

# 介观量子点系统中的自旋相关 输运及散粒噪声研究

(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 究 生： 秦 岭

指 导 教 师： 郭 永      教 授

二〇〇九年四月

介观量子点系统中的自旋相关输运及散粒噪声研究

秦岭

# **Study on spin-dependent transport and shot noise in mesoscopic quantum dot systems**

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

by  
**Qin Ling**  
**( Physics )**

Dissertation Supervisor: Professor Guo Yong

**April, 2009**

## 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交叉学科,近年来发展非常迅速,目前已成为凝聚态物理、材料科学、电子工程等学科共同关注的热点领域。此外,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。本文首先介绍自旋电子学的概况和量子点体系的输运性质,然后介绍自旋轨道耦合与散粒噪声的性质,随后主要讨论多种量子点器件中自旋自由度、外磁场等对系统输运性质的影响。

利用非平衡态格林函数方法研究了铁磁端/量子点/铁磁端系统中的散粒噪声。导出了散粒噪声谱的一般表达式,发现散粒噪声随铁磁端相对磁化方向夹角的变化依赖于系统参数。

研究了铁磁端/量子点/铁磁端系统中的自旋相关电导,考虑了 Rashba 自旋轨道耦合与自旋翻转散射对电导谱的影响。发现在单能级量子点情况,由于各条隧穿路径间的干涉,电导谱中可以形成电导峰或电导谷(这取决于自旋翻转散射的性质);在多能级量子点情况, Rashba 自旋轨道耦合可以使电导峰转变为电导谷。

利用量子主方程方法研究了铁磁端/量子点/铁磁端系统中的电流与自旋矩特性,考察了外加磁场对该系统中二极管效应的影响。发现磁场可以移动或者缩小二极管效应的工作区域,从而起到调控二极管的作用;在磁场的影响下,自旋矩随铁磁端相对磁化方向夹角的变化呈现复杂的特性。

提出了在对称平行耦合双量子点系统中通过施加外磁场来产生和调控超泊松散粒噪声的方法。发现当磁通分布不均匀时,在耦合弱的量子点系统中就可以产生超泊松散粒噪声,从而使实验制备更加容易。

基于四铁磁端口双量子点体系,提出了一种显著增强从铁磁金属到半导体量子点的自旋电流注入效率的方案。发现当其中一个铁磁端口的磁化方向与其余三个端口反平行时,由于两个量子点间的交换相互作用,通过一个量子点的电流自旋极化度会显著增强,伴随着通过另一个量子点的电流自旋极化度的剧烈减小。该效应指出了一条显著增强自旋注入效率的可能途径。

关键词: 量子点; 散粒噪声; 铁磁端口; 自旋注入; 自旋-轨道耦合

## Abstract

The nascent field called “spintronics” grows very fast in recent years, and has already become a hot topic in condensed matter Physics, material science, and electronic engineering, etc. In addition, quantum computation based on quantum dot is considered as the most applicable quantum computer scheme. In this dissertation, we first present the general situation of spintronics and the transport properties in mesoscopic quantum dot systems, and then introduce spin-orbit coupling and shot noise. In the following, we mainly discuss the effects of the spin-degree of freedom and magnetic field on the transport properties in several different quantum dot systems.

Within the formalism of the nonequilibrium Green’s functions, we study the shot noise in ferromagnetic metal/quantum dot/ferromagnetic metal system. The general formula for the shot noise spectrum is derived. It is found the shot noise can increase or decrease with the relative angle between the magnetizations of the two leads, which depends on the system parameters.

The spin-dependent conductance spectra are investigated in a ferromagnetic metal/quantum dot/ferromagnetic metal system, where both the Rashba spin-orbit coupling and spin-flip scattering are taken into account. It is found that in the single-level quantum dot system, due to the interference between different tunneling paths, a dip or a resonant peak can appear in the conductance spectra, which depends on the property of the spin-flip scattering. If the quantum dot has multiple levels, the Rashba spin-orbit coupling can result in switching from resonance into antiresonance in the conductance spectra.

Using the technique of quantum rate equations, we study the current and the spin torque in a ferromagnetic metal/quantum dot/ferromagnetic metal system, where the influence of external magnetic field on the diode effect is taken into account. It is found that the magnetic field can shift or reduce the working bias range of the diode effect, thus can control the diode. Under the external magnetic field, the spin torque shows a nontrivial dependence on the relative magnetization angle.

A scheme is proposed to generate and modulate super-Poissonian shot noise

based on a parallel-coupled double quantum dot system via an external magnetic field. It is found that if the distribution of the magnetic flux is inhomogeneous, super-Poissonian shot noise can be generated in a weakly-coupled system, which makes the realization in experiment more easily.

Based on a double quantum dot system with four ferromagnetic terminals, we propose a scheme to significantly improve the injection efficiency of spin-polarized current from ferromagnetic metal into semiconductor quantum dot. When the magnetization in one of the four ferromagnetic terminals is antiparallel with the other three, owing to the exchange interaction between electrons in the two dots, the polarization rate of the current through one dot can be greatly enhanced, accompanied by the drastic decrease of the current polarization rate through the other one. It is pointed out that this mechanism can be a promising candidate for the enhancement of the injection efficiency of spin-polarized current.

**Key words:** quantum dot; shot noise; ferromagnetic terminal; spin injection; spin-orbit coupling

## 目 录

|                                   |    |
|-----------------------------------|----|
| 第 1 章 绪论 .....                    | 1  |
| 1.1 自旋电子学概况 .....                 | 1  |
| 1.1.1 自旋电子学的出现 .....              | 1  |
| 1.1.2 自旋电子学的发展 .....              | 2  |
| 1.1.3 自旋电子学研究的基本问题 .....          | 4  |
| 1.2 量子点的制备与性质 .....               | 8  |
| 1.2.1 量子点的实验制备 .....              | 8  |
| 1.2.2 量子点的基本性质 .....              | 11 |
| 1.3 自旋轨道耦合效应 .....                | 12 |
| 1.4 散粒噪声 .....                    | 17 |
| 1.4.1 散粒噪声概述 .....                | 17 |
| 1.4.2 量子点中的散粒噪声 .....             | 18 |
| 1.5 本论文的研究目标和结构安排 .....           | 20 |
| 第 2 章 铁磁端/量子点/铁磁端系统中的散粒噪声 .....   | 21 |
| 2.1 引言 .....                      | 21 |
| 2.2 理论模型 .....                    | 22 |
| 2.3 数值计算结果与讨论 .....               | 25 |
| 2.3.1 电流散粒噪声 .....                | 25 |
| 2.3.2 自旋相关的散粒噪声 .....             | 28 |
| 2.4 小结 .....                      | 30 |
| 第 3 章 铁磁端/量子点/铁磁端系统中的自旋相关电导 ..... | 32 |
| 3.1 引言 .....                      | 32 |
| 3.2 理论模型 .....                    | 34 |
| 3.3 数值计算结果与讨论 .....               | 38 |
| 3.3.1 单能级情况 .....                 | 38 |
| 3.3.2 二能级情况 .....                 | 45 |
| 3.4 小结 .....                      | 49 |

|                                        |     |
|----------------------------------------|-----|
| 第 4 章 铁磁端/量子点/铁磁端系统中的二极管效应与自旋矩特性 ..... | 51  |
| 4.1 引言 .....                           | 51  |
| 4.2 理论模型与计算方法 .....                    | 53  |
| 4.2.1 系统哈密顿量及主方程方法 .....               | 53  |
| 4.2.2 电流和自旋矩 .....                     | 56  |
| 4.3 数值计算结果与讨论 .....                    | 58  |
| 4.3.1 共线构型 .....                       | 58  |
| 4.3.2 非共线构型 .....                      | 64  |
| 4.4 小结 .....                           | 66  |
| 第 5 章 平行耦合双量子点体系中的可调散粒噪声 .....         | 67  |
| 5.1 引言 .....                           | 67  |
| 5.2 理论模型与计算方法 .....                    | 68  |
| 5.3 数值计算结果与讨论 .....                    | 71  |
| 5.4 小结 .....                           | 81  |
| 第 6 章 四端口双量子点体系中的电流自旋极化度增强效应 .....     | 82  |
| 6.1 引言 .....                           | 82  |
| 6.2 理论模型 .....                         | 83  |
| 6.3 数值计算结果与讨论 .....                    | 86  |
| 6.3.1 单量子点两端口结构 .....                  | 86  |
| 6.3.2 双量子点四端口结构 .....                  | 87  |
| 6.4 小结 .....                           | 92  |
| 第 7 章 总结 .....                         | 93  |
| 参考文献 .....                             | 95  |
| 致谢与声明 .....                            | 108 |
| 个人简历与在学期间发表的学术论文 .....                 | 109 |

## 第 1 章 绪论

### 1.1 自旋电子学概况

电子除了具有电荷的属性外，还具有内禀自旋角动量。在外磁场中不仅受洛伦兹力的作用，还通过内禀磁矩和外场发生耦合。传统的微电子学完全忽略了电子自旋，而自旋电子学（Spintronics）将自旋属性引入电子学中，用自旋或电荷和自旋共同作为信息的载体，把传统的微电子学和携带自旋的介质及材料的磁性性质与自旋相互作用引起的效应联系起来，将会发展出新一代的器件<sup>[1-3]</sup>。本节我们将介绍自旋电子学的出现、发展及其研究内容。

#### 1.1.1 自旋电子学的出现

传统的微电子学通过电场来调控半导体中载流子的输运过程，进而实现各种各样的功能，其主要利用的是载流子的电荷属性。尽管在量子力学诞生不久人们便认识到电子不仅带有电荷，还有内禀自旋，但同样作为电子基本属性的自旋，除了磁性材料之外，在电子工业领域却一直未受到足够的重视。随着上世纪 70 年代集成电路的出现，微处理器的尺寸迅速减小，单位面积内晶体管的数目每 18 个月增加一倍，推动了半导体和信息工业的发展。但同时晶体管的尺寸快速逼近纳米尺度，导致大规模集成电路遇到了两个难以克服的限制因素：半导体芯片的原子尺度的限制和小尺度引起的大焦耳能耗。目前尚无解决这两个限制因素的办法，基于电荷操控的微电子学在不远的将来可能很难再有大的发展空间。因此，科学家开始寻找一种新的途径来避开这个困难，即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技术。自旋电子学便在这种情况下诞生了。

Tedrow 和 Meservey 在 1973 年就用铁磁金属/ $\text{Al}_2\text{O}_3$ /Al 隧道结测量隧道磁阻证实了铁磁金属导带电子的自旋极化<sup>[4]</sup>，这一研究结果极大地促进了铁磁金属/隧穿势垒/铁磁金属结构的研究。如果隧穿过程是绝热的，那么隧道结的电导应该正比于两个铁磁层中每个子带的电子态密度乘积。因此，电导是自旋相关的。这种结构具有存储效应，可以用作存储器件。

1988年巨磁阻效应(GMR)的发现标志着自旋电子学研究的开端<sup>[5,6]</sup>。GMR是在交替的铁磁-非磁性薄膜上发现的,当相邻铁磁层的磁矩平行时材料的电阻最小,反平行时最大。在室温下磁场改变很小时电阻可以产生很大的变化。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<sup>[7,8,9]</sup>。

### 1.1.2 自旋电子学的发展

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<sup>[2]</sup>。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,自旋相干扩散长度达到 $\mu\text{m}$ 量级,远长于金属中电子的自旋相干长度<sup>[1]</sup>,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,在量子信息和计算方面具有广阔的应用前景。

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、材料科学、电子工程等众多学科研究的热点领域。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。

1990年, Parkin 等人<sup>[10]</sup>发现磁性多层膜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控的。巨磁阻效应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,会减小电子的平均自由程,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

薄膜中巨磁阻效应的发现，使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)<sup>[11]</sup>。这些效应已广泛应用于磁感应器等商业产品中。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。

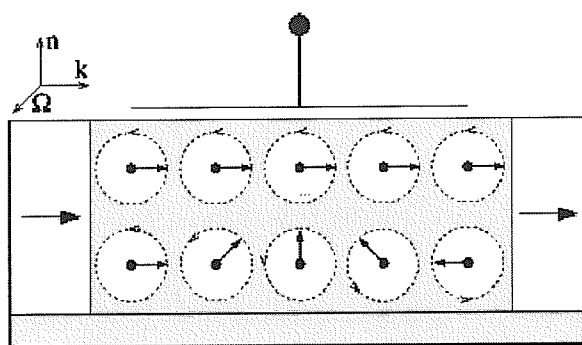


图 1-1 Datta-Das 自旋场效应管。

在巨磁阻效应发现后不久，Datta 和 Das 提出了自旋场效应晶体管 (Spin Field Effect transistor) 的概念<sup>[12]</sup>。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 Rashba 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。当电子隧穿出通道时，如果电子自旋与接收端电极的磁化方向一致，电子就可进入电极，晶体管导通；反之，如果电子自旋与磁化方向相反，电子被反射回通道，晶体管关闭。这就实现了晶体管的开关功能，如图 1-1 所示。传统的晶体管是通过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。与之相比，自旋场效应晶体管利用门电压来操纵电子自旋的进动，而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。按照美国加州大学自旋电子学和量子计算研究中心教授 D. D. Awschalom 的观点，自旋电子学器件可以分为三个层次。第一是基于铁磁性金属的器件，第二则要求自旋注入半导体，第三是单电子自旋器件。自旋场效应晶体管属于上述第二类。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中实现了<sup>[1]</sup>。

将自旋自由度引入半导体器件中,给半导体器件新的工作原理和结构提供了更多的新思路。通过对半导体材料中电子自旋属性的开发、利用和操控,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没有的功能。近年来提出了多种自旋器件,如自旋场效应晶体管、全金属自旋晶体管、SPICE 晶体管以及以单电子自旋为基础的纳米器件。磁性材料/半导体混合结构的自旋器件是今后的发展方向,这不仅是由于可以和传统的半导体工艺兼容,还因为只有这种混合结构的自旋器件才有放大信号的功能。

自旋量子计算机是自旋电子学最重要的应用方向之一。电子(核)的自旋自然地满足量子计算机对量子位的要求(二能级,长的相干时间,准确和快速的控制等),因此已经提出了很多自旋量子计算机的方案<sup>[13,14]</sup>。不仅如此,单电子自旋的电学测量也是自旋电子学研究的内容之一。事实上,自旋量子计算机可能是量子计算固态实现中最有希望的,也是自旋电子学发展集大成的表现形式。

### 1.1.3 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。近年来,利用半导体材料实现自旋器件是自旋电子学新的研究方向,包括半导体内自旋极化电流的注入、输运、控制和检测<sup>[15,16]</sup>。接下来我们分别对这几个方面进行简单介绍。

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,这是实现自旋电子器件最基本的条件。此过程通常伴随着自旋极化的衰减,因此,注入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<sup>[17]</sup>,都需要有较强的自旋极化电流注入。目前在铁磁性金属和半导体中,自旋极化电子的来源已经不是问题,而且自旋相位的弛豫时间已经达到 100 $\mu$ s,比电子相干态高三个数量级,已经适合实际器件的需要。但是,一个最大的挑战就是将一束自旋高度极化流从磁性材料有效地注入到半导体中,并且自旋极化在转移过程中没有大的损失。在室温下还没

有特别有效地注入方法，磁性材料/半导体界面的自旋注入是最基本的自旋注入结构。作为自旋极化源和检测的磁性材料电极有铁磁金属、磁性半导体和稀磁半导体三种。

磁性半导体有较高的自旋注入效率，但是磁性半导体（如硫化铈）的生长极其困难，因此研究就集中在从稀磁半导体和铁磁金属向非磁半导体内的注入。稀磁半导体的铁磁转变温度远低于室温，虽然理论预测某些材料的铁磁转变温度可以高于室温<sup>[18]</sup>，但是在开发出可以在室温下应用的稀磁半导体之前，铁磁金属/半导体的接触仍然是实现从自旋注入、操纵到检测全部电学控制的最有希望的方法。在自旋注入的研究初期，自旋注入效率很低<sup>[19,20]</sup>。直至今日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。下面简单介绍在铁磁金属/半导体结构的自旋注入方法 and 研究进展。

欧姆注入：最直接的自旋注入结构就是铁磁材料/半导体形成欧姆接触，由于在铁磁材料中电子是自旋极化的，因此希望能够在半导体中注入自旋极化的电子。但是典型的欧姆接触需要半导体表面重掺杂，这导致了自旋翻转的散射和自旋极化度的损失。最早的研究是利用 InAs 上的铁磁接触，这是少数几种可以和过渡金属形成陡峭界面和无 Schottky 势垒的欧姆接触的材料之一。尽管做了大量的研究，铁磁/半导体欧姆接触的注入或者是微乎其微，或者是间接测量的。

Schmidt 提出的电导率失配模型指出了理想半导体欧姆接触自旋注入的根本问题<sup>[21]</sup>。该模型基于两通道的电阻网络模型，分析了不同区域的电势分布，指出自旋注入的效率依赖于半导体和铁磁电极电导率的比例。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度接近 100%时才会产生有效的注入。不过，这个失配模型有一定的局限性。首先，该模型是建立在漂移扩散输运基础上的，并不适用于弹道输运和隧穿输运；其次，该模型假设界面是没有电阻的，没有考虑金属半导体接触可能形成的自旋相关的界面电阻，而界面电阻的性质是决定自旋注入的重要因素。因此，不能根据这一理论断定从铁磁金属向半导体内的自旋极化注入是不可行的。

Johnson 等人提出利用半导体量子阱结构中电子自旋简并分裂的方法克服这一问题<sup>[22]</sup>。这种分裂可以通过非对称势阱的自旋-轨道耦合实现。二维电子气携带电流，可以产生非平衡极化。但是，这一实验的数据和欧姆接触注入存在

类似的问题，器件磁阻的变化很小，无法将局部 Hall 效应（铁磁电极对半导体内电子自旋的作用）从实验数据中分离出来，也无法证实磁阻的变化确实是由自旋极化导致的。

隧道注入：Alvarado 和 Renaud<sup>[23]</sup>采用 STM 的铁磁针尖表明，可以通过真空隧穿得到有效的自旋注入。进一步的研究表明了表面结构对 STM 自旋相关的隧穿的影响。高阻抗的铁磁/绝缘层/铁磁结构也已经证实了隧穿过程中自旋极化可以保持，表明隧穿可能是比扩散输运更有效的自旋注入方法。

Rashba<sup>[24]</sup>最近的工作定量地研究了隧道结有效注入的可能性。如果势垒足够高，那么在界面的输运就取决于结两边电极的电子态密度（要求态密度是自旋相关的）。如果通过界面的电流足够小，使电极处于平衡态，那么自旋相关的电导率比例对于界面处自旋输运的影响就很小。因此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到半导体内的有效方法。

弹道电子注入：除了隧穿注入，另外一个办法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中导带的差异决定了界面处的弹道电子传输概率是自旋相关的。铁磁和半导体之间的一个三维弹道点接触就是有效的注入结构，最近的铁磁/非磁金属弹道点接触的实验证实具有较高的注入效率<sup>[25]</sup>（>40%）。

热注入：热电子注入<sup>[26]</sup>是采用自旋极化的热电子（能量远大于费米能  $E_f$ ），通过一个隧道结注入到铁磁层，注入热电子的能量通过调节隧道结的偏压来调节。由于多数和少数自旋电子的非弹性平均自由程有很大的差异，当热电子通过铁磁金属就可以产生大于 90% 极化度的电子电流。按照界面处半导体和金属的能带结构所决定的传输概率，高度极化的电流可以保留相当的一部分。如果界面处自旋翻转散射较少，进入半导体的弹道电流仍然是高度极化的。

自旋极化的载流子在半导体中的输运是实现自旋电子器件的另一个重要条件。自旋输运研究的重点主要是自旋极化载流子的自旋扩散长度和退相干时间，分别表征自旋极化电子在空间和时间的可控制的范围。Daniel Hagele<sup>[27]</sup>等人首次采用圆偏振光注入自旋极化载流子的方法研究了半导体中自旋极化的输运，在 6 KV/cm 的电场下自旋扩散长度达到 5  $\mu\text{m}$ 。Sogama<sup>[28]</sup>等人研究了在 p 型 GaAs 矩形量子线中的自旋极化输运，自旋扩散长度超过 10  $\mu\text{m}$ ，证明了低维结构中自旋

输运的可能性。Kuzma 等人在 5 K 的温度下测得 n 型 GaAs 中的电子自旋退相干时间达到 100 ns。Takeuchi 等人在未掺杂的 InGaAs 量子阱中测量出室温下的自旋退相干时间为 6 ps，这一水平还不适合用作自旋电子器件。

从器件应用的角度来看，自旋输运的控制还需要进一步研究，主要的研究目标是对输运性质(自旋扩散长度和自旋退相干时间)的进一步提高，不像自旋注入那样遇到从理论到应用的多方面的问题。

自旋检测有光学检测和电学检测两种方法。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<sup>[29-35]</sup>。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，可以避免其他电学效应的影响。Gupta 及合作者<sup>[32]</sup>运用时间分辨光学测量技术来研究半导体量子点的自旋相干性，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。Fiederling 和 Ohno 进行了自旋极化的光学检测实验研究<sup>[36,37]</sup>，分别利用自旋极化的发光二极管和 EL 谱测量光的偏振度，从而确定电子的自旋极化度。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<sup>[35]</sup>。

