斥会很大，向量子点内添加一个电子需要提供一定的充电能 $U = e^2/2C$ (C 是量子点的等效电容)。当温度大于充电能时，热电子会造成量子点内的电子数的涨落，电流可以连续地流过量子点。当温度低于量子点的充电能时，由于 Pauli 不相容原理和库仑排斥，只有当电极费米面比量子点内最高未填充能级高出一个充电能，电子才能进入和离开量子点。其他情况电子不能通过量子点隧穿，量子点内的电子数目是固定的，这种现象被称作库仑阻塞。一般而言，量子点内的能级间隔和库仑排斥的特征能量为 1meV。调节控制点内能级的栅压，可以使通过量子点的输运被完全库仑阻塞或者打开。因此通过量子点的输运作为栅压的函数表现出一系列库仑振荡。

库仑阻塞发生的温度很低，在这个温度下，参与通过量子点输运的主要是电极费米面附近的电子。当电极费米面和量子点内某个离散能级对齐时，量子力学的隧穿机制会让电子从电极进入或者离开量子点，这时候量子点内的这个

离散能级和电极的连续能谱之间通过量子隧穿被耦合起来。

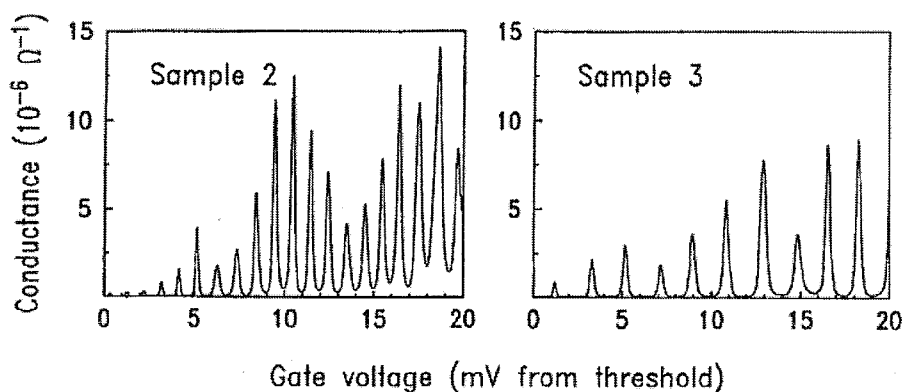


图 1.5 库仑阻塞效应示意图^[45]。

1.2.3 顺序隧穿和共隧穿

在半导体量子点中，大多数电子是束缚的，只有少量的自由电子，其数量从零到几千个不等。当能级差和单电子静电能远大于电子的热涨落时，这些电子对电导没有贡献，因此我们只需考虑该能级上的电子，而量子点简化为一个单能级系统。当通过控制门电压使量子点中的电子能级与外电路中的费米能级相等时，则这个能级中的电子可以很容易地隧穿进入到外电路中，而外电路中的一个电子也可以很容易地隧穿进入量子点以占据这个已空的能级，然后再离开量子点。如此下去，外电路中的电子就能直接不断地隧穿通过量子点。这个时候，量子点中可以有一个电子电量的涨落，也就是含有 N 个电子的量子点和含有 $N+1$ 个电子的量子点有相同的能量，此时量子点具有二重简并态。在这个电子隧穿通过量子点的过程中，电子是一个接一个地通过量子点，这种隧穿过程称为顺序隧穿(sequential tunneling)。此时隧穿可以由简单的概率方程来描述^[46,47]。温度和电子点能级差的高低，直接决定着量子点内量子态的概率分布。密度矩阵最初用来描述包含铁磁端口的介观体系输运是由 Konig 和 Martinek 提出的^[48]。他们利用格林函数导出了只考虑单能级的量子点输运。Braig 和 Brouwer 将主方程方法推广到多能级的情形^[49]，并且极大简化了推导的过程。拓展到多能级将非常便于实验数据的分析，这是由于大多数实验都采取的高偏压，

这种情形下更多的电子的能级会参与输运。

而当量子点中电子单占据的这个能级低于外电路中的费米能级时，由于电子之间强的库仑排斥作用，外电路中的电子不能直接隧穿通过量子点，发生库仑阻塞。但此时可以存在几率很小的高阶隧穿过程，根据量子力学原理，处于低能态的量子点中的电子可以通过量子涨落而跃迁到处于高能态的外电路中，同时，外电路中的一个电子直接隧穿进入量子点，这种过程不断重复下去，就完成了电子不断地隧穿通过量子点的过程。在这个电子隧穿通过量子点的过程中，所涉及到的两个量子力学过程是同时发生的，这种隧穿过程为共隧穿(cotunneling)。理论上一般采取基于费米黄金规则的二阶微扰理论来计算共隧穿电流^[50,51]。

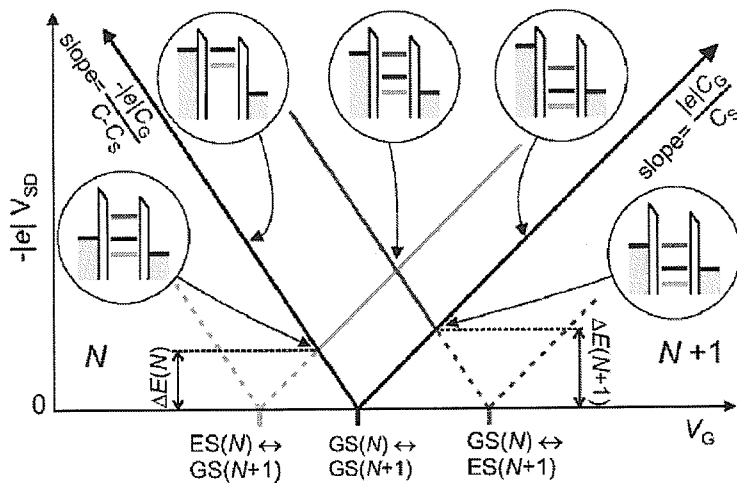


图 1.6 电导作为栅极电压 V_g 和源极漏极间偏压 V_{SD} 函数的 Coulomb Diamond^[21]。菱形内的区域为库仑阻塞区，该区内电子不能进入也不能离开量子点。

在实验上，一般利用库仑菱形(Coulomb Diamond)来反映量子点的输运性质。如图 1.6 所示，可以把电导描绘成栅压 V_g 和源极漏极偏压 V_{SD} 的二维图。有电子导通的高电导区围成一个菱形，称作 Coulomb Diamond。库仑菱形上每一点对应着体系的微分电导随电极费米面和量子点能级的变化。沿偏压 V_{SD} 方向，菱形两个顶角间的距离的一半近似对应于向量子点内添加一个电子所需要的能量，即充电能。而沿门电压 V_g 方向，顶角间距

离不代表充电能。这是因为栅压提供的是静电势调节，量子点和栅极间必然有一个高电容的势垒区。栅压施加在势垒区和量子点串连的两个电容上。栅压的大部分落在势垒区，只是成正比而不能真实反映量子点的充电能。

1.2.4 近藤效应

当量子点内占据奇数个电子时，最接近费米面的能级上就有一个未配对的自旋，在库仑阻塞区，量子点内最高能级低于两端二维电子气的费米面，同时最高能级的库仑排斥能又远高于费米面，此时二阶的共隧穿过程起主导作用。当发生自旋翻转的共隧穿过程时，局域自旋和巡游电子的自旋通过这种自旋翻转共隧穿的机制耦合在一起，形成一个多体的自旋单态。这种共振隧穿现象称为近藤共振，它是由于电子自旋的交换相互作用引起的，会显著增强非共振区通过量子点的输运^[52,53]。

近藤效应是凝聚态物理中非常重要的一种多体效应^[54]。对近藤效应的研究源于上世纪 30 年代稀磁合金中低温电阻随温度降低而增大的反常特征。在晶体运动中的电子受到的电阻一般来自于声子的振动和与杂质的碰撞。随着温度的降低，声子的效应逐渐减弱，电阻在纯金属中趋向一饱和值(称为剩余电阻)，它主要来自于材料中晶格缺陷、非局域或颗粒边界等。然而人们发现在掺有少量磁性原子的稀磁合金中，某一温度时电阻会随着温度的降低而增大，直至趋于一个饱和值。1964 年近藤在考虑磁性杂质与导电电子间自旋相互作用时，发现磁性离子杂质的散射确实随温度的降低变得强起来^[55]。在利用玻恩近似处理散射问题时，一般只微扰展开至一阶，认为二阶项不会带来新的物理。而对磁性离子杂质的散射，第二阶玻恩近似项随着温度的降低会变得非常重要，从而导致电阻的增大。近藤效应的本质是由于金属中的传导电子和局域磁矩间的反铁磁交换作用，使围绕孤立磁性杂质的传导电子的自旋反平行极化，从而屏蔽掉磁性原子的磁矩，形成一个多体单态。这导致磁性杂质对传导电子的散射更为有效，进而导致电阻率的增大。

与真实原子的相似性是量子点的基本特征之一，因此在研究量子点输运初期理论上便提议利用量子点来从微观上来研究近藤效应。而且由于量子点体系的参数可调节性，利用其可以更基本、深刻和多样地研究近藤效应。在实验上，可以利用栅极电压能够控制量子点中的电子数目。当奇数

个电子被囚禁在量子点中，量子点的总自旋 $S=1/2$ ，可以将其看作单个磁性杂质。将量子点与外电极相联接，这即等效于将单个杂质放入电子库中，可以通过体系的输运性质来研究近藤效应。如果适当地控制量子点系统中的有关参数，那么会导致占据量子点中最高能级上的单电子与两边费米面的传导电子之间通过共隧穿发生反铁磁交换相互作用。此时，量子点起着磁性杂质的作用，具有一个局域自旋磁矩，与稀磁合金中的磁性杂质一样。因此，量子点系统能够产生近藤效应^[56,57]。在稀磁合金中，近藤效应的出现增强了磁性杂质对巡游电子的散射，所以电阻增大。而在量子点系统中，电子的输运必须通过量子点，近藤共振为电子通过量子点提供了一个新的通道，所以导致的是电导的增加，这与稀磁合金中的近藤效应相反。

实验测量观测到 Kondo 效应的一个主要现象是所谓零偏压反常，即是说当源漏电极之间的偏压为零时测到的线性电导最大。这是因为 Kondo 效应发生时，态密度在巡游电子费米面上产生一个共振峰，对应于向这个多体系统增加或减少一个电子所需要的化学势能量。当零偏压时，源漏费米面的高度一致，两个电极的 Kondo 态密度重叠最大，电导也最大。当源漏电极的之间有个偏压时，两边的费米面不一样高，Kondo 态密度重叠减小，所以电导减小。

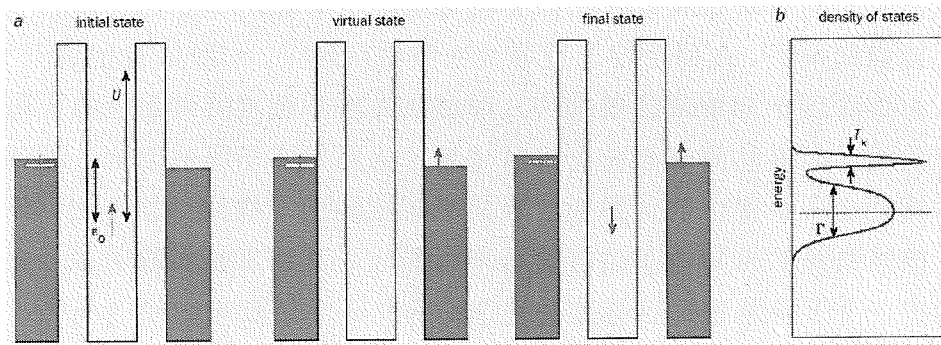


图1.7 近藤共振示意图。

决定一个磁性杂质是否会产生近藤效应的参数有:(i)杂质中的电子之间的库仑排斥相互作用能 U ；(ii)杂质中的电子之间的能级间隔 ΔE ；(iii)

