

中国科学技术大学 博士学位论文



论文题目： 受限半导体纳米系统中自旋动力学
以及自旋调控的理论研究

作者姓名： 程晋罗

学科专业： 凝聚态物理

导师姓名： 吴明卫 教授

完成时间： 二零零七年十一月

中国科学技术大学物理系

二零零七年十一月



University of Science and Technology of China

Spin Dynamics and Spin Manipulation in Confined Semiconductor Nanostructures

A DISSERTATION

submitted in conformity with the requirement for the degree of

DOCTOR of PHILOSOPHY

in Physics

by

Jin-Luo Cheng

November, 2007

Advisor : Prof. Dr. Ming-Wei Wu

Major : Condensed Matter Physics

中国科学技术大学学位论文相关声明

本人声明所提交的学位论文，是本人在导师指导下进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除已特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含任何他人已经发表或撰写过的研究成果。与我一同工作的同事对本研究所做的贡献均已在论文中作了明确的说明并表示了谢意。

本人授权中国科学技术大学拥有学位论文的部分使用权，即：学校有权按有关规定向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅，可以将学位论文编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。

保密的学位论文在解密后也遵守此规定。

作者签名：程晋罗

2007年11月24日

摘要

自旋电子学作为一个由多学科交叉而形成的新兴的领域，以自旋自由度为研究对象并以发展新型的可以替代传统电子学器件的自旋电子学器件为目标，在近十年之间取得了令人瞩目的进展。在实现自旋电子学器件中有两个非常重要的问题，即如何延长自旋去相干时间和扩散长度，以及如何有效的控制自旋；因此在物理上理解自旋弛豫/去相位和自旋扩散/输运过程是非常必要的。本论文主要内容集中在受限半导体纳米结构如量子点、量子线以及量子阱系统中的自旋弛豫/去相位过程以及量子阱系统的自旋扩散/输运过程的研究，同时研究了 THz 场对二维电子气中自旋的调控作用，以及外禀自旋霍尔效应的动力学过程。

本文首先简单的回顾自旋电子学的发展，主要集中在半导体系统中自旋极化的产生、探测以及在半导体内部的弛豫和输运过程。然后我们回顾了半导体系统中对自旋弛豫过程有着重要影响的自旋轨道耦合的物理来源，给出如何从 8×8 Kane 模型中得到 Dresselhaus、Rashba 以及 Elliott-Yafet (EY) 自旋轨道耦合。然后给出电子系统在三维系统以及约束系统中哈密顿量的具体表示形式，其中包括电子-杂质散射、电子-声子散射以及电子-电子散射。紧接着我们回顾了导致自旋弛豫的各种机制以及理论上的处理方法。对于简单的两能级系统，可以使用费米黄金规则和运动方程计算自旋弛豫/去相位时间。相比较而言，运动方程方法可以直接给出自旋极化的时间演化过程，可以扩展到包括了很多能级的系统中的自旋弛豫过程。而对于自旋系综，导致自旋弛豫/去相位机制主要包括 Elliott-Yafet 机制、D'yakonov-Perel' (DP) 机制、Bir-Aronov-Pikus (BAP) 机制、和原子核之间的超精细相互作用导致的自旋弛豫以及非均匀扩展引起的自旋弛豫/去相位机制。然后我们回顾了使用动力学自旋 Bloch 方程在自旋弛豫/扩散方面的研究。

在对单体问题的研究中，我们先考虑的是量子点系统中的自旋弛豫过程。用完全对角化的方法求出包括了自旋轨道耦合在内的量子点系统的波函数后，利用费米黄金规则求出在不同的能量本征态之间由电子-声学声子导致的弛豫时间。我们发现在 GaAs 量子点中电子-压电声子导致的自旋弛豫占主导地位。我们的结果指出以往所采用微扰方法仅仅求解 Zeeman 能级之间的自旋弛豫时间是不充分的：他们所没有考虑的自旋轨道耦合引起的能量二阶修正、高能级对低能级的波函数的修正，对自旋弛豫过程都有着非常重要的贡献。同时详细研究了自旋弛豫时间对磁场、量子点半径、量子阱的阱宽以及温度的依赖关系。接着我们研究了强 THz 场对二维电子气的调控作用。我们用 Floquet 定理严格求解包括自旋轨道耦合的薛定谔方程，利用求出的波函数得到态密度以及自旋极化密度。我们发现，THz 场对态密度和自旋极化密度有非常大的影响，并

且可以在垂直于 THz 电场方向上诱导出一个 THz 的磁矩。我们指出这个效应可以用来把 THz 的电信号转化成 THz 的磁信号。

在对多体问题的研究中，通过求解动力学自旋 Bloch 方程，我们研究了量子线和量子阱系统中的自旋弛豫/去相位与自旋扩散/输运问题。首先我们研究了 InAs 量子线中由可以通过电场调节的 Rashba 自旋轨道耦合所导致的自旋弛豫过程。我们发现在外加磁场方向垂直于量子线生长方向时，沿着量子线方向的自旋极化的自旋弛豫时间可以由界面电场调控；而当磁场沿着量子线方向，垂直于量子线生长方向的自旋极化的弛豫时间与界面电场方向无关。同时，在量子线系统中的非均匀扩展可以用自旋进动频率的均方差很好的描述。接着我们在等强度的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的 GaAs 量子阱中研究了不同的统计平衡态—基于 Helix 态的 Helix 统计与基于 Collinear 态的 Collinear 统计—对自旋弛豫的影响。我们发现这两种统计下的自旋弛豫时间几乎没有差别，并且自旋极化方向表现出很强的各向异性。在不考虑 Dresselhaus 自旋轨道耦合三次项的贡献时，沿着 (110) 方向的自旋弛豫时间是无穷长而其他方向的却非常的短；即使考虑了三次项的贡献，它也要远比其他两个方向的长。我们仔细讨论了沿着 (110) 方向的自旋弛豫时间随着外界条件的变化。

在输运问题中，我们采用一套新的数值计算方法自洽求解空间不均匀的动力学自旋 Bloch 方程及泊松方程，在计入所有散射特别是电子-电子散射以后重新研究在 n 型 (001)-GaAs 量子阱的自旋扩散问题。我们发现即使没有外磁场时，自旋极化也会在扩散方向上有振荡，并且振荡周期与外加电场无关。在散射足够强的时候—内禀的散射如电子-电子散射就已经满足了这个条件—不同动量的电子自旋具有相同的振荡频率以及相位，导致横向的自旋注入长度和系综的横向注入长度相等。进一步我们研究了自旋扩散/输运长度的散射、温度、量子阱宽、磁场以及电场的依赖关系。接着我们研究了强度相近的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合共同作用下各向异性对自旋运输的影响。我们发现此时自旋扩散长度不仅仅对自旋极化方向，而且对自旋注入方向都表现出很强的各向异性。在不考虑 Dresselhaus 自旋轨道耦合的三次项的贡献并且线性的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合强度相同时，如果自旋极化方向沿着 (110) 而注入方向任意，或者注入方向沿着 $(\bar{1}10)$ 而自旋极化方向任意，自旋扩散长度都是无穷长。在考虑了三次项的贡献以后，这些自旋扩散长度虽然变为有限值并且随着温度和电子浓度减小，但是各向异性的性质仍然被保留下来。另外，在改变 Rashba 强度时，由于 Dresselhaus 自旋轨道耦合三次项的贡献，自旋扩散长度的最大值出现在 Rashba 强度略小于 Dresselhaus 强度时，而不是文献中所认为的出现在两者相等处。

最后我们研究了 n 型 (001)-GaAs 对称量子阱中外禀自旋霍尔效应的动力学过程。我们得到稳态的外禀自旋霍尔电导在仅仅考虑线性项的自旋轨道耦合时为零，而在考虑了三次项的自旋轨道耦合后为一个非常小的值。这是由 Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合引起的自旋进动引起的。同时，自旋进动和偏转散射的共同作用可以在半导体的体内产生极化方向在平面内的自旋极化，并且这种自旋极化和流致极化具有完全不一样的性质，包括具有不同的自旋极化方向，量子阱的阱宽和杂质浓度的依赖关系。

关键词: 自旋弛豫/去相位 自旋扩散/输运 自旋轨道耦合 量子点 量子线 量子阱 含时系统

Abstract

Spintronics, whose central theme is the active manipulation of spin degree of freedom in solid-state system, is a multidisciplinary field which aims to develop a new kind of spintronic devices to replace the traditional electronic devices, and has achieved much progress in past decade. Two of the important issues on realizing the spintronic device are how to prolong the spin decoherence time and the spin diffusion length, and how to manipulate the spin efficiently. So it is necessary to understand the mechanism of the spin relaxation/dephasing and the spin diffusion/transport. In this dissertation, we focus on the spin relaxation/dephasing in quantum dots, quantum wires and quantum wells, and the spin diffusion/transport in quantum wells. We also investigate the effect of the intense THz field on the two dimensional electron gas with spin orbit coupling, and the kinetic properties of the extrinsic spin Hall effect.

We first give a simple review of the spintronics on spin generation, spin detection and spin relaxation/transport inside semiconductors. Then we give a detailed derivation of the physical origin of the spin orbit coupling in Zinc-blende semiconductors which plays an very important role in spin relaxation. We derive the Dresselhuas term, the Rashba term and the Elliott-Yafet spin orbit coupling, from the 8×8 Kane model. Then we give the exactly expression of the electron Hamiltonian for bulk and two dimension systems, including the electron-impurity scattering, the electron-phonon scattering and the electron-electron Coulomb scattering. All the spin relaxation mechanisms and the theoretical approaches are reviewed: For the two-level system, the relaxation time can be calculated directly by the Fermi golden rule or the time evolution of the equation of motion. While for spin ensemble, the spin relaxation mechanisms include the Elliott-Yafet mechanism, the D'yakonov-Perel' mechanism, the Bir-Aronov-Pikus mechanism, the spin dephasing induced by the hyperfine interaction, and the spin relaxation induced by the inhomogeneous broadening. Then we review the progress of the kinetic spin Bloch equation on the spin relaxation/diffusion.