电学检测半导体内自旋极化的最直接的方法是利用半导体/铁磁界面的自旋相关输运性质。这种自旋阀方案的收集电极采用欧姆接触，同样存在电导率失配的问题，仍然需要采用半导体/铁磁的弹道接触或者隧穿接触。另外，势垒还必须足够薄，以保证自旋极化电子能隧穿到铁磁电极，否则将会在半导体内弛豫。除此之外，排除低温下半导体的弱局域化和局部 Hall 效应的干扰也是电学方法检测自旋极化度的难点。

综上所述，自旋电子学是一门有着广阔应用前景和重要理论研究价值的学科，为微电子学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于从理论和实验两个方面解决，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一个全新的图景。

## 1.2 量子点的制备与性质

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<sup>[38,39]</sup>。在低温下，相位相干长度可以达到  $\mu\text{m}$  量级。当电子的运动被局域在这样小的一个尺度范围内时会呈现出很多新奇的物理现象<sup>[40,41]</sup>。半导体超晶格、量子阱概念的提出，开创了制备低维量子结构材料研究的新领域。低维量子结构材料是指除三维体材料外的二维超晶格、一维量子线和零维量子点材料。二维超晶格是指载流子在两个方向上可以自由运动，而在第三个方向受到约束，即材料在这个方向的特征尺寸可与电子的德布罗意波长相比拟。在量子线中载流子只在一个方向上可以自由运动，而在量子点中，载流子在三个方向都受到势垒约束而不能自由运动。由量子力学知识可以知道，量子点中载流子的能量在三个维度方向都是量子化的，其态密度分布为一系列的分离函数，类似于原子光谱，因而往往把量子点称为“人工原子”。

由于量子点尺寸和形状可以改变，因此其中的电子态可以控制，半导体量子点的制备被称为“能级工程”。由于量子点具有的量子尺寸、量子隧穿、库仑阻塞、量子干涉、多体关联等效应明显，以及它在微电子、光电子器件、量子计算等方面的潜在应用优势，所以在低维量子结构的研究中受到了高度重视。在本节中，我们将介绍量子点的实验制备及其基本性质。

### 1.2.1 量子点的实验制备

实现量子点的形状、尺寸、面密度、体密度和空间分布有序性等可控生长一直是材料科学家追求的目标。目前，基于半导体材料的量子点生长工艺主要有以下几种<sup>[41,42]</sup>。

应变自组装技术<sup>[43]</sup>。这种技术适用于晶格失配较大但表面能不是很大的异质结材料系统，实验上可采用分子束外延（MBE）、金属有机物化学气相沉淀（MOCVD）和原子层外延（ALE）等技术制备。在外延的初始阶段，外延材料可以通过弹性形变适应晶格失配，以二维层状模式生长，称为浸润层。随着浸润层厚度的增加，应变能不断增加，当达到某个临界值时，二维层状生长不再是最低能量状态，浸润层上会形成三维小岛，应变能减小，表面能增加，但总能量降低。三维岛生长初期形成的纳米量级尺寸小岛是无位错的，若用禁带宽度较大的材料将其包围起来，小岛中的载流子将受到三维限制。小岛的直径一

一般为几十纳米，通常称为量子点，如图 1-2a。

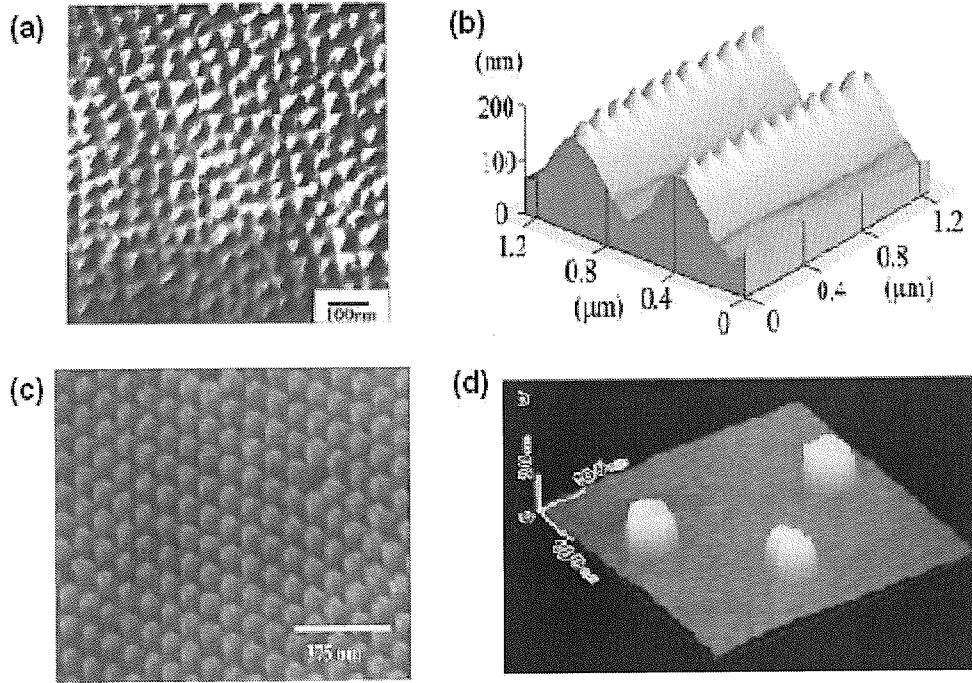


图1-2 几种量子点体系。(a)InP衬底上InAs量子点的明场TEM像<sup>[43]</sup>；(b)在[110]方向上的Si条形台面上自组装生长Ge量子点的三维AFM像<sup>[45]</sup>；(c)使用阳极氧化铝模板制备的Si量子点的SEM像<sup>[47]</sup>；(d)在AlGaIn表面，以四乙基硅烷为表面活性剂得到的GaN量子点<sup>[50]</sup>。

应变自组装技术不需要高空间分辨的电子束曝光和刻蚀等复杂的工艺技术，而且不会引入杂质污染和形成自由表面缺陷，是目前制备量子点材料最常用的方法。但由于量子点在浸润层上的成核是无序的，所以其尺寸、形状、分布均匀性难以控制，量子点的定位生长就更加困难。为解决这个问题，人们进行了很多尝试，例如，在高指数晶面上自组装制备量子点，其均匀性可得到改善。

微结构生长和微细加工相结合方法。由于受到微加工技术空间分辨率的限制，早期的微结构生长制备出的量子点尺寸较大，不能满足量子尺寸限制的需要。随着微加工水平的不断提高，这种微结构生长和微加工相结

合的方法再次受到人们的关注，其优点是量子点的形状、尺寸、密度和空间分布可控。这种方法可以分为两类：

(1) 微结构生长后进行微加工制备。先用 MBE 或 MOCVD 等技术生长制备低维结构材料，如 GaAs/AlGaAs 二维电子气等超晶格、量子阱材料，然后用高分辨电子束曝光直写和湿法或干法刻蚀，或通过聚焦离子束注入使材料内部某些区域的组分发生变化，从而制备量子点。原则上它可以制备最小特征宽度为 10nm 的结构，而且图形的几何形状和密度可控。

(2) 微加工后再进行微结构生长技术。首先利用物理或化学方法在衬底上进行微加工，制造择优成核位置，然后进行外延生长，实现对量子点生长位置的控制。例如，使用刻蚀方法在衬底上制备 V 型槽、T 型台，使衬底表面出现不同取向晶面，利用不同取向晶面上吸附原子的迁移距离、吸附系数和生长速度的不同，在某些晶面上制备量子点结构<sup>[44,45]</sup>，如图 1-2b。这种方法的优点是可以人为设计择优成核位置的尺寸和排列，从而控制量子点的生长情况，但是刻蚀等微加工工艺的水平对其制备效果有很大的影响，如果这些工艺的水平能够进一步提高的话，此方法将成为量子点有序生长与定位生长的有效制备方法。

此外，可以将  $\text{SiN}_x$  或阳极氧化铝多孔膜<sup>[46,47]</sup>等放置在衬底上，或者以碳纳米管<sup>[48]</sup>和沸石<sup>[49]</sup>等作为框架，然后通过物理或化学反应在它们的孔道中限位生长量子点。这种方法得到的量子点原则上可严格地按照模板的图形排列，如图 1-2c。但实践中也存在很多问题，例如，如果沸石笼子或碳纳米管的孔道被阻塞，原子向笼子或纳米管内的沉积则不能顺利进行，将影响量子点的质量。

表面活性剂法。一般来说，生长前沿外延层与衬底之间表面能与界面能的关系决定外延生长模式，如果满足  $\sigma_s > \sigma_f + \sigma_i$ ，其中  $\sigma_s$  是衬底的表面能， $\sigma_f$  是外延层的表面能， $\sigma_i$  是界面能，则外延层可浸润衬底，外延生长以二维层状模式进行；如果  $\sigma_s < \sigma_f + \sigma_i$ ，则系统以三维模式生长。如果将第三种成分（表面活性剂）如 As 引入到衬底上，则可以通过改变衬底的表面自由能来改变不等式的符号，从而影响外延结构的形态。例如，应用 MOCVD 技术在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $x=0-0.2$ ) 表面生长 GaN 时，通常为二维层状生长。但是，如果在生长 GaN 之前，将四乙基硅烷作为表面活性剂喷射

到衬底上，则四乙基硅烷会降低衬底的表面自由能，GaN 则以量子点的形式出现，如图 1-2d 所示。

### 1.2.2 量子点的基本性质

量子点和原子具有非常相似的物理特征<sup>[51]</sup>，它在三个方向的限制使点内形成零维的离散能谱，有限数目个电子填充在这些能级上，电子数目通常从零到几百个。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，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。

量子干涉特性是量子点的另一个基本性质。由于量子点的尺寸与电子的德布罗意波长可比拟，所以样品尺寸可以小于电子相位相干长度，即电子受到相继两次非弹性散射过程中走过的距离，那么电子通过量子点时只发生弹性散射，电子波函数的相位信息不会被破坏，只会发生一定的相移。电子从不同路径通过样品时发生弹性散射的情况不同，相位的积累也不同。如果在样品的两端放置两个探头，理论上就可以观测到干涉结果，这就是量子干涉现象。所以在相位相干长度内，载流子所输运的电流与其相位有关。基于量子干涉效应可以制备多种新型量子器件，如量子干涉晶体管等。

由于一个具有两种状态的系统可以看作一个“二进制”的量子比特，而量子点的能级具有基态和激发态，同时又具有量子叠加性、相干性、纠缠性等，所以量子点的能级可以制成量子计算的基本单元——量子比特。

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，电子间的库仑排斥能会很大，向量子点内添加一个电子需要提供一定的充电能  $U = e^2/2C$ （ $C$  是量子点与电极的电容之和）。当温度大于充电能时，热电子会造成量子点内电子数的涨落，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，这时只要有一个电子进入量子点，系统静电能的增加就会远大于电子热运动能量  $k_B T$ ，这个静电能将阻止随后的第二个电子进入同一个量子点，这种现象被称作库仑阻塞<sup>[52]</sup>。一般而言，量子点内的能级间隔和库仑排斥的特征能量为 meV。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，如图 1-3。

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。

基于库仑阻塞效应可以制成多种量子器件，如单电子器件和量子点旋转门等。单电子器件不仅在超大规模集成电路上有重要的应用，而且还可用于研制超快、超高灵敏静电计，其分辨率可高达 $1.2 \times 10^{-5} e/Hz^{1/2}$ ，可用来检测小于 $10^{-4}$  电子电荷的电量。

量子点结构是一个涉及物理、化学、材料等学科的交叉研究领域，内容非常广泛，虽然理论研究已经达到了一定高度，但人们对微观量子点特性的认识存在很大困难。利用微波类比方法在宏观领域研究量子点的特性为量子点的宏观理解提供了另一种途径。超大规模电路集成为量子点器件的发展提供了广阔的前景。随着理论研究的进步，制备工艺更新，会有越来越多的新型量子点器件出现。

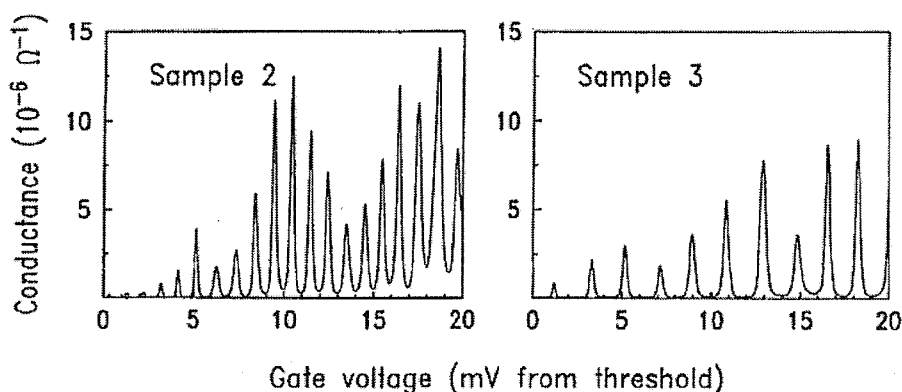


图 1-3 库仑阻塞效应示意图<sup>[52]</sup>。

### 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)<sup>[53-57]</sup>，它是当前自旋电子学研究的一个热点。

基于自旋轨道耦合效应，在实验上观察到了自旋光电流和电流导致的自旋极化<sup>[33]</sup>，而且实现了对量子点内单电子自旋的操控<sup>[58]</sup>。

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，本质上是相对论效应，可以由 Dirac 方程导出，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电子自旋在实空间的进动<sup>[59]</sup>。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 自旋轨道耦合效应和 Dresselhaus 自旋轨道耦合效应<sup>[53,54]</sup>。Rashba 自旋轨道耦合效应是由晶体结构反演不对称引起的。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。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 自旋轨道耦合强度很容易通过外加电场调节<sup>[60-62]</sup>，从而有大量的研究工作针对它展开，同时也获得了很多应用。如自旋场效应管就是以 Rashba 自旋轨道耦合为理论基础。在自旋过滤器，量子线，量子环以及量子点中，Rashba 自旋轨道耦合也有重要应用。

Rashba 自旋轨道效应的哈密顿量可写成如下形式：

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

Rashba 耦合常量  $\alpha(r)$  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时，所引起有效磁场会跟电场和电子动量正交。若  $\alpha(r)$  的取向是沿  $z$  方向，上式化为

$$H_R = \frac{\alpha}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \quad (1-2)$$

下面我们简要介绍 Rashba 自旋轨道耦合的由来<sup>[63,64]</sup>。考虑外场后的 Dirac 方程为：

$$[c\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) + eA_0 + \beta mc^2]\psi = E\psi \quad (1-3)$$

其中  $\psi$  为四分量波函数， $\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}$ ， $\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$ ， $\alpha$ ， $\beta$  是  $4 \times 4$  矩阵， $\sigma_i$

为泡利 $2 \times 2$ 矩阵,  $I$  为 $2 \times 2$ 单位矩阵。将 $\psi$ 写作 $\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$ , 其中 $\psi_A, \psi_B$ 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:

$$c\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})\psi_B + (eA_0 + mc^2)\psi_A = E\psi_A \quad (1-4)$$

$$c\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})\psi_A + (eA_0 - mc^2)\psi_B = E\psi_B \quad (1-5)$$

其中 $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 。在 $\vec{A} = 0$ 即没有磁场的情况下, 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:

$$H\psi_P = [\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3c^2} + eA_0 + \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2 A_0 - \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\vec{\sigma} \cdot \vec{E} \times \vec{p}] \psi_P = \varepsilon \psi_P \quad (1-6)$$

方程中第五项称为Thomas进动项, 这一项就是自旋轨道耦合的来源, 它的出现完全是由于相对论效应。考虑一个在电场 $\vec{E}$ 中运动的电子, 经过电磁场的洛伦兹变换, 在电子的静止参考系中电子会受到一个磁场 $\vec{B} = \vec{E} \times \frac{\vec{v}}{c} = \vec{E} \times \frac{\vec{p}}{mc}$ 的作用。

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

$$\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}[\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \nabla V(\vec{r})) - \vec{\sigma} \cdot (\nabla V(\vec{r}) \times \vec{p})] = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}[\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \nabla V(\vec{r})) + \nabla V(\vec{r}) \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{p})] \quad (1-7)$$

这是自旋轨道相互作用的一般形式, 从前面推导可知它是由Dirac方程在低速极限下推出来的, 本质上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 $\nabla V(\vec{r}) = \frac{\vec{r}}{r} \frac{d}{dr} V(r)$ , 公式(1-1)可以变为我们熟悉的形式:

$$H_{so} = -\frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} V(r) \vec{s} \cdot \vec{l} \quad (1-8)$$

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  $\frac{dV}{dy} \gg \frac{dV}{dx}, \frac{dV}{dz}$ ， $\nabla V(\vec{r}) \approx \hat{y} \frac{dV}{dy}$ ，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(1-7)化为Rashba自旋轨道耦合项：

$$H_{so} = \frac{\hat{y}}{2\hbar} \cdot [\alpha(\vec{\sigma} \times \vec{p}) + (\vec{\sigma} \times \vec{p})\alpha] \quad (1-9)$$

其中  $\alpha \equiv \langle \Psi(y) | \frac{d}{dy} V(y) | \Psi(y) \rangle$  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  $\alpha$  在实验中可以通过改变外电场或门电压来调节。

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。

对于量子点系统，利用二次量子化方法，Rashba 自旋轨道耦合可以改写成更简单的形式<sup>[64]</sup>。式(1-9)中的 Rashba 哈密顿量可以分为两项：

$$\frac{\hat{y}}{2\hbar} \cdot [\alpha(\vec{\sigma} \times \vec{p}) + (\vec{\sigma} \times \vec{p})\alpha] = \frac{\alpha \sigma_z p_x}{\hbar} - \frac{\alpha \sigma_x p_z}{\hbar} \equiv H_{R1} + H_{R2} \quad (1-10)$$

第一项  $H_{R1}$  导致自旋的进动，而第二项  $H_{R2}$  导致不同能级间的自旋翻转。由于  $H_{R1}$  在量子点—电极连接处有一个  $\delta$  函数的因子，因此不能直接通过计算矩阵元  $\langle ns | H_{R1} | ms' \rangle$  将  $H_{R1}$  二次量子化。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将 Rashba 哈密顿量二次量子化。

在实空间量子点内单粒子哈密顿量可写为：

$$H_s^1(\vec{r}) \equiv \frac{p_x^2 + p_z^2}{2m^*} + V(\vec{r}) + \hat{\sigma} \cdot \vec{M}(\vec{r}) + H_{R1} \quad (1-11)$$

做如下的么正变换：

$$u(x) = \begin{cases} 1 & x < x_L \\ \exp\{-i\sigma_z k_R(x - x_L)\} & x_L < x < x_R \\ \exp\{-i\sigma_z k_R(x_R - x_L)\} & x_R < x \end{cases} \quad (1-12)$$

这里  $x_L$  和  $x_R$  为具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 (1-11) 可化为:

$$H_s^{1'} = u(x)^{\dagger} H_s^1 u(x) = \frac{p_x^2 + p_z^2}{2m^*} + V(\vec{r}) + \hat{\sigma} \cdot \vec{M}'(\vec{r}) - \frac{\hbar^2 k_R^2(x)}{2m^*} \quad (1-13)$$

其中  $\vec{M}_L' = \vec{M}_L$ ,  $|\vec{M}_R'| = |\vec{M}_R|$ ,  $\vec{M}_R'$  的角度将变为  $(\theta_R, \phi_R - 2\phi_{SO})$ ,  $\phi_{SO} \equiv k_R(x_R - x_L)$ 。变化后的哈密顿量的最后一项是一个常数。这个变换的物理本质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进动。而在旋转的框架下, 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  $[H_s^{1'}, \sigma_{x,y,z}] = 0$ 。二次量子化后, 体系的哈密顿量可写为:

$$H = \sum_{k,s} (\varepsilon_{k\beta} + sM_{\beta}) a_{k\beta s}^{\dagger} a_{k\beta s} + \sum_{n,s} \varepsilon_n d_{ns}^{\dagger} d_{ns} + \sum_{k,n,s,\beta} \left[ t_{k\beta n} \left( \cos \frac{\theta_{\beta}}{2} a_{k\beta s}^{\dagger} - s \sin \frac{\theta_{\beta}}{2} a_{k\beta \bar{s}}^{\dagger} \right) e^{is\phi_{\beta}/2} e^{-isk_R x_{\beta}} d_{ns} + H.c. \right] \quad (1-14)$$

对于另外一部分 Rashba 哈密顿量  $H_{R2} = -\frac{\alpha \sigma_x p_z}{\hbar}$ , 可以通过直接计算矩阵元  $\langle ns | u(x)^{\dagger} H_{R2} u(x) | ms' \rangle$  将其二次量子化。对于  $s = s'$ , 矩阵元为零, 即  $H_{R2}$  并不导致同一能级内电子的自旋翻转。计算非对角矩阵元得到:

$$H_{R2} = \sum_{m,n} t_{mn}^{SO} d_{m\downarrow}^{\dagger} d_{n\uparrow} + H.c. \quad (1-15)$$