杂质中的电子态与导线中的电子态之间的耦合强度 Γ ；(iv) 杂质中的最高单占据电子能级 ε_0 ；(v) 近藤温度 T_K 。这些量之间满足

$$T_K = \left(\frac{U\Gamma}{2} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{\pi\varepsilon_0(\varepsilon_0 + U)}{2U\Gamma} \right\}. \quad (1-1)$$

对于稀磁合金材料，这些参数均为材料的固有属性。而在量子点系统中，所有参数都可以人为地调节。要产生近藤效应，首先应要求杂质中的电子能级小于导线的费米能级；此外，还必须要求 $\Delta E > \Gamma > k_B T_K$ 。如果量子点和电子库的耦合太强，量子点中电子能级的量子化和电荷的量子化都将消失，量子点与电子库融合，从而也谈不上库仑阻塞振荡和近藤共振。量子点越小，其电子能级差 ΔE 越大， Γ 就能有一个更大的调节范围，因而容许有一个更高的近藤温度，这样更易在实验中观察到近藤效应。

由于量子点体系的参数都可以通过实验调节，近藤效应所研究的具体问题非常广泛，包括非平衡输运下、磁场下、铁磁或超导电极下的近藤效应、与相干性有关 Kondo-Fano 效应^[58]以及和电声子相互作用于有关的 Phonon-Kondo 效应^[59]等。在稀磁金属中，近藤温度为 10K 量级，在一般量子点中，近藤温度更是在 1K 以下。但近年来在分子晶体管和 SEM 实验中观测的近藤温度却能达到 100K 以上^[60]，这主要是由于这些体系中量子点和电极的耦合强度很强。如此高的近藤温度，促使近藤效应再次成为实验和理论关注的热点。

1.2.5 Aharonov-Bohm效应和Fano效应

在介观尺度下，量子力学的相位相干机制对输运会起到重要作用^[61]。Aharonov-Bohm(AB)效应和 Fano 效应是在量子点体系中已经实现并受到广泛关注的两种重要相干效应。在第二章和第三章中讨论自旋流产生时均会涉及到这两个效应，本小节我们简要介绍这两个效应及其实验进展。

(1) Aharonov-Bohm 效应

1959 年，Aharonov 和 Bohm 设想了一个电子束双缝干涉实验^[62]，使一束电子分岔通过两个不同电磁势，在包围磁通一周后再汇合射出。由量子力学中电子在电磁场中的哈密顿量，可以得出两束电子分波在汇合点的相移，因此，两束电子分波将产生相长或相消干涉，并最终导致总电流强

度以 h/e 为周期的振荡。这种现象称为 AB 效应。在经典电动力学中，场是有明确物理意义的物理实在，而电磁矢势则是为了数学上的计算方便而引入的虚拟量，其本身并没有与之对应的物理实在。而从量子力学的观点来分析，即便电子波和磁场不发生直接作用，但由于电磁矢势引起电子波相位的变化，将导致某些可观测的结果。这表明电磁矢势不仅仅是为了数学处理的方便而引入的一个虚拟量，而是个物理实在量。

1960 年，Chambers 在真空实验中首次观测到了这种干涉现象^[63]。1985 年，IBM 的 R. A. Webb 小组在很小的金制单环回路中观测到磁阻的振荡，这也是首次在金属中观察到 AB 效应^[64]。1995 年，Yacoby 等人将一个量子点植入 AB 环一臂。通过量子点的输运是共振隧穿方式，而通过另外一条通道是非共振的^[65]。在 AB 环里加磁场并测量通过系统的电流的 AB 振荡，可以研究通过量子点每个共振能级两侧的相位变化。他们的实验采用两端结构，由于 Onsager-Casimir 对称性的限制，只能观察到 0 或者 π 的相位，而测量不到通过共振能级的相位的连续变化。1997 年，Schuster 小组采用了四端连接的样品，克服了 Onsager-Casimir 对称性带来的限制，测量到了电子通过量子点共振隧穿相位 π 的连续变化^[66]。自此将量子点植入 AB 环中已经成为一种标准的研究量子点相干输运的实验方法。在最近的实验中，人们在具有强自旋轨道耦合的 GaAs 电子气制成的 AB 环中观测到 Aharonov-Bohm-Casher 效应^[67]。

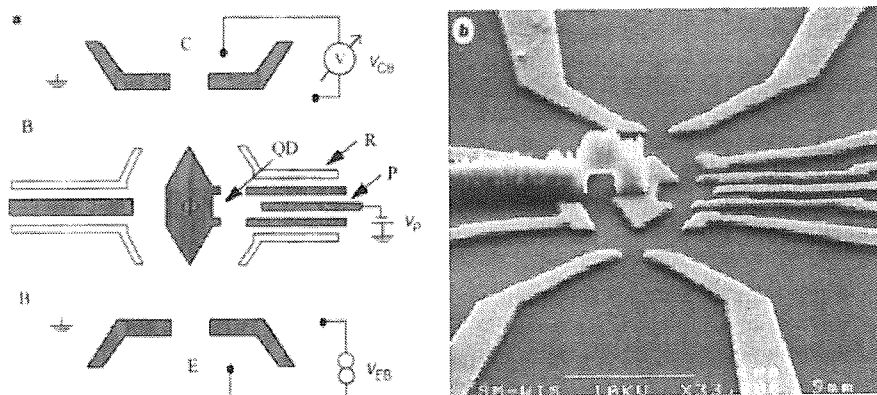


图 1.8 基于量子点的 AB 效应。

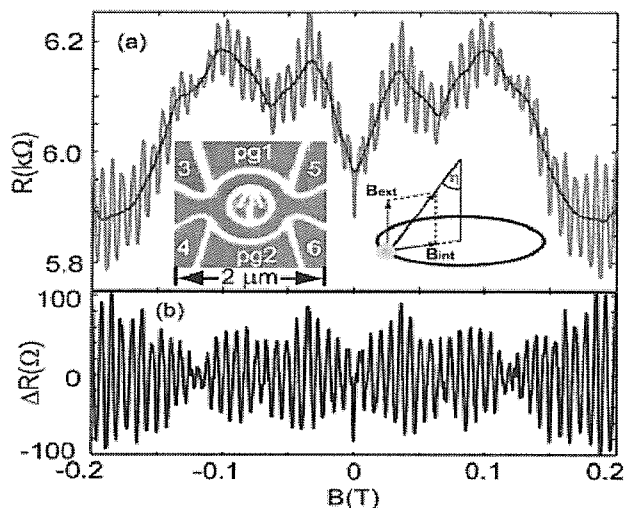


图1.9 含有自旋轨道耦合的AB效应。

(2) Fano 效应

利用 Aharonov-Bohm 干涉仪, 还可以使我们观测到另一个与电子关联特性相联系的现象: Fano 共振输运^[68]。简单地说, Fano 效应是一条共振通道和一条非共振通道一起干涉的结果。1961 年, Fano 通过研究有限个离散态和连续态的共振耦合发现: 离散态和连续态的相互干涉可以导致跃迁概率呈现反对称线条形状; 描述跃迁概率非对称线型可以用一个简捷的解析公式描述: $(\epsilon+q)^2/(\epsilon^2+1)$, 其中参数 q 称为对称度指数。对每个 Fano 线型, 它只是一个常数。这被称之为 Fano 效应。

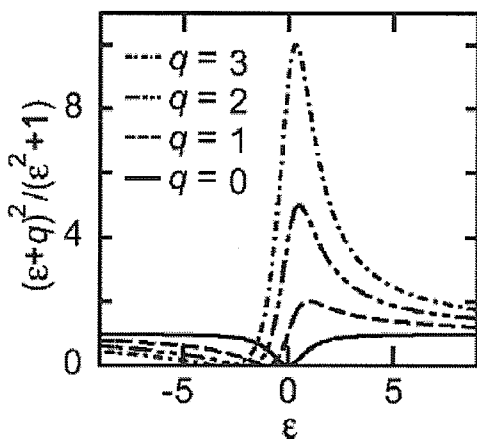


图1.10 Fano线形示意图^[68]。

在很多不同物理系统都观察到 Fano 效应，包括中子散射^[69]、原子光电离^[70]、拉曼散射^[71]和光吸收^[72]等。量子点 Fano 系统可以依照 AB 干涉仪那样由 AB 环和对其中一臂嵌入量子点来实现。在库仑阻塞区，量子点中的单粒子能级可以用门电压来调节。无量子点的一臂等价于直接通道，并提供连续的能态。这样 AB 干涉仪就可以看成一臂具有连续态，而含量子点的一臂是离散态。物理上，这正是 Fano 系统在相干电子输运系统中实现的一种方式^[73-75]。2000 年，Gores 小组首次观测到了量子点系统中的 Fano 效应^[73]，并且测量了 Fano 效应对温度的敏感依赖关系，反映出温度对相位相干输运过程的破坏。最近 Sato 小组研究在实验中观察到了 Fano 效应与 Kondo 态的竞争与共存^[58]。

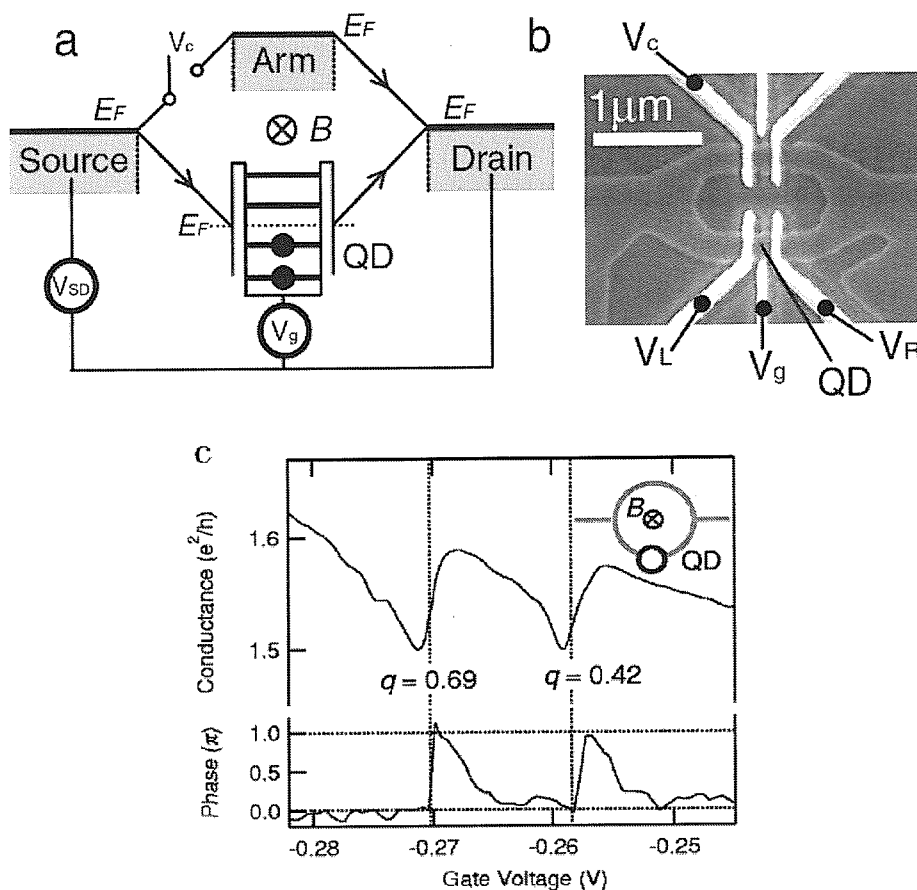


图 1.11 基于 Aharonov-Bohm 干涉仪观测 Fano 共振的装置^[58]。

在量子点系统中，电子在输运过程中往往能够保持较好的相干性。相干性的保持是很多量子器件在量子计算等方面应用的前提，而相干性验证最方便的方法就是不同通道之间的干涉。因此 Fano 效应对探测介观体系的相干性有非常重要的应用。