For the single-particle approach, we first consider the spin relaxation time in quantum dots. The spin-relaxation time due to the electron-acoustic phonon scattering in GaAs quantum dots is calculated by the Fermi golden rule after the exact diagonalization of the electron Hamiltonian with the spin-orbit coupling. The spin relaxation time limited by the piezoelectric phonon is dominant. We show that the perturbation method widely used in the literature is inadequate in accounting for the electron structure and therefore

the spin-relaxation time. Different effects such as the magnetic field, dot size, and the temperature on the spin-relaxation time are investigated in detail. Then we investigated the spin-dependent density of states and the density of spin polarization of an InAs-based two-dimensional electron gas with the Rashba spin-orbit coupling under an intense terahertz laser field by utilizing the Floquet states to solve the time-dependent Schrödinger equation. It is found that both densities are strongly affected by the terahertz laser field. A terahertz magnetic moment perpendicular to the external terahertz laser field in the electron gas is induced. This effect can be used to convert terahertz electric signals into terahertz magnetic ones efficiently.

For the many-body investigation, we study the spin relaxation/dephasing or the spin diffusion/transport in quantum wires and quantum wells by numerically solving the kinetic spin Bloch equation. We first consider the spin relaxation in quantum wire due to the Rashba spin orbit coupling. We find that the spin dephasing is strongly affected by the angle of Rashba effective magnetic field and the applied magnetic field. The nonlinearity in spin dephasing time versus the direction of the electric field shows the potential to manipulate the spin lifetime in spintronic device. Moreover, we figure out a quantity that can well represent the inhomogeneous broadening of the system which may help us to understand the many-body spin dephasing due to the Rashba effect. Then we study the spin relaxation under identical Dresselhaus and Rashba coupling strengths in n -type (001) GaAs quantum wells in both the traditional collinear statistics, where the energy spectra do not contain the spin-orbit coupling terms, and the helix statistics, where the spin-orbit couplings are included in the energy spectra. We show that there is only marginal difference between the spin relaxation times obtained from these two different statistics. We further show that with the cubic term of the Dresselhaus spin-orbit coupling included, the spin relaxation time along (110) direction becomes finite, although it is still much longer than that along the other two perpendicular directions. The properties of the spin relaxation along this special direction under varied conditions are studied in detail.

With all scattering, especially the electron-electron scattering included, we reinvestigate the spin diffusion in n -type (001) GaAs quantum wells at high temperatures by solving the kinetic spin Bloch equation together with the Poisson equation self-consistently by developing a new numerical scheme. We find that the spin polarization/coherence oscillates along the transport direction even when there is no external magnetic field, and the oscillation period is independent of the electric field. We show that when the scattering is strong enough, electron spins with different momentums oscillate in the same phase which leads to an equal transversal spin injection length and an ensemble transversal injection length. The intrinsic scattering is already strong enough for such feature. The scattering, temperature, quantum well width, and external magnetic/electric field dependences

of the spin diffusion are studied in detail. Then we explore the effect of the anisotropy of the spin-orbit coupling on the competition between the Rashba and the Dresselhaus spin-orbit couplings in the spin diffusion. We find the spin-diffusion length shows strong anisotropy not only for the spin-polarization direction but also for the spin-diffusion direction. Without the cubic term of the Dresselhaus spin-orbit coupling and with the identical Dresselhaus and Rashba strengths, infinite diffusion lengths can be obtained either for the spin-diffusion/injection direction along $(\bar{1}10)$, regardless of the direction of spin polarization, or for the spin polarization along (110) , regardless of the direction of the spin diffusion/injection. With the cubic Dresselhaus term included, although the spin-diffusion length becomes finite and decreases with the temperature and the electron density, the anisotropy for the spin-diffusion direction and spin-polarization direction is maintained. Due to the contribution of the cubic term of the Dresselhaus spin orbit coupling, the maximum spin diffusion length for the injection direction along $(\bar{1}10)$ occurs when the Rashba strength is slightly smaller than (instead of equal to) the Dresselhaus strength,

Finally, we study the kinetics of the extrinsic spin Hall conductivity induced by the skew scattering from the fully microscopic kinetic spin Bloch equation approach in (001) GaAs symmetric quantum well. In the steady state, the extrinsic spin Hall current/conductivity vanishes for the linear- k dependent spin-orbit coupling and is very small for the cubic- k dependent spin-orbit coupling. The spin precession induced by the Dresselhaus/Rashba spin-orbit coupling plays a very important role in the vanishment of the extrinsic spin Hall conductivity in the steady state. An in-plane spin polarization is induced by the skew scattering, thanks to the spin-orbit coupling. This spin polarization is very different from the current-induced spin polarization.

Key Words : spin relaxation/dephasing, spin diffusion/transport, spin orbit coupling, many-electron system, quantum dots, quantum wire, quantum well, time dependent system.

目 录

中文摘要	i
英文摘要	iv
第一章 半导体自旋电子学介绍	1
1.1 引言	1
1.2 自旋电子学器件设计	2
1.2.1 Datta-Das 晶体管	3
1.2.2 无磁自旋晶体管	4
1.2.3 量子逻辑门器件	5
1.3 自旋极化的产生	5
1.3.1 光学取向	6
1.3.2 电学注入	8
1.3.3 自旋霍尔效应	9
1.4 自旋极化的探测	12
1.4.1 光学测量	12
1.4.2 电学测量	13
1.5 自旋弛豫过程与自旋扩散/输运	16
1.5.1 最近的实验进展	17
1.5.2 理论进展	21
1.5.3 THz 场对自旋的影响	23
1.6 量子点系统	23
1.6.1 量子点中自旋弛豫: 实验测量	25
1.6.2 量子点中自旋弛豫: 理论进展	29

第二章 能带结构和有效哈密顿量	32
2.1 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法	33
2.2 Kane 模型	34
2.3 包络函数近似: 对外场的处理	37
2.4 体材料中的自旋轨道耦合相互作用	39
2.4.1 Dresselhaus 内禀自旋轨道耦合	41
2.4.2 Bychkov-Rashba 内禀自旋轨道耦合	42
2.4.3 Elliott-Yafet 自旋轨道耦合	43
2.4.4 有效质量近似下的哈密顿量	46
2.5 异质结结构和量子阱	47
2.5.1 不对称量子阱	47
2.5.2 对称量子阱	49
2.5.3 量子阱系统的有效哈密顿量	51
第三章 自旋弛豫和自旋去相位	54
3.1 两能级系统中的自旋弛豫	54
3.1.1 微扰处理	55
3.1.2 运动方程处理	58
3.2 系综的自旋弛豫	61
3.2.1 Elliott-Yafet 弛豫机制	63
3.2.2 D'yakonov-Perel' 弛豫机制	66
3.2.3 Bir-Aronov-Pikus 弛豫机制	72
3.2.4 超精细相互作用导致的自旋弛豫	73
3.2.5 非均匀扩展引起的自旋弛豫/去相位	74
3.2.6 小结	75
3.3 动力学自旋 Bloch 方程	76
3.3.1 四自旋子带模型	78
3.3.2 自旋守恒散射下非均匀扩展导致的自旋弛豫/去相位	80

3.3.3	n 型材料中的动力学自旋 Bloch 方程	81
3.3.4	空间输运中的非均匀扩展及动力学自旋 Bloch 方程	82
3.3.5	讨论	84
第四章	GaAs 量子点中的电子自旋弛豫	86
4.1	理论模型	86
4.1.1	哈密顿量	86
4.1.2	电子本征波函数和本征能量	88
4.1.3	自旋态之间的跃迁几率和自旋弛豫时间	91
4.2	结果	92
4.2.1	$T = 4$ K 时和以前微扰的结果比较	92
4.2.2	$T = 4$ K 时直径为 $d = 20$ nm 量子点中的自旋弛豫时间	95
4.2.3	磁场依赖关系	96
4.2.4	温度依赖关系	98
4.2.5	量子阱的阱宽依赖关系	98
4.3	小结	99
第五章	强 THz 场对二维电子气的影响	101
5.1	理论模型	101
5.1.1	THz 场作用下的本征态	101
5.1.2	自旋空间的表示: Collinear 表象和 Helix 表象	103
5.1.3	态密度和自旋极化密度	104
5.2	结果	106
5.2.1	准能量	106
5.2.2	态密度和自旋极化密度	108
5.2.3	平均磁矩	108
5.3	结论	109

第六章 一维和两维系统的自旋弛豫和自旋去相位	110
6.1 受限体系动力学自旋 Bloch 方程	110
6.1.1 基空间的选取	111
6.1.2 动力学自旋 Bloch 方程	112
6.2 量子阱系统	114
6.2.1 Collinear 表象和 Helix 表象	116
6.2.2 Collinear 统计和 Helix 统计	116
6.2.3 空间均匀时的非均匀扩展	118
6.3 量子线系统	121
6.3.1 空间均匀时的非均匀扩展	122
6.4 小结	123
第七章 量子线系统中自旋弛豫和自旋调控	124
7.1 模型	124
7.2 结果	126
第八章 等强度 Dresselhaus 项和 Rashba 项的 GaAs 量子阱中自旋弛豫	129
8.1 理论模型	129
8.2 计算结果	131
8.2.1 数值处理方法	131
8.2.2 两种统计下自旋极化的时间演化	132
8.2.3 两种统计下 (110) 方向自旋弛豫时间的比较	134
8.2.4 Collinear 统计下考虑了库仑散射的 (110) 方向自旋弛豫时间	135
8.3 结论	136
第九章 n-型 GaAs 量子阱中的自旋扩散/输运	138
9.1 理论模型	138
9.1.1 输运中的非均匀扩展	140
9.1.2 空间注入/扩散长度 L_d , L_p 和 L_p^*	141