其中

$$\langle m\downarrow | H_{R2}' | n\uparrow \rangle = \frac{-\hbar k_R}{m^*} \int d\vec{r} e^{-2ik_R x} \varphi_m(\vec{r}) p_z \varphi_n(\vec{r}) \equiv t_{mn}^{SO} \quad (1-16a)$$

$$\langle n\downarrow | H_{R2}' | m\uparrow \rangle = \frac{-\hbar k_R}{m^*} \int d\vec{r} e^{-2ik_R x} \varphi_n(\vec{r}) p_z \varphi_m(\vec{r}) \equiv -t_{mn}^{SO} \quad (1-16b)$$

以上推导了含有 Rashba 自旋轨道耦合的量子点输运体系哈密顿量的二次量子化形式。对于量子点体系, Rashba 自旋轨道耦合主要导致两个作用: (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，可以实现电学操控量子点内单电子自旋<sup>[58,65-67]</sup>。本文的部分工作围绕这两个效应讨论了 Rashba 自旋轨道耦合对量子点线性电导谱的影响。

## 1.4 散粒噪声

### 1.4.1 散粒噪声概述

随着纳米技术的发展，纳米器件的输运性质得到了深入的研究。尽管大部分研究工作集中在介观体系的电导上，但在近些年，电流的振荡受到了越来越多的关注。在介观体系中，即使是在直流偏压下，电流仍然会随着时间振荡，并可以用电流噪声来描述。在介观物理中，电子相干性和库仑相互作用是主要的研究对象<sup>[68]</sup>，而电流噪声被证明是研究这些问题的有效手段之一。

电流噪声主要有两个源头：热噪声和散粒噪声。热噪声起源于载流子占据数的振荡，即使在平衡态下它依然是有限的，但在零温下热噪声消失。借助散射涨落理论<sup>[69]</sup>，可以将热噪声与系统平衡态电导直接联系起来，因此热噪声并没有提供比线性响应电导更多的信息。而散粒噪声体现系统非平衡态的性质，即只有当存在有限电流时散粒噪声才不为零。它起源于电荷的量子性（即电量不是连续的），而它衡量的是单个电子相继通过介观体系时在时间上的关联。因此，散粒噪声包含了关于系统输运的动力学信息，这些信息无法在平均电流数据中得到<sup>[70,71]</sup>。在实验上，已经在多种体系中对散粒噪声进行过测量，如超导体<sup>[72,73]</sup>，分数霍尔液体<sup>[74,75]</sup>，以及量子点等<sup>[76-78]</sup>。

对于完全无关联的电流，可以观测到所谓的泊松散粒噪声。此时电子的输运可以用泊松统计来描述，低频散粒噪声达到最大值  $S = 2eI$ ，其中  $e$  是电子的电量， $I$  是平均电流。1918 年，Schottky 在理想的真空管中首先观测到这个现象<sup>[79]</sup>。在单隧道结和 p-n 结中，电子的输运是相互独立的，因此散粒噪声同样可以达到泊松值。但是，如果有附加的源头使得相继的电子输运间存在关联（正关联或负关联），散粒噪声会相对于其泊松值被增强或抑制。因此可以用 Fano 因子  $F = S / 2eI$  来刻画这个关联，当电子转移间不存在关联时， $F = 1$ ，当存在负（正）的关联时， $F < 1$ （ $> 1$ ）。在大部分介观体系中会观测到亚泊松散粒噪声（ $F < 1$ ）。这里的负关联可以由 Pauli 不相容原理引起的，该原理限制了在相

空间中的电子密度，或者是由库仑排斥作用引起的。这两个效应使得相继两个电子的转移之间多了一个时间上的延迟，因此抑制了噪声<sup>[80,81]</sup>。人们发现在对称的双势垒结构中散粒噪声被抑制到  $F = 1/2$ <sup>[82,83]</sup>，而在只存在弹性散射的无序扩散性金属线中  $F = 1/3$ <sup>[84,85]</sup>。这个普适的值并不依赖于导体材料的性质，比如说，扩散性、几何尺寸、以及形状等。另一方面，在共振隧穿二极管或者量子点系统中，在某些物理区域库仑排斥作用可以引起正的关联作用，使得噪声变为超泊松散粒噪声 ( $F > 1$ )。在第五章我们会讨论这个问题。

当透射概率很小时，关联可以忽略，此时散粒噪声是泊松噪声，满足  $S/I = 2e^*$ ，其中  $e^*$  是作为载流子的准粒子电荷。所以散粒噪声可以给出准粒子的有效电荷信息。例如，在普通金属/超导体结中，人们观测到了  $e^* = 2e$ <sup>[86]</sup>，这正是 Cooper 对的电量。在超导体/普通金属/超导体结构中，由于多次的 Andreev 反射<sup>[87,88]</sup>，准粒子的电荷可以更大。在接近理想输运极限时，反射粒子的散粒噪声可以视为泊松噪声，按照这样的观点在分数量子霍尔区域观测到了  $e^* = e/3$ <sup>[74,75]</sup>。在量子点体系中，在 Kondo 区域，Sela 等人在理论上预言了  $e^* = 5e/3$ <sup>[89]</sup>。与量子霍尔体系以及超导体不同，这个现象并没有和基本的准粒子电荷关联。实际上，这是电荷为  $e$  的准粒子之间的相互作用造成的，这种相互作用引起了两个准粒子的同时反射。

#### 1.4.2 量子点中的散粒噪声

量子点体系的输运性质是我们关注的重点，所以接下来我们简单地介绍量子点中散粒噪声的性质。量子点中的散粒噪声能够提供关于量子点内部结构以及电荷输运的强关联性质的大量信息。最简单的量子点输运结构是一个单量子点耦合到两个普通金属端口上，即普通金属/量子点/普通金属系统。下面给出一个具体的模型。一般情况下量子点中能级间距远大于能级展宽，所以可以假设量子点中只有一个能级  $\varepsilon_d$  即能量最高的能级参与输运。假定这个能级略高于两端口的平衡费米面。在两端口间对称地施加偏压，可以得到典型的  $I-V$  和  $F-V$  曲线，如图 1-4。该图中展示了量子点体系中的散粒噪声的很多性质。在零偏压极限下，噪声由热噪声占主导，而热噪声是通过涨落耗散理论与系统电导联系在一起的， $S = 4k_B T G$ ，这里  $G = \partial I / \partial V|_{V=0}$  是线性微分电导。因此，Fano 因子  $F = 2k_B T / eV$  在  $V = 0$  时发散。当电压大到可以与  $k_B T$  相比时，散粒噪声占主导地位。但是如果源极的费米面（假设左端口为源极）仍然低于量子点中的能级

$(eV/2 < \varepsilon_d)$ , 输运是由热激发的, 并按指数规律被抑制。在这个区域, 散粒噪声是泊松噪声,  $F=1$ 。这是因为此时相继的隧穿事件间隔了很长的时间, 所以是无关联的。进一步增加偏压, 能级进入了偏压窗口  $(\varepsilon_d < eV/2 < \varepsilon_d + U)$ , 一个隧穿通道打开了,  $I-V$  曲线上出现了一个平台。由主方程方法可以得到此时  $I = 2e\Gamma_L\Gamma_R/(2\Gamma_L + \Gamma_R)^{[90]}$ 。在第四章中我们将介绍主方程方法, 并在第五章中用这种方法研究双量子点体系中的散粒噪声。另一方面, 此时散粒噪声相对于泊松值被抑制:  $F = 1 - 4\Gamma_L\Gamma_R/(2\Gamma_L + \Gamma_R)^2$ 。这个抑制是由库仑排斥引起的, 当量子点已经占据了一个电子的时候, 库仑排斥作用禁止另一个电子从源极隧穿到量子点上, 因而对相继的隧穿事件之间提供了负的关联。很明显, 在这个区域电流和 Fano 因子的值只依赖于体系结构不对称因子  $\Gamma_L/\Gamma_R$ , 并且当  $\Gamma_R = 2\Gamma_L$  时  $F$  下降到其最小值  $1/2$ 。当  $eV/2 > \varepsilon_d + U$  时, 库仑相互作用不再阻塞输运, 但是 Pauli 不相容原理仍然起作用, 使得相同自旋的电子不能同时占据相同态。在这个区域,  $I = 2e\Gamma_L\Gamma_R/(\Gamma_L + \Gamma_R)$ ,  $F = 1 - 2\Gamma_L\Gamma_R/(\Gamma_L + \Gamma_R)^2^{[91]}$ 。当  $\Gamma_L = \Gamma_R$  时, 共振态有一半的时间被占据,  $F$  下降到最小值  $1/2$ 。 $F$  因子的这个最小值与输运是完全相干的或是完全不相干的没有关系。在极度不对称的系统中 ( $\Gamma_L \ll \Gamma_R$  或  $\Gamma_L \gg \Gamma_R$ ), 散粒噪声接近其泊松值, 因为此时的量子点与耦合强的端口达到平衡, 所以系统可视为单势垒隧穿结。

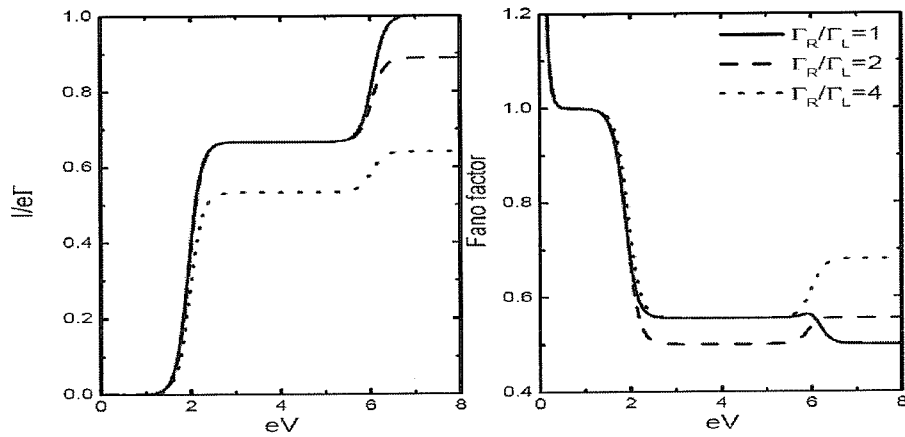


图1-4 (a)  $I-V$  曲线和(b)  $F-V$  曲线。 $\Gamma_L$  和  $\Gamma_R$  分别是量子点与左右端口的耦合强度。

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。本文第二章和第五章的工作均涉及散粒噪声性质的研究。

## 1.5 本论文研究目标和结构安排

量子点的输运性质是当前介观物理学研究的核心问题之一，而其在自旋电子学中的应用更是引起了广泛的关注。本文主要研究了量子点体系中的自旋相关的输运性质与散粒噪声，包括当外端口为铁磁金属时以及施加外磁场时系统的输运性质会受到怎样的影响。本文各章的内容安排如下：

第二章主要研究铁磁端/量子点/铁磁端系统中散粒噪声的性质。由于铁磁端口中的电子是自旋极化的，因此在这个体系中自旋自由度对散粒噪声的性质有显著的影响。我们讨论了散粒噪声随铁磁端相对磁化方向夹角的变化，同时研究了自旋相关的散粒噪声。

第三章主要介绍铁磁端/量子点/铁磁端系统中自旋相关的电导性质，考虑了自旋翻转隧穿以及 Rashba 自旋轨道耦合效应的影响。由于输运的相干性，Rashba 相因子对系统电导有很大的影响，因此可以用来调控系统的输运性质。

第四章主要研究铁磁端/量子点/铁磁端系统中的二极管效应以及自旋矩的性质。我们研究了外加磁场对二极管效应的影响，讨论了通过外磁场调控二极管效应的可能性。同时讨论了在外加磁场下自旋矩随系统相对磁化方向夹角的变化。

第五章主要研究平行耦合双量子点体系中的散粒噪声。我们指出可以通过外加磁场在该体系中产生并调控超泊松散粒噪声。

第六章主要研究了四铁磁端口双量子点系统中的电流自旋极化度增强效应。我们指出由于量子点间的交换相互作用，可以实现通过量子点电流的自旋极化度的增强，这个效应对于克服目前自旋注入效率低的困难指出了一种可能的途径。

第七章对全文简要总结。

## 第2章 铁磁端/量子点/铁磁端系统中的散粒噪声

### 2.1 引言

在绪论中我们介绍了散粒噪声的基本知识以及量子点中的散粒噪声的特性。在量子点体系中，散粒噪声主要用来刻画相互作用的性质，与电流相比，散粒噪声对相互作用要敏感得多。不过，在大多数情况里，Pauli 不相容原理和库仑相互作用在介观体系中同时起作用，因此散粒噪声反映的是这两种机制的同时作用，而不能区分清楚 Pauli 不相容原理和库仑排斥分别的作用。但是，由于不同自旋的电子波包不受 Pauli 不相容原理的限制，所以可以从自旋相关的散粒噪声中得到更清楚的关于相互作用的信息，其中 Pauli 不相容原理和库仑排斥作用不再混杂在一起。Sauret 和 Feinberg<sup>[92]</sup>研究了在普通金属/超导体结和单电子晶体管中的自旋相关的散粒噪声。采用主方程方法，他们发现在单电子晶体管中，当电压能够克服充电能之后， $S^{\uparrow\downarrow} = 0$ ，因为此时具有相反自旋的电子的输运是无关联的。相反，在低偏压区域，具有相反自旋的电子隧穿之间有较强的关联，所以  $S^{\uparrow\downarrow}$  不为零，其表达式为  $S^{\uparrow\downarrow} = -2e\langle I \rangle \Gamma_L \Gamma_R / (2\Gamma_L + \Gamma_R)^2$ 。由于库仑排斥作用，这个值是负的。这个结果与交叉关联（即不同端口间电流的关联）类似，但是交叉关联小于零是由 Fermi 统计造成的。

在铁磁体/量子点/铁磁体系统中，由于注入量子点的电子是自旋极化的，因此自旋自由度起到了重要的作用，与绪论中介绍的普通金属/量子点/普通金属体系中的散粒噪声相比，在铁磁体/量子点/铁磁体系统中的散粒噪声具有更加丰富的特性<sup>[93-95]</sup>。Braun 等人<sup>[96]</sup>发现当两个铁磁端口的磁化方向平行，并且  $\varepsilon_d < eV/2 < \varepsilon_d + U$  时，可以在端口极化度足够大时观测到超泊松散粒噪声，这是由动力学自旋阻塞造成的。在铁磁端中的电子有两种自旋，由于自旋极化，其中一种自旋的电子占多数，而相反自旋的电子占少数。少数自旋的电子态密度比多数自旋的电子态密度要小，所以它们在量子点与端口之间的隧穿比多数自旋的电子困难，因此占据量子点的时间更长。当少数自旋的电子占据量子点时，由于库仑阻塞，多数自旋的电子无法隧穿，只有当少数自旋的电子不再占据量子点时多数电子的隧穿才能实现，这引起了多数自旋电子的隧穿事件在时间上的集中，从而增强了散粒噪声。显然，这个现象的关键因素是库仑排斥作

用，所以在无相互作用情况下没有这种现象。当系统处于反平行构型时，散粒噪声是亚泊松的，当极化度很大时接近泊松值。这是因为多数自旋的电子与源极耦合强而与漏极耦合弱，并在输运中占主导地位。那么对于多数自旋的电子，系统类似于单势垒结构。当端口磁化方向不再共线，Fano 因子随偏压的变化不再出现一个个常数台阶，而是与偏压有关，这是由电子自旋绕端口磁化方向进动造成的。由于自旋进动抑制了隧穿事件的集中，所以 Fano 因子也被抑制了。

Braun 等人的工作主要关注的是铁磁端磁化方向共线的情形，关于非共线情况，尽管也有涉及，但仍有许多问题没有研究，如散粒噪声和 Fano 因子在不同参数下随相对磁化方向夹角的变化情况。本章中我们研究了在铁磁体/量子点/铁磁体系统中的散粒噪声谱随端口相对磁化方向夹角变化的情况。我们忽略了库仑排斥作用，并用非平衡格林函数方法推出了散粒噪声谱的表达式。计算结果表明散粒噪声和 Fano 因子可以随相对磁化方向夹角的增加而增大或减少，这取决于系统参数。同时我们也研究了自旋相关的散粒噪声，揭示了其随磁化方向夹角变化的特性。

## 2.2 理论模型

我们用哈密顿量

$$H = H_{dot} + \sum_{\nu} H_{\nu} + \sum_{\nu} H_{T\nu}, \quad \nu = L, R \quad (2-1)$$

来描述铁磁端口/量子点/铁磁端口系统。 $H_{dot} = \sum_{\sigma} \varepsilon_0 d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}$  描述了无相互作用的量子点， $\sigma = \uparrow$  或  $\downarrow$  是自旋指标， $d_{\sigma}^{\dagger}$  ( $d_{\sigma}$ ) 是在量子点中自旋为  $\sigma$  的电子的产生（湮灭）算符， $\varepsilon_0$  是量子点中的能级，这里只考虑量子点中能量最高的那个能级。

$H_{\nu} = \sum_{k_{\nu}\sigma} \varepsilon_{k_{\nu}\sigma} a_{k_{\nu}\sigma}^{\dagger} a_{k_{\nu}\sigma}$  描述铁磁端口  $\nu$ ， $a_{k_{\nu}\sigma}^{\dagger}$  ( $a_{k_{\nu}\sigma}$ ) 是波矢为  $k$  自旋为  $\sigma$  的电子在端口  $\nu$  中的产生（湮灭）算符， $\varepsilon_{k_{\nu}\sigma} = \varepsilon_{k_{\nu}} - \sigma M$  是端口中电子的能量，其大小与电子波矢和自旋有关， $M$  是端口  $\nu$  中的磁矩。本章中假设左右端口的磁化方向可以不共线，但具有相同的数值，即两端口的极化度相同。如果考虑量子点中的库仑相互作用，我们的结果在库仑阻塞区会与无相互作用时有一些差别，但是如果库仑相互作用比较弱，使得  $\varepsilon_0$  和  $\varepsilon_0 + U$  都处在偏压窗口 ( $\mu_R, \mu_L$ ) 中，我们的结果仍然成立<sup>[97]</sup>。隧穿哈密顿量可以写作  $H_{T\nu} = \sum_{k_{\nu}\sigma\sigma'} \left( \tilde{T}_{k_{\nu}}^{\sigma\sigma'} a_{k_{\nu}\sigma}^{\dagger} d_{\sigma'} + H.c. \right)$ <sup>[95]</sup>，这里  $\tilde{T}_{k_{\nu}}^{\sigma\sigma'}$  定义为

$$\tilde{T}_{k_v}^{\sigma\sigma'} = T_{k_v}^{\sigma\sigma'} \cos(\theta_v/2) + \sigma T_{k_v}^{\bar{\sigma}\sigma'} \sin(\theta_v/2) \quad (2-2)$$

$T_{k_v}^{\sigma\sigma'}$  是隧穿系数,  $\theta_v$  是端口  $v$  的磁化方向与  $z$  轴的夹角,  $\bar{\sigma} = -\sigma$ 。为了方便, 取  $z$  轴与左端口的磁化方向平行, 则有  $\theta_L = 0$  而  $\theta_R \equiv \theta$ 。

总电流是由自旋向上和向下的电子共同贡献的, 如果只考虑某一种自旋的电子贡献的电流, 那么可以通过计算端口中该自旋电子的数目的变化得到自旋分量的电流:

$$\hat{I}_{v\sigma} = -e \frac{d\hat{N}_{v\sigma}}{dt} = \frac{ie}{\hbar} \sum_{k_v\sigma'} \left( \tilde{T}_{k_v}^{\sigma\sigma'} a_{k_v\sigma}^+ d_{\sigma'} - \tilde{T}_{k_v}^{*\sigma\sigma'} d_{\sigma'}^+ a_{k_v\sigma} \right) \quad (2-3)$$

通过这个表达式可以定义端口  $v$  和端口  $v'$  之间自旋分量的电流间的关联为

$$S_{vv'}^{\sigma\sigma'}(t, t') = \left\langle \left\{ \Delta\hat{I}_{v\sigma}(t), \Delta\hat{I}_{v'\sigma'}(t') \right\} \right\rangle \quad (2-4)$$