在实际的量子点体系中，以上的几个效应有时会同时出现，呈现出更多丰富的物理内容。本文第 2 章将讨论自旋轨道耦合引起的自旋劈裂对这个体系在近藤区输运性质产生的影响。

1.2.6 散粒噪声

对电荷通过导体的输运特征，通常是测量电流-电压特征。这里电流是对时间平均了的平均电流，而某时流过任一点处的电流实际上是不连续的，而且时刻在变动且绕其平均值涨落。这些与时间相关的精细起伏涨落里，包含着在电荷转移过程从电导测量中所不能获得且又丰富的信息^[76]。这种由电子电荷离散本征特性所导致电流相对其平均值的涨落，称为散粒噪声 (shot noise)。涨落的测量就是对噪声的测量，它正比于测量电流相对于其平均值的方均涨落值。

1918 年肖特基 (Schottky) 发现真空晶体管的涨落可以与电荷载体的离散性质联系起来^[77]。在真空管中，栅极随机地发射电子，电子相互之间没有关联，呈现为一个泊松过程，对应的电流噪声谱密度为 $S_I = 2e\langle I \rangle$ 。肖特基建议可由颗粒噪声来测量基本电荷的值。在相互作用的电子体系，电流的颗粒状的并不是基本电荷 e 。平均电流无法反映这个信息，但是噪声可以。如果电荷与 q 的单位元无关，可以从 Fano 因子 $F = S_I / 2e\langle I \rangle$ 测量出被转移电荷的单位。例如，正常金属和超导体结的隧穿， $q = 2e$ ，所以 $F = 2$ 。

在研究介观体系的输运性质时，体系的非平衡噪声扮演着非常重要的角色^[78-80]。随时间涨落的低温电流关联真实地反映了体系电子和其他载流子的统计信息。对于无相互作用的电子体系，散射近似非常适用。由于 Pauli 不相容原理，两个具有相同量子态的波包被禁止同时出现，这会导致散粒噪声偏离 Schottky 值。另一方面，库仑排斥也会加强波包间的关联，噪声实际上比电导对相互作用更敏感。库仑相互作用可以增加或减小散粒噪声，这依赖于不同的物理区域。在一个介观体系中，费米统计和相互作用对散粒噪声的影响通常是混合在一起的。自旋相关的散粒噪声能够细致区

分介观体系内的电子相互作用。基本原理是 Pauli 不相容原理作用的是同自旋的电子。因此不同自旋的准粒子波包的关联仅仅来自于库仑相互作用。电流涨落噪声提供了获取在输运过程的电导测量中那些被遗漏的信息。颗粒噪声现已在介观尺度区域器件的测量中广泛地应用。在一类形如真空管的经典器件中，颗粒噪声达到最大值，并满足肖特基公式。所以，肖特基公式是对无关联的离散电荷的泊松过程而言。但是，在量子器件中，由于关联效应，使得颗粒噪声被压制。介观导体中，费米统计的泡利(Pauli)不相容原理使得电子高度的关联。关联使得噪声低于肖特基公式的结果。

和电荷流散粒噪声不同，自旋相关的散粒噪声直到最近才得到少量的关注^[81,82]。另一方面，很多工作讨论了自旋极化电流对电荷和自旋散粒噪声的影响，这样的体系由于自旋积累会展现出非常复杂的行为。散粒噪声同时是探测纠缠电子关联和电子自旋通讯的有效工具。假设一个一般的介观结构，这个器件由一个正常金属电极和一个单通道纳米结构组成。在缺少外加磁场和忽略各种自旋散射的情况下，散射矩阵在自旋部分是自旋无关并且对角的，可以发现对于任意频率的噪声谱在自旋空间是对角的。而在考虑库仑相互作用的情形下，将出现不同自旋电流的关联。这出现在不同自旋态的电子耦合的情形。

总之，散粒噪声可用来测量转移电荷的单位、可以获得载流子的统计属性、可以由噪声谱与平均电流比较获得系统内在结构的信息，以及可用来做为纠缠探测仪。散粒噪声是探测体系相互作用的重要工具，特别是对于研究多量子点体系的相互作用有重要意义。本文的每章工作均涉及噪声性质的研究，例如在第 4 章中提出用散粒噪声来区分量子点内自旋翻转和电荷翻转机制。

1.3 自旋轨道耦合效应

本节将介绍目前研究最多的电学操控自旋的方式自旋轨道耦合效应(Spin-Orbit Interaction)^[27,28]，它是当前自旋电子学研究的一个热点^[1,83-85]。基于自旋轨道耦合效应实验上观察到了自旋光电流和电流导致的自旋极化这两个互逆的过程^[24]，而且实现了对量子点内单电子自旋的操控^[86]。

1.3.1 Rashba和Dresselhaus自旋轨道耦合效应

自旋轨道相互作用是自旋磁矩和轨道磁矩之间耦合的相互作用。自旋轨道耦合效应是一种基本的相对论效应，其物理图象可以看作电子绕核运动产生了一个等效的磁场，而这个磁场反过来影响着电子自旋在实空间的进动^[87]。自旋轨道耦合与材料的对称性有关。通常研究较多且最重要的自旋轨道耦合效应为 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合效应^[27,28]。Rashba 自旋轨道耦合效应是由晶体结构反演不对称 (Structural Inversion Asymmetry)引起的^[27]。结构反演不对称是指外加电场或是半导体材料的结构组成的不同，引起的样品结构反演不对称性，一般出现在材料的表面或界面处，或者出现在掺杂成分不同的三明治结构中。由于在中心对称的晶体上外加电场或者改变材料的粒子构成和排列，就会破坏电子势能的反演对称性，使得电子磁矩所受的电场力改变。因此，Rashba 自旋轨道耦合的强度可以通过控制外加电场来调节。外加电场对自旋轨道耦合效应的可调性，也使这种效应成为未来自旋晶体管实现的最佳选择。Rashba 自旋轨道效应的哈密顿量可写成如下形式：

$$H_R = \frac{\alpha(r)}{\hbar} \times p \cdot r. \quad (1-2)$$

Rashba 耦合常量 $\alpha(r)$ 的取向是沿着结构反演对称性破坏的方向，它的大小与外加电场强度和边界条件有关。当外加电场与生长方向平行，所引起有效磁场会跟电场和电子动量正交。假设 $\alpha(r)$ 的取向是沿 z 方向，上式为

$$H_R = \frac{\alpha}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x). \quad (1-3)$$

Dresselhaus 自旋轨道耦合来源于体材料自身的反演不对称性 (Bulk Inversion Asymmetry)^[28]。这种体不对称性是指具有闪锌矿结构的半导体，它的晶格点阵不再具有点群对称性，所以它的波函数不再具有周期性，因此在整个布里渊区中不可能存在能量的二重简并。对于二维样品(窄[001]的量子阱)而言，其哈密顿量写成如下形式：

$$H_D = \frac{\beta}{\hbar} (\sigma_x p_x - \sigma_y p_y), \quad (1-4)$$

其中 β 为 Dresselhaus 耦合常量。它和量子阱的厚度有关，厚度越小， β 越

大。

下面我们简要介绍 Rashba 自旋轨道耦合的由来^[88]。加外场后 Dirac 方程为：

$$[c\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) + eA_0 + \beta mc^2]\psi = E\psi, \quad (1-6)$$

其中 ψ 为四分量波函数， $\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}$ ， $\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$ ， α ， β 是 4×4 矩阵，

σ_i 为泡利 2×2 矩阵， I 为 2×2 单位矩阵。将 ψ 写作 $\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$ ，其中 ψ_A ， ψ_B

均为二分量波函数，这样，Dirac 方程可写为两个二分量波函数的方程：

$$c\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})\psi_B + (eA_0 + mc^2)\psi_A = E\psi_A, \quad (1-7)$$

$$c\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})\psi_A + (eA_0 - mc^2)\psi_B = E\psi_B, \quad (1-8)$$

其中 $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 。在缺少外磁场情况 ($\vec{A} = 0$) 下，令 $\psi_P = (1 - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2)\psi_A$ ，

在非相对论极限下 $E = mc^2 + \varepsilon$ ， $|\varepsilon| \ll mc^2$ ， $|\vec{p}| \ll mc$ ， $|eA_0| \ll mc^2$ ，这时方程化为：

$$H\psi_P = [\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3c^2} + eA_0 + \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2 A_0 - \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\vec{\sigma} \cdot \vec{E} \times \vec{p}] \psi_P = \varepsilon\psi_P. \quad (1-9)$$

方程中间第四项称为 Darwin 项。第五项称为 Thomas 进动项，这一项就是自旋轨道耦合的来源，它的出现完全是相对论效应。考虑一个在电场 \vec{E} 中运动的电子，经过电磁场的洛仑兹变换，在电子的静止参考系中电子会看见一个磁场 $\vec{B} = \vec{E} \times \frac{\vec{v}}{c} = \vec{E} \times \frac{\vec{p}}{mc}$ 。这个磁场与电子自旋的相互作用能为 $-\frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma} \cdot \vec{E} \times \frac{\vec{p}}{mc}$ ，是 Thomas 进动项的两倍。再考虑到自旋在磁场中会进动，用经典电动力学计算这个效应后，就可以得出 Thomas 进动项。

为了将这一项量子化，我们作替换：电场 $\vec{E} \rightarrow \nabla V(\vec{r})/e$ ， $V(\vec{r})$ 是系统的势能。这样 Thomas 进动项在量子力学中对应于

$$\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}[\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \nabla V(\vec{r})) - \vec{\sigma} \cdot (\nabla V(\vec{r}) \times \vec{p})] = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}[\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \nabla V(\vec{r})) + \nabla V(\vec{r}) \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{p})] \quad (1-10)$$

这是自旋轨道相互作用的一般形式，从前面推导可知它是 Dirac 方程在低速极限下推出来的，它的本质是电场对运动自旋的作用。

如果势能 $V(\vec{r})$ 具有球对称性即 $V(\vec{r}) = V(r)$ ，那么 $\nabla V(\vec{r}) = \frac{\vec{r}}{r} \frac{d}{dr} V(r)$ ，(1-1) 式可以变为我们熟悉的形式：

$$H_{so} = -\frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} V(r) \vec{s} \cdot \vec{l}, \quad (1-11)$$