9.2	计算结果	142
9.2.1	动量分辨的自旋极化的瞬时的空间演化	143
9.2.2	散射对扩散的作用	145
9.2.3	自旋扩散的温度依赖关系	147
9.2.4	自旋扩散的阱宽依赖关系	147
9.2.5	自旋扩散的磁场依赖关系	148
9.2.6	电场对自旋扩散的影响	150
第十章	GaAs 量子阱中自旋输运中的各向异性	152
10.1	理论模型	152
10.1.1	自旋轨道耦合	153
10.1.2	动力学自旋 Bloch 方程	154
10.2	计算结果	156
10.2.1	$\alpha = \beta$ 时自旋扩散/注入方向以及自旋极化方向的依赖关系	156
10.2.2	温度和电子浓度的依赖关系	158
10.2.3	门电压的影响	159
第十一章	动力学方法研究由偏转散射导致的外禀自旋霍尔效应	161
11.1	EY 自旋轨道耦合	161
11.1.1	偏转散射	162
11.1.2	偏转散射项表达式	163
11.2	自旋流	164
11.2.1	反常位置算符和反常速度算符	164
11.2.2	自旋流的定义	165
11.3	动力学自旋 Bloch 方程	166
11.3.1	稳态时线性项自旋轨道耦合给出的外禀自旋流为零	166
11.3.2	自旋流转化为自旋极化	167
11.4	计算结果	168
第十二章	总结	171

附录A Lowdin Partitioning方法	175
附录B 动力学自旋 Bloch 方程的推导	177
附录C Helix 表象下的量子阱系统中电子的动力学自旋 Bloch 方程	182
附录D 2DEG 中 Collinear 统计下库仑散射的数值处理	183
D.1 优化前的数值处理	184
D.2 优化后的数值处理	186
附录E 动力学自旋 Bloch 方程输运部分的数值处理	188
参考文献	189
硕博连读期间发表的论文	205
致谢	207

第一章 半导体自旋电子学介绍

1.1 引言

电荷与自旋是电子的两大特性，也是如今在日常生活中信息处理和存储技术的物理基础 [1]。传统电子学以电子的电荷特性为基础，主要利用电场对电流的控制来实现器件的各项功能。自从贝尔实验室在 1947 年发明半导体点接触晶体管以后，传统电子学在逻辑处理器件中得到了广泛的应用。随后，集成电路以及高频器件等的发明，使得以 Si 为基础的半导体工业得到了蓬勃的发展。这些发明和技术在计算机微处理器上的应用正在强烈的改变着人们传统生活。目前为止，微处理器上集成电路的器件集成度仍然按照 Moore 律每隔 18 个月翻一番 [2]。但是随着器件尺寸的缩小，量子效应越来越重要：比如由于隧穿效应而导致的泄漏电流，以及集成度太高而导致的热耗散问题都严重的制约着传统电子学的发展 [2-5]。有专家认为在最近几年内 Moore 律就会失效 [2]。因此，寻找可以替代传统电子学器件的研究已经提到了日程中，其中自旋电子学作为有可能和传统半导体工业结合的新兴方向而倍受关注。

所谓的自旋电子学 (Spintronics) 是一个由多种学科交叉而形成的新领域，它主要是研究如何有效地操作/控制固体中的自旋自由度 [6-11]，以期望可以在器件设计中使用自旋自由度来取代电荷自由度 (或与之相结合) [2, 4, 12, 13]。虽然自旋电子学这个名词是 Wolf 在 1996 向 DARPA 申请磁性材料和器件的启动基金中首次提出的 [6]，但是人们对电子自旋在器件中的应用却是从很早就开始了。早期的应用都是集中在金属磁性材料中，比如早期的以磁阻效应为基础的内存和磁盘存储器，以及读写磁头等。后来 Baibich 等人 [14] 于 1988 年在 [Fe/Cr] 周期性多层膜中观察到的巨磁电阻效应 (giant magnetoresistance, GMR) 被认为是自旋为基础的电子学器件时代的开始 [12, 15, 16]。其后自旋阀结构 [17] (spin valve) 的出现，使得巨磁电阻效应的应用很快变为现实。1993 年，Helmolt 等人 [18] 在类钙钛矿结构的稀土锰氧化物中观测到了庞磁电阻 (colossal magnetoresistance, CMR) 效应，其磁电阻值比 GMR 还大。随后，人们在磁隧道结结构中发现隧道磁阻 (tunneling magnetoresistance, TMR) 效应 [19, 20] 具有更大的磁电阻变化以及较小的饱和磁场，具有更加明显的磁电阻效应。GMR 和 TMR 结构可以应用在磁场感应器、硬盘磁头以及磁随机存储器 (magnetoresistive random access memory, MRAM) 等产品中，其中 MRAM 整合了静态随机存储器 (static random access memory, SRAM) 的快速和动态随机存储器 (dynamic random access memory, DRAM) 的高容量的优点，并且在断

电条件下信息不丢失。相比较于传统的磁盘容量，依据 GMR 效应制作的硬盘存储器的容量可以提高近三个数量级，引起了计算机存储领域的变革，并广泛地应用在现代计算机中。因此，为了表彰 Albert Fert 和 Peter Grünberg 发现 GMR 对社会发展的巨大贡献，他们被授予了 2007 年的诺贝尔物理学奖。以上是 Awschalom 等人 [13] 将自旋电子学的发展分为的三个阶段中的第一阶段。它是和材料科学、纳米技术、介观物理以及强关联系统联系在一起，并且有些已经到了可以实用的地步。第二阶段是在半导体系统中利用自旋极化流来代替电荷流或与之相结合，从而制造出自旋晶体管、自旋阀等来代替传统器件，实现电信号或者光信号的放大，进一步实现超快的开关和自旋电子学意义下的可编程的微处理器。这类器件具有节能、快速的特点。这一阶段的最终目标是希望实现集成逻辑、存储以及通讯在一块芯片上的新型的多功能电子器件。为了利用传统电子学中成熟的微电子以及半导体工艺和设备，从而减小投资，在大部分的研究中人们仍然是以半导体材料为基础的。这一阶段应是从 1990 年 Datta 和 Das [21] 提出的基于电子自旋进动的 Datta-Das 自旋晶体管 (SFET) 开始，其后理论上 [22–34] 已经提出了大量的方案，但是在实现过程中还有一系列的问题需要解决。这些问题主要包括 [6]: (i) 如何有效地产生自旋极化，特别是通过电学方法产生; (ii) 自旋极化可以保持的时间或者运输的距离是否足够长; (iii) 如何有效地探测自旋极化，特别是通过电学方法探测。到目前为止，第一点和第三点距离实用还有很远的路。自旋电子学第一阶段和第二阶段的发展都是基于固体中大量电子的共同作用，而第三阶段却是完全基于对单个或几个电子自旋的操作。由于少数几个电子自旋的去相干时间要远比大量电子的长，因此人们认为可以利用它来实现量子计算、量子加密、数据压缩和量子通讯等 [2, 35–37]。这一阶段中最有发展潜力的就是量子点系统，因为它直接建立在传统半导体工业的基础之上，并且可以通过制成量子点阵列从而具有很好的扩展性 [37]。Divincenzo [38, 39] 指出量子计算的实现需要满足如下的五条要求: (i) 量子位的定义要明确; (ii) 可靠的初态制备; (iii) 去相干时间足够长; (iv) 精确的量子门的操作; (v) 合适的末态读出测量。目前，在单电子自旋的研究中一大部分的工作都集中在理解单电子自旋弛豫机制和如何获得长的自旋相干时间上 [38–45]。

由此可见，无论是在自旋电子学发展的第二阶段还是第三阶段，都还有大量的问题需要解决。

1.2 自旋电子学器件设计

第二类自旋电子学主要是希望用自旋晶体管代替传统的电子晶体管。与传统的电子学晶体管器件相比较，自旋晶体管器件具有耗能少，开关时间快的优点。传统的晶体管 (MOSFET) 把在器件中产生一个足够高的势垒阻碍电子通过的状态设为关；而把势垒的高度降低以后，电流容易通过的状态设为开。这个过程中需要消耗大量的能量：开关过程中的耗能以及静态保持晶体管状态时候的耗能。对于不相干的电荷输入器件，Landauer [46] 指出最小的开关能量为 $E_{\text{bit}} = k_B T \ln 2 \sim 23 \text{ meV}$ 。而自旋晶体管却

不需要这样的开关能量。它采用电子自旋相关的势垒从源极中选择某一方向极化的电子，并且用自旋相关的势垒形成漏极来检测注入的自旋。只有当电子在通道中翻转了自旋时，它才能进入到漏极中，从而形成开状态；否则为关状态。这两种晶体管的工作示意图见1-1 [8]。因此，对于自旋晶体管而言，开关状态的关键是要有效地控制通道中的电子自旋的状态。因此自旋晶体管的能量消耗在控制通道中的自旋状态，一般来说，对于半导体中自旋的调节需要的能量大概在 μeV 量级 (Zeeman 劈裂的能量大小)。虽然在实验上已经实现了自旋选择的发光二极管 [47, 48]，但是自旋晶体管仍然停留在理论阶段，其在半导体材料中的设计方案中包括自旋场效应管 [21–24]、单极自旋晶体管 [25–27]、磁 p - n 结 [28–30] 以及磁双极晶体管 [31, 32]。最近，已经有人提出了使用量子逻辑门设计室温下可编程的大规模集成电路的方案 [49]。这类自旋晶体管的关键就是自旋极化的产生、控制以及探测。接下来我们给出几种典型的自旋晶体管的设计方案。

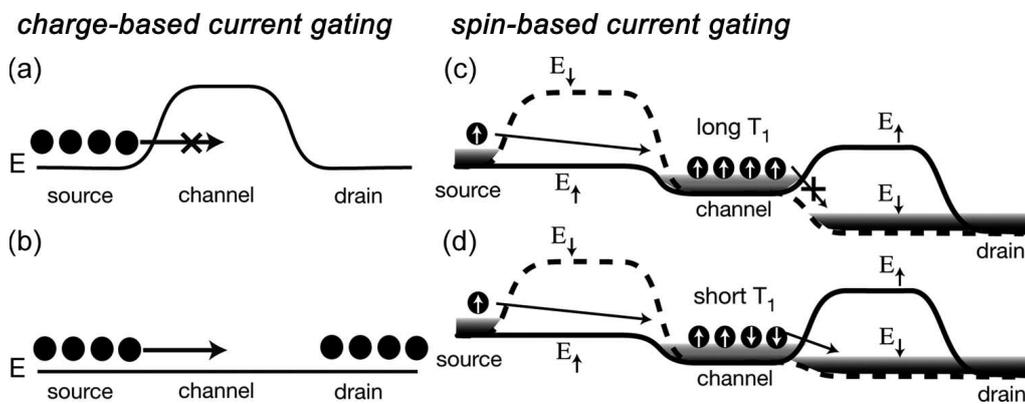


图 1-1: 传统晶体管和自旋晶体管工作原理上的差别[摘自文献 [8]]。(a) 和 (b) 分别是传统晶体管的关和开状态，它们中间的开关是在通道中形成很高的势垒；(c) 和 (d) 是自旋晶体管的关和开状态，它们之间的开关是通过通道中的自旋状态决定。