其中  $\Delta\hat{I}_{v\sigma}(t) = \hat{I}_{v\sigma}(t) - \langle \hat{I}_{v\sigma}(t) \rangle$  [92,98,99]。如果对公式 (2-4) 中的自旋指标求和, 并取  $v = v'$ , 那么这就是端口  $v$  中的电流散粒噪声, 而这里我们将其分解为各个自旋分量的电流的散粒噪声, 并且当  $v \neq v'$  时还是不同端口间的电流的关联, 这使得我们可以通过这个公式计算更加普遍的结果, 而不仅局限于同一端口中的电流散粒噪声。采用非平衡态格林函数方法 [100], 并按照标准的推导步骤 [101], 经过较复杂的计算后可以得到噪声谱的表达式

$$\begin{aligned} S_{vv'}^{\sigma\sigma'}(\omega) = & \left( \frac{ie}{\hbar} \right)^2 \int \frac{d\omega'}{2\pi} \text{Tr} \left\{ i\delta_{vv'} \delta_{\sigma\sigma'} \left\{ [(1-f_v(\omega'-\omega))\Gamma_v^\sigma G^<(\omega') - f_v(\omega'-\omega)\Gamma_v^\sigma G^>(\omega')] \right. \right. \\ & + [(1-f_v(\omega'))\Gamma_v^\sigma G^<(\omega'-\omega) - f_v(\omega')\Gamma_v^\sigma G^>(\omega'-\omega)] \} \\ & - \Gamma_v^\sigma G^>(\omega') \Gamma_{v'}^{\sigma'} \left[ f_v(\omega'-\omega) G^r(\omega'-\omega) + \frac{1}{2} G^<(\omega'-\omega) \right] \\ & + \Gamma_v^\sigma G^<(\omega') \Gamma_{v'}^{\sigma'} \left[ (1-f_v(\omega'-\omega)) G^r(\omega'-\omega) - \frac{1}{2} G^>(\omega'-\omega) \right] \\ & - \Gamma_v^\sigma G^a(\omega') \Gamma_{v'}^{\sigma'} \left[ (1-f_v(\omega')) G^<(\omega'-\omega) - f_v(\omega') G^>(\omega'-\omega) \right] \\ & \left. \left. + \Gamma_v^\sigma \left[ (1-f_v(\omega'-\omega)) G^r(\omega'-\omega) - \frac{3}{2} G^>(\omega'-\omega) \right] \Gamma_{v'}^{\sigma'} \left[ f_{v'}(\omega') G^r(\omega') + \frac{1}{2} G^<(\omega') \right] \right\} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & +\Gamma_{\nu}^{\sigma}\left[f_{\nu}(\omega')G^a(\omega')+\frac{1}{2}G^<(\omega')^{\dagger}\right]\Gamma_{\nu'}^{\sigma'}\left[-\frac{1}{2}G^>(\omega'-\omega)^+ + (1-f_{\nu'}(\omega'-\omega))G^a(\omega'-\omega)\right] \\
 & +\Gamma_{\nu}^{\sigma}\left[-\frac{1}{2}G^>(\omega')^{\dagger} + (1-f_{\nu}(\omega'))G^a(\omega')\right]\Gamma_{\nu'}^{\sigma'}\left[f_{\nu'}(\omega'-\omega)G^a(\omega'-\omega)+\frac{1}{2}G^<(\omega'-\omega)^+\right] \\
 & +\Gamma_{\nu}^{\sigma}\left[f_{\nu}(\omega'-\omega)G^r(\omega'-\omega)+\frac{3}{2}G^<(\omega'-\omega)\right]\Gamma_{\nu'}^{\sigma'}\left[(1-f_{\nu'}(\omega'))G^r(\omega')-\frac{1}{2}G^>(\omega')\right] \\
 & -\Gamma_{\nu}^{\sigma}\Gamma_{\nu'}^{\sigma'}G^a(\omega'-\omega)\left[(1-f_{\nu'}(\omega'-\omega))G^<(\omega')-f_{\nu'}(\omega'-\omega)G^>(\omega')\right]\}
 \end{aligned} \tag{2-5}$$

这里  $f_{\nu}(\omega)=[1+e^{(\omega-\mu_{\nu})/k_B T}]^{-1}$  是  $\nu$  端口的 Fermi 分布函数,  $\mu_{\nu}$  是  $\nu$  端口的 Fermi 能级。  $G^{\gamma}$  ( $\gamma=r,a,<,>$ ) 是量子点的格林函数, 可以写作  $2\times 2$  的矩阵形式。  $\Gamma_{\nu}^{\sigma}$  是  $\nu$  端口与量子点的耦合矩阵, 其表达式为

$$\Gamma_{\nu}^{\sigma} = \frac{1+\sigma P_{\nu}}{2} \begin{pmatrix} \Gamma_{\nu}^{\uparrow\uparrow}(1+\sigma \cos \theta_{\nu}) & \sigma \Gamma_{\nu}^{\uparrow\downarrow} \sin \theta_{\nu} \\ \sigma \Gamma_{\nu}^{\downarrow\uparrow} \sin \theta_{\nu} & \Gamma_{\nu}^{\downarrow\downarrow}(1-\sigma \cos \theta_{\nu}) \end{pmatrix} \tag{2-6}$$

这里  $\Gamma_{\nu}^{\sigma\sigma'} \equiv 2\pi\rho_{\nu}T_{\nu}^{\sigma\sigma*}T_{\nu}^{\sigma'\sigma'}$ ,  $\rho_{\nu}=\rho_{\nu\uparrow}+\rho_{\nu\downarrow}$  是  $\nu$  端口的电子态密度,  $P_{\nu}=(\rho_{\nu\uparrow}-\rho_{\nu\downarrow})/(\rho_{\nu\uparrow}+\rho_{\nu\downarrow})$  是  $\nu$  端口的自旋极化度。为了得到式 (2-5), 需要借助

$$\begin{aligned}
 G_{k_{\nu}k'_{\nu'}}(t,t') & = -i\langle T_c a_{k'_{\nu'}}(t)a_{k_{\nu}}^{\dagger}(t') \rangle \\
 & = \delta_{\nu\nu'}\delta(k-k')g_{k_{\nu}}(t,t') + \int_{\mathcal{C}} dt'' g_{k_{\nu}}(t,t'')\tilde{T}_{k_{\nu}}G_{dk'_{\nu'}}(t'',t')
 \end{aligned} \tag{2-7}$$

并假设  $T_{k_{\nu}}^{\sigma\sigma}=0$ 。这里  $g_{k_{\nu}}(t,t')$  是  $\nu$  端口的格林函数,  $G_{dk_{\nu}}$  是耦合格林函数。

我们首先关注零频的电流散粒噪声, 其表达式为  $S(t,t')=\langle\{\Delta\hat{I}(t),\Delta\hat{I}(t')\}\rangle$ , 这里  $\hat{I}(t)=(\hat{I}_L(t)-\hat{I}_R(t))/2$ , 因此  $S=\frac{1}{4}(S_{LL}+S_{RR}-S_{LR}-S_{RL})$ 。由电流守恒可以导出在两端口系统中,  $S_{LL}(0)=S_{RR}(0)=-S_{LR}(0)=-S_{RL}(0)$ 。在这个公式的后两项前有一个负号, 这是由电子的 Fermi 统计性质造成的。接下来, 我们用物理量  $S_{RR}=\sum_{\sigma\sigma'}S_{RR}^{\sigma\sigma'}=S_{RR}^{\uparrow\uparrow}+S_{RR}^{\downarrow\downarrow}+2S_{RR}^{\uparrow\downarrow}\equiv S$  来研究电流噪声, 其表达式可以直接通过将式 (2-5) 中的  $\Gamma_{\nu}^{\sigma}$  用  $\Gamma_{\nu}$  代替得到:

$$\Gamma_{\nu} = \begin{pmatrix} \Gamma_{\nu}^{\uparrow\uparrow}(1+P_{\nu}\cos\theta_{\nu}) & \Gamma_{\nu}^{\uparrow\downarrow}P_{\nu}\sin\theta_{\nu} \\ \Gamma_{\nu}^{\downarrow\uparrow}P_{\nu}\sin\theta_{\nu} & \Gamma_{\nu}^{\downarrow\downarrow}(1-P_{\nu}\cos\theta_{\nu}) \end{pmatrix} \quad (2-8)$$

### 2.3 数值计算结果与讨论

取量子点中的自旋简并能级为  $\varepsilon_0=1$ ，左右端口间施加的偏压为  $V$ ，即  $\mu_L - \mu_R = eV$ 。假设式 (2-6) 与 (2-8) 中的耦合参数  $\Gamma_{\nu}^{\sigma\sigma'}$  与自旋指标无关，即  $\Gamma_{\nu}^{\sigma\sigma'} \equiv \Gamma_{\nu}$ 。特别的，我们固定  $\Gamma_L + \Gamma_R = 0.16$ ，并定义不对称度为  $\alpha = \Gamma_L / \Gamma_R$ ，这个参数表征左右端口耦合强度的不对称性。最后，取  $P_L = P_R = P$ ， $k_B T = 0.01$ 。

#### 2.3.1 电流散粒噪声

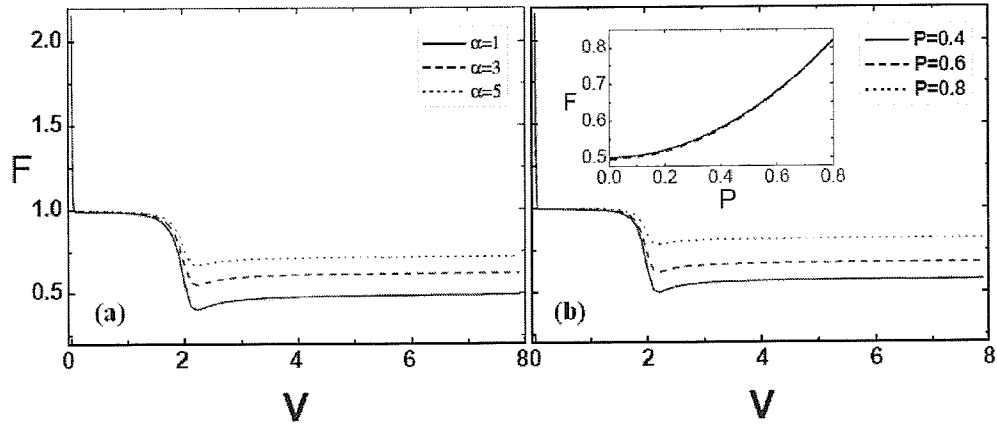


图 2-1 Fano 因子  $F$  随偏压的变化。偏压对称地施加在左右端口间，即  $\mu_L = -\mu_R = eV/2$ 。(a)  $\theta=0$ ， $P=0.4$ ， $\alpha=1, 3, 5$ ；(b)  $\theta=\pi$ ， $\alpha=1$ ， $P=0.4, 0.6, 0.8$ 。插图给出了在对称系统中，当  $\theta=\pi$  时，Fano 因子随极化度  $P$  的变化。

图 2-1 给出不同参数时 Fano 因子  $F$  随偏压的变化。当偏压很小即  $eV < k_B T$  时，噪声主要由热噪声贡献。由涨落耗散理论，Fano 因子为  $2kT/eV$ ，因此在  $V=0$  时发散。当偏压增加到可以与热运动的能量相比拟时，散粒噪声占主导地位。如果此时偏压仍然低于量子点的共振能级  $\varepsilon_0$ ，那么相继两个隧穿事件之间的时间间隔很大，隧穿是无关联的，因而散粒噪声是泊松噪声， $S = 2e\langle I \rangle$ 。这对应于图中  $V < 2$  时的 Fano 因子  $F=1$  的平台<sup>[90,91,102]</sup>。当左端铁磁端口的 Fermi 能级接近量子点中的能级  $\varepsilon_0$  时，由于 Pauli 不相容原理，散粒噪声相对于其泊松值被

抑制。在对称的结构中，当偏压足够大时，Fano 因子下降到 0.5。如果  $\alpha \neq 1$ ，系统为非对称结构，此时 Fano 因子大于其最小值 0.5。因为随着  $\alpha$  增加，系统从双势垒结构向等效的单势垒结构转变，所以隧穿事件之间的关联被抑制，散粒噪声趋近于泊松值。在对称结构中，当两端口的磁化方向平行时， $F$  与  $P$  无关，这个结论在图中没有给出。而当两端口磁化方向反平行时， $F$  随  $P$  的增加而增加，如图 2-1b 所示。这个现象在引言中已经提到，下面我们用具体公式推导出这个结论。在由普通金属端口构成的共振隧穿系统中有<sup>[90,95,103]</sup>

$$I = e \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L + \Gamma_R}, \quad F = 1 - 2 \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{(\Gamma_L + \Gamma_R)^2} \quad (2-9)$$

以及  $S = 2eIF$ 。在绪论中也给出了这个公式，不过公式 (2-9) 中并没有考虑电子的自旋自由度，因此电流的表达式比绪论中的电流表达式小一倍。下面将公式 (2-9) 推广到铁磁系统中，这需要分别考虑两个自旋分量，然后对两个自旋分量求和就可以得到铁磁系统中对应的物理量的表达式。公式 (2-9) 在零温和大偏压区域成立，而我们认为这个公式在本章考虑的系统中至少在定性上是成立的。由于  $F = S/2eI$ ，而在铁磁系统中有  $I = I^\uparrow + I^\downarrow$ ， $S = S^\uparrow + S^\downarrow$ （当两端口的磁化方向平行或反平行时， $S^{\uparrow\downarrow} = 0$ ），所以此时 Fano 因子  $F = (S^\uparrow + S^\downarrow) / [2e(I^\uparrow + I^\downarrow)]$ 。将该表达式代入式 (2-9)，其中的物理量都需要带上自旋指标，比如  $\Gamma_\nu$  有附加的自旋指标。在平行磁化构型用  $\Gamma_\nu(1 + \sigma P)$  代替  $\Gamma_\nu^\sigma$ ，而在反平行构型中用  $\Gamma_L(1 + \sigma P)$  代替  $\Gamma_L^\sigma$ ，用  $\Gamma_R(1 - \sigma P)$  代替  $\Gamma_R^\sigma$ 。这样在简单的计算之后我们发现在平行构型中 Fano 因子与  $P$  无关，而在反平行构型中  $F = (1 + P^2)/2$ 。在图 2-1b 的插图中，实线代表由该公式的计算结果绘出的曲线，而短线是由用 (2-5) 式在  $V = 12$  时计算的结果绘出的曲线。这两条曲线彼此符合得很好，证明了我们做法的正确性。

图 2-2 中给出了电流，散粒噪声，以及 Fano 因子在不同的不对称度  $\alpha$  时随两端口的相对磁化方向夹角  $\theta$  的变化。在图 2-2a 中可以看到噪声谱随  $\theta$  增加而增加或减少，而电流的情况却不同，无论  $\alpha$  取什么样的值，电流总是随  $\theta$  增加而单调减少，如图 2-2b 的插图所示。在图 2-2b 中可以看到在对称结构中，Fano 因子随  $\theta$  增加而增加。当  $\alpha$  增加时， $F$  的值也随着增加，并且在超过一个临界值后  $F$  开始随着  $\theta$  增加而减少。在图 2-3a 中可以更清楚的看到这些特征，该图中给出了反平行时与平行时 Fano 因子的比值。很明显，Fano 因子是否随  $\theta$  增加而增大强烈的依赖于系统参数。当  $\alpha = 1$ ，即量子点与两端口对称地耦合时，反平行结

构中的 Fano 因子  $F(\pi)$  总是比平行结构中的  $F(0)$  要大, 而当  $\alpha > 1$  时,  $F(\pi)$  是否比  $F(0)$  大取决于端口极化度  $P$  的数值。我们同样可以通过公式 (2-9) 来解释这个现象。通过直接的计算可得

$$F(0) = 1 - \frac{2\alpha}{(1+\alpha)^2}$$

$$F(\pi) = 1 - \frac{\alpha(1+P)(1-P)}{1+\alpha} \times \left\{ \frac{\alpha(1-P)+1+P}{[\alpha(1+P)+1-P]^2} + \frac{\alpha(1+P)+1-P}{[\alpha(1-P)+1+P]^2} \right\} \quad (2-10)$$

用这两个表达式可以计算出  $F(\pi)/F(0)$ , 结果在图 2-3b 中给出。显然图 2-3a 和图 2-3b 的结果符合得很好。注意到公式 (2-10) 中  $F(\pi)$  表达式的括号中有两项相加, 这两项分别代表自旋相反的电流的贡献, 因此 Fano 因子随  $\theta$  的复杂变化情况是由噪声谱的两个自旋分量的叠加造成的。如果进一步考虑库仑相互作用, 公式 (2-9) 在不同的偏压区域有不同的形式<sup>[92,102,104]</sup>, 另外, 此时  $S^{\uparrow\downarrow}$  分量可以与  $S^{\sigma\sigma}$  有相同的量级<sup>[92]</sup>, 不能再被忽略了, 所以 Fano 因子随  $\theta$  的变化情况变得更加复杂, 这超过了本章讨论的范围。

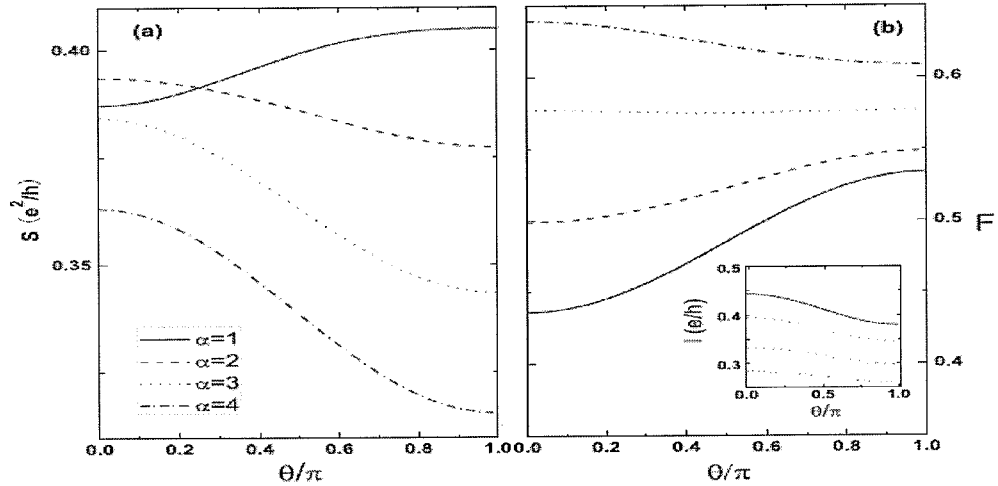


图2-2 不同  $\alpha$  参数下(a)散粒噪声谱(b)Fano因子随  $\theta$  变化的情况。  $P = 0.4$ ,  $\mu_L = 2.5$ ,  $\mu_R = -0.5$ 。插图给出了相应的电流变化。

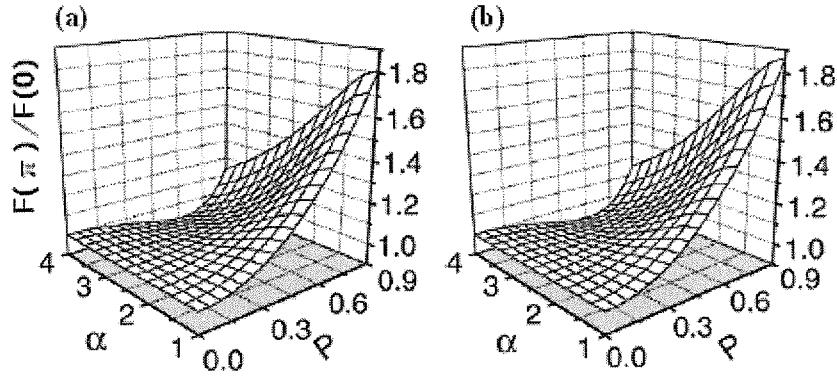


图2-3 偏压  $V = 8$  时反平行和平行磁化构型中Fano因子的比值随  $\alpha$  和  $P$  的变化。(a) 基于公式 (2-5) 计算的结果, (b) 基于公式 (2-10) 计算的结果。

### 2.3.2 自旋相关的散粒噪声

在由普通金属构成的系统中, 当  $\alpha$  变为  $1/\alpha$  时, 即系统的不对称性左右反演时, 电流和 Fano 因子保持不变。如果没有库仑相互作用, 在铁磁系统中也存在这种不变性, 但是对自旋分量的电流和散粒噪声就没有这种对称性了。图 2-4a 中给出了  $S^{\uparrow\uparrow}$  和  $S^{\downarrow\downarrow}$  在  $\alpha = 2$  和  $\alpha = 0.5$  时随  $\theta$  的变化情况。当  $\theta \neq 0$  时,  $\alpha = 2$  时的自旋分量散粒噪声不等于  $\alpha = 0.5$  时的自旋分量散粒噪声。有趣的是当  $\theta = \pi$  时,  $\alpha = 2$  时的  $S^{\sigma\sigma}$  等于  $\alpha = 0.5$  时的  $S^{\sigma\sigma}$ 。这个现象可以这样理解。当偏压为  $V$ 、 $\Gamma_L/\Gamma_R = \alpha$ 、两端口的相对磁化方向夹角为  $\theta$  时, 此时的自旋相关散粒噪声记为  $S^{\sigma\sigma}(V, \alpha, \theta)$ 。按照图 2-4a 中的参数, 固定  $\Gamma_L + \Gamma_R = (1 + \alpha)\Gamma = 3\Gamma$  ( $\alpha = 2$  时  $\Gamma_R = \Gamma$ , 或  $\alpha = 1/2$  时  $\Gamma_L = \Gamma$ ), 并假设  $V$  足够大而使得  $\varepsilon_0$  在偏压窗口中。当  $\theta = 0$ 、 $V > 0$ 、 $\Gamma_L/\Gamma_R = 2$  时, 左端口中的自旋向上的电子首先隧穿到量子点上, 其隧穿强度即为量子点-端口耦合强度  $2(1+P)\Gamma$ , 然后再隧穿到右端口上, 其隧穿强度为  $(1+P)\Gamma$ 。类似的, 当偏压为  $-V$  而  $\Gamma_L/\Gamma_R = 1/2$  时, 右端口中的自旋向上的电子首先隧穿到量子点上, 其隧穿强度为  $2(1+P)\Gamma$ , 然后再隧穿到左端口上, 其隧穿强度为  $(1+P)\Gamma$ 。显然这两个过程完全相同, 相应的各个物理量也应该相同, 所以有  $S^{\uparrow\uparrow}(V, 2, 0) = S^{\uparrow\uparrow}(-V, 1/2, 0)$ 。因为在稳态系统中散粒噪声与偏压方向无关<sup>[70]</sup>, 所以  $S^{\uparrow\uparrow}(-V, 1/2, 0) = S^{\uparrow\uparrow}(V, 1/2, 0)$ , 从而有  $S^{\uparrow\uparrow}(V, 2, 0) = S^{\uparrow\uparrow}(V, 1/2, 0)$ 。对于  $S^{\downarrow\downarrow}$  显然有相同的结论。所以在平行磁化构型中自旋分量散粒噪声与系统不对称方向无关。通过公式 (2-9) 也可以得到这个结果。将各端口耦合强度代入式 (2-9), 可以得到

$$S^{\uparrow\uparrow}(V, 2, 0) = S^{\uparrow\uparrow}(V, 1/2, 0) = \frac{e^2}{\hbar^2} \frac{20(1+P)\Gamma}{27} \quad (2-11)$$