其中角动量算符 $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ 。

现在考虑二维电子气系统 (2DEG)，其中束缚势 $V(y)$ 使电子在 y 方向被强烈地限制，所以 $\frac{dV}{dy} \square \frac{dV}{dx}, \frac{dV}{dz}$ ， $\nabla V(\vec{r}) \approx \hat{y} \frac{dV}{dy}$ ，电场几乎沿 y 方向。进一步，如果 $V(y)$ 关于点 $y=0$ 反演不对称，则矩阵元 $\langle \Psi(y) | \frac{d}{dy} V(y) | \Psi(y) \rangle \neq 0$ ， $|\Psi(y)\rangle$ 是 y 方向的基态。在上述条件下，自旋轨道相互作用的一般形式 (1-10) 化为 Rashba 自旋轨道耦合项：

$$H_{so} = \frac{\hat{y}}{2\hbar} \cdot [\alpha(\vec{\sigma} \times \vec{p}) + (\vec{\sigma} \times \vec{p})\alpha], \quad (1-12)$$

其中 $\alpha \square \langle \Psi(y) | \frac{d}{dy} V(y) | \Psi(y) \rangle$ 是耦合系数。由此可见在垂直于 2DEG 方向上

限制势的不对称是必要的，否则 $\alpha = 0$ ，就没有 Rashba 自旋轨道耦合。耦合强度 α 在实验中可以通过改变外电场或门电压来调节^[135]。

最后，如果我们考虑其它形式的势能 $V(\vec{r})$ ，就会得到其它种类的自旋轨道耦合，但自旋轨道耦合的本质都是外电场对运动自旋的作用。

1.3.2 量子点内的自旋轨道耦合效应

本小节以 Rashba 自旋轨道耦合为例，介绍量子点内自旋轨道耦合效应对体系输运性质的影响。这里主要参照文献[89]的推导。

对于方程(1-12)的 Rashba 哈密顿量，它可以分为两项：

$$\frac{\hat{y}}{2\hbar} \cdot [\alpha(\vec{\sigma} \times \vec{p}) + (\vec{\sigma} \times \vec{p})\alpha] = \frac{\alpha\sigma_z p_x}{\hbar} - \frac{\alpha\sigma_x p_z}{\hbar} \equiv H_{R1} + H_{R2}. \quad (1-13)$$

这两项会导致非常不同的物理结果。第一项 H_{R1} 导致自旋的进动，而 H_{R2} 则导致不同能级间的自旋翻转。由于 H_{R1} 在量子点—电极连接处为一个 δ 函数性质，因此我们不能直接通过计算矩阵元 $\langle ns | H_{R1} | ms' \rangle$ 来二次量子化 H_{R1} 。为了克服这个困难，我们选择一个新的表象，在一个旋转的框架下二次量子化 Rashba 哈密顿量。

在实空间量子点内单粒子哈密顿量可写为：

$$H_s^1(\vec{r}) \equiv \frac{p_x^2 + p_z^2}{2m^*} + V(\vec{r}) + \hat{\sigma} \cdot \vec{M}(\vec{r}) + H_{R1}. \quad (1-14)$$

我们做以下的么正变换：

$$u(x) = \begin{cases} 1 & x < x_L \\ \exp\{-i\sigma_z k_R(x - x_L)\} & x_L < x < x_R \\ \exp\{-i\sigma_z k_R(x_R - x_L)\} & x_R < x \end{cases} \quad (1-15)$$

这里 x_L 和 x_R 为含有自旋轨道耦合效应区域的边界坐标，其中 $k_R \equiv \alpha m^* / \hbar^2$ 。

变换后哈密顿量(1-14)可化为：

$$H_s^1 = u(x)^{\dagger} H_s^1 u(x) = \frac{p_x^2 + p_z^2}{2m^*} + V(\vec{r}) + \hat{\sigma} \cdot \vec{M}'(\vec{r}) - \frac{\hbar^2 k_R^2(x)}{2m^*} \quad (1-16)$$

其中 $\bar{M}_L' = \bar{M}_L$, $|\bar{M}_R'| = |\bar{M}_R|$, \bar{M}_R' 的角度将变为 $(\theta_R, \phi_R - 2\phi_{SO})$, $\phi_{SO} \equiv k_R(x_R - x_L)$ 。变化后哈密顿量的最后一项是一个常数。这个变换的物理本质是相当于在一个旋转的框架下观测电子的自旋。在实空间, 由于自旋轨道耦合效应, 电子的自旋会在运动时发生一定的进动。但是在旋转的框架下, 新的坐标随着电子自旋的进动而变化, 电子自旋是一个不变量, 可以证明 $[H_s', \sigma_{x,y,z}] = 0$ 。二次量子化后, 体系的哈密顿量可写为:

$$H = \sum_{k,s} (\varepsilon_{k\beta} + sM_\beta) a_{k\beta s}^\dagger a_{k\beta s} + \sum_{n,s} \varepsilon_n d_{ns}^\dagger d_{ns} + \sum_{k,n,s,\beta} \left[t_{k\beta n} \left(\cos \frac{\theta_\beta}{2} a_{k\beta s}^\dagger - s \sin \frac{\theta_\beta}{2} a_{k\beta \bar{s}}^\dagger \right) e^{is\phi_\beta/2} e^{-isk_R x_\beta} d_{ns} + H.c. \right]. \quad (1-17)$$

接下来讨论另外一部分 Rashba 哈密顿量 $H_{R2} = -\frac{\alpha\sigma_x p_z}{\hbar}$, 可以直接通过计算矩阵元 $\langle ns | u(x)^\dagger H_{R2} u(x) | ms' \rangle$ 来将其二次量子化。发现对于 $s = s'$, 矩阵元为零。因此只需要计算非对角矩阵元, 因而得到:

$$H_{R2} = \sum_{m,n} t_{mn}^{SO} d_{m\downarrow}^\dagger d_{n\uparrow} + H.c., \quad (1-18)$$

其中

$$\langle m\downarrow | H_{R2}' | n\uparrow \rangle = \frac{-\hbar k_R}{m^*} \int d\vec{r} e^{-2ik_R x} \varphi_m(\vec{r}) p_z \varphi_n(\vec{r}) \equiv t_{mn}^{SO}, \quad (1-19a)$$

$$\langle n\downarrow | H_{R2}' | m\uparrow \rangle = \frac{-\hbar k_R}{m^*} \int d\vec{r} e^{-2ik_R x} \varphi_n(\vec{r}) p_z \varphi_m(\vec{r}) \equiv -t_{mn}^{SO}. \quad (1-19b)$$

以上推导了含有自旋轨道耦合的量子点输运体系的二次量子化形式。对于量子点体系, Rashba 相互作用导致两个主要作用: (i) 量子点和电极的耦合矩阵元出现一个自旋相关的相位; (ii) 量子点内不同能级间伴随着自旋翻转的电子跃迁, 但是禁戒同一能级内电子的自旋翻转。利用这两个效应, 可以实现电学地操控量子点内单电子自旋^[86,90-92]。本文的部分工作围绕这两个效应讨论了电学地获得自旋电流的方案。

1.4 本论文研究目标和结构安排

怎样产生和操纵自旋来实现自旋积累和自旋极化输运一直是自旋电子学的一个中心课题。对于介观量子点体系，常规的实现自旋极化输运的方法是与铁磁材料电极耦合或外加电磁场。但这两类方法在实验上均存在一定的困难。本文主要研究了自旋轨道耦合效应、外加圆偏振光对量子点体系自旋相关输运性质的影响，希望能够为实验上操控量子点内单电子自旋和探测输运性质提供一些新的思路和建议。本文各章的内容安排如下：

第二章主要介绍含有自旋轨道耦合效应的量子点植入 AB 环一端在近藤区对体系相干输运性质的影响。无外磁场的自旋劈裂效应、自旋极化输运、Fano 效应和 Kondo 效应的共同作用，使这个体系呈现出非常丰富的物理性质。我们将讨论其中的自旋极化电流及相关散粒噪声的性质。

第三章主要介绍一种基于三终端器件分流性质获得直流纯自旋流的结构。这个结构的优点在于无需外加磁场和铁磁电极，而直接利用量子点内禀的自旋轨道耦合效应来产生纯自旋流。我们同时讨论不同端口结构下的纯自旋流大小。

第四章主要研究二能级 Rashba 量子点泵浦产生纯自旋流及相关的散粒噪声性质。这个结构由一个二能级 Rashba 量子点耦合两个平行排列的铁磁端口组成。对比 Datta 和 Das 最早提出的自旋场效应管，其机理是一致的，这个器件可以看成零维的 Datta-Das 管。我们还将研究这个输运体系自旋相关的散粒噪声性质。

第五章主要研究圆偏振光对量子点内自旋极化电流和相关散粒噪声性质的影响。在顺序隧穿区域，只有在特定的化学势和量子点能级位置才能获得自旋电流。

最后第六章对全文简要总结，并对今后的工作进行了展望。

第2章 Rashba量子点中的近藤效应和自旋极化输运

2.1 引言

最近, 基于Rashba自旋轨道耦合的Aharonov-Bohm (AB) 环装置被建议用来实现自旋积累^[90]和自旋极化输运^[89]。这个装置由一个含有自旋轨道耦合的量子点嵌入AB环组成, 它可以看成是基于Rashba自旋轨道耦合效应在量子点系统中实现自旋输运的最小模型。这个模型非常类似于已被广泛研究的AB环嵌入普通量子点的输运模型。所不同的是这里的相位是自旋相关的, 自旋相关的相位部分称为Aharonov-Casher相位^[93,94]。中科院物理所孙庆丰研究员等人研究了含有自旋轨道耦合的介观小量子环的持续自旋流性质^[95]。Lobos和Aligia考虑了外加磁通和内禀自旋轨道耦合共同作用下小量子环在近藤区的电导性质^[96], 发现自旋轨道耦合效应会抑制近藤效应引起的线性电导极大。最近, Grbic等人在由含有强自旋轨道耦合效应的二维空穴气构成的小量子环上观测到了AB振荡^[67], 他们观测到了电导的量子拍效应, 这可以看作是AB磁通和自旋轨道耦合共同作用的结果。

在这个 Aharonov-Bohm-Casher 装置中, 量子点中的局域态和电极间直接耦合的连续态的干涉会导致非对称的 Fano 共振峰, 而且低温下强耦合的量子点中会出现近藤效应。随着纳米电子学的快速发展, 很多量子点器件被用来观测和研究近藤效应。反过来, 在低温时近藤效应在量子点输运中扮演着重要作用。在这个系统中, Fano 效应、近藤效应和自旋极化的共存会导致输运中很多有趣的信息。

除了电流, 近年来介观系统中电流的噪声性质受到越来越多的重视。散粒噪声起源于载流子的分立性, 且在零温时也不可避免。散粒噪声谱包含了电荷涨落的信息, 也是探测系统内部相互作用和关联的重要工具, 而这些性质不能通过电流来全面的反映出来。如果载流子之间没有关联, 电流的涨落满足泊松分布 $S = 2eI$ 。对于介观的电子输运, 电流涨落敏感地依赖于库仑相互作用和泡利不相容原理, 散粒噪声会偏离泊松值。通常定义 Fano 因子 $F = S/2eI$ 来表示这种偏离 (对于泊松噪声 $F = 1$)。近几年自旋相关的散粒噪声受到了越来越多的关注, 研究发现磁场总是会增大 Fano 因子。而对于量子点系统中, 自旋轨道耦