1.2.1 Datta-Das 晶体管

图 1-2 给出 Datta-Das 晶体管的示意图。这里的源和漏极都是采用固定取向的铁磁金属制作，其中通道部分是一层高迁移率的 InGaAs，其中电子自旋状态由 Rashba 自旋轨道耦合 [50] 控制。由于 Rashba 自旋轨道耦合产生的有效磁场 $\mathbf{B} = \alpha \mathbf{E}_z \times \mathbf{k}$ ，其大小正比于门电压 V_G 的大小。理想情况下，电子自旋在通过通道时会围绕着这个磁场进动，从而进入右边漏极之前的自旋取向和源极进入通道的自旋取向是不一样的。通过调节门电压的大小，可以有效地改变自旋进动的空间周期，从而可以控制进入右边漏极的自旋取向。这里存在的问题是，即使通道部分是高迁移率的材料构成，对于自旋而言是否是处在弹道散射区域还是值得研究的，因为电子电子散射对自旋弛豫过程有非常重要的贡献 [51–54]。在现实情况下，通道中的自旋极化会因为散射的原因发生弛

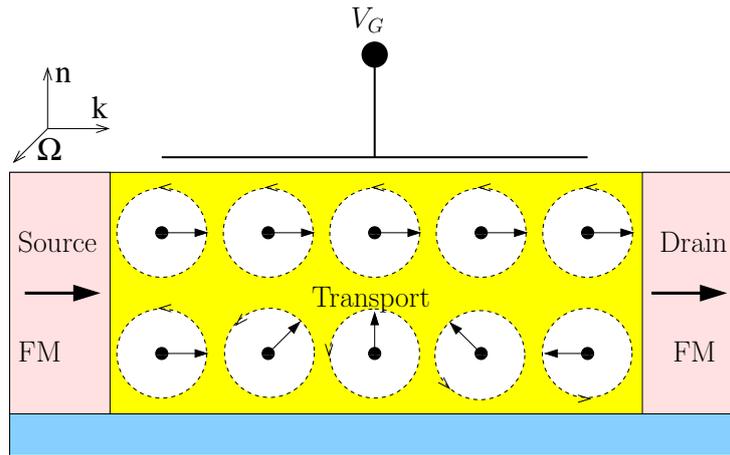


图 1-2: Datta-Das 晶体管的示意图[摘自文献 [6, 21]]。两边是铁磁电极，中间部分为半导体材料的通道，其中的 Rashba 自旋轨道耦合可以通过门电压 V_G 控制。在无外加门电压即没有 Rashba 自旋轨道耦合时，电子自旋在通过通道时方向不变；在加了门电压以后，电子自旋将会微扰 Rashba 自旋轨道耦合产生的有效磁场进动。

豫，这导致自旋极化的大小以及相位都发生变化。最近的实验 [55, 56] 和理论 [57–62] 的研究表明体材料以及二维半导体系统中自旋极化即使在没有外磁场时也会在空间上保持非常好的振荡。特别是在二维材料中，即使在比较高的温度下 [59, 61, 62] 自旋极化仍然可以很好的振荡。这些都是有利于实现 Datta-Das 晶体管。Schliemann [24, 63] 等人发现，在 Rashba 和 Dresselhaus [64] 自旋轨道耦合同时存在的二维电子气中，如果它们强度接近时，某一个方向上 (GaAs 材料是 (110) 方向) 的自旋极化将会有非常长的自旋弛豫时间；而当其强度相差较大时，这个方向的自旋弛豫时间非常的短。而 Rashba/Dresselhaus 之间的相对强度可以由门电压控制。将这个性质应用在 Datta-Das 晶体管的通道中，也可以形成自旋晶体管 [22]。不过由于 Dresselhaus 自旋轨道耦合三次方项的存在，使得自旋弛豫时间在改变 Rashba 自旋轨道耦合强度时的变化不是太剧烈 [62, 65]，因此这种结构的晶体管的开关状态是否很有效是值得进一步研究的。

Cabbibo 等人 [66] 和 Meier 和 Matsuyama [67] 都尝试过实验上制造 Datta-Das 晶体管，但是实验结果都不尽人意，造成这个结果的原因可能是界面的影响。

1.2.2 无磁自旋晶体管

在自旋晶体管的设计中，从磁性材料注入自旋极化以及用磁性探测自旋极化都不是必须的。当自旋轨道耦合足够大的时候，自旋的共振隧穿可以提供相应的注入和探测。Hall 等人 [23] 利用自旋共振隧穿在 (110) 方向生长的 InAs/GaSb/AlSb 材料中设计了一种新的晶体管，结构见示意图 1-3。这种材料中自旋轨道耦合导致的能量劈裂非常的大 (最大有 20 meV) 并且自旋轨道耦合引起的有效磁场的方向都是沿着量子阱的生长方向，因此可以采用自旋共振隧穿在源极注入自旋极化和在漏极检测。而在通道中和 Datta-Das 晶体管一样是由门电压调节 Rashba 自旋轨道耦合来控制。对于这种晶体

管以及 Datta-Das 晶体管，只要求自旋弛豫时间足够的长，对自旋去相位时间则不做要求 [7]。

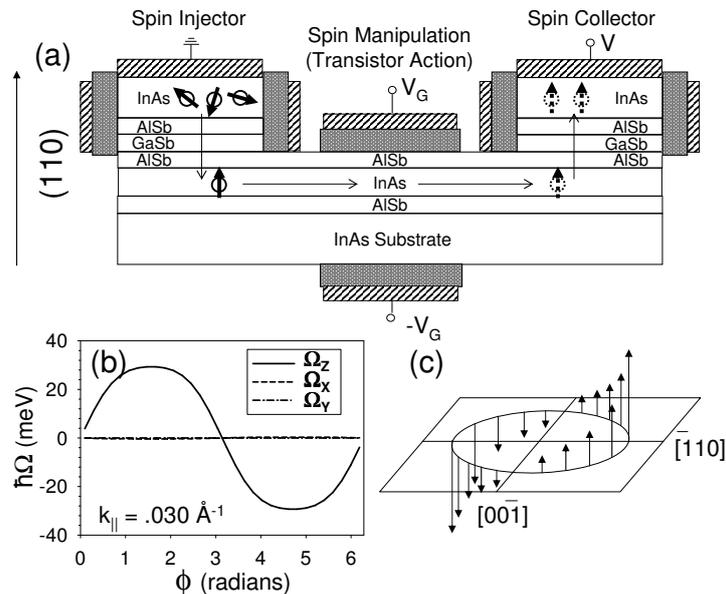


图 1-3: 无磁自旋晶体管的示意图[摘自文献 [23]]。(a) 为晶体管的结构示意图；(b) 为自旋轨道耦合的能量劈裂；(c) 自旋轨道耦合对应的有效磁场示意图。

1.2.3 量子逻辑门器件

对于第三类的自旋电子学，在固体中量子点系统是一个非常好的载体。图 1-4 给出利用量子点系统做出的可扩展的逻辑门的示意图。通过在二维电子气表面刻蚀一系列的电极，约束成为量子点阵列。在量子阱下面形成一层磁化层或者高 g 因子材料层。量子点内的能级结构可以通过约束电极施加不同的偏压，将电子的波函数压入磁化层或高 g 因子材料层，可以改变 Zeeman 分裂的大小。另外，局域的磁场可以通过电流流过左边的导线获得。这里每一个量子点都相当于一个量子位。并且不同的量子点中的电子能级 (Zeeman 劈裂的大小) 不同，可以通过电子自旋共振测量获得每个量子点中的自旋信息。此时，已经可以在每个量子点内进行单自旋操作。对于两个量子点决定的门操作，可以通过调节两个量子点之间的势垒高度 (调节电极偏压实现) 而改变他们之间的交换作用实现。使用这个器件可以完全用电的方法控制量子点中的自旋动力学和进行量子计算。

1.3 自旋极化的产生

如何在半导体中产生自旋极化是自旋电子学发展的一个先决条件。最直接的产生自旋极化的方法就是通过外加磁场使不同自旋子带的能量劈裂，从而可以在样品内部产生

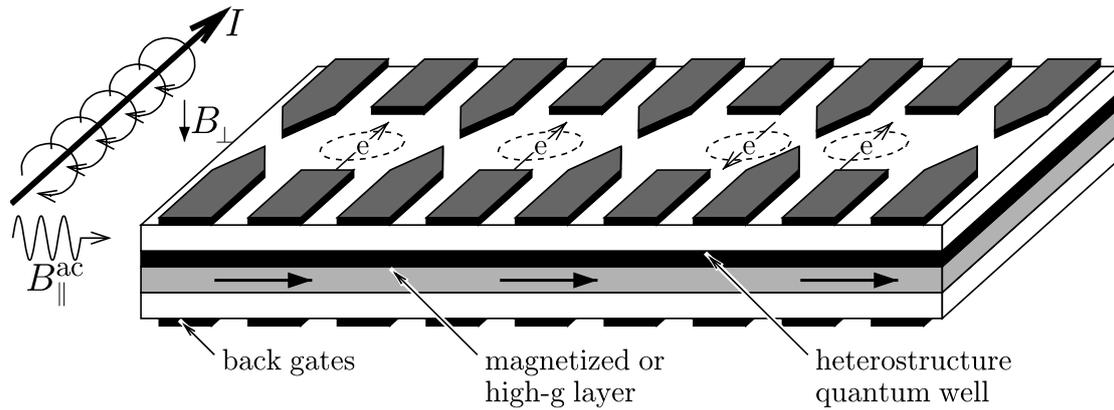


图 1-4: 电极约束的量子点阵列[摘自文献 [68]]构成的量子逻辑门器件.