所以当  $\theta = 0$  时，自旋相关的散粒噪声与隧道结的不对称方向无关。

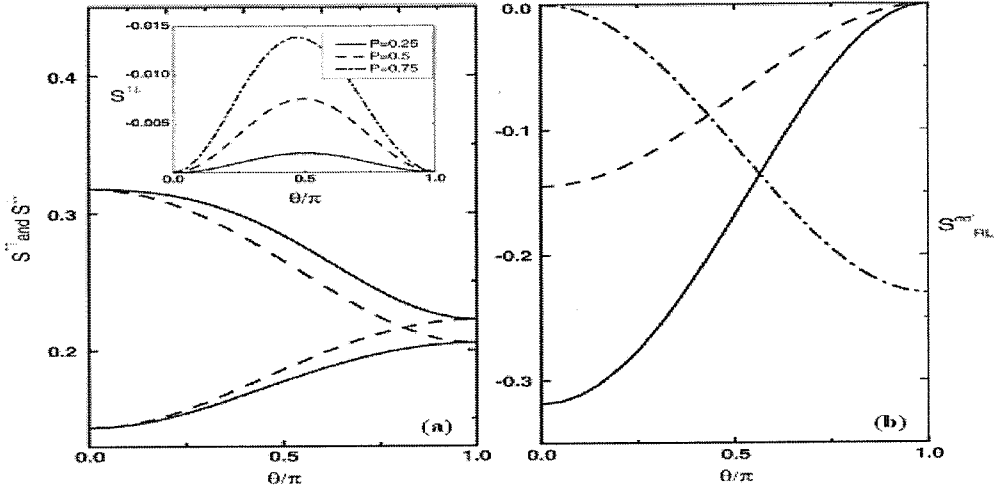


图2-4 (a)  $\alpha = 2$  和  $\alpha = 0.5$  时  $S^{\uparrow\uparrow}$  和  $S^{\downarrow\downarrow}$  随  $\theta$  的变化。实线和短线分别对应  $\alpha = 2$  和  $\alpha = 0.5$ 。插图给出不同端口极化度时  $S^{\uparrow\downarrow}$  随  $\theta$  的变化；(b) 两端口间自旋分量电流之间的关联随  $\theta$  的变化。实线，短线，以及点划线分别对应  $S^{\uparrow\uparrow}_{RL}$ ， $S^{\downarrow\downarrow}_{RL}$ ，和  $S^{\uparrow\downarrow}_{RL}$  的情况。 $\mu_L = 2.5$ ， $\mu_R = -0.5$ 。

当  $\theta > 0$  时，如果将  $\alpha = 2$  变为  $\alpha = 1/2$ ，并同时  $V$  变为  $-V$ ，系统保持不变，因为只有相对磁化方向夹角  $\theta$  而不是两端口分别的磁化方向与  $z$  轴的夹角  $\theta_L$  和  $\theta_R$  对系统输运性质有影响。如果在  $\alpha = 2$  和偏压为  $V$  时取左端口磁化方向为  $z$  轴，而  $\alpha = 1/2$  和偏压为  $-V$  时取右端口磁化方向为  $z$  轴，显然这两个系统是完全一样的，由于输运性质与坐标轴的选取无关，所以这两个系统的输运性质相同。这就是总的电流散粒噪声与隧道结不对称方向无关的原因，即  $S(V, 2, \theta) = S(-V, 1/2, \theta) = S(V, 1/2, \theta)$ 。但是对于自旋相关的散粒噪声，情况就不同了，因为自旋与方向选取有关。本章中我们取左端口中电子自旋向上的方向为  $z$  轴，当  $\theta > 0$  时，它与左端口磁化方向相同而与右端口磁化方向不同。现在将右端口中电子自旋向上的方向记为  $\uparrow'$ ，也即是右端口的磁化方向， $\uparrow$  与  $\uparrow'$  间的夹角就是  $\theta$ 。当偏压  $V > 0$  时， $S^{\uparrow\uparrow}(V, 2, \theta)$  对应于自旋为  $\uparrow$  的电子从左端口隧穿到右端口的过程。当偏压为  $-V$  时， $S^{\uparrow\uparrow}(-V, 1/2, \theta)$  对应于自旋为  $\uparrow'$  的电子从

右端口隧穿到左端口的过程。如果在后一种情况中选取右端口磁化方向为新的  $z$  轴，显然这两个过程完全相同，所以有  $S^{\uparrow\uparrow}(V, 2, \theta) = S^{\uparrow\uparrow}(-V, 1/2, \theta) = S^{\uparrow\uparrow}(V, 1/2, \theta)$ 。因为  $\uparrow$  和  $\uparrow'$  不共线，所以在铁磁系统中  $S^{\uparrow\uparrow}(V, 1/2, \theta) \neq S^{\uparrow\uparrow}(V, 1/2, \theta)$ ，从而推出  $S^{\uparrow\uparrow}(V, 2, \theta) \neq S^{\uparrow\uparrow}(V, 1/2, \theta)$ 。特别的，当  $\theta = \pi$ 、 $V > 0$ 、 $\Gamma_L/\Gamma_R = 2$  时，自旋向上的电子先隧穿到量子点中，其隧穿强度为  $2(1+P)\Gamma$ ，然后再隧穿到右端口，隧穿强度为  $(1-P)\Gamma$ ；而当偏压为  $-V$ 、 $\Gamma_L/\Gamma_R = 1/2$  时，右端口中的一个自旋向下的电子先隧穿到量子点上，其隧穿强度为  $2(1+P)\Gamma$ ，然后隧穿到左端口上，其隧穿强度为  $(1-P)\Gamma$ 。这两个过程完全相同，所以有  $S^{\uparrow\uparrow}(V, 2, \pi) = S^{\downarrow\downarrow}(-V, 1/2, \pi) = S^{\downarrow\downarrow}(V, 1/2, \pi)$ 。实际上，当  $\theta = \pi$  时， $\uparrow'$  即为  $\downarrow$ ，所以  $S^{\uparrow\uparrow}(V, 2, \pi) = S^{\downarrow\downarrow}(V, 1/2, \pi)$  是普遍公式  $S^{\uparrow\uparrow}(V, 2, \theta) = S^{\uparrow\uparrow}(V, 1/2, \theta)$  的特殊情况。这个结果同样可以通过公式 (2-9) 来验证，此时有

$$S^{\uparrow\uparrow}(V, 2, \pi) = S^{\downarrow\downarrow}(V, 1/2, \pi) = \frac{e^2}{h} \frac{4(1-P^2)(5+6P+5P^2)\Gamma}{(3+P)^3} \quad (2-12)$$

图 2-4a 的插图给出了不同自旋分量电流之间的关联  $S^{\uparrow\downarrow}$  随  $\theta$  的变化。注意到  $S^{\uparrow\downarrow}$  小于零，且它的值远小于  $S^{\sigma\sigma}$ ，这是因为自旋相反的电子间的关联比自旋相同电子间的关联小得多。当两端口的磁化方向不共线时，它才不为零，因为只有在这种构型中才会有自旋向上和向下的电子之间的关联，这种关联发生在电子从量子点隧穿到右端口的过程中。当  $P=0$  时， $S^{\uparrow\downarrow}=0$ ，因为此时自旋向上和向下的电子的隧穿是独立的。当  $P=1$  时，由于没有自旋向下的电子， $S^{\uparrow\downarrow}$  同样等于零。在  $\theta$  从 0 增加到  $\pi$  的过程中， $|S^{\uparrow\downarrow}|$  先增加，然后再降到零，这是因为  $S^{\uparrow\downarrow}$  是由总电流分流成自旋分量电流引起的，而电流振荡在  $\theta$  接近  $\pi/2$  时达到最大。最后，在图 2-4b 中给出了左右端口自旋流之间的关联随  $\theta$  的变化情况。与同端口电流间的关联不同，当  $\theta \neq 0$  时， $S_{RL}^{\uparrow\downarrow}$  与  $S_{RL}^{\sigma\sigma}$  有相同的量级，因为现在存在两端口中自旋分量电流间的直接关联。

## 2.4 小结

在本章中我们利用非平衡态格林函数方法研究了铁磁端/量子点/铁磁端体系中的自旋相关的散粒噪声性质。首先研究了电流散粒噪声与各个系统参数之间的关系。当系统处于平行构型时，Fano 因子与铁磁端极化度无关；而在反平

行构型时, Fano 因子正比于极化强度  $P$  的平方。当选取不同的极化度  $P$  和系统不对称度  $\alpha$  时, Fano 因子可以随两端口相对磁化方向夹角  $\theta$  的增加而增加或减少。我们将经典的电流和 Fano 因子的表达式 (2-9) 推广到包含自旋分量的情况, 从而适用于铁磁体系统。利用这个公式解释了 Fano 因子随  $\theta$  的复杂变化 (由于自旋分量散粒噪声的叠加引起)。同时研究了自旋分量的散粒噪声随  $\theta$  的变化情况, 与电流散粒噪声不同, 当系统的不对称方向左右反演时, 自旋分量的散粒噪声一般会改变大小。深入研究了一个电子在体系中的隧穿情况, 从而解释了这个现象, 并在平行和反平行两种构型中推出了自旋分量散粒噪声的表达式。不同自旋电流之间的关联远小于同一自旋分量电流自身的关联, 而且随  $\theta$  的变化呈现非单调的特性<sup>[200]</sup>。

## 第3章 铁磁端/量子点/铁磁端系统中的自旋相关电导

### 3.1 引言

在绪论中我们介绍了量子点的基本性质，由于量子点尺寸很小，因此其量子特性很明显，相位相干机制会对输运起到显著的影响<sup>[105]</sup>，主要体现在量子干涉效应上。本章中我们主要关注量子干涉效应对量子点线性电导谱的影响，并考察 Rashba 自旋轨道耦合效应在其中所起的作用。首先简单介绍一下与量子干涉相关的两个著名的效应——Aharonov-Bohm (AB) 效应和 Fano 效应，这两个效应对量子点的线性电导谱有显著的影响。

1959 年，Aharonov 和 Bohm 设想了一个电子束双缝干涉实验<sup>[106]</sup>，让一束电子通过两条不同的路径后汇聚，整个路径中没有电磁场影响，但包围着一个螺线管，因此闭合回路中有磁通量。在经典力学中磁通量对电子传播没有影响，而在量子力学中，是势函数而非场进入哈密顿量，因此，即使电子不直接受电磁场作用，磁通量也会引起两束电子在汇聚处的相位差的改变，从而改变电子波函数的干涉，并最终导致总电流以  $h/e$  为周期的振荡。这种现象称为 AB 效应。在经典电动力学中，电磁矢势是为了数学上的计算方便而引入的量，而从量子力学的观点来分析，即使电子与电磁场不发生直接作用，电磁矢势仍然可以引起电子波函数相位的变化，从而导致某些可观测的结果。

1960 年，Chambers 在真空实验中首次观测到了这种干涉现象<sup>[107]</sup>。1995 年，Yacoby 等人将一个量子点植入 AB 环的一条支路上<sup>[108]</sup>。通过量子点的输运为共振隧穿，而通过另外一条通道是非共振的。在 AB 环中施加磁场，通过改变磁通可以影响电子的干涉，从而造成通过系统电流的振荡。由于这种振荡与相位密切相关，因此可以用这种方法研究通过量子点的共振能级附近的电子的相位变化。在他们的实验中采用的是两端结构，由于 Onsager-Casmir 对称性的限制，电子的相位只能是 0 或  $\pi$ ，而没有通过共振能级的电子相位的连续变化。1997 年，Schuster 小组采用了四端连接的结构<sup>[109]</sup>，因此没有受到 Onsager-Casmir 关系的限制，从而测量到了电子通过量子点共振能级的相位为  $\pi$  的连续变化。由于 AB 效应发生的前提条件是相位相干性，因此人们常常把量子点植入 AB 环，观测通过系统电流的振荡，以此确定通过量子点的电子相位信息是否仍旧保持。

利用 AB 环干涉仪还可以观测到另一个固态系统中常出现的现象：Fano 共振效应<sup>[110]</sup>。Fano 效应是电子通过一条共振通道和一条非共振通道干涉的结果。由于通过共振通道电子的相位会改变  $\pi$ ，而通过非共振通道电子的相位不改变，因此如果在共振能量的一侧是相长（相消）干涉的话，那么在共振能量的另一侧就是相消（相长）干涉，从而产生不对称的共振峰。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不对称形状，描述跃迁概率线型可以用一个简捷的解析公式描述： $(\varepsilon+q)^2/(\varepsilon^2+1)$ ，其中参数  $q$  称为对称度指数，如图 3-1 所示。对每个 Fano 线型，它是一个常数。这被称为 Fano 效应。

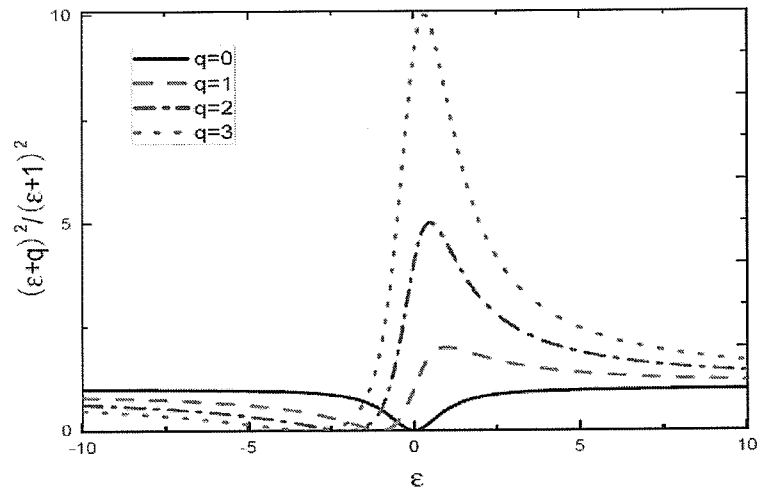


图3-1 Fano线形示意图<sup>[110]</sup>。

在很多不同的物理系统中都观察到了 Fano 效应，如中子散射<sup>[111]</sup>、原子光电离<sup>[112]</sup>、拉曼散射<sup>[113]</sup>和光吸收<sup>[114]</sup>等。量子点 Fano 系统可以通过在 AB 环其中一臂嵌入量子点来实现，量子点中的单粒子能级可以用门电压来调节。有量子点的一臂视为共振通道，而无量子点的一臂视为非共振通道即直接通道，这样在 AB 干涉仪中就可以实现 Fano 共振<sup>[115-117]</sup>。2000 年，Gores 小组首次观测到了量子点系统中的 Fano 效应<sup>[115]</sup>，并且测量了 Fano 效应对温度的敏感依赖关系。相干性的保持是很多量子器件应用的前提，而最直接验证相干性的方法就是干涉效应，因此 Fano 效应对确定介观体系的相干性有非常重要的应用。

本章我们从理论上研究了铁磁体/半导体量子点/铁磁体系统中的自旋相关的电导谱，其中考虑了量子点中的 Rashba 自旋轨道耦合效应以及在隧穿过程中

的磁杂质引起的自旋翻转。研究表明，在单能级量子点中，当系统处于平行磁化构型，由于通过自旋简并能级的不同路径间的干涉，电导谱中可以形成电导峰或电导谷，这取决于自旋翻转的性质。当系统处于非共线磁化构型时，电导谱中的共振峰可以变成电导谷。正如我们绪论中所言，Rashba 自旋轨道耦合可以改变每条隧穿路径的相位，从而起到调制电导的作用。当量子点有多个能级时，系统中存在 Rashba 自旋翻转跃迁效应，从而改变了系统的拓扑结构，其与 Rashba 相因子的共同作用可以调节量子点与端口间的等效耦合强度，因此造成耦合强与耦合弱的能级间的干涉。由于耦合弱的能级相对于耦合强的能级而言可视为非共振能级，所以此时可以观测到 Fano 共振，并且可以实现在电导谱中的共振到反共振的转变。

### 3.2 理论模型

本章中研究的铁磁端/量子点/铁磁端隧穿系统如图 3-2a 所示，其中的量子点是基于二维量子气制成的，电子在  $y$  方向受限，因而在量子点中存在 Rashba 自旋轨道耦合效应。为了得到更清晰的物理图像，我们忽略了量子点中的库仑相互作用。由于异质结中可能有磁杂质，电子在隧穿的过程中会受到磁杂质的散射，从而发生自旋翻转，这对电子隧穿而言相当于引入了更多的隧穿路径。

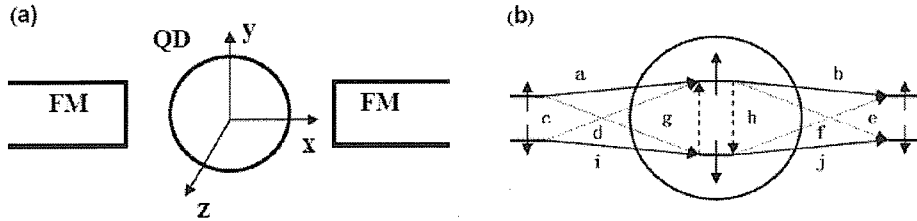


图3-2 (a)量子点与两个铁磁端口耦合。量子点是基于二维量子气制成的，在  $y$  方向受限，电子沿  $x$  方向传播；(b)对于自旋向上和向下的电子在两个铁磁端口间各条隧穿路径的示意图。

我们用哈密顿量

$$H = H_{lead} + H_{dot} + H_T \quad (3-1)$$

来描述这个系统，其中  $H_{lead} = \sum_{\alpha} H_{\alpha}$  是两个铁磁端口的哈密顿量，

$H_\alpha = \sum_{k_\alpha \sigma} \varepsilon_{k_\alpha \sigma} a_{k_\alpha \sigma}^\dagger a_{k_\alpha \sigma}$  代表  $\alpha$  端口的哈密顿量,  $\alpha = L, R$ 。  $a_{k_\alpha \sigma}^\dagger$  ( $a_{k_\alpha \sigma}$ ) 是波矢为  $k$  自旋为  $\sigma$  的电子在端口  $\alpha$  中的产生 (湮灭) 算符。先不考虑 Rashba 自旋轨道耦合, 则量子点的哈密顿量是  $H_{dot} = \sum_{n\sigma} \varepsilon_{n\sigma} d_{n\sigma}^\dagger d_{n\sigma}$ ,  $n$  是标记能级的序号。量子点与端口的耦合哈密顿量为  $H_T = \sum_\alpha H_{T\alpha}$ , 其中<sup>[95,118]</sup>

$$H_{T\alpha} = \sum_{k_\alpha n \sigma \sigma'} \left[ T_{k_\alpha n}^{\sigma \sigma'} \left( \cos \frac{\theta_\alpha}{2} a_{k_\alpha \sigma}^\dagger - \sigma \sin \frac{\theta_\alpha}{2} a_{k_\alpha \bar{\sigma}}^\dagger \right) d_{n\sigma'} + H.c. \right] \quad (3-2)$$

代表量子点与端口  $\alpha$  间的耦合哈密顿量,  $\sigma = \pm 1$  对应于  $\sigma = \uparrow$  和  $\downarrow$ ,  $\bar{\sigma} = -\sigma$ 。  $\theta_\alpha$  是端口  $\alpha$  的磁化方向与量子点中自旋量子化轴 ( $z$  轴) 之间的夹角,  $d_{n\sigma}^\dagger$  ( $d_{n\sigma}$ ) 是自旋为  $\sigma$  并占据量子点第  $n$  个能级的电子产生 (湮灭) 算符,  $T_{k_\alpha n}^{\sigma \sigma'}$  是量子点与端口的耦合矩阵元, 假设它是实数。现在考虑量子点中的 Rashba 自旋轨道耦合, 其哈密顿量可以写作

$$H_{SO} = \frac{1}{2\hbar} [\alpha(x) \hat{\sigma}_z p_x - \hat{\sigma}_z p_x \alpha(x)] - \alpha(x) \hat{\sigma}_x p_z / \hbar \equiv H_{R1} + H_{R2} \quad (3-3)$$