合对散粒噪声和 Fano 因子影响的研究还很少。

有限 U 的隶玻色子方法最初是由 Kolitar 和 Ruckenstein 发展出来用于研究 Anderson 单杂质模型^[97]。近几年这种方法被用来研究任意大小库仑相互作用的量子点在近藤区的输运性质^[98-101]。结合非平衡格林函数技术，这种隶玻色子方法可以自洽地得到量子点内各种状态的分布。和使用较多的 Coleman 发展的隶玻色子近似^[102]相比，有限 U 的隶玻色子方法可以在任意大小库仑作用的情况较好地描述体系的近藤效应，到现在为止这种方法已用于多种自旋极化输运系统，例如磁场^[98]和铁磁电极情形^[99]，得到结果与数值重整化群和实验符合较好^[103]。有限 U 隶玻色子方法可以看作是研究量子点输运的有效工具。

本章主要利用有限 U 的隶玻色子近似，研究含有 Rashba 自旋轨道耦合效应的量子点在近藤区的自旋积累、自旋极化输运和散粒噪声性质。我们发现自旋轨道耦合会导致近藤峰和 Fano 型电导的劈裂。在量子点能级的两侧会出现两个极化的电导峰，分别位于 $\varepsilon_d = -U/2$ 的两侧 (ε_d 和 U 分别代表量子点的能级和库仑相互作用)。在大偏压极限且忽略自旋轨道耦合下，Fano 因子可由电极间直接耦合调制，而与库仑相互作用大小无关。自旋轨道耦合可以增加或减小 Fano 因子，这取决于量子点能级和两端化学势高低。当量子点能级低于两端化学势，Rashba 自旋轨道耦合增加 Fano 因子；反之减小 Fano 因子。

2.2 理论模型和计算公式

考虑一个 AB 环系统，在 AB 环一臂嵌入一个含有 Rashba 自旋轨道耦合的量子点，这个环和两个普通金属电极耦合在一起。当在两个电极间施加有限偏压 V ，自旋轨道耦合会导致极化的自旋电流出现。该系统的哈密顿量可写为：

$$H = H_L + H_R + H_D + H_T \quad (2-1)$$

其中

$$H_\alpha = \sum_{k,s} \varepsilon_{\alpha k} c_{\alpha k s}^\dagger c_{\alpha k s} \quad (2-2)$$

表示电极 $\alpha (= L, R)$ 上传导电子的哈密顿量， $s (= \uparrow, \downarrow)$ 为自旋指标；

$$H_D = \sum_s \varepsilon_d c_{ds}^\dagger c_{ds} + U c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow} \quad (2-3)$$

表示量子点的哈密顿量， ε_d 为量子点的能级， U 为库仑排斥能；

$$H_T = \sum_{k,s} t_{LR} (c_{Lks}^\dagger c_{Rks} + c_{Rks}^\dagger c_{Lks}) + \sum_{k,s} (t_{Ld} c_{Lks}^\dagger c_{ds} + t_{Rd} e^{-isk_R L} c_{Rks}^\dagger c_{ds} + H.c.) \quad (2-4)$$

描述了电极间以及量子点和电极的耦合。附加的相位 $sk_R L = s\alpha_R m^* L / \hbar^2$ 是由于 Rashba 自旋轨道耦合所导致的，其中 α_R 和 L 分别表示自旋轨道耦合强度和量子点的尺寸， m^* 为量子点内传导电子的有效质量。首先需要在一个旋转的框架下二次量子化 Rashba 自旋轨道耦合项^[89]。这个旋转的坐标系随着量子点内自旋进动而转动，在这个框架下看电子自旋是不动的。对于一个多能级的 Rashba 量子点体系，加上一个有限偏压后，体系会呈现出非阿贝尔的规范结构(也称为几何 Berry 相)。在实空间，Yang 计算了同时含有 Rashba 和 Dresselhaus 两种自旋轨道效应的 n 型半导体量子点内的几何相^[104,105]，并提出了可能的光学测量方案。几何相代表简并能级间的耦合。对于这个体系，当外加电压和电极-量子点耦合强度远小于量子点内能级差时，几何相的影响是可忽略的，因此公式(2-1)可以看作是一个可靠的近似哈密顿量。在这种情形下只考虑量子点内的单能级，Rashba 自旋轨道耦合效应对二次量子化哈密顿量的影响全部反映在自旋相关相位 $sk_R L$ 上。

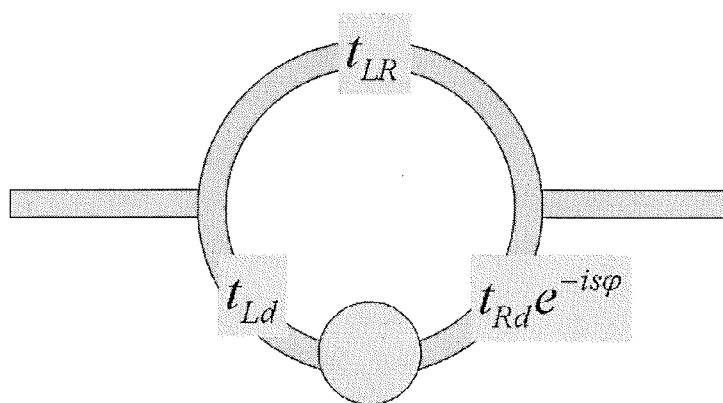


图 2.1 结构示意图。在 AB 环的一臂嵌入一个含有自旋轨道耦合效应的量子点。

在有限 U 隶玻色子近似下，我们可以引入四个辅助场 e 、 $p_s (s = \uparrow, \downarrow)$ 和 d 来

表示量子点上的状态，它们分别对应量子点内空占、单占和双占据，且满足完备性条件 $e^\dagger e + \sum_s p_s^\dagger p_s + d^\dagger d = 1$ 和电荷守恒条件 $c_{ds}^\dagger c_{ds} = p_s^\dagger p_s + d^\dagger d$ 。在平均场的

框架下，我们可得到如下的有效哈密顿量：

$$\begin{aligned}
 H_{\text{eff}} = & \sum_{\alpha, k, s} \varepsilon_{\alpha k} c_{\alpha k s}^\dagger c_{\alpha k s} + \sum_s \varepsilon_d c_{ds}^\dagger c_{ds} + U d^\dagger d + \sum_{k, s} t_{LR} (c_{Lks}^\dagger c_{Rks} + c_{Rks}^\dagger c_{Lks}) \\
 & + \sum_{k, s} (t_{Ld} c_{Lks}^\dagger c_{ds} z_s + t_{Rd} e^{-isk_R L} c_{Rks}^\dagger c_{ds} z_s + H.c.) \\
 & + \lambda_1 (e^\dagger e + \sum_s p_s^\dagger p_s + d^\dagger d - 1) + \lambda_{2s} (c_{ds}^\dagger c_{ds} - p_s^\dagger p_s - d^\dagger d). \quad (2-5)
 \end{aligned}$$

这里引入三个拉格朗日乘子 λ_1 和 λ_{2s} ($s = \uparrow, \downarrow$) 来保证上面提到的三个约束条件。此时量子点上电子算符 c_{ds}^\dagger 和 c_{ds} 重整为 $z_s^\dagger c_{ds}^\dagger$ 和 $c_{ds} z_s$ ，其中 z_s 由玻色子组成并和自旋为 s 电子湮灭过程联系在一起：

$$z_s = (1 - p_s^\dagger p_s - d^\dagger d)^{-1/2} (e^\dagger p_s + p_s^\dagger d) (1 - e^\dagger e - p_s^\dagger p_s)^{-1/2}. \quad (2-6)$$

从有效的哈密顿量(2-5)我们可以得到这些玻色子的运动方程，同时和约束条件一起构成一套自恰的方程组。以上引入的这些玻色算符可以用其期待值代替，求解后我们可以得到量子点内各种状态的分布。在宽带极限下这些方程可表示为：

$$\sum_s |p_s|^2 + |e|^2 + |d|^2 = 1, \quad (2-7)$$

$$\langle c_{ds}^\dagger c_{ds} \rangle = |p_s|^2 + |d|^2, \quad (2-8)$$

$$\sum_s \frac{\partial z_s}{\partial e} (K_{Ls} + K_{Rs}) + 2\lambda_1 e = 0, \quad (2-9)$$

$$\sum_{s'} \left(\frac{\partial z_{s'}}{\partial p_s} + \frac{\partial z_{s'}}{\partial p_s^\dagger} \right) (K_{Ls'} + K_{Rs'}) + 2(\lambda_1 - \lambda_{2s}) p_s = 0, \quad (2-10)$$

$$\sum_s \frac{\partial z_s}{\partial d} (K_{Ls} + K_{Rs}) + 2(U + \lambda_1 - \sum_s \lambda_{2s})d = 0. \quad (2-11)$$

这里

$$K_{Ls} = t_{Ld} \left\langle \sum_k c_{Lks}^\dagger c_{ds} \right\rangle + t_{Ld} \left\langle \sum_k c_{ds}^\dagger c_{Lks} \right\rangle \quad (2-12)$$

和

$$K_{Rs} = t_{Rd} e^{-isk_R L} \left\langle \sum_k c_{Rks}^\dagger c_{ds} \right\rangle + t_{Rd} e^{isk_R L} \left\langle \sum_k c_{ds}^\dagger c_{Rks} \right\rangle, \quad (2-13)$$

其中 K_{Ls} 和 K_{Rs} 的表达式可通过计算 Keldysh 格林函数 $G^<(\omega)$ 得到。

有效哈密顿量(2-5)描述的输运过程可由标准的 Keldysh 非平衡格林函数方法求解。接下来的讨论中，我们用 $\varphi = k_R L$ 来表示 Rashba 自旋轨道耦合引起的自旋进动角。在给出数值结果前，定性的分析可以帮助我们理解这个体系中自旋对称破缺的机制。电极和量子点的有效耦合可有如下的形式 [89]：

$$T_{Ls} = |t_{Ld} - i\pi\rho t_{LR} t_{Rd} e^{is\varphi}|^2 = |t_{Ld}|^2 + |\pi\rho t_{LR} t_{Rd}|^2 + 2\pi\rho t_{Ld} t_{LR} t_{Rd} \sin s\varphi, \quad (2-14a)$$

$$T_{Rs} = |t_{Rd} e^{is\varphi} - i\pi\rho t_{LR} t_{Ld}|^2 = |t_{Rd}|^2 + |\pi\rho t_{LR} t_{Ld}|^2 - 2\pi\rho t_{Ld} t_{LR} t_{Rd} \sin s\varphi. \quad (2-14b)$$

这里 ρ 为电极的电子态密度。对于 $0 < \varphi < \pi$ ，自旋向上的电子比自旋向下的电子更易透射进入量子点，但却更难透射出。因此，量子点内会出现自旋积累和极化电流。

延迟格林函数 G_s^r 可利用 Dyson 方程 $G_s^r = g_s^r + g_s^r \Sigma_s^r G_s^r$ 得到。这里 g_s^r 为无耦合时(即 $t_{Ld} = t_{LR} = t_{Rd} = 0$)的格林函数，可表示为：

$$g_s^r(\omega) \equiv \begin{pmatrix} -i\pi\rho & 0 & 0 \\ 0 & -i\pi\rho & 0 \\ 0 & 0 & g_{dds}^r(\omega) \end{pmatrix}, \quad (2-15)$$