沿着磁场方向的自旋极化。不过这个方法在实际应用中几乎没有什么用处，这是因为不仅产生磁场的装置过于笨重不利于器件的扩展，而且一般半导体材料中有效 g 因子太小从而必须在很大的磁场下才能产生可观的自旋极化。因此这种方法极少在实验中使用。实验上一般采用的方法有如下几种：

1. 光学取向：早期的实验中的自旋极化的产生所通常采用的方法，它具有容易产生、容易得到高自旋极化等优点。
2. 电学注入：从铁磁金属/磁性半导体/稀磁半导体注入到半导体中。根据接触界面的不同情况，可以分为欧姆注入，隧穿注入。这种方法的优点是装置比较小，可以很容易的集成到器件中。
3. 利用自旋霍尔效应产生：在由电流产生了横向霍尔自旋流以后，自旋流可以在样品的边界积累自旋极化。

下面我们详细的介绍各种方法。

1.3.1 光学取向

光学取向方法产生自旋极化是在自旋弛豫实验中最先采用的方法 [69–73]，由于其具有实验简单以及可以产生很高自旋极化的特点，最近仍然在大量的实验中 [55, 56, 74–78] 应用。光学取向产生自旋极化的物理来源主要是由于光学激发的选择定则。

通过入射能量大小为导带和价带带隙的圆偏光到半导体材料中，价带的特定自旋的空穴可以吸收光量子的角动量从而跃迁到导带电子 [69]。按照选择定则我们知道，对于特定的圆偏光，比如左偏光，如果照射到没有应力以及外场的 GaAs 体材料中，由于其重空穴和轻空穴在 Γ 点简并，则可以同时激发自旋为 $3/2$ 的重空穴到自旋为 $1/2$ 的电子以及自旋为 $1/2$ 的轻空穴到自旋为 $-1/2$ 的电子态上，同时产生自旋朝上和朝下

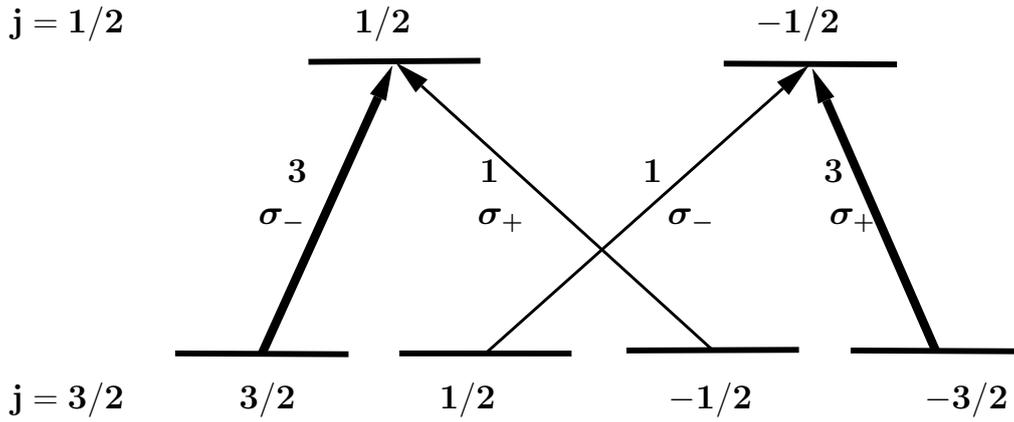


图 1-5: 光学激发以及电子空穴对复合发射光子的选择定则[摘自文献 [69]]。 σ_{\pm} 表示左旋和右旋的圆偏光, 而箭头上的数字表示在相应能级之间光学偶极子的矩阵元的相对强度。

的电子。不过由于在相应能级之间光学偶极子的矩阵元的强度不同, 使得这两个过程对应的激发强度不一样。一般来说, 在体材料中 Γ 点附近重空穴的激发强度是轻空穴的 3 倍。具体见示意图 1-5。从而激发的电子自旋极化度 P_0 最大可以达到

$$P_0 = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n_{\uparrow} + n_{\downarrow}} = \frac{3 - 1}{3 + 1} = 50\% . \quad (1.1)$$

在激发电子自旋极化的同时, 重空穴和轻空穴也产生了自旋极化。一般来说, 由于轻重空穴带之间的混合 [79], 空穴的自旋弛豫时间 $\tau_{s,h}$ 要远比电子空穴的复合时间 τ_r 以及电子的自旋弛豫时间 $\tau_{s,e}$ 短的多, 满足 $\tau_{s,h} \ll \tau_r, \tau_{s,h} \ll \tau_{s,e}$, 从而导致空穴的自旋极化快速衰减为零 [74, 75], 只剩下电子的自旋极化。由 $\tau_r \ll \tau_{s,e}$ [74]可知, 没有极化的空穴会在电子弛豫之前复合等量的自旋朝上和自旋朝下的电子。然后, 电子自旋极化度变为

$$P_0 = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{2n_0} , \quad (1.2)$$

其中 n_0 是未激发时导带电子在每个自旋子带上的浓度。可以看出, 如果激发的总的自旋极化浓度大于未激发时总的电子浓度 $n_{\uparrow} - n_{\downarrow} \geq 2n_0$, 则最后空穴复合完以后电子的自旋极化可以达到 100%。

对于有应力的体材料或者二维电子系统, 由于在 Γ 点轻重空穴带不再简并, 实验上一般可以调节圆偏光的频率使之仅仅激发最顶部的空穴带 (由于轻重空穴的混合, 不再是纯的轻/重空穴) 的电子到导带, 见示意图 1-6 (a)。在这种情况下, 由于激发的电子只有一种自旋取向, 给出较高的自旋极化度 [81, 82], 可以达到 100% [83]。另外, 在二维系统中 $\tau_r \ll \tau_{s,e}$ 的关系并不一定成立, 因此在电子自旋弛豫的过程中, 电子会感受到未复合完的空穴散射。

对于激光脉冲连续激发的情形, 稳态时的电子自旋极化 P 和 P_0 是不一样的。一般在研究自旋输运/扩散问题中, 可能需要连续激发以获得稳定的边界极化 [56]。

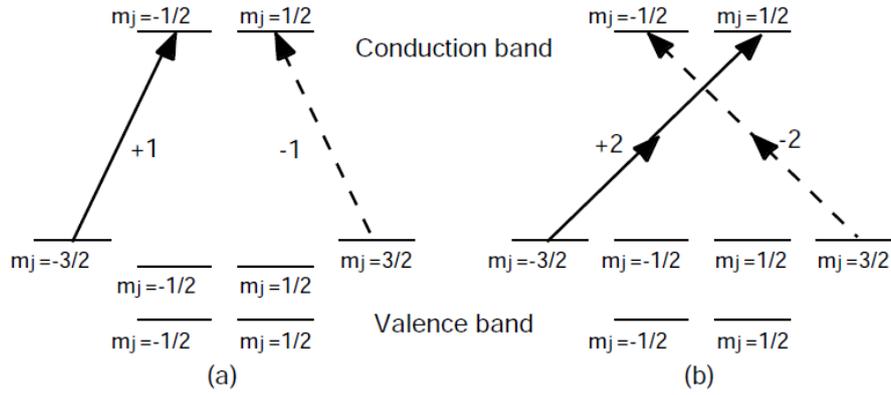


图 1-6: 轻重空穴带不简并的时候的单光子激发 (a) 和双光子激发 (b) 过程[摘自文献 [80]]。而箭头上的数字表示在相应能级之间激发时的角动量的变化。

自旋极化本身的弛豫以及激发的电子和空穴的复合可以分别用弛豫时间 $\tau_{s,e}$ 以及 τ_r 描述。对于一次激发, t 时间以后自旋极化和激发的电子浓度可以分别表示为 $P_0 e^{-t/\tau_{s,e}}$ 和 $N_0 e^{-t/\tau_r}$, 其中 $N_0 = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$, 则平均的自旋极化为 [69, 84]

$$P = \frac{\int_0^{\infty} dt P_0 e^{-t/\tau_{s,e}} N_0 e^{-t/\tau_r}}{\int_0^{\infty} dt N_0 e^{-t/\tau_r}} = \frac{P_0}{1 + \tau_r/\tau_{s,e}}. \quad (1.3)$$

可以看出, 只有当自旋弛豫时间远远大于电子空穴复合时间的时候, 稳态下才能产生可观的自旋极化。

除了上面的单光子过程可以光学激发自旋极化以外, 双光子过程也可以产生自旋极化, 跃迁过程示意图见 1-6 (b)。并且在一定的条件下, 双光子过程产生的自旋极化可以比拟单光子过程的极化 [83]。最近, Matsuyama 等人 [80] 尝试在体 GaAs 材料中使用双光子激发产生自旋极化。他们通过自旋相关的发光谱测量出自旋弛豫时间以及寿命以后, 得到双光子激发的自旋极化度可以高达 95%。一系列的理论研究 [83, 85–87] 表明在合适的材料参数下, 双光子激发的自旋极化度最高可以达到 100%。

1.3.2 电学注入

和光学取向方法相比, 电学注入方法具有实验设备简单, 利用它实现的自旋晶体管可以很容易的扩展等优点, 并且使用电致发光方法测量发现自旋注入效率可以高达 90% [48]。一般来说, 电学注入可以分为欧姆注入和隧穿注入两类。

(i) 欧姆注入

欧姆注入指的是在铁磁和半导体之间形成一个比较理想的欧姆接触界面, 从而期望可以把铁磁中的自旋极化通过自旋流的形式注入到半导体内部 [12]。然而典型的铁磁金属和半导体材料的欧姆接触会在半导体表面形成一层重掺杂区, 导致自旋极化在经过界面时感受到很强的翻转散射而损失。初期的实验都集中从铁磁向 InAs 材料的

自旋注入，这是因为他们的接触界面是一个理想接触，不会形成 Schottky 势垒。然而实验上得到的自旋注入极化率却很低，到现在为止，最高也不过是 4.5% [88]。而后，Schmidt 等人 [89]指出了在欧姆注入下的一个基本问题：铁磁金属和半导体材料的电导失配。通过简单的扩散方程和欧姆定律，他们在忽略了界面散射的条件下考虑了铁磁/半导体/铁磁结构的注入效率。当两边铁磁的磁矩方向相同时，欧姆注入的电流极化率从铁磁中的 β 变为半导体中的 α_2 [89]：

$$\alpha_2 = \frac{\beta}{1 + \frac{\sigma_{\text{fm}} x_0}{2\lambda_{\text{fm}} \sigma_{\text{sc}}} (1 - \beta^2)} \quad (1.4)$$