该公式在绪论中已经给出,  $\alpha(x)$  是 Rashba 自旋轨道耦合系数。对于沿  $x$  轴传播的电子,  $H_{R1}$  引起自旋进动,  $H_{R2}$  导致自旋翻转。对整个哈密顿量施加一个么正变换  $U$ <sup>[64]</sup>,  $H_{R1}$  只剩下一个相位因子  $e^{-i\sigma' \phi_{SO}^\alpha}$ , 这个相因子乘在隧穿系数  $T_{k_\alpha n}^{\sigma \sigma'}$  上, 且有  $\phi_{SO}^L = 0$  和  $\phi_{SO}^R = \int_{x_L}^{x_R} k_R(x) dx \equiv \phi_{SO}$ , 其中  $k_R(x) = \alpha(x) m^* / \hbar^2$ 。如果假设  $\alpha(x)$  与  $x$  无关, 那么  $\phi_{SO} = \alpha m^* L / \hbar^2$ ,  $L$  是量子点的长度。施加么正变换  $U$  之后,  $H_{R2}$  可以写为  $H_{R2} = \sum_{m,n} t_{mn} d_{m\downarrow}^\dagger d_{n\uparrow} + H.c.$ , 这里  $t_{mn} = \langle m \downarrow | U^\dagger H_{R2} U | n \uparrow \rangle$ , 并且有  $t_{mn} = -t_{nm}$  ( $t_{nn} = 0$ ), 表明 Rashba 自旋轨道耦合只引起能级间的电子自旋翻转跃迁而不引起能级内的电子自旋翻转跃迁。 $\phi_{SO}$  和  $t_{mn}$  均正比于  $\alpha$ 。中科院物理所的孙庆丰研究员等人估算了  $\phi_{SO}$  和  $t_{mn}$  的量级<sup>[64]</sup>, 指出在实验上  $\phi_{SO}$  可以被调节到  $\pi/2$ , 而  $t_{mn}$  的量级大约是  $100 \mu eV$ , 这与端口-量子点耦合强度以及能级间距的量级一样。由于系统哈密顿量的其余部分在这个么正变换下保持不变, 那么可以重新写出考虑了 Rashba 自旋轨道耦合后的哈密顿量:

$$H_{dot} = \sum_{n\sigma} \varepsilon_{n\sigma} d_{n\sigma}^\dagger d_{n\sigma} + \sum_{mn} (t_{mn} d_{m\downarrow}^\dagger d_{n\uparrow} + H.c.) \quad (3-4)$$

以及

$$H_{T\alpha} = \sum_{k_\alpha n \sigma \sigma'} \left( \tilde{T}_{k_\alpha n}^{\sigma \sigma'} a_{k_\alpha \sigma}^+ d_{n \sigma'} + H.c. \right) \quad (3-5)$$

这里

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{k_\alpha n}^{\uparrow \uparrow} &= \left( T_{k_\alpha n}^{\uparrow \uparrow} \cos \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{k_\alpha n}^{\downarrow \uparrow} \sin \frac{\theta_\alpha}{2} \right) e^{-i\phi_{SO}^\alpha} \\ \tilde{T}_{k_\alpha n}^{\downarrow \downarrow} &= \left( T_{k_\alpha n}^{\downarrow \downarrow} \sin \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{k_\alpha n}^{\uparrow \downarrow} \cos \frac{\theta_\alpha}{2} \right) e^{i\phi_{SO}^\alpha} \\ \tilde{T}_{k_\alpha n}^{\downarrow \uparrow} &= \left( -T_{k_\alpha n}^{\uparrow \uparrow} \sin \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{k_\alpha n}^{\downarrow \uparrow} \cos \frac{\theta_\alpha}{2} \right) e^{-i\phi_{SO}^\alpha} \\ \tilde{T}_{k_\alpha n}^{\uparrow \downarrow} &= \left( T_{k_\alpha n}^{\downarrow \downarrow} \cos \frac{\theta_\alpha}{2} - T_{k_\alpha n}^{\uparrow \downarrow} \sin \frac{\theta_\alpha}{2} \right) e^{i\phi_{SO}^\alpha} \end{aligned} \quad (3-6)$$

为了方便起见, 假设  $T_{k_\alpha n}^{\sigma \sigma'}$  与波矢  $k_\alpha$  无关, 并将它们重新写为  $T_{k_\alpha n}^{\uparrow \uparrow} = T_{n1}^\alpha$ ,  $T_{k_\alpha n}^{\downarrow \downarrow} = T_{n2}^\alpha$ ,  $T_{k_\alpha n}^{\uparrow \downarrow} = T_{n3}^\alpha$ , 以及  $T_{k_\alpha n}^{\downarrow \uparrow} = T_{n4}^\alpha$ , 再将  $\tilde{T}_{k_\alpha n}^{\sigma \sigma'}$  的下指标  $k_\alpha$  用  $\alpha$  代替。假设  $T_{n1}^\alpha = T_{n2}^\alpha$  (唯一的例外是在图 3-5c 和 3-5d 中), 并且把  $T_{n2}^\alpha$  也记为  $T_{n1}^\alpha$ 。  $T_{n3}^\alpha$  和  $T_{n4}^\alpha$  描述了自旋翻转的隧穿过程, 它们的值依赖于隧道结中的磁杂质。我们假设  $T_{n3}^\alpha$  和  $T_{n4}^\alpha$  比  $T_{n1}^\alpha$  小, 也就是说, 在隧穿过程中多数电子的自旋状态不受磁杂质的影响。

采用非平衡态格林函数方法, 通过  $\alpha$  端口的自旋分量的电流可以写成

$$I_\sigma^\alpha = -\frac{2e}{\hbar} \text{Im} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \text{Tr} \left[ \left( G^r(\varepsilon) f_\alpha(\varepsilon) + \frac{1}{2} G^<(\varepsilon) \Gamma^{\alpha\sigma} \right) \right] \quad (3-7)$$

不失一般性, 接下来只考虑流过左端口的电流。经过一些计算可以得到在零温极限下自旋相关的线性电导的表达式:

$$G^\sigma = \frac{e^2}{h} \text{Tr} (G^r \Gamma^R G^a \Gamma^{L\sigma}) \quad (3-8)$$

这里  $G^{r(a)}$  是量子点的推迟 (超前) 格林函数,  $\Gamma^\alpha (= \Gamma^{\alpha\uparrow} + \Gamma^{\alpha\downarrow})$  是量子点与  $\alpha$  端口的耦合矩阵。  $G^{r(a)}$  和  $\Gamma^{\alpha\sigma}$  都是  $2n \times 2n$  的矩阵,  $n$  是量子点中的能级数。也可以把它们视为  $n \times n$  的矩阵, 其矩阵元  $G_{nn'}^{r(a)}$  和  $\Gamma_{nn'}^{\alpha\sigma}$  是自旋空间的  $2 \times 2$  矩阵。  $G_{nn'}^{r(a)}$  的表达式为

$$G_{mn'}^r = \begin{pmatrix} G_{nn'}^{r\uparrow\uparrow} & G_{nn'}^{r\uparrow\downarrow} \\ G_{nn'}^{r\downarrow\uparrow} & G_{nn'}^{r\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \quad (3-9)$$

其中  $G_{nn'}^{r\sigma\sigma'} = \langle\langle d_{n\sigma}^+ | d_{n'\sigma'} \rangle\rangle^r$ ,  $G_{nn'}^a = [G_{nn'}^r]^\dagger$ 。  $\Gamma_{nn'}^{\alpha\sigma}$  的表达式为

$$\Gamma_{nn'}^{\alpha\sigma} = \sum_{k_\alpha} 2\pi\delta(\omega - \varepsilon_{k_\alpha\sigma}) \begin{pmatrix} \tilde{T}_{\alpha n}^{\sigma\uparrow*} \tilde{T}_{\alpha n'}^{\sigma\uparrow} & \tilde{T}_{\alpha n}^{\sigma\uparrow*} \tilde{T}_{\alpha n'}^{\sigma\downarrow} \\ \tilde{T}_{\alpha n}^{\sigma\downarrow*} \tilde{T}_{\alpha n'}^{\sigma\uparrow} & \tilde{T}_{\alpha n}^{\sigma\downarrow*} \tilde{T}_{\alpha n'}^{\sigma\downarrow} \end{pmatrix} \quad (3-10)$$

这里  $\sum_{k_\alpha} \delta(\omega - \varepsilon_{k_\alpha\sigma}) = \rho_{\alpha\sigma}$  是  $\alpha$  端口的自旋相关的态密度, 满足  $\rho_{\alpha\uparrow} + \rho_{\alpha\downarrow} = \rho_\alpha$ , 而  $P_\alpha = (\rho_{\alpha\uparrow} - \rho_{\alpha\downarrow})/(\rho_{\alpha\uparrow} + \rho_{\alpha\downarrow})$  是  $\alpha$  端口的自旋极化度。为了描述简便, 将  $2\pi\rho_\alpha T_{ni}^\alpha T_{n'j}^\alpha$  记为  $T_{ni}^\alpha T_{n'j}^\alpha$  ( $i, j = 1, 2, 3, 4$ )。假设  $P_L = P_R = P > 0$ , 即自旋向上的电子是铁磁端口中的多数电子, 那么可以写出  $\Gamma_{nn'}^{\alpha\uparrow}$  和  $\Gamma_{nn'}^{\alpha\downarrow}$  的各个元素:

$$\Gamma_{nn'}^{\alpha\uparrow}(1,1) = \frac{1+P}{2} \left( T_{n1}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{n4}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} \right) \times \left( T_{n'1}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{n'4}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} \right)$$

$$\Gamma_{nn'}^{\alpha\uparrow}(1,2) = \frac{1+P}{2} \left( T_{n1}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{n4}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} \right) \times \left( T_{n'2}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{n'3}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} \right) e^{2i\phi_{so}^\alpha}$$

$$\Gamma_{nn'}^{\alpha\uparrow}(2,1) = \frac{1+P}{2} \left( T_{n2}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{n3}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} \right) \times \left( T_{n'1}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{n'4}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} \right) e^{-2i\phi_{so}^\alpha}$$

$$\Gamma_{nn'}^{\alpha\uparrow}(2,2) = \frac{1+P}{2} \left( T_{n2}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{n3}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} \right) \times \left( T_{n'2}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{n'3}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} \right)$$

以及

$$\Gamma_{nn'}^{\alpha\downarrow}(1,1) = \frac{1-P}{2} \left( -T_{n1}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{n4}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} \right) \times \left( -T_{n'1}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{n'4}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} \right)$$

$$\Gamma_{nn'}^{\alpha\downarrow}(1,2) = \frac{1-P}{2} \left( -T_{n1}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{n4}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} \right) \times \left( T_{n'2}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} - T_{n'3}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} \right) e^{2i\phi_{so}^\alpha}$$

$$\Gamma_{nn'}^{\alpha\downarrow}(2,1) = \frac{1-P}{2} \left( T_{n2}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} - T_{n3}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} \right) \times \left( -T_{n'1}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} + T_{n'4}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} \right) e^{-2i\phi_{so}^\alpha},$$

$$\Gamma_{nn'}^{\alpha\downarrow}(2,2) = \frac{1-P}{2} \left( T_{n2}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} - T_{n3}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} \right) \times \left( T_{n'2}^\alpha \cos \frac{\theta_\alpha}{2} - T_{n'3}^\alpha \sin \frac{\theta_\alpha}{2} \right)$$

(3-11)

由运动方程方法可以得到  $G^r(\omega) = [A(\omega) - R + i\Gamma/2]^{-1}$ ，其中

$$A_{nn'}(\omega) = \delta_{nn'} \begin{pmatrix} \omega - \varepsilon_{n\uparrow} & 0 \\ 0 & \omega - \varepsilon_{n\downarrow} \end{pmatrix}, \quad R_{nn'} = \begin{pmatrix} 0 & t_{n'n}^* \\ t_{nn'} & 0 \end{pmatrix} \quad (3-12)$$

$\Gamma = \Gamma^L + \Gamma^R$ 。Rashba 自旋进动体现在  $\Gamma$  矩阵的相因子  $e^{\pm 2i\phi_{SO}}$  上，而 Rashba 能级间电子自旋翻转跃迁体现在矩阵  $R$  上。本章中我们只关注两种情况，一种是量子点只有一个能级 ( $n=1$ )，另一种是量子点有两个能级 ( $n=2$ )，这两个能级可以是自旋简并的，也可以是非简并的。在第一种情况中矩阵  $R$  不存在，因为  $t_{nn'}$  没有对角项，此时  $G^r$  可以写作

$$G^r(\omega) = \begin{pmatrix} \omega - \varepsilon_{0\uparrow} + \frac{i}{2}\Gamma_{11} & \frac{i}{2}\Gamma_{12} \\ \frac{i}{2}\Gamma_{21} & \omega - \varepsilon_{0\downarrow} + \frac{i}{2}\Gamma_{22} \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{|G|} \begin{pmatrix} \omega - \varepsilon_{0\downarrow} + \frac{i}{2}\Gamma_{22} & -\frac{i}{2}\Gamma_{12} \\ -\frac{i}{2}\Gamma_{21} & \omega - \varepsilon_{0\uparrow} + \frac{i}{2}\Gamma_{11} \end{pmatrix} \quad (3-13)$$

$|G| = (\omega - \varepsilon_{0\uparrow} + i\Gamma_{11}/2)(\omega - \varepsilon_{0\downarrow} + i\Gamma_{22}/2) + \Gamma_{12}\Gamma_{21}/4$ 。对于两能级的量子点， $t_{12}$  ( $= -t_{21}$ ) 有限，并且我们假设  $t_{12}$  ( $= t$ ) 是实数，该参数代表了 Rashba 能级间自旋翻转强度。当能级间距远远大于耦合强度时，我们的讨论对于多能级系统仍然成立，因为此时在某个共振能级处的输运性质主要受最邻近的能级影响，而其他能级的影响可以忽略。在强耦合极限，当研究某个能级附近的电导谱的时候，所有能级的影响都要考虑到，因此情况变得复杂了很多，超过了这里讨论的范围。

### 3.3 数值计算结果与讨论

#### 3.3.1 单能级情况

首先讨论量子点只有一个能级的情况，并假设能级是自旋简并的 ( $\varepsilon_{\uparrow} = \varepsilon_{\downarrow}$ )。在这种情况下所有公式中的下标  $n$  可以略去。从  $\Gamma^{\alpha\sigma}$  的表达式可知，当  $\theta_L = \theta_R = 0$  时，如果  $T_3^\alpha$  或  $T_4^\alpha$  不为零，那么  $\Gamma^{\alpha\sigma}$  的非对角元仍为有限值。由于当没有自旋翻转隧穿时，只有当两端口磁化方向不共线时  $\Gamma^{\alpha\sigma}$  的非对角元才不为零，这表明  $T_3^\alpha$

和  $T_4^\alpha$  具有旋转铁磁端口  $\alpha$  的磁化方向的作用。这是因为自旋翻转作用使得电子可以隧穿到量子点中的自旋向上和向下的态上，这与两个端口磁化方向不共线的效果类似。图 3-3a 给出了电导（单位是  $e^2/h$ ）随两个端口相对磁化方向夹角  $\theta$  的变化。对于  $T_3^L = 0$  的情况，当  $\theta$  从 0 变到  $\pi$  时， $G$  单调减少，此即一般的 TMR 效应。当  $T_3^L$  不为零时，等效于左端口的磁化方向被旋转了，因此当  $\theta$  从 0 增加到  $\pi$ ， $G$  先增加然后减少。还可以看到在考虑自旋翻转效应以后，电导被抑制了，之后我们将讨论这个效应。

现在考虑一种简单的情况，即两铁磁端口的磁化方向平行，并且量子点中没有 Rashba 自旋轨道耦合效应。为了得到清晰的物理图像，在考虑自旋翻转隧穿效应的时候，假设只有  $T_3^L$  不为零。图 3-3b 到 3-3d 中给出了不同参数下的自旋相关的电导谱。在图 3-3b 中，当极化度  $P$  很小时， $G^\uparrow$  在简并能级  $\varepsilon_0$  处出现了一个共振峰，而当  $P$  增加时，这个共振峰变成了谷。在非共振的能量区域， $G^\uparrow$  随  $P$  的增加而增加。在插图中可以看到  $G^\downarrow$  在  $\varepsilon_0$  处总是有一个峰，并且峰值被  $P$  抑制。图 3-3c 给出了  $T_3^L$  取不同值时的  $G^\uparrow$ 。当  $T_3^L = 0$  时，电子可以完全共振隧穿，因此电导谱在共振能级处达到最大值，而随着  $T_3^L$  增加，电导被抑制，并且出现了一个电导谷，电导峰分裂成两个具有相同高度的较低的峰。所以可以得出结论，当  $T_3^L$  有限时，只要  $P$  和  $T_3^L$  足够大， $G^\uparrow$  处于  $\varepsilon_0$  处的电导峰可以转变成电导谷，而在  $G^\downarrow$  的电导谱中共振峰始终存在。而当自旋翻转效应不存在时， $G^\uparrow$  和  $G^\downarrow$  在  $\varepsilon_0$  处的电导峰始终存在。这可以这样理解：将公式 (3-8) 展开，可以得到

$$G^\sigma = |T_1^\sigma + T_2^\sigma + T_3^\sigma + T_4^\sigma|^2 + |T_5^\sigma + T_6^\sigma + T_7^\sigma + T_8^\sigma|^2 \quad (3-14)$$

其中

$$\begin{aligned} T_1^\sigma &= G^{r\uparrow\uparrow} \sqrt{\Gamma_{11}^{R\uparrow} \Gamma_{11}^{L\sigma}} e^{i\phi_{s0}}, T_2^\sigma = G^{r\downarrow\downarrow} \sqrt{\Gamma_{22}^{R\uparrow} \Gamma_{22}^{L\sigma}} e^{-i\phi_{s0}} \\ T_3^\sigma &= G^{r\downarrow\uparrow} \sqrt{\Gamma_{11}^{R\uparrow} \Gamma_{22}^{L\sigma}} e^{i\phi_{s0}}, T_4^\sigma = G^{r\uparrow\downarrow} \sqrt{\Gamma_{22}^{R\uparrow} \Gamma_{11}^{L\sigma}} e^{-i\phi_{s0}} \\ T_5^\sigma &= G^{r\uparrow\uparrow} \sqrt{\Gamma_{11}^{R\downarrow} \Gamma_{11}^{L\sigma}} e^{i\phi_{s0}}, T_6^\sigma = G^{r\downarrow\downarrow} \sqrt{\Gamma_{22}^{R\downarrow} \Gamma_{22}^{L\sigma}} e^{-i\phi_{s0}} \\ T_7^\sigma &= G^{r\downarrow\uparrow} \sqrt{\Gamma_{11}^{R\downarrow} \Gamma_{22}^{L\sigma}} e^{i\phi_{s0}}, T_8^\sigma = G^{r\uparrow\downarrow} \sqrt{\Gamma_{22}^{R\downarrow} \Gamma_{11}^{L\sigma}} e^{-i\phi_{s0}} \end{aligned} \quad (3-15)$$

这里  $\Gamma_{ij}^{\alpha\sigma} = \Gamma^{\alpha\sigma}(i, j)$ 。这些量是自旋为  $\sigma$  的电子通过不同路径从左端口隧穿到右端口的隧穿振幅。以  $G^\uparrow$  为例，如图 3-2b 所示， $T_1^\uparrow$  是通过路径  $ab$  的隧穿振幅， $T_3^\uparrow$

是通过路径  $cgb$  的隧穿振幅，等等。为了看的更清楚可以取  $\theta_L = \theta_R = 0$ ，此时  $T_1^\uparrow = G^{r\uparrow\uparrow} \sqrt{(1+P)/2T_1^L} \sqrt{(1+P)/2T_1^R} e^{i\phi_{so}}$ ， $T_3^\uparrow = G^{r\downarrow\uparrow} \sqrt{(1+P)/2T_3^L} \sqrt{(1+P)/2T_1^R} e^{i\phi_{so}}$