其中 $g_{ds}^r(\omega) = 1/(\omega - \tilde{\varepsilon}_{ds})$, $\tilde{\varepsilon}_{ds} = \varepsilon_d + \lambda_{2s}$, ρ 为电极上的电子态密度。相互作用自能 $\Sigma_s^r(\omega)$ 可表示为:

$$\Sigma_s^r(\omega) \equiv \begin{pmatrix} 0 & t_{LR} & t_{Lds} \\ t_{LR} & 0 & t_{Rds} e^{-is\varphi} \\ t_{Lds} & t_{Rds} e^{is\varphi} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2-16)$$

其中 $t_{Lds} = t_{Ld}z_s$, $t_{Rds} = t_{Rd}z_s$ 。利用公式(2-15)和(2-16), G_s^r 可通过求解 Dyson 方程 $G_s^r = (g_s^r - \Sigma_s^r)^{-1}$ 得到。通过求解 G_s^r , 即可得到小于格林函数 $G^<(\omega)$ 。

2.3 结果讨论

本节将讨论这个系统的自旋积累、自旋极化输运以及对应的散粒噪声性质。这里假定左右电极由相同材料组成且在宽带极限下它们与量子点的耦合强度相同, $\Gamma_{Ls}(\omega) = \Gamma_{Rs}(\omega) = \Gamma_s$ 。在接下来的讨论中取电极中电子态密度 ρ 作为能量归一, $t_{Ld} = t_{Rd} = 0.4$ (对应的线宽为 $\Gamma = 2\pi\rho |t_{L(R)d}|^2 \square 1$)。当在电极两端外加电压 V , 对应的化学势取为 $\mu_L = -\mu_R = V/2$ 。

2.3.1 自旋积累

在有限 U 隶玻色子近似框架下, 可以得到量子点上四种状态的分布和自旋积累 $\Delta_n \equiv p_{\uparrow}^2 - p_{\downarrow}^2$, 这里 p_{\uparrow}^2 和 p_{\downarrow}^2 分别代表自旋上单占据和自旋下单占的概率。

图 2.2(a)给出了量子点内四个状态随量子点能级的变化。结果表明空态概率 (e^2) 和双占概率 (d^2) 随着量子点能级 ε_d 的增大分别增加和减小。考虑 Rashba 自旋轨道耦合, 自旋相关的单占态概率 p_{\uparrow}^2 和 p_{\downarrow}^2 不再相等。图 2.2(b)给出了不同库仑作用 $U = 0.0, 5.0$ 和 10.0 时 Δ_n 随量子点能级 ε_d 的变化。对于 $U = 0.0$, 在 $\varepsilon_d = 0$ 的两边分别出现一个自旋积累峰。然而它们并不关于 $\varepsilon_d = 0$ 对称分布, 这不同于普通 Hatree-Fock 近似得到的结果^[89]。这是由于在两种方法处理时采用了不同的表象: 以前工作采用的直接是量子点上电子的产生湮灭算符, 而这里采用的则是量子点内的状态作为基矢。

对于有限 U ，自旋积累会稍微的增加且函数 $\Delta_n \propto \varepsilon_d$ 的曲线和 $U=0.0$ 的情形具有类似的形状。两个自旋积累峰间的峰谷位置对应 $\varepsilon_d = -U/2$ ，这和以前的研究是一致的。图 2.3 给出了不同 Rashba 强度 $\varphi = 0.0, 0.2$ 和 0.4 时 Δ_n 随 ε_d 的变化。可以发现随着 φ 的增加， Δ_n 增加但自旋积累峰的位置并不变化。

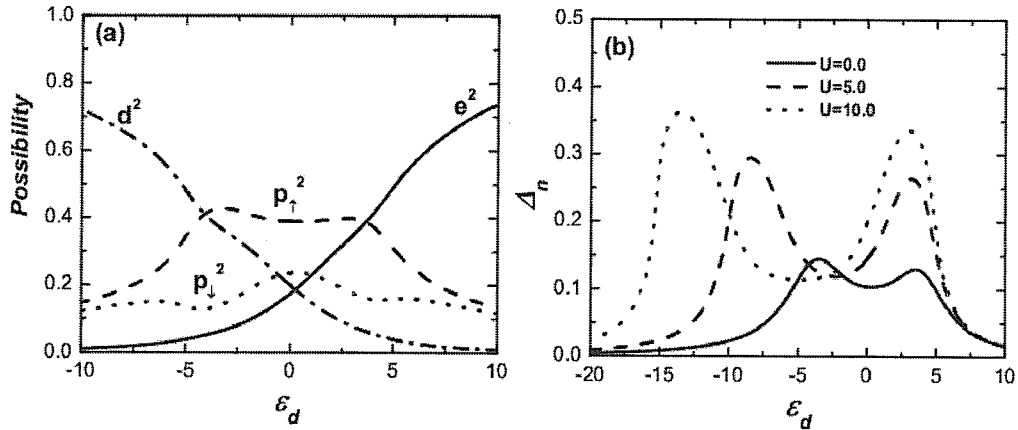


图 2.2 (a) $U=0.0$ 时四种态的概率随量子点能级的变化，其中 $t_{LR} = 0.1$ ， $\varphi = 0.2$ ， $V = 2.0$ ；(b) 不同库仑作用 $U = 0.0, 5.0$ 和 10.0 时自旋积累 Δ_n 随量子点能级 ε_d 的变化，其中 $t_{LR} = 0.1$ ， $\varphi = 0.2$ ， $V = 3.0$ 。

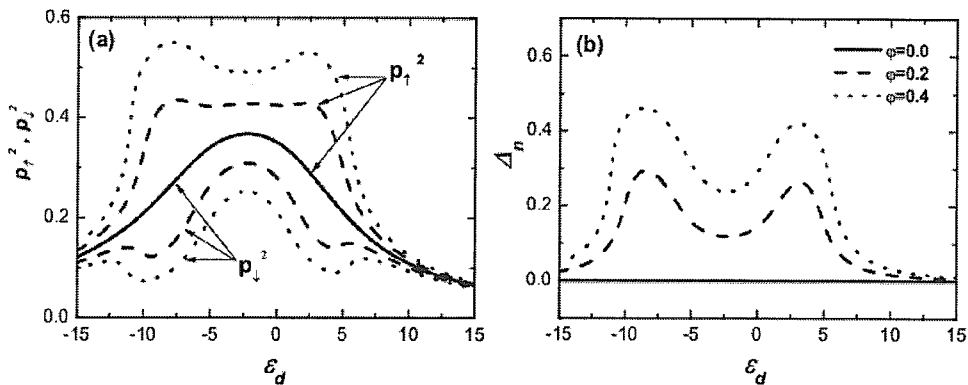


图 2.3 不同自旋轨道耦合强度 $\varphi = 0.0, 0.2$ 和 0.4 时，(a) 概率 p_1^2 和 p_2^2 ，(b) 自旋积累 Δ_n 随量子点能级 ε_d 的变化，其中 $t_{LR} = 0.1$ ， $U = 5.0$ ， $V = 3.0$ 。

2.3.2 极化电导

利用稳态的 Landauer 公式, 不同自旋分量的电流表达式可表示为^[106-108]:

$$I_s = \frac{e}{h} \int d\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] T_s(\omega), \quad (2-17)$$

这里 $f_\alpha(\omega)$ 为端口 α 的费米分布函数, 透射概率 $T_s(\omega)$ 为:

$$T_s(\omega) = \frac{2}{\pi^2 \rho^2} \frac{t_{LR}^2 g_{dds}^{r-2}(\omega) + 2t_{LR} t_{Lds} t_{Rds} \cos s\varphi g_{dds}^{r-1}(\omega) + t_{Lds}^2 t_{Rds}^2}{\Lambda(\omega)}, \quad (2-18)$$

其中

$$\Lambda(\omega) = \left[\frac{g_{dds}^{r-1}(\omega)}{\pi^2 \rho^2} + t_{LR}^2 g_{dds}^{r-1}(\omega) + 2t_{LR} t_{Lds} t_{Rds} \cos s\varphi \right]^2 + \frac{(t_{Lds}^2 + t_{Rds}^2)^2}{\pi^2 \rho^2}. \quad (2-19)$$

从电流的表达式我们可以得到不同自旋分量的电导 $G_s = dI_s/dV$, 总电导 $G = \sum_s dI_s/dV$ 和极化电导 $G_p = G_\uparrow - G_\downarrow$ 。

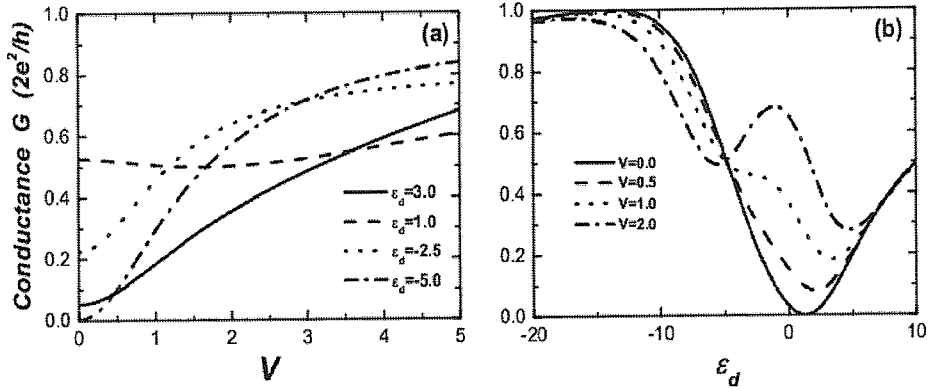


图 2.4 不考虑自旋轨道耦合($\varphi=0.0$)时, (a) 不同量子点能级 $\varepsilon_d = 3.0, 1.0, -2.5$ 和 -5.0 下电导 G 随偏压 V 的变化, 其中 $t_{LR} = 0.2$, $U = 5.0$; (b) 不同偏压 $V = 0.0, 0.5, 1.0$ 和 2.0 时电导 G 随量子点能级 ε_d 的变化, 其中 $t_{LR} = 0.2$, $U = 5.0$ 。

本节主要讨论非平衡情况下的电导。实际上这个系统在平衡状态下不会出现自发的自旋积累和输运^[89]。在这种情况下, 其等同于普通量子点嵌入 AB 环的模型。对于此模型, 已有的研究表明在强库仑相互作用下电导中的近藤平台

会被 Fano 效应抑制^[74-75,103,109]。而在有限偏压下，自旋向上和自旋向下的电流不再对称。普通量子点嵌入 AB 环模型的电导已被广泛的研究，但大多数的研究集中于线性响应极限情况。为了和以前的工作对比，图 2.4 给出了不考虑 Rashba 效应 ($\varphi=0$) 时的电导。图 2.4(a) 给出了不同能级 ε_d 时电导随偏压 V 的变化，图 2.4(b) 给出了不同偏压 $V=0.0, 0.5, 1.0$ 和 2.0 时电导随 ε_d 的变化。可以发现有限偏压下出现了 Fano-Kondo 平台。随着 V 的增加，费米面附近会出现一个 Kondo 电导峰，同时在 Fano 型的电导上出现两个电导谷，这和以前的实验结果一致^[74]。