其中 $\sigma_{\text{fm}/\text{sc}}$ 分别为铁磁和半导体的电导， λ_{fm} 以及 x_0 分别为铁磁和半导体中的电子自旋扩散长度和半导体样品的厚度。一般来说， σ_{fm} 要远远大于 σ_{sc} ，从而使注入的自旋极化非常小。从公式上看，除非铁磁金属的自旋极化率接近 $\beta = 1$ ，即对应着半金属材料 [90, 91]的情况下，自旋注入效率才会有显著提高。紧接着，Fert 和 Jaffrès 考虑了界面电阻的影响后指出通过提高界面电阻可以有效地提高注入效率 [92]，他们在铁磁/半导体结构中通过扩散方程得到自旋流的注入效率为：

$$\alpha_2 = \frac{\beta r_{\text{fm}} + \gamma r_b^*}{r_{\text{fm}} + r_{\text{sc}} + r_b^*} \quad (1.5)$$

其中 $r_{\text{fm}/\text{sc}} = l_{\text{sf}}^{\text{fm}/\text{sc}} / \sigma_{\text{fm}/\text{sc}}$ 是电阻和自旋扩散长度的乘积， r_b^* 是界面电阻， γ 是界面的自旋选择效率。可见，如果增大界面电阻 r_b^* ，即使铁磁和半导体的电阻以及扩散长度都不匹配，也可能获得比较大的注入效率。这和 Rashba [93]提出的通过自旋选择的绝缘层来提高自旋注入效率是一致的。

(ii) 隧穿注入

从上面可以看出，降低铁磁金属和半导体之间的电导不匹配是实现高的注入自旋极化率的很重要的前提条件。最近的理论预测铁磁-重掺杂半导体-半导体结构的接触界面的自旋极化注入可以达到100% [94]。Rashba 指出 [93]，在铁磁材料和半导体之间加入一个隧穿效率依赖于自旋的隧穿结之后，自旋注入效率将完全由隧穿结决定。如果隧穿结中自旋朝上和自旋朝下的透射率相差很大，可以有效地提高自旋注入效率。实验采用了这种方法 [47, 95, 96]获得远比欧姆注入高的自旋极化率，其中文献 [96]采用 FeCo/MgO 到 GaAs 量子阱中的注入效率在 100 K 高达52%，290 K时为32%。

1.3.3 自旋霍尔效应

无论是光学取向还是从铁磁中注入自旋极化，都是将外界的自旋信号引入到半导体系统中。然而，在最近的一些理论工作中 [97–99]，有人指出自旋霍尔效应可以用电的方法在半导体内部产生自旋极化。

对于自旋霍尔效应，早在 1971 年 D'yakonov 和 Perel' [100] 就已经指出了相应的效

应：在有自旋轨道耦合的样品中施加电场，由于 EY 自旋轨道耦合 (见第2章) 会给出自旋偏转的散射，会导致在垂直于电流方向的样品边界将会产生自旋积累，并且样品两边积累的自旋极化方向相反。现在我们知道，这种自旋霍尔效应对应着外禀自旋霍尔效应 [101]。这样产生自旋极化不需要任何的外加磁场以及平衡态时的磁有序。在自旋电子学迅速发展的这几年，特别是在 Murakami 等人 [97]在 *p*-型半导体材料以及 Sinova 等人 [98] 在 *n*-型半导体材料中提出了“无耗散”的内禀自旋霍尔流以后，自旋霍尔效应引起了理论上 [97–117] 和实验上 [118–126]大量的关注。由于在有自旋轨道耦合的系统，自旋可以在自旋朝上和自旋朝下的态之间翻转，从而和电流不一样，自旋流本身不是一个守恒量，导致理论上自旋流的定义上还有非常多的争议 [97, 98, 127–130]。同时，自旋流本身还不能在实验上直接测量，需要将其转化为可测量的信号，比如边界的自旋积累、电流或者电压等。这就导致了另外的重要问题，即自旋流和这些量之间的定量关系在理论上并不是很清楚。

1.3.3.1 理论上的进展

在理论上依据不同的物理来源自旋霍尔效应被分为两种不同的类型：内禀自旋霍尔效应以及外禀自旋霍尔效应。主要研究方法有 Kubo 公式 [97, 98, 110]、Boltzmann 方法 [99, 102, 105, 113, 115]等，不过这些研究中都没有考虑电子-电子散射对自旋霍尔效应的影响。我们采用动力学自旋 Bloch 方程考虑了所有散射的情况下自旋霍尔电导的时间演化 [131]。

在半导体中，由于自旋轨道耦合会导致导带波函数和价带波函数的混合，这种混合会给出如下三个修正^①：(i) Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合，导致内禀自旋霍尔效应；(ii) 这种混合会修正自旋守恒散射，给出自旋偏转散射 [100, 132]，包括自旋依赖的电子-杂质散射、电子-声子散射等；(iii) 这种混合也修正了系统的位置算符和速度算符，给出自旋依赖的速度和位置算符，即文献中 [102, 133]所指的 side-jump 机制。

内禀自旋霍尔效应主要是在施加外电场时由内禀自旋轨道耦合—如 Dresselhaus [64]、Rashba [50] 自旋轨道耦合—引起。它最早是由 Murakami 等人 [97]在 *p*-型半导体材料以及 Sinova 等人 [98]在 *n*-型二维半导体材料中提出了“无耗散”的自旋霍尔电导开始的。其中 Sinova 等人 [98]还得到一个普适的内禀自旋霍尔电导

$$\sigma_y^z = \frac{e}{8\pi} . \quad (1.6)$$

他们指出这是因为对于给定的动量 \mathbf{k} 上自旋轨道耦合引起的自旋极化正比于 Rashba 自旋轨道耦合系数 α ，而非绝热修正却是反比于 α ，从而给出一个与 α 无关的自旋霍尔电导。^② 后来的研究表明在 Rashba [104, 105, 134–136]或者线性的 Dresselhaus [137]模型中正确的考虑了电子杂质散射的顶角修正以后，这种无耗散的自旋霍尔电导将会消失。在

^①详细的介绍及推导在第2章和第11章

^②我们觉得他们对文献 [98]中 Bloch 方程 (2) 的求解可能有问题。

用动力学 Bloch 方程研究自旋霍尔效应中(见第11章), 可以很容易得到线性自旋轨道耦合给出内禀自旋霍尔电导为零。然而, 如果自旋轨道耦合是关于动量三次方项的, 比如三次方项的 Dresselhaus 自旋轨道耦合以及在空穴系统中的 Rashba 自旋轨道耦合, 即使考虑散射的顶角修正仍然给出非零的自旋霍尔电导 [135, 138–140]。紧接着, Chen 等人 [106]以及 Sheng 等人 [107]指出在 Laughlin 规范的思想实验下内禀的自旋霍尔效应不会在样品边界上的导致任何自旋积累。因此, 实验上观测到的样品边界上自旋积累都来自外禀自旋霍尔效应。

外禀自旋霍尔效应的一个主要来源是自旋偏转散射 [100]。在电场作用下, 这种散射会使得自旋朝上的电子和自旋朝下的电子倾向于偏转到相反的方向上, 从而形成自旋流。另外, side-jump 机制有两个效应: 修正的位置算符会导致电势能给出一项额外的类似于 Rashba 自旋轨道耦合, 以及修正的速度算符也会对自旋流的定义产生影响。但是文献 [106, 107]已经指出这种由位置算符给出的自旋轨道耦合不会对自旋积累有贡献, 同时修正的速度算符对自旋流的影响需要考虑不同动量之间高阶关联, 其很难在动力学方程中考虑。对于外禀的自旋霍尔效应, 大部分的工作 [100, 101, 110–117]考虑的都是自旋依赖的电子-杂质散射的贡献, 以及在不对称量子阱中的电子- LO 声子的贡献 [141]。

在仅仅考虑外禀自旋霍尔效应时, 边界上自旋积累直接和自旋霍尔电流联系在一起 [99–101], 并且成正比关系 $S_z = \sqrt{\tau_s/D_s} j_y^z$, τ_s 和 D_s 分别对应自旋弛豫时间和扩散长度。这也是很多实验估计自旋流大小的依据。然而对于内禀自旋霍尔效应, 这种关系并不是很明确, 并且表现出非常强的边界条件的依赖关系 [102, 139, 142, 143]。

在部分实验中, 除了在样品的边界上可以观测到自旋积累以外, 样品的内部也观测到了几乎在同一量级的自旋极化 [118, 121, 144]。理论上, Engel 等人 [145]以及 Trushin 和 Schliemann [146]认为这是电场作用下电子在动量空间的分布有个偏移, 使得 $\langle \mathbf{k} \rangle \neq 0$, 则自旋轨道耦合将会给出一个净的有效磁场 [78, 119, 121, 141, 144–147], 从而产生自旋极化, 即流致自旋极化 (current induced spin polarization, CISP) 现象, 这和内禀的自旋轨道耦合紧密相关; 而 Tarasenko [141]指出自旋偏转的电子-声子散射 (EY 自旋轨道耦合) 也会给出同样的结果。

1.3.3.2 实验上的进展

到目前为止, 自旋霍尔效应只有很少的实验。Bakun 等人 [148] 在实验上观测到空间分布有上不均匀自旋极化时会在自旋偏转散射下出现电流, 这相当于自旋霍尔效应的逆效应。Kato 等人 [118] 在 *n*-型 GaAs 体材料中通过 Kerr 效应在垂直于电流的方向的样品两侧观察到了自旋极化。后来对有应力的样品中不同晶向下的自旋积累的测量表明这里应当是外禀自旋霍尔效应占主导地位。后来 Hans 等人 [115]以及 Tse 等人 [110]在理论上用外禀自旋霍尔效应进行了解释。Sih 等人 [119]首先用类似的方法研究了两维 GaAs 系统的外禀自旋霍尔效应, 然后他们又进一步证实了边界上的自旋积累的确是和自旋霍尔流有关 [120, 149, 150]。Stern 等人 [121]在室温条件下在 ZeSn 材料观