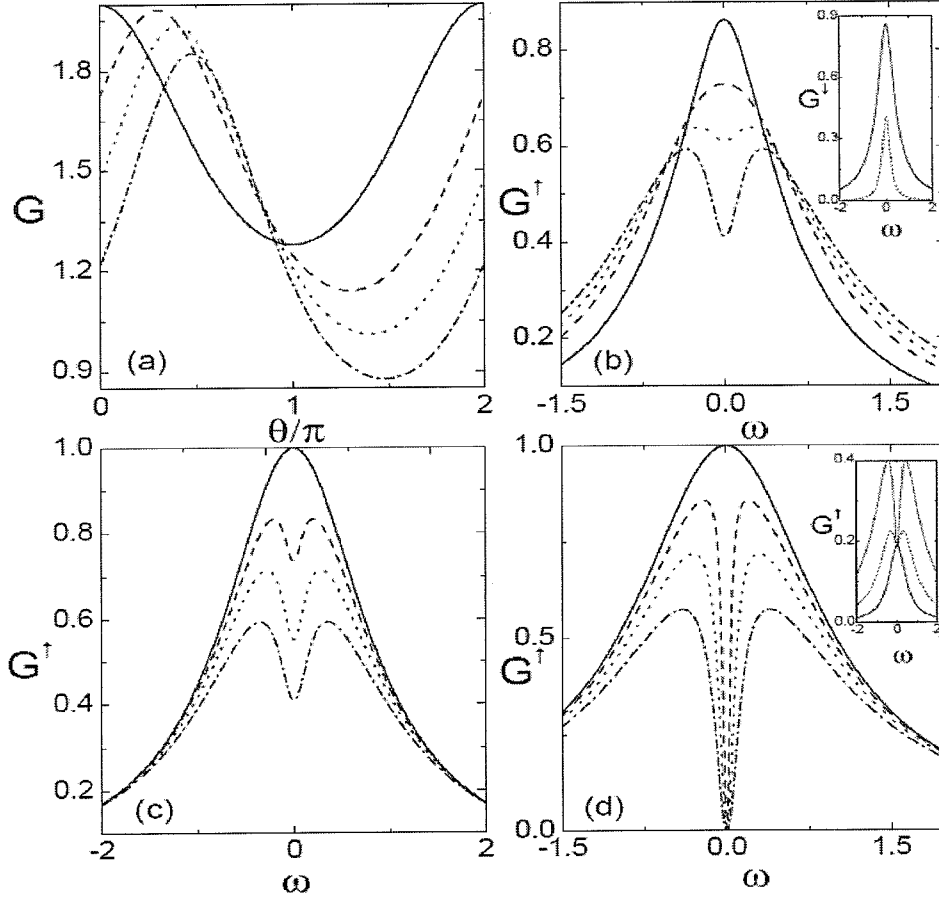


图3-3 自旋翻转隧穿只发生在左边隧道结 ( $T_4^L = T_3^R = T_4^R = 0$ ) 以及量子点中没有 Rashba 自旋轨道耦合情况下的线性电导谱  $G$  和  $G^\sigma$  在不同参数下的变化。(a) 总电导对相对磁化方向夹角  $\theta$  的依赖，端口极化度固定为  $P=0.8$ ， $T_3^L$  取不同值；(b) 在平行磁化构型中 ( $\theta_L = \theta_R = 0$ ) 不同端口极化度  $P$  时的  $G^\uparrow$  的电导谱，固定  $T_3^L = 0.8$ 。插图给出了  $P=0.2$  和  $0.8$  时对应的  $G^\downarrow$ ；(c)  $P=0.8$  时和 (d)  $P=1$  时在平行磁化构型中不同  $T_3^L$  时  $G^\uparrow$  的变化。插图给出了在反平行构型中  $T_3^L = 0, 0.4, 0.8$  时相应的情况。在 (a), (c), (d) 中的实线，短线，点线，点划线分别对应于  $T_3^L = 0, 0.4, 0.6, 0.8$ ，而在 (b) 中对应  $P = 0, 0.4, 0.6, 0.8$ 。所有图中均有  $\varepsilon_0 = 0$  和  $T_1^L = T_1^R = 1$ 。

显然这两项正好对应路径  $ab$  和  $cgb$  的隧穿振幅。这里我们列出所有对  $G^\uparrow$  有贡献的隧穿路径:  $T_1^\uparrow \square ab$ ,  $T_2^\uparrow \square cf$ ,  $T_3^\uparrow \square cgb$ ,  $T_4^\uparrow \square ahf$ ,  $T_5^\uparrow \square ae$ ,  $T_6^\uparrow \square cj$ ,  $T_7^\uparrow \square cge$ ,  $T_8^\uparrow \square ahj$ 。前四项对应自旋向上的电子隧穿到右端口中的自旋向上态的四条路径, 它们彼此间相互干涉, 而后四项对应于自旋向上的电子隧穿到右端口中自旋向下的态的路径, 同样彼此相互干涉。尽管量子点里并没有自旋向上和向下态之间的电子直接跃迁机制, 但路径  $g$  和  $h$  仍然存在, 这两条路径对应于量子点中的电子通过端口转移到量子点中自旋相反态的过程<sup>[119]</sup>。例如, 一个电子通过路径  $g$  隧穿, 实际上代表着电子从量子点中的自旋向下态隧穿到左端口后再隧穿到量子点中自旋向上的态上 (路径  $ca$  和  $id$ ), 或隧穿到右端口再隧穿到自旋向上的态上 (路径  $je$  和  $fb$ )。这也可以从  $G^{r\uparrow}$  的表达式中看出, 这一项描述的正是路径  $g$ 。  $G^{r\uparrow}$  正比于  $\Gamma_{12} = \Gamma_{12}^{L\uparrow} + \Gamma_{12}^{L\downarrow} + \Gamma_{12}^{R\uparrow} + \Gamma_{12}^{R\downarrow}$  ( $|\Gamma_{12}^{\alpha\sigma}| = \sqrt{\Gamma_{11}^{\alpha\sigma}\Gamma_{22}^{\alpha\sigma}}$ ), 而这四项正对应于路径  $ca$ ,  $id$ ,  $je$ ,  $fb$ 。

按照图 3-3b 和图 3-3c 中取的参数,  $T_1^\uparrow$ ,  $T_3^\uparrow$ ,  $T_6^\uparrow$ , 和  $T_8^\uparrow$  对  $G^\uparrow$  有贡献, 而只有  $T_6^\downarrow$  对  $G^\downarrow$  有贡献, 所以有

$$G^\uparrow = (1+P)^2 \left| G^{r\uparrow} T_1^L T_1^R + G^{r\downarrow} T_3^L T_1^R \right|^2 / 4 + (1+P)(1-P) \left| G^{r\downarrow} T_3^L T_1^R + G^{r\uparrow} T_1^L T_1^R \right|^2 / 4 \quad (3-16)$$

$$G^\downarrow = (1-P)^2 \left| G^{r\downarrow} T_1^L T_1^R \right|^2 / 4 \quad (3-17)$$

因此  $G^\downarrow$  在  $\varepsilon_0$  处总是为电导峰。当  $P$  趋近于 1 时,  $G^\uparrow$  的表达式中的第一项占主导, 所以图 3-3c 中的现象是路径  $ab$  和路径  $cgb$  的干涉的结果。从  $G^r$  的表达式中可以看出在共振能级处, 两条路径有相位差  $\pi$ , 所以干涉的结果造成电导谱中出现了谷。当  $T_3^L / T_1^L$  接近 1 时,  $|T_3^\uparrow|$  的值接近  $|T_1^\uparrow|$ , 相消干涉变的更强。在非共振能量处,  $T_1^\uparrow$  和  $T_3^\uparrow$  的相位差小于  $\pi$  但仍然大于  $\pi/2$ , 所以当  $T_3^L > 0$  时, 增加的隧穿路径  $cgb$  总是使  $G^\uparrow$  减少, 尤其是在共振能级处。进一步, 如果取  $P=1$ , 这两条路径在能量为  $\varepsilon_0$  处刚好有相同的幅度, 所以完全相消干涉出现了, 这在图 3-3d 中可以看到。注意到现在  $G^\downarrow = 0$ ,  $G = G^\uparrow$ , 这表明在强自旋极化的系统中, 很弱的自旋翻转散射就可以导致在共振能级处电导的完全抑制。实际上, 我们也研究过当  $T_4^L$  和  $T_4^R$  为有限值时, 仍然会出现对  $G^\uparrow$  和  $G^\downarrow$  的完全抑制。但是当  $T_3^R$  同时也非零时, 情况就完全不同了, 后面会讨论这种情况。

当两个端口的磁化方向夹角  $\theta$  不为零时, 电导谱中的谷仍然存在。图 3-3d

的插图中给出了 $\theta = \pi$ 时 $G^\uparrow$ 的谱。随着 $T_3^L$ 增加,电导谷出现,但是 $G^\uparrow$ 的值随 $T_3^L$ 的增加而增加。其原因在于有限的 $T_3^L$ 等效于转动了左端口的磁化方向,减少了相对磁化方向 $\theta$ ,因此使电导增加。当考虑 Rashba 自旋轨道耦合效应后,电导被抑制,如图 3-4a 所示。可以看到当 Rashba 相因子 $\phi_{so}$ 从 0 增加到 $\pi/2$ 时,共振能级处的电导谷变成了一个平坦的峰,而非共振能级处的电导被极强的抑制。这是因为 Rashba 自旋轨道耦合改变了各条隧穿路径的相对相位,从公式 (3-14) 中可以看出。所以通过调节外场改变 Rashba 相因子,各条路径之间的干涉情况随之改变,进而可以调制电导谱。

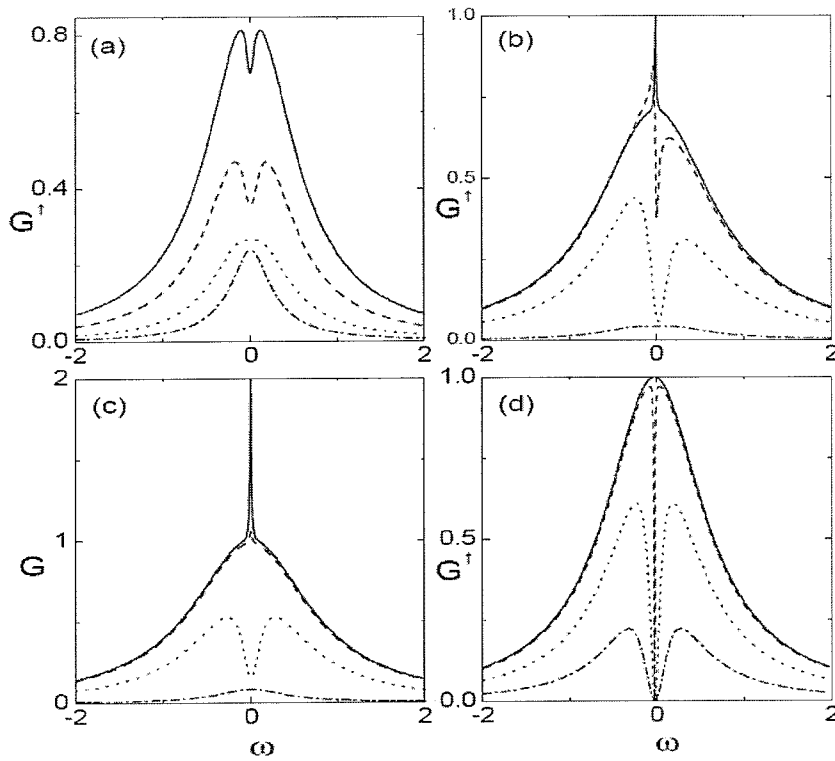


图3-4 Rashba自旋轨道耦合对线性电导谱 $G$ 和 $G^\uparrow$ 的影响。(a)Rashba相因子 $\phi_{so}$ 不同时的 $G^\uparrow$ 。 $P=0.8$ ,  $T_3^L=T_4^L=T_4^R=0$ ,  $T_3^R/T_1^L=0.8$ ,  $\theta_L=2\pi/3$ ,  $\theta_R=0$ ; (b)平行磁化构型中的 $G^\uparrow$ , 取 $P=0.4$ ,  $T'/T=0.8$ 。相应的总电导 $G$ 的情况在(c)中给出; (d)平行磁化构型中的 $G^\uparrow$ , 取 $P=1$ ,  $T'/T=0.6$ 。在(a)中的实线, 短线, 点线, 点划线分别对应于 $2\phi_{so}=0, \pi/2, 3\pi/4, \pi$ , 而在(b), (c), (d)中对应 $2\phi_{so}=0, \pi/8, \pi/2, \pi$ 。所有图中均有 $T_1^L=T_1^R=\sqrt{2}/2$ 。

接下来研究  $T_3^L = T_4^L = T_3^R = T_4^R \equiv T'$  的情况，即左右隧道结中均存在磁杂质，并且磁杂质对自旋向上和向下电子的作用相同。同时也假设  $T_1^L = T_1^R \equiv T$ ，并且记  $T^2$  为  $\Gamma$ ， $T'^2/T^2$  为  $\gamma$ 。图 3-5a 给出了当两个端口磁化方向平时时，不同  $\gamma$  对应的电导谱。当  $\gamma=0$ ，公式 (3-14) 变为

$$G^\uparrow = \frac{(1+P)^2 \Gamma^2 / 4}{(\omega - \varepsilon_0)^2 + (1+P)^2 \Gamma^2 / 4} \quad (3-18)$$

所以  $G^\uparrow$  在  $\varepsilon_0$  处有一个宽度为  $(1+P)\Gamma$  的完全共振峰，见图 3-5a 中的实线。随着  $\gamma$  增加，电导峰变宽，同时在  $\varepsilon_0$  处出现了一个更尖锐的峰，其宽度随  $\gamma$  增加而变窄。当  $\gamma=1$  有

$$G^\uparrow = \frac{2(1+P)\Gamma^2}{(\omega - \varepsilon_0)^2 + 4\Gamma^2} \quad (3-19)$$

此时窄峰消失，而宽峰的宽度和高度分别变为  $4\Gamma$  和  $(1+P)/2$ 。 $G^\downarrow$  与  $G^\uparrow$  有相似的特征，所以不再给出相应的  $G^\downarrow$  的图像。文献[119]中讨论过类似的现象，在那篇工作中的参数  $\alpha$  与这里的参数  $\gamma$  起到相同的作用。与他们的结果相比较后即可知道，图 3-5a 中窄峰的出现是由于量子点中的电子通过端口实现跃迁的过程（通过路径  $g$  和  $h$ ）造成的。这两条路径是由有限的  $T'$  引起的。当  $\gamma$  接近 1 时，所有的路径对电导都有贡献，并具有几乎相同的振幅，而它们之间的干涉使得窄峰形成。实际上，当  $\gamma$  接近 1 时，公式 (3-14) 可以近似地写为

$$G^\uparrow \approx \frac{(1+P)^2(1+\gamma)^2 \Gamma^2 / 4 + (1-P^2)\Gamma^2}{(\omega - \varepsilon_0)^2 + (1+\gamma)^2 \Gamma^2} + \frac{\left[ (1+\gamma)^2 - (1+P)^2(1+\gamma)^2 / 4 - \gamma(1-P^2) \right] (1-P^2)^2 (1-\gamma)^4 \Gamma^2 / 16(1+\gamma)^4}{(\omega - \varepsilon_0)^2 + (1-P^2)^2 (1-\gamma)^4 \Gamma^2 / 16(1+\gamma)^2} \quad (3-20)$$

很明显，该公式表明此时的电导谱是由一个宽度为  $2(1+\gamma)\Gamma$  的宽峰和宽度为  $(1-P^2)(1-\gamma)^2 \Gamma / [2(1+\gamma)]$  的窄峰叠加而成。图 3-5b 中给出了不同  $P$  时的  $G^\uparrow$ ，可以看到当  $G^\uparrow$  的值恰好等于  $(1+P)/2$  时（宽峰的顶点），窄峰开始出现，其宽度随  $P$  增加而减少。

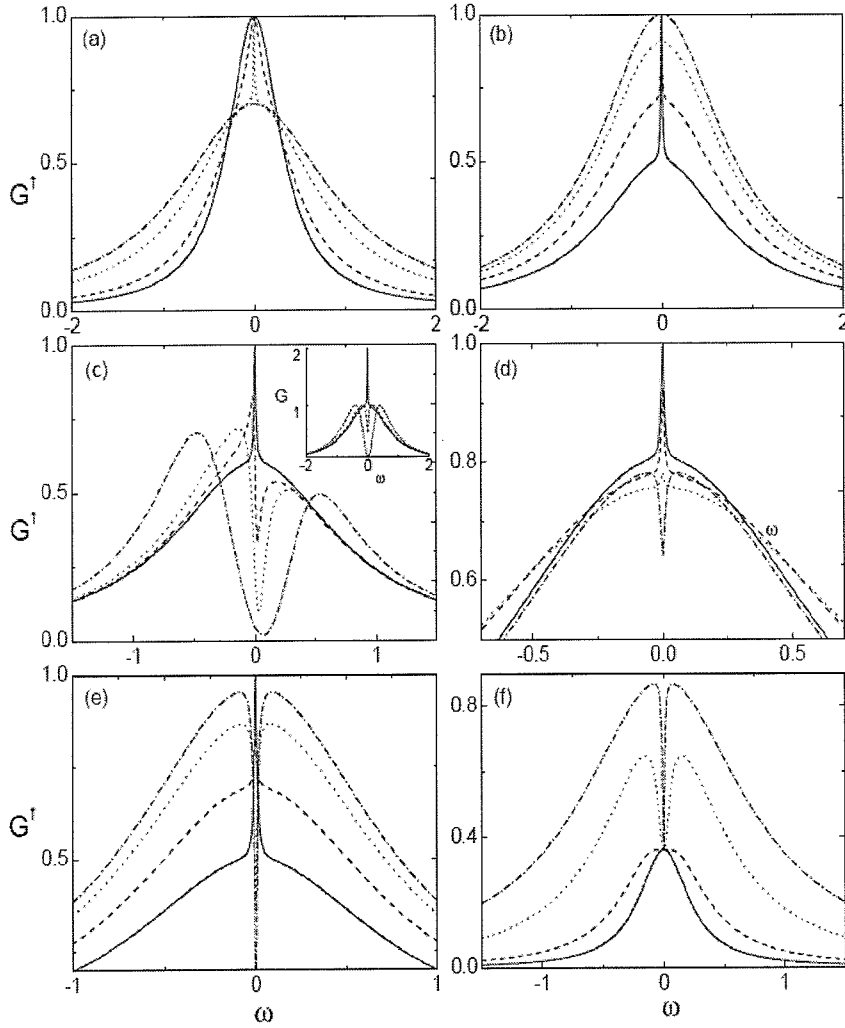


图3-5 不考虑Rashba自旋轨道耦合效应时不同参数下的线性电导谱  $G$  和  $G^\uparrow$ 。(a)不同  $T'/T$  时的  $G^\uparrow$ ,  $\theta_R = 0$ ,  $P = 0.4$ ; (b)不同极化度  $P$  时的  $G^\uparrow$ ,  $\theta_R = 0$ ,  $T'/T = 0.8$ ; (c)不同能级间距  $\Delta\varepsilon$  时的  $G^\uparrow$ , 取  $P = 1$ ,  $T'/T = 0.6$ 。在(a)中的实线, 短线, 点线, 点划线分别对应于  $2\phi_{SO} = 0, \pi/2, 3\pi/4, \pi$ , 而在(b), (c), (d)中对应  $2\phi_{SO} = 0, \pi/8, \pi/2, \pi$ 。所有图中均有  $T_1^L = T_1^R = \sqrt{2}/2$ 。

当能级不再是自旋简并时,  $\varepsilon_0$  处的不同路径间有相位差, 所以可以预期共振峰会被抑制, 这在图 3-5c 中可以看到。当两个能级的能量差增加时,  $G^\uparrow$  谱中的窄峰很快变为电导谷, 而两个低峰出现在  $\varepsilon_\uparrow$  和  $\varepsilon_\downarrow$  处。因为  $T > T'$ , 在  $\varepsilon_\uparrow$  处的峰比  $\varepsilon_\downarrow$  处的峰高。在插图中, 总电导有类似的现象, 唯一不同的是共振峰分裂

成两个具有相同高度的峰。

当两个端口的磁化方向不共线时，情况有所改变，这在图 3-5d 到图 3-5f 中可以看出。在图 3-5d 中，随着相对磁化方向夹角  $\theta$  增加，宽峰仍然存在，而窄峰被抑制，当  $\theta = \pi$  时最终形成了一个反共振峰。实际上，只有当  $P$  较大时这种现象才会出现。这可以在图 3-5e 中看到：对于较小的  $P$ ，当  $\theta = \pi$  时，窄峰仍然存在。原因是当  $P$  比较小时，相对磁化方向夹角  $\theta$  对输运性质影响很小。随着  $P$  增加，电导峰变成了反共振。电导谱的具体结构从公式 (3-14) 中可看出，在  $\theta = \pi$  和  $\gamma$  趋近 1 的时候从公式 (3-14) 得到

$$G^\uparrow \approx \frac{\left[ (1+P)^2 \gamma + (1-P^2)(1+\gamma)^2 / 2 \right] \Gamma^2}{(\omega - \varepsilon_0)^2 + 4\Gamma^2} + \frac{\left[ 1 - P^2 - (1+P)^2 \gamma / 4 - (1-P^2)(1+\gamma)^2 / 8 \right] (1-\gamma)^4 \Gamma^2 / 64 \gamma}{(\omega - \varepsilon_0)^2 + (1-\gamma)^4 \Gamma^2 / 64} \quad (3-21)$$

第二项对应于窄电导峰（谷）。当  $\gamma$  接近 1 时，在  $\varepsilon_0$  处的窄峰（谷）峰值为  $(1+P)(1-3P)$ ，当  $P$  较大时峰值变为负数。所以我们得出结论，当  $P$  和  $\theta$  为有限值时，完全共振隧穿消失，当  $P$  和  $\theta$  较大时，共振峰可以变成反共振峰。图 3-5f 给出了  $\theta = \pi$  时的  $G^\uparrow$  随  $\gamma$  的变化。此时除了在  $\varepsilon_0$  处， $G^\uparrow$  随  $\gamma$  增加而增加。当  $\gamma$  接近 1 时，反共振出现，这与  $\theta = 0$  时的情况类似。