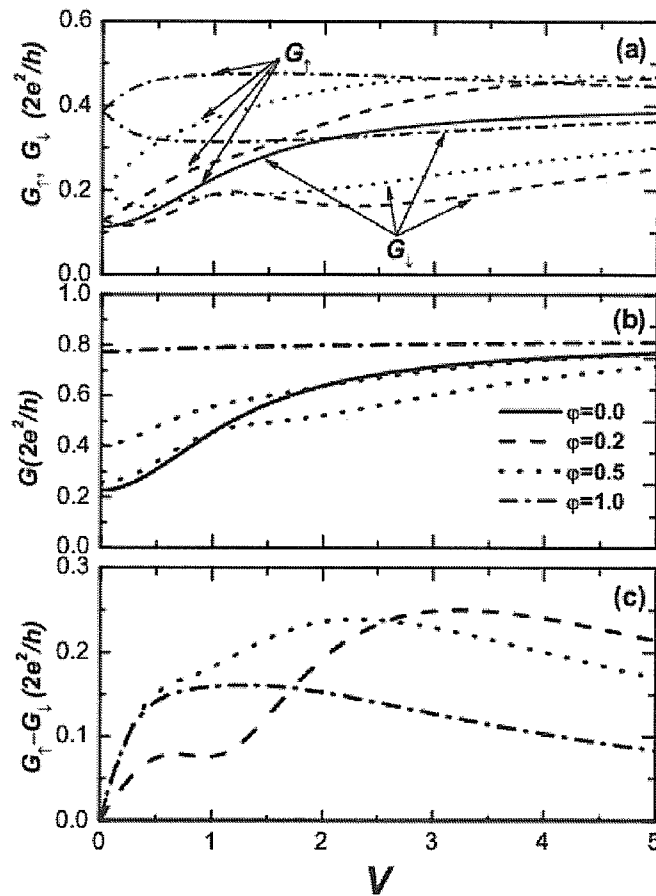


图 2.5 不同自旋轨道耦合强度 $\varphi=0.0, 0.2, 0.5$ 和 1.0 时，(a) 不同自旋分量的电导 G_\uparrow 和 G_\downarrow ，(b) 总电导 G ，(c) 极化电导 $G_p = G_\uparrow - G_\downarrow$ 随外偏压 V 的变化，其中 $t_{LR} = 0.2$ ， $U = 5.0$ ， $\varepsilon_d = -2.5$ 。

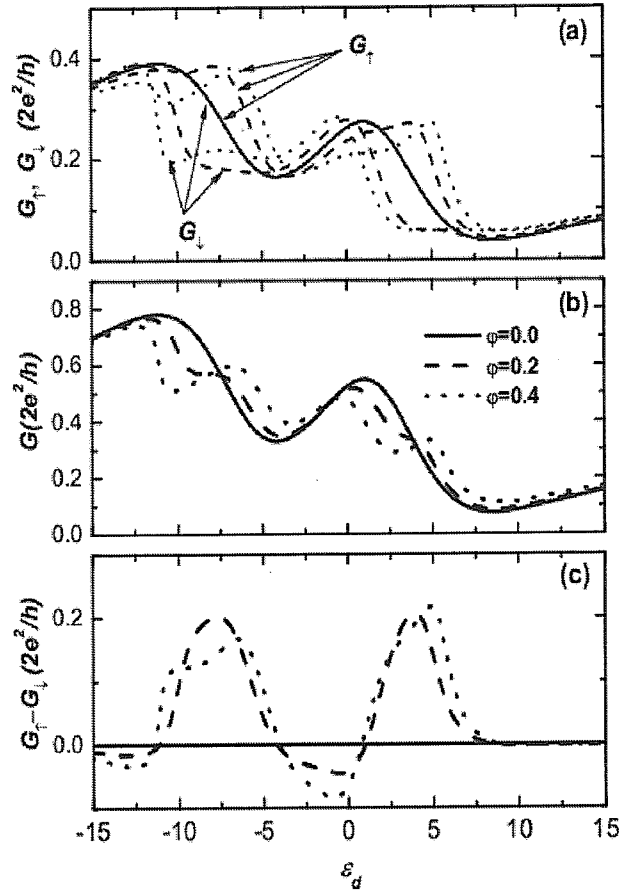


图 2.6 不同自旋轨道耦合强度 $\phi = 0.0, 0.2$ 和 0.4 时, (a) 不同自旋分量的电导 G_\uparrow 和 G_\downarrow , (b) 总电导 G , (c) 极化电导 $G_p = G_\uparrow - G_\downarrow$ 随量子点能级 ε_d 的变化, 其中 $t_{LR} = 0.1$, $U = 5.0$, $V = 3.0$ 。

图 2.5 给出了不同 Rashba 强度 $\phi = 0.0, 0.2, 0.5$ 和 1.0 时自旋电导分量 $G_s = dI_s/dV$ 、总电导 $G = \sum dI_s/dV$ 和极化电导 $G_p = G_\uparrow - G_\downarrow$ 随偏压 V 的变化。对于不同的 ϕ , 在大偏压极限下电导趋于同一值, 而在相对小的偏压下 ϕ 对电导的影响较大。随着 ϕ 的增大, 电导趋于 Kondo 极限的电导值。此外, 随着 Rashba 自旋轨道耦合的增大, 极化的电导值呈现出峰值(如图 2.5(c) 示)。对于较小的 $\phi = 0.2$, $G_p \square V$ 曲线呈现出双峰并随着 ϕ 的增加逐渐靠近。最终在 $G_p \square V$ 曲线上显示出单峰。随着 ϕ 进一步增加, 极化电导峰值逐渐减小。

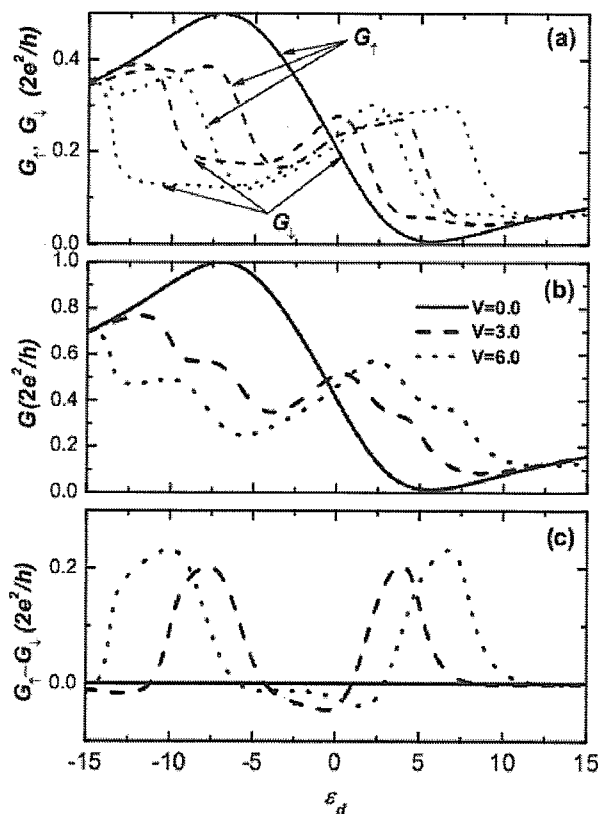


图 2.7 不同自旋轨道耦合强度 $V = 0.0, 3.0$ 和 6.0 时, (a) 不同自旋分量的电导 G_{\uparrow} 和 G_{\downarrow} , (b) 总电导 G , (c) 极化电导 $G_p = G_{\uparrow} - G_{\downarrow}$ 随量子点能级 ε_d 的变化, 其中 $t_{LR} = 0.1$, $U = 5.0$, $\varphi = 0.2$ 。

为研究 Rashba 自旋轨道耦合对 Fano 共振和 Kondo 效应的影响, 在图 2.6 和图 2.7 中分别给出了电导分量 $G_s = dI_s/dV$ 、总电导 $G = \sum dI_s/dV$ 和极化电导 $G_p = G_{\uparrow} - G_{\downarrow}$ 在不同偏压和 Rashba 强度 φ 随量子点能级 ε_d 的变化。可以看出偏压越大, 总电导 G 中的 Fano 共振峰变形的越严重。和图 2.4(d) 中不考虑 Rashba 效应相比, Kondo 峰附近出现了两个小峰且 Kondo 峰峰值随着偏压 V 的增大而减小。对于非平衡情形 $V \neq 0$, 极化电导出现了并且为 ε_d 的非单调函数。 G_p 在 $\varepsilon_d = -U/2$ 附近有最小值并在 $\varepsilon_d = -U/2$ 两边各出现极化电导峰。这两个峰的距离随着 V 的增大而增大。总电导 G 和极化电导 G_p 均呈现 Kondo 峰的劈裂和 Fano-Kondo 平台的变形, 这些都是由于 Rashba 自旋轨道耦合所引起的自旋简并

解除所导致的结果。从以上的讨论可以知道,最直接的确证 Rashba 效应是在 Fano 型的电导峰上观测到更多的电导谷。而实际上,在以前的一些实验中,观察到一些小的电导涟漪^[58],这有可能是自旋轨道耦合效应的结果。

2.3.3 散粒噪声和Fano因子

在本节中我们研究 Rashba 自旋轨道耦合对于零频散粒噪声和相应 Fano 因子的影响。电流的关联一般定义为 $S(t, t') = \langle \{ \Delta \hat{I}(t), \Delta \hat{I}(t') \} \rangle$, 其中 $\hat{I}(t) = [\hat{I}_L(t) - \hat{I}_R(t)]/2$, 因此 $S = (S_{LL} + S_{RR} + S_{LR} + S_{RL})/4$ 。由电流守恒,对于两端器件,在零频时有 $S_{LL} = S_{RR} = -S_{LR} = -S_{RL}$ 。接下来我们利用 $S_{LL} = \sum_{s,s'} S_{LL}^{ss'} = S_{LL}^{\uparrow\uparrow} + S_{LL}^{\downarrow\downarrow} + 2S_{LL}^{\uparrow\downarrow} \equiv S$ 来计算电荷流的散粒噪声,对应的 Fano 因子为 $\gamma = S/2eI$ 。

在赝自旋子框架下,原始哈密顿量(2-1)退化成一个无相互作用的形式[哈密顿量(2-5)],这意味着在平均场近似下不同自旋分量电流的交叉关联 $S_{LL}^{\uparrow\downarrow} = 0$ 。电流和其涨落的表达式都可由透射概率表示。由 Wick 定理,零温时散粒噪声的表达式可简化为^[106,107]:

$$S_{LL}^{ss} = \frac{2e^2}{h} \int d\omega T_s(\omega) [1 - T_s(\omega)]. \quad (2-20)$$