测到这种自旋积累。对于 p -型材料，Wunderlich 等人 [122] 在空穴系统中通过观测载流子的复合发光的极化度从而得到了自旋极化。同时，俄罗斯的 Ioffe 研究所的实验组却从另外一个角度探讨了自旋霍尔效应 [124–126]：他们利用外加 THz 频率的交变场以及自旋相关的电子-声子散射导致的 EY 自旋轨道耦合的作用下产生自旋流，同时施加一个磁场后，系统会产生净的电荷流，通过对电荷流的测量研究自旋流的性质。这类似自旋霍尔效应的逆过程，和 Valenzuela 等人 [123, 151] 在扩散区的金属铝中通过注入自旋极化流从而在铝的两边产生电势降的实验一样。

1.4 自旋极化的探测

而对于自旋极化的探测，实验上主要是通过光学方法或者电学方法实现。其中光学方法中，通过探测其偏振度的变化给出自旋极化的大小。根据发光手段的不同，可以分为光致/电致发光、Hanle 效应、时间分辨的 Faraday 旋转以及 Kerr 效应。对于电学方法，一般主要是用铁磁半导体界面的自旋依赖的输运性质，比如测量通过不同磁化方向的铁磁电极以后电阻的差别给出自旋极化度。不过对于量子点系统，现在的实验手段已经可以直接探测单个电子引起的电流信号的变化。

1.4.1 光学测量

早期的光学测量 [69–73, 152] 都是采用光致发光方法 (photoluminescence/electroluminescence)。直接测量发光的极化度就可以得到电子激发的自旋极化度。按照图 1-5 给出的光学选择定则，由电子到重空穴的跃迁几率是电子到轻空穴的跃迁几率的 3 倍，故复合发光的极化率为

$$P_{\text{opt}} = \frac{(3n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) - (n_{\uparrow} + 3n_{\downarrow})}{(3n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + (n_{\uparrow} + 3n_{\downarrow})} = \frac{1}{2} \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n_{\uparrow} + n_{\downarrow}}. \quad (1.7)$$

在施加横向的外磁场作用以后，电子自旋将会在复合的同时绕着磁场做 Lamor 进动，激发电子的自旋极化随时间的变化为 $P_0 e^{-t/\tau_{s,e}} \cos(\Omega_L t)$ ，其中 $\Omega_L = g\mu_B B$ 是 Lamor 进动频率。平均的自旋极化为：

$$P(B) = \frac{\int_0^{\infty} dt P_0 e^{-t/\tau_{s,e}} \cos(\Omega_L t) N_0 e^{-t/\tau_r}}{\int_0^{\infty} dt N_0 e^{-t/\tau_r}} = \frac{P(0)}{1 + \left(\frac{\Omega_L \tau_r}{1 + \tau_r/\tau_{s,e}}\right)^2}. \quad (1.8)$$

其中 $P(0)$ 是磁场为零测量得到的自旋极化率。可见在横向磁场的作用下，半导体带边发光的偏振度会下降，即 Hanle 效应 [69, 84, 153]。在测量得到光学极化率 P 以后，可以根据电子顺磁共振 (electron paramagnetic resonance, 或 EPR) 得到激发电子的寿命 τ_r ，然后根据公式 (1.3) 得到自旋弛豫时间 τ_s 。在测量时，要求电子寿命 τ_r 不能太长、同时系统的 g -因子不能为零 [70, 71]。然而在电学注入的实验中 [47, 48]，通过将电

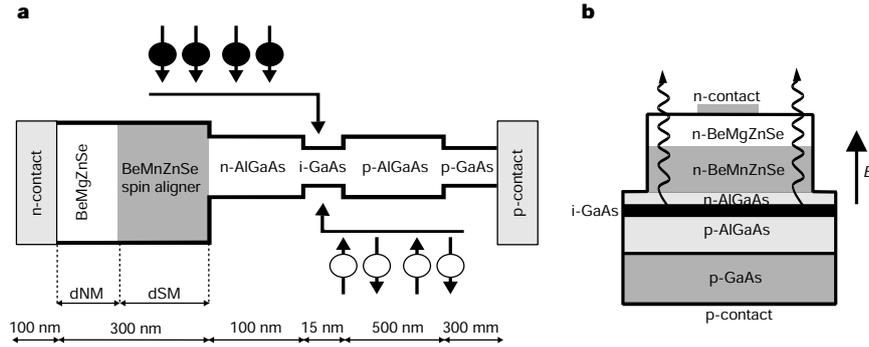


图 1-7: 电致发光测量自旋极化[摘自文献 [48]]。极化的自旋从 $\text{Be}_x\text{Mn}_y\text{Zn}_{1-x-y}\text{Se}$ 中注入到 $n\text{-AlGaAs}$ 中, 进一步在电场作用下和 $p\text{-AlGaAs}$ 中的空穴同时输运到中间本征 GaAs 中复合发光。

子和空穴输运到同一位置上复合发光, 从而测量发光的极化率。图 1-7 给出实验上的示意图。

自从飞秒激光器实现以后, 实验上可以用泵浦-探测方法去测量半导体中的自旋极化的时间演化。首先用圆偏振的泵浦激光激发自旋极化, 在一个时间延迟 Δt 以后, 探测系统自旋性质。探测方法可以分为如下几种: (i) 测量左/右旋光的透射强度 I^\pm , 则光学极化度为 $P_{\text{opt}}(\Delta t) = \frac{I^+ - I^-}{I^+ + I^-}$ 。根据公式 (1.7) 可以得到自旋极化度, 通过调节 Δt 的变化, 可以得到自旋极化度随着时间的变化 [47, 77, 154, 155]。 (ii) 时间分辨的 Faraday/Kerr 旋转测量。测量时使用线偏光入射, 然后测量透射光/反射光的偏振方向的偏转角度, 可以得知自旋极化的信息。对于透射光即为 Faraday 旋转角度, 反射光即为 Kerr 旋转角度。理论上 Ostreich 等人 [156] 通过建立 Bloch 方程研究了自旋极化和偏转角度之间的关系, 在小角度偏移时, 可以认为自旋极化度和偏转角度成正比关系。图 1-8 是这两种测量的示意图。时间分辨的 Faraday 旋转测量中首先用圆偏振的泵浦光在半导体中激出自旋极化, 在经过一段时间延迟 Δt 以后, 再利用一束传播方向稍微偏离泵浦光入射方向的线偏探测光通过磁性介质, 由于半导体中有自旋极化, 根据 Faraday 效应, 探测光的偏振方向会发生偏转, 这个偏转的角度 θ_F 就可以反映样品中磁矩的大小。时间分辨的 Kerr 旋转测量就是将时间分辨的 Faraday 旋转中的探测光由透射改为反射。由于飞秒激光器的出现, 时间延迟 Δt 可以达到几十飞秒量级, 相比较自旋弛豫时间而言, 可以有效地反映自旋极化的时间演化过程。现在时间分辨的 Faraday/Kerr 旋转已经被越来越多的应用于探测自旋极化的时间演化实验中 [55, 56, 74–76, 78, 81, 82, 118–121, 157–163]。

1.4.2 电学测量

电学测量方法不同于光学测量, 它的响应时间要远远长于光学的响应时间。因此, 对于弛豫时间比较快的系统如二维或者三维系统, 它几乎不可能获得自旋极化时间演化

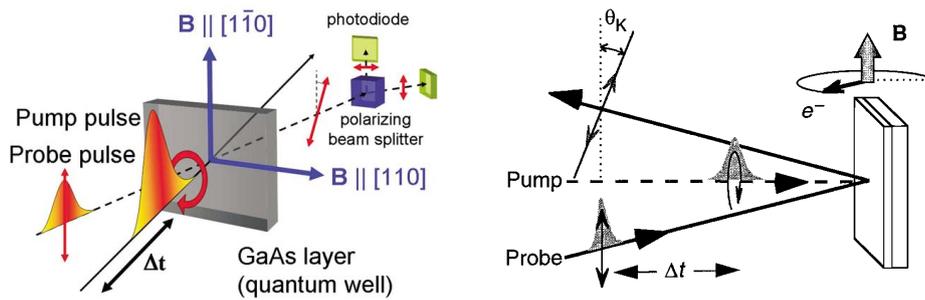


图 1-8: 时间分辨的 Faraday 旋转角度测量(左图, 摘自文献 [161])和时间分辨的 Kerr 旋转角度测量(右图, 摘自文献 [74])示意图。这两种测量都是先用圆偏振的泵浦光在样品中激发出自旋极化, 然后在经过一小段时间 Δt 以后通过探测线偏振的探测光通过(Faraday 旋转角度测量) 或者反射 (Kerr 旋转角度测量)以后的偏振角度的变化值 θ_F/θ_K 来确定自旋极化的大小。

的信息, 一般通过测量电阻的变化来反映系统稳态时的自旋极化的大小; 然而对于自旋弛豫时间很长的系统如量子点系统, 它也可以获得时间演化的信息, 并且被用于测量系统的自旋弛豫时间, 这一部分我们放在后面量子点中回顾。

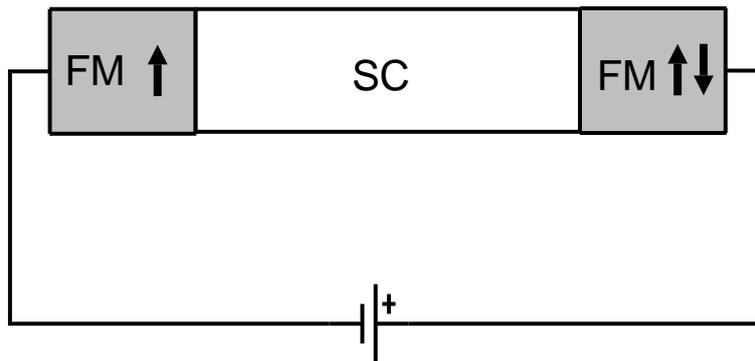


图 1-9: 自旋阀的原理示意图。

在两维或者三维系统中, 电学测量最直接的方法就是利用自旋阀设备来直接测量电阻的变化。示意图如图 1-9。左边铁磁金属 (源极) 注入的自旋经过半导体后由右边的铁磁金属 (漏极) 流出。通过选择不同矫顽力的铁磁体, 实验上可以将源极的磁矩钉扎在一个固定的方向, 然后改变右边漏极中磁矩取向, 测量出电阻差异就可以反映半导体中的自旋极化状况。和从铁磁向半导体中注入的结果一样, 接触的界面将会对这种测量产生非常大的影响, 最好可以形成欧姆接触。