考虑 Rashba 自旋轨道耦合效应之后，每条隧穿路径得到了一个附加的相位因子  $e^{\pm i\phi_{so}}$ ，所以原来的相长干涉消失，在图 3-5a 中的共振峰被抑制。在图 3-4b 中，当  $\phi_{so}$  从 0 增加时，共振峰很快变成了谷，并且两个不对称的更低的峰出现在它的两侧，这与能级自旋简并度被破坏时的情况类似。随着  $\phi_{so}$  继续增加， $G^\uparrow$  被进一步抑制，当  $2\phi_{so} = \pi$  时，整个电导谱被完全地抑制了。相应的总电导的变化情况在图 3-4c 中给出，在这幅图中可以更清楚的看到共振峰的抑制。在图 3-4d 中我们取  $P=1$ 。正如之前所说的，此时窄峰消失，但是完全共振隧穿峰仍然存在。当  $\phi_{so}$  不为零，完全共振隧穿峰会突然转变成零隧穿谷，表明 Rashba 自旋轨道耦合使得各条隧穿路径间有相位差，导致相长干涉变成完全相消干涉。

### 3.3.2 二能级情况

现在讨论量子点中有两个能级的情况，此时需要考虑 Rashba 能级间自旋翻

转跃迁效应。实际上, 如果 Rashba 自旋翻转跃迁效应的强度  $t$  比量子点-端口耦合强度小, 前面讨论的所有单能级情况下的现象都可以在两能级情况中重现。例如, 在图 3-6a 的插图中给出了相应于图 3-5a 的二能级系统的情况。在单能级情况, 没有能级内的自旋翻转跃迁, 所以整个系统是单连通的, 而在两能级系统中, 由于能级间的自旋翻转跃迁, 系统的拓扑结构改变了。在某种意义上来说, 两能级系统与有两个平行耦合量子点的 Aharonov-Bohm 干涉仪类似<sup>[120-122]</sup>, 其中 Rashba 相因子与外磁场的作用类似。所以我们预期 Rashba 相移和 Rashba 自旋翻转跃迁效应的共同作用可以引起一些在单能级情况中没有的现象。

由于能级间的自旋翻转跃迁, 在两能级系统中的隧穿路径远多于单能级系统的隧穿路径, 所以此时再用隧穿振幅的图像来描述这个系统会很不方便。这里我们采用量子点的分子能级表象来描述这个系统, 这个表象由将量子点的哈密顿量对角化得到:

$$H_d = \varepsilon_{1\uparrow} d_{1\uparrow}^\dagger d_{1\uparrow} + \varepsilon_{2\downarrow} d_{2\downarrow}^\dagger d_{2\downarrow} - t d_{1\uparrow}^\dagger d_{2\downarrow} - t d_{2\downarrow}^\dagger d_{1\uparrow} + \varepsilon_{1\downarrow} d_{1\downarrow}^\dagger d_{1\downarrow} + \varepsilon_{2\uparrow} d_{2\uparrow}^\dagger d_{2\uparrow} + t d_{1\downarrow}^\dagger d_{2\uparrow} + t d_{2\uparrow}^\dagger d_{1\downarrow} \quad (3-22)$$

从这个表达式可以很清楚地看到, 哈密顿量可以分为包含  $(d_{1\uparrow}, d_{2\downarrow})$  的部分[式 (3-22) 第一行]和包含  $(d_{1\downarrow}, d_{2\uparrow})$  的部分[式 (3-22) 第二行], 所以可对这两部分分别对角化。施加两个幺正变换:

$$\begin{pmatrix} d_{2\downarrow} \\ d_{1\uparrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta_1 & \sin \beta_1 \\ -\sin \beta_1 & \cos \beta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{1+} \\ d_{1-} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} d_{2\uparrow} \\ d_{1\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta_2 & -\sin \beta_2 \\ \sin \beta_2 & \cos \beta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{2+} \\ d_{2-} \end{pmatrix} \quad (3-23)$$

其中  $\beta_1 = \frac{1}{2} \arctan[2t/(\varepsilon_{2\downarrow} - \varepsilon_{1\uparrow})]$ ,  $\beta_2 = \frac{1}{2} \arctan[2t/(\varepsilon_{2\uparrow} - \varepsilon_{1\downarrow})]$ ,  $H_d$  可以写为对角化的形式

$$H_d = \varepsilon_{1+} d_{1+}^\dagger d_{1+} + \varepsilon_{1-} d_{1-}^\dagger d_{1-} + \varepsilon_{2+} d_{2+}^\dagger d_{2+} + \varepsilon_{2-} d_{2-}^\dagger d_{2-} \quad (3-24)$$

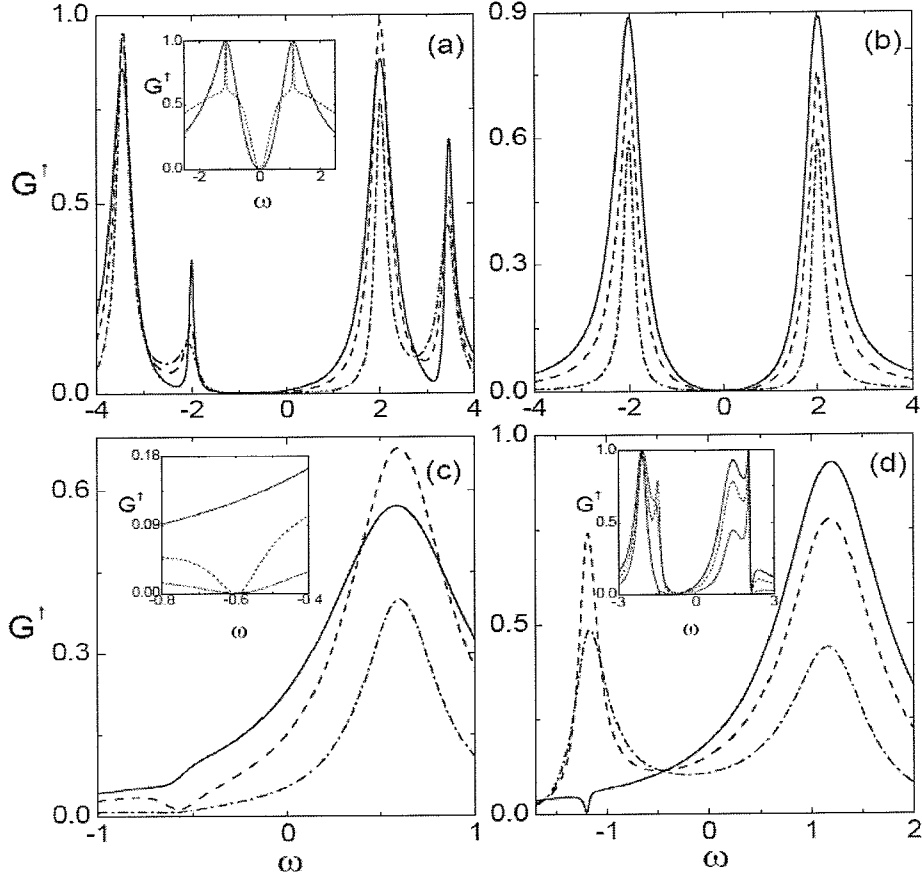


图3-6 二能级系统中线性电导  $G^\uparrow$  受Rashba自旋轨道耦合的影响。实线，短线，点划线分别对应于  $2\phi_{so} = 0, \pi/2, \pi$ 。(a)非简并能级系统中的  $G^\uparrow$ 。  $\varepsilon_{1\uparrow} = -\varepsilon_{2\downarrow} = -3$ ,  $\varepsilon_{1\downarrow} = -\varepsilon_{2\uparrow} = -1$ ,  $P = 0.8$ ,  $\theta_L = \theta_R = \pi/2$ ,  $t = \sqrt{3}$ ,  $T_{11}^L = T_{21}^L = 0.5$ ,  $T_{11}^R = T_{21}^R = 1/\sqrt{2}$ ,  $T_{n2}^\alpha = T_{n3}^\alpha = 0$ 。相应的简并能级系统中的情况 ( $\varepsilon_{1\uparrow} = \varepsilon_{1\downarrow} = -1$ ,  $\varepsilon_{2\uparrow} = \varepsilon_{2\downarrow} = 1$ ) 在(b)中给出。插图给出了相应于图3-5a的二能级情况的图, 取  $\varepsilon_{1\uparrow} = \varepsilon_{1\downarrow} = -1$ ,  $\varepsilon_{2\uparrow} = \varepsilon_{2\downarrow} = 1$ ,  $P = 0.2$ ,  $t = 0.5$ ,  $T = 1$ ,  $T' = 0.2$  和  $0.8$ ; (c)  $1\pm$  态脱离系统后的  $G^\uparrow$  电导谱。  $\varepsilon_{1\downarrow} = -\varepsilon_{2\uparrow} = -0.3$ ,  $\theta_L = \theta_R = 0$ ,  $P = 0.4$ ,  $t = 0.3\sqrt{3}$ ,  $T_{12}^\alpha = T_{21}^\alpha = 1/\sqrt{3}$ ,  $T_{13}^\alpha = T_{24}^\alpha = 1/3$ 。插图给出了  $P = 1$  时的对应的情况。(d) 与(c) 相同, 除了  $\varepsilon_{1\downarrow} = -\varepsilon_{2\uparrow} = -0.6$ ,  $\theta_L = \pi/2$ ,  $\theta_R = 0$ ,  $P = 1$ ,  $t = 0.6\sqrt{3}$ 。插图给出了当  $1\pm$  态重新耦合到系统上的情况, 取  $\varepsilon_{1\uparrow} = -1.7$ ,  $\varepsilon_{1\downarrow} = -0.7$ ,  $\varepsilon_{2\uparrow} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{2\downarrow} = 1.7$ 。

这里  $\varepsilon_{1\pm} = (\varepsilon_{1\uparrow} + \varepsilon_{2\downarrow} \pm \sqrt{(\varepsilon_{2\downarrow} - \varepsilon_{1\uparrow})^2 + 4t^2})/2$ ,  $\varepsilon_{2\pm} = (\varepsilon_{1\downarrow} + \varepsilon_{2\uparrow} \pm \sqrt{(\varepsilon_{2\uparrow} - \varepsilon_{1\downarrow})^2 + 4t^2})/2$  是重整化的系统能级。当系统是自旋简并的, 即  $\varepsilon_{1\uparrow} = \varepsilon_{1\downarrow}$  和  $\varepsilon_{2\uparrow} = \varepsilon_{2\downarrow}$ , 有  $\varepsilon_{1+} = \varepsilon_{2+}$  和  $\varepsilon_{1-} = \varepsilon_{2-}$ , 系统仍是简并的, 因为 Rashba 自旋翻转跃迁效应并不破坏自旋简并。相应的隧穿哈密顿量为

$$H_{T\alpha} = \sum_{k_\alpha \sigma \xi} [T_\xi^{\alpha\sigma} a_{k_\alpha \sigma}^\dagger d_\xi + H.c.], \quad \xi = 1\pm, 2\pm \quad (3-25)$$

耦合系数为

$$\begin{aligned} T_{1+}^{\alpha\sigma} &= -\tilde{T}_{\alpha 1}^{\sigma\uparrow} \sin \beta_1 + \tilde{T}_{\alpha 2}^{\sigma\downarrow} \cos \beta_1 \\ T_{1-}^{\alpha\sigma} &= \tilde{T}_{\alpha 1}^{\sigma\uparrow} \cos \beta_1 + \tilde{T}_{\alpha 2}^{\sigma\downarrow} \sin \beta_1 \\ T_{2+}^{\alpha\sigma} &= \tilde{T}_{\alpha 2}^{\sigma\uparrow} \cos \beta_2 + \tilde{T}_{\alpha 1}^{\sigma\downarrow} \sin \beta_2 \\ T_{2-}^{\alpha\sigma} &= -\tilde{T}_{\alpha 2}^{\sigma\uparrow} \sin \beta_2 + \tilde{T}_{\alpha 1}^{\sigma\downarrow} \cos \beta_2 \end{aligned} \quad (3-26)$$

注意到与单能级情况不同, 现在 Rashba 相因子不再以一个整体相因子来影响这些耦合系数。比如,

$$\begin{aligned} T_{2+}^{\alpha\uparrow} &= -[T_{21}^{\alpha} \cos(\theta_\alpha/2) + T_{24}^{\alpha} \sin(\theta_\alpha/2)] \cos \beta_2 e^{-i\phi_{so}^\alpha} \\ &\quad + [T_{13}^{\alpha} \cos(\theta_\alpha/2) + T_{12}^{\alpha} \sin(\theta_\alpha/2)] \sin \beta_2 e^{i\phi_{so}^\alpha} \end{aligned} \quad (3-27)$$

由于  $|T_\xi^{\alpha\sigma}|^2$  是对于自旋为  $\sigma$  的电子, 量子点中第  $\xi$  个能级和端口  $\alpha$  的耦合强度, 所以 Rashba 相因子可以通过调节  $T_\xi^{\alpha\sigma}$  来调制在  $\varepsilon_\xi$  处的电导峰的宽度和高度, 这个特性在图 3-6a 和图 3-6b 中可以看到。在单能级系统中没有这个效应, 因为单能级系统的拓扑结构很简单。在图 3-6a 中四个能级均不简并, 这可以通过向量子点施加一个外磁场来实现。我们看到由于能级间的自旋翻转跃迁效应, Rashba 相因子可以调节  $G^\uparrow$  中的四个电导峰的宽度和高度。当没有外磁场时, 自旋简并恢复, 四个重整化的能级合并成两个, 如图 3-6b 所示。现在由于  $1+(1-)$  和  $2+(2-)$  能级的重合, 每个峰的细节被抹去了。

最后我们研究一些特定的系统, 在其中 Rashba 自旋轨道耦合可以引起一些有趣的效应。为了使物理图像更清楚, 首先让  $1\pm$  能级脱离系统 ( $T_{1\pm}^{\alpha\sigma} = 0$ )。此时只有态  $2+$  和  $2-$  耦合到两个端口上。当  $\phi_{so} = 0$  时, 可以取特定的参数使得  $T_{2-}^{\alpha\uparrow} = T_{2-}^{\alpha\downarrow} = 0$ 。现在对于自旋向上的电子,  $2-$  态也同样脱离了系统, 所以在  $G^\uparrow$

的电导谱中只有在  $\varepsilon_{2+}$  处有一个电导峰 (见图 3-6c 中的实线)。随着  $\phi_{so}$  增加,  $T_{2-}^{L\uparrow}$  保持为零, 而  $T_{2-}^{R\uparrow}$  不再是零。所以现在 2- 态只通过右端口连接到系统, 此时电子可以通过两条路径隧穿过整个系统: 一条是直接通过 2+ 态隧穿到右端口, 另一条是首先隧穿到 2- 态上, 然后再到右端口。这两条路径有相位差  $\pi$ , 因为当能量为  $\varepsilon_{2-}$  的电子进入和离开 2- 态以后, 它获得了相移  $\pi$  [108,123-125]。所以当  $\phi_{so} > 0$ , 相消的干涉在  $G^\uparrow$  电导谱中能量为  $\varepsilon_{2-}$  处形成了一个电导谷, 如图 3-6c 所示。在  $\varepsilon_{2-}$  处的电导谷值并不会降低到零, 因为自旋向下的电子通过耦合矩阵  $\Gamma^{\alpha\downarrow}$  对  $G^\uparrow$  也有贡献。如果取  $P=1$ , 自旋向下的电子输运消失, 所以在  $\varepsilon_{2-}$  处会发生完全相消干涉, 这在图 3-6c 的插图中可以看到。类似的我们给出图 3-6d, 其中取参数使得当  $\phi_{so}=0$  时,  $T_{2-}^{L\uparrow} > 0$  和  $T_{2-}^{R\uparrow} = 0$ , 所以现在 2- 态通过左端口连接到系统上, 电导谱中出现电导谷。随着  $\phi_{so}$  增加,  $T_{2-}^{R\uparrow}$  变为非零, 电子可以直接通过 2- 态隧穿到右端口, 因此在  $\varepsilon_{2-}$  处产生了一个电导峰。所以 Rashba 相因子可以将零隧穿的电导谷直接转化成共振峰。当 1± 态重新耦合到系统上, 只要这四个能级是非简并的, 那么在  $\varepsilon_{2\pm}$  处  $G^\uparrow$  的行为仍然能保持。这可以在图 3-6d 的插图中看到。另外, 在图 3-6d 中, 通过这四个量子态的各条路径的干涉在  $\varepsilon_{1-}$  和  $\varepsilon_{2+}$  处产生了 Fano 共振峰的结构。由于  $\varepsilon_{2-}$  最靠近  $\varepsilon_{1-}$ , 在  $\varepsilon_{1-}$  的 Fano 共振主要是由通过 2- 和 1- 态的路径间的干涉引起的。从  $T_{\xi}^{\alpha\sigma}$  的表达式我们知道  $T_{1+}^{\alpha\sigma} \approx T_{2-}^{\alpha\sigma}$ ,  $T_{1-}^{\alpha\sigma} \approx T_{2+}^{\alpha\sigma}$ 。由于与端口耦合相对强的能级起到非共振隧穿通道的作用, 而 Fano 共振出现在相对耦合弱的能级处 [120], 所以当  $|T_{1-}^{\alpha\sigma}| \ll |T_{2-}^{\alpha\sigma}|$  时, Fano 共振出现在  $\varepsilon_{1-}$  和  $\varepsilon_{2+}$  处, Breit-Wigner 共振出现在  $\varepsilon_{1+}$  和  $\varepsilon_{2-}$  处, 如图 3-6d 的插图所示。如果自旋简并恢复, 1± 态将与 2± 态重叠, 上述现象将变得很不明显。

### 3.4 小结

本章中我们采用非平衡态格林函数方法导出了铁磁体/量子点/铁磁体系统中的自旋相关的线性电导的表达式。考虑了量子点中的 Rashba 自旋轨道耦合效应和自旋翻转隧穿过程, 并针对单能级量子点和二能级量子点两种情况进行了讨论。在单能级情况中, 在共振能级处, 线性电导谱可以有一个电导峰或电导谷, 这是由自旋翻转隧穿引起的。Rashba 自旋轨道耦合效应可以改变电子干涉的情况, 从而抑制电导。在两能级系统中, Rashba 自旋翻转跃迁使得系统的拓扑结构不同于单能级情况, 其与 Rashba 相移的共同作用可以调节端口与共振能

级间的耦合强度。因此，电导峰的宽度和高度都可以被 Rashba 相移调制，并且在某些特定的系统中 Rashba 相移可以直接导致共振隧穿与反共振隧穿之间的转变<sup>[201]</sup>。

## 第4章 铁磁端/量子点/铁磁端系统中的二极管效应与自旋矩特性

### 4.1 引言

纳米技术的发展推动了对单电子隧穿器件的理论和实验的研究。铁磁隧穿结是最重要的纳米器件之一，在其中发现了隧穿磁阻效应<sup>[126]</sup>。最近，在铁磁金属/量子点/铁磁金属系统中发现了新现象：如果这个系统是不对称的（即左右端口极化度不相同），那么在某个偏压范围内该系统具有与传统电子学中的二极管类似的功效<sup>[127,128]</sup>（本章中我们称这个偏压区域为“阻塞区域”）。其原因是量子点的尺度很小，充电能可以比热能大很多，从而会引起库仑阻塞效应<sup>[129-131]</sup>。在铁磁金属/量子点/铁磁金属系统中，如果作为源极的端口的极化度较小而作为漏极的端口的极化度较大，那么多数自旋态的电子的态密度大，等效于它与端口的耦合强，而少数自旋态的电子与右端口（漏极）的耦合最弱，如图 4-1a 所示，其中箭头的粗细代表耦合的强弱。假设自旋向上的电子为多数自旋电子，当电子从左端向右端输运时，一旦自旋向下的电子占据量子点，由于它与右端口耦合很弱，因此很难隧穿到漏极。如果此时偏压还不足以克服库仑排斥作用，那么自旋向上的电子无法进入量子点，使得电流被阻塞。如果漏极由半金属材料制成，在这种情况下电流甚至可以降低到零。当偏压反转时，电子从右端向左端输运，此时自旋向下的电子很难进入量子点，并且当它进入量子点后也比较容易隧穿出去，因为自旋向下的电子与左端口耦合较强。所以此时电流不被阻塞。这就是铁磁二极管的工作原理。前面的分析适用于两个铁磁端口磁化方向共线的情况，事实上，当两个端口磁化方向非共线时，二极管效应会被削弱<sup>[132-134]</sup>。另外，最近 Souza 等人<sup>[135]</sup>发现，如果将该系统中的极化度较小的铁磁金属端口替换成普通金属端口，那么在阻塞区域不仅有电流的二极管效应，还会有自旋流的二极管效应，即电流的自旋极化度在正偏压（电子从普通金属端流向铁磁端）时为零，而在负偏压时为有限值。这种效应称为自旋二极管效应。

在分子器件中，关于电流整流已经开展了很深入的研究<sup>[136-138]</sup>，而铁磁二极管效应也可以视为一种电流整流。在空间不对称的系统中，电流整流可以通过施加正和负的偏压来实现。在自旋电子学中，自旋流整流有很大的潜在应用价