近藤效应对量子点体系散粒噪声的影响已被广泛研究^[66,110-114]。数值结果显示在单量子点中 Kondo 效应总是减小 Fano 因子^[110],而在双量子点中 Fano 因子则敏感地依赖于这两个量子点的构型和耦合强度^[113]。对于正常量子点嵌入 AB 环一端的输运噪声也被细致地研究过^[111,112]。结果显示散粒噪声能反映出电流中所不包含的干涉信息。同上小结一样,依然首先研究 $\varphi = 0.0$ 的情形(如图 2.8 所示)。图 2.8(a)给出了不同直接耦合 $t_{LR} = 0.0, 0.1, 0.2$ 和 0.5 时 Fano 因子 γ 随偏压 V 的变化。如果没有电极间的直接耦合,即 $t_{LR} = 0.0$ 时,可以发现 Fano 因子在线性相应极限下完全被抑制 ($\gamma = 0$),而且在 $V \rightarrow \infty$ 下 Fano 因子 $\gamma = 1/2$,这个极限值和库仑相互作用的大小无关。随着电极间直接耦合 t_{LR} 的出现, Fano 因子 γ 在 $V \rightarrow \infty$ 的行为与

t_{LR} 相关, 而依然和库仑相互作用无关(如图 2.8(b)所示)。在图 2.8(c)和图 2.8(d)中, 可以发现偏压可以增大或者减小 Fano 因子, 同时依赖于量子点能级和电极间的直接耦合系数。对应于有限偏压下费米能附近出现的 Kondo 共振峰, $\varepsilon_d = 0$ 附近的 Fano 因子则被偏压抑制了。

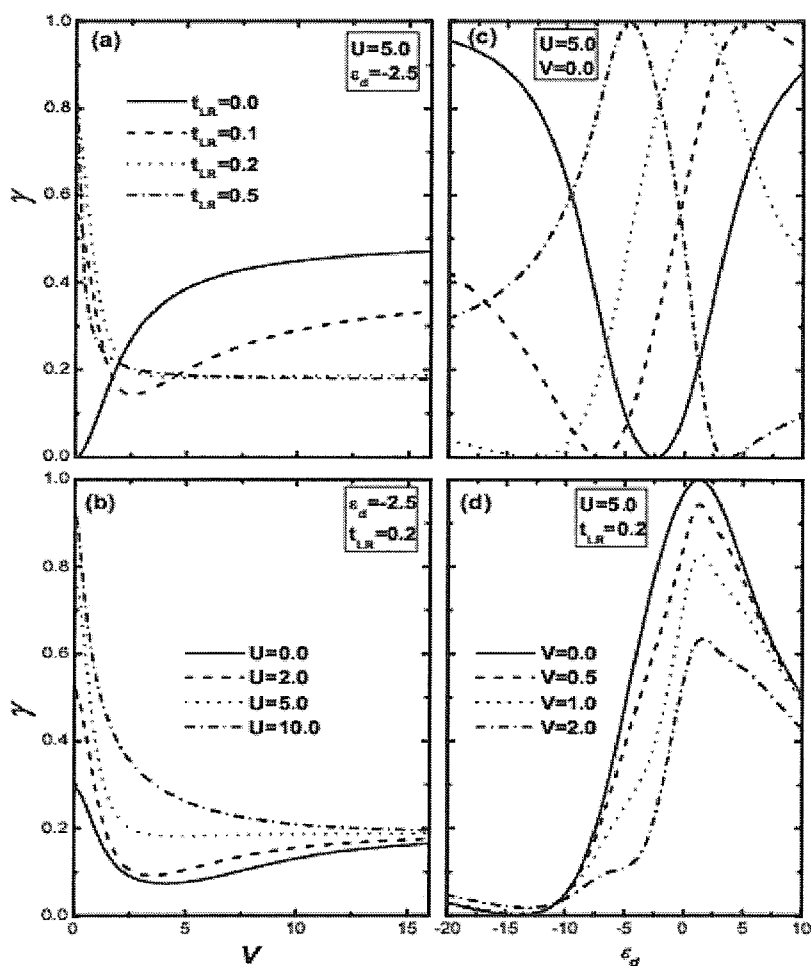


图 2.8 无自旋轨道耦合 ($\varphi = 0.0$) 时, Fano 因子 γ 随偏压 V 的变化, (a) $t_{LR} = 0.0, 0.1, 0.2$ 和 0.5 , 其中 $U = 5.0$, $\varepsilon_d = -2.5$; (b) $U = 0.0, 2.0, 5.0$ 和 10.0 , 其中 $U = 5.0$, $t_{LR} = 0.2$ 。Fano 因子 γ 随量子点能级 ε_d 的变化, (c) $t_{LR} = 0.0, 0.1, 0.2$ 和 0.5 , 其中 $U = 5.0$, $V = 0.0$; (d) $V = 0.0, 0.5, 1.0$ 和 2.0 , 其中 $U = 5.0$, $t_{LR} = 0.2$ 。

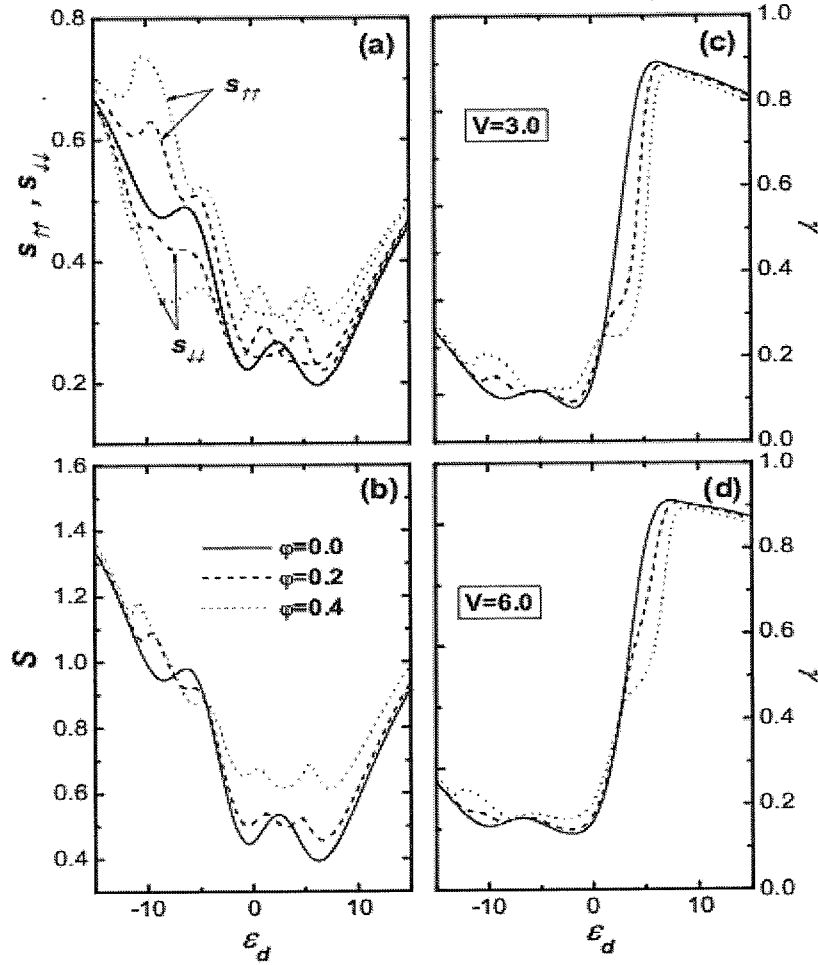


图 2.9 不同自旋轨道耦合强度 $\varphi=0.0, 0.2$ 和 0.4 时, (a) 散粒噪声分量 $S^{\uparrow\uparrow}$ 和 $S^{\downarrow\downarrow}$, (b) 总散粒噪声 S 随量子点能级 ε_d 的变化, 其中 $V=3.0$; (c) 和 (d) 为 Fano 因子 γ 随量子点能级 ε_d 的变化。其他参数 $U=5.0$, $t_{LR}=0.1$ 。

接下来讨论不同参数下 Rashba 自旋轨道耦合 φ 对散粒噪声和相应的 Fano 因子的影响。图 2.9(a) 和图 2.9(b) 给出了不同 Rashba 自旋轨道耦合强度 $\varphi=0.0, 0.2$ 和 0.4 时散粒噪声分量 $S_{LL}^{\uparrow\uparrow}$ 和 $S_{LL}^{\downarrow\downarrow}$ 随量子点能级 ε_d 的变化。随着自旋简并的解除, $S_{LL}^{\uparrow\uparrow}$ 和 $S_{LL}^{\downarrow\downarrow}$ 的每一个峰都发生了劈裂。图 2.9(b) 显示在很宽的 ε_d 范围内总散粒噪声随着 Rashba 自旋轨道耦合强度的增加而增加。图 2.9(c) 和图 2.9(d) 反映

Rashba 自旋轨道耦合 φ 定性的随着偏压变化可增大或减小 Fano 因子。当点内能级 ε_d 高于两端化学势时, Rashba 自旋轨道耦合减小 Fano 因子; 而对于 $\varepsilon_d < \mu_L$, Rashba 自旋轨道耦合则增加 Fano 因子。这个特征非常不同于磁场对 Fano 因子的影响^[98,115], 尽管它们都可以解除自旋的简并。在量子点体系中, 磁场加强 Fano 因子, 其可以解释为在 Kondo 区磁场削弱了 Kondo 加强的态密度, 这减小了电导和传输系数。而 Rashba 自旋轨道耦合可调制 Fano 因子[如图 2.9(c)和图 2.9(d)]。当点内能级高于两端化学势时, 电子很难透射出量子点, 总的散粒噪声为近泊松分布, 而 Rashba 自旋轨道耦合可以帮助自旋向上电子更容易透射出量子点。在这种情况下, 隧穿过程的关联得到了加强, 因此 Fano 因子减小。而当点内能级低于化学势时, Rashba 自旋轨道耦合导致了点内的自旋积累, 这使自旋向下的电子很难透射出量子点。因此 Rashba 自旋轨道耦合破坏电子的关联, Fano 因子增加。

2.4 小结

利用有限 U 的赝自旋技术, 本章研究了近藤效应对含有 Rashba 自旋轨道耦合效应的量子点内自旋积累、自旋极化输运和相关散粒噪声性质的影响。自旋积累在 $-U/2$ 两侧呈现出非对称的峰值, 并且在较大 ε_d 一侧的自旋积累也较大。在有限偏压下, Rashba 自旋轨道耦合效应会在 Kondo 峰的两边出现两个小峰, 而 Kondo 峰本身则被抑制。对于相对较大的电压, Fano 型的电导严重变形而 Kondo 峰的变化则较小。对于极化电导 $G_p (= G_\uparrow - G_\downarrow)$, 在 $\varepsilon_d = -U/2$ 两边会出现极化电导峰, 且峰的位置由偏压决定。

此外, 本章还讨论了 Rashba 自旋轨道耦合对散粒噪声的影响。在大偏压极限下, Fano 因子只由电极间的直接耦合强度调节, 而与库仑相互作用和 Rashba 强度无关。散粒噪声分量 $S_{LL}^{\uparrow\uparrow}$ 和 $S_{LL}^{\downarrow\downarrow}$ 被 Rashba 自旋轨道耦合效应劈裂, 总的散粒噪声增强。和磁场一样, Rashba 自旋轨道耦合也能导致量子点内自旋简并的解除。但是, 不同于磁场总是加强 Fano 因子, Rashba 自旋轨道耦合可以增大或减小 Fano 因子, 这取决于量子点能级和两端化学势的高低。当量子点能级高于两端化学势时, Rashba 自旋轨道耦合导致的自旋劈裂削弱了相消干涉, 这加强了隧穿过程的关联, 减小了 Fano 因子。当量

子点能级低于两端化学势时，Rashba 自旋轨道耦合的影响主要体现在抑制了自旋向下电子的隧穿出量子点，这破坏了隧穿过程的关联，因此增大了 Fano 因子。