Johnson [164]在 1998 年进一步给出这种测量的详细的实验装置图以及理论根据。图 1-10 给出他的理论示意图。其中图 (a) 和 (b) 分别给出铁磁电极的磁化方向相反时半导体和铁磁电极的能带示意图。由于铁磁或者半导体的不同自旋子带的电导是正比于其态密度的, 故两部分连接在一起的时候, 对应的自旋子带整体的电导可以

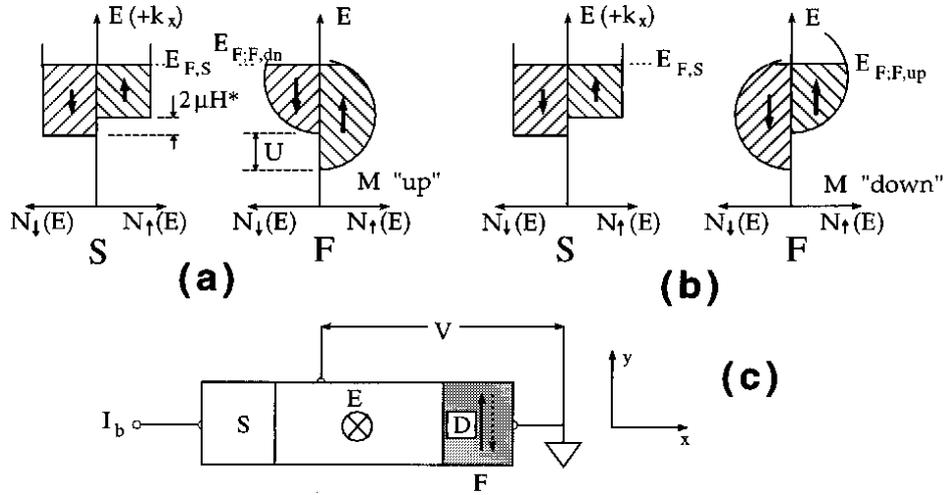


图 1-10: Johnson 在提出的整流效应的理论示意图[摘自文献 [164]]。其中图 (c) 是试验装置示意图。(a) 和 (b) 对应这半导体和不同磁矩方向的铁磁电极的能带图。

用 $g_{\sigma}^{-1} = \sum_i g_{i,\sigma}^{-1}$ 表示，而系统的总电导是 $G = \sum_{\sigma} g_{\sigma}$ 。因此在铁磁的极化方向改变的时候，整体的电导变化可以很容易得到：

$$\frac{\Delta G}{G_1 + G_2} = \frac{\Delta R}{R_1 + R_2} = \frac{g_{\min,F} - g_{\max,F}}{g_{\min,F} + g_{\max,F}} \frac{g_{\min,S} - g_{\max,S}}{g_{\min,S} + g_{\max,S}}. \quad (1.9)$$

其中 $g_{\min/\max,F/S}$ 分别表示铁磁和半导体中自旋少子和自旋多子对应的电导， G_i 和 R_i 表示铁磁部分取不同磁矩时候的整个系统的电导和电阻。这种做法中没有考虑界面电阻的贡献，因此适用于欧姆接触的情况。后来，Hammar 等人 [95]按照这种方法进行了实验测量，得到自旋注入效率为 20%

另外，Schmidt 等人 [89]在欧姆接触区的自旋电学注入问题的研究中就包括了如何用电学的方法探测自旋极化。他们计算了系统电阻在两端铁磁金属的磁矩方向平行或者反平行时的电阻 R_{par} 及 R_{anti} ，得到

$$\frac{R_{\text{par}} - R_{\text{anti}}}{R_{\text{par}}} = \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \frac{\lambda_{\text{fm}}^2 \sigma_{\text{sc}}^2}{\sigma_{\text{fm}}^2 x_0^2} \frac{4}{(2 \frac{\lambda_{\text{fm}} \sigma_{\text{sc}}}{\sigma_{\text{fm}} x_0})^2 - \beta^2}. \quad (1.10)$$

可见只有在铁磁的极化 $\beta \sim 1$ 附近才会有明显的磁电阻，一般来说实验上观测到比较困难。他们在 2004 年的实验中 [165]将铁磁改为稀磁半导体，通过外加磁场的方法固定其

磁矩方向，可以得到比较高的磁阻变化。图 1-11 是他们的实验示意图。随着磁场的增

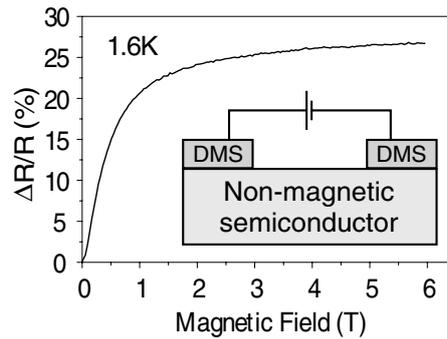


图 1-11: 磁电阻效应[摘自文献 [165]]。插图中两块稀磁半导体在磁场作用下是分别用于自旋注入和检测。纵轴给出的磁电阻的变化。其中 $\Delta R = R(B) - R(0)$ 。

加，自旋注入效率提高，从而检测到的自旋极化 (磁电阻的变化) 也相应的变大，自旋注入效率最高达到 25%。

最近，Lou 等人 [166,167]用电的方法测量了在正向偏压下 Fe 和 *n*-GaAs 之间形成的 Schottky 势垒中的自旋积累。他们认为自旋积累会在结两边造成额外的电压降，并且磁场可以抑制其中的自旋积累，通过测量随着磁场变化的电压变化就可以得出推出其中自旋积累的大小，装置和结果见图 1-12。

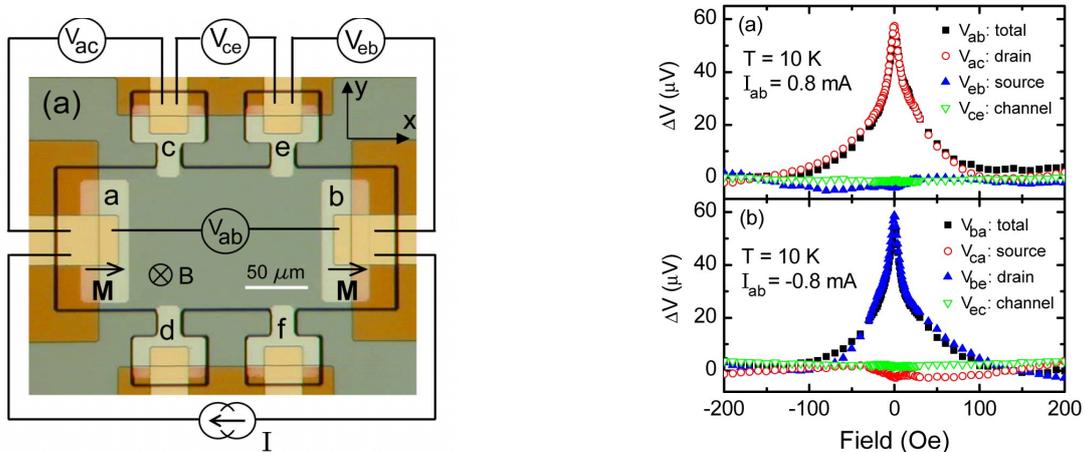


图 1-12: Schottky 势垒中的自旋积累磁场下导致的其两端电压的变化[摘自文献 [166]]。左图为实验装置示意图，其中 Schottky 势垒在 a,c 之间，右图为实验结果。

1.5 自旋弛豫过程与自旋扩散/运输

实现自旋电子学器件一个非常重要的条件就是需要自旋信号在半导体中的弛豫时间足够长以及传输距离足够远。实验上和理论上围绕着这个问题做了大量的研究。虽

然对自旋电子学的研究很早就已经涉及到，比如 Mott [168]早在 1936 年就用电子自旋性质来解释铁磁金属中的电阻的反常行为，提出在低温下磁振子之间散射比较弱的时候，可以用自旋朝上和朝下电子的两流体模型来理解铁磁金属中的电流行为。决定半导体中自旋弛豫的三个重要机制：Elliot-Yafet (EY) 机制 [169]、D'yakonov-Perel' (DP) 机制 [170]以及 Bir-Aronov-Pikus (BAP) 机制 [171]也早在上世纪七十年代就已经在理论上提出以及在实验上观测到。然而，直到 1997 年左右 Kikkawa 等人 [74-76]的实验才使得第二类自旋电子学的实际应用成为可能。他们利用时间分辨的 Faraday 旋转测量 GaAs 半导体体材料中自旋极化的时间演化，发现在很广的温度和磁场范围内自旋弛豫时间都超过 100 纳秒 [75](见图 1-13)以及自旋信号可以扩散/输运到 100 微米 [75]以外(见图 1-14)。二维 ZnSe 材料中自旋弛豫时间最长也可以达到 1.5 纳秒。此后，实验以及理论上都对自旋弛豫/输运/扩散过程做了大量的研究。

1.5.1 最近的实验进展

Crooker 等人 [159,160]最早在掺 Mn^{+2} 的磁性半导体量子阱中利用时间分辨的 Faraday 旋转探测激发的自旋极化的时间演化。其中他们观测到了空穴、电子以及 Mn^{+2} 离子的自旋信号随着时间的演化：空穴极化很快就弛豫掉了，而 Mn^{+2} 离子却可以持续好几百皮秒，电子的弛豫时间在几十皮秒量级。理论上 [156,172]通过建立 Bloch 方程给出了 Faraday 旋转角和自旋相干的关系，很好的描述了他们的实验。接着 Kikkawa 等人 [75]采用光学泵浦探测方法利用时间分辨的 Faraday 旋转测量得出了体材料 GaAs 中的自旋弛豫时间 [74]。从图 1-13 中可以看出自旋弛豫时间对电子浓度有非常大的依赖关系，并且对于体材料 GaAs，当浓度为 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 时自旋弛豫时间达到最长。这些实验结果对应的自旋极化都是小极化 (除了本征激发以外，其余三条线对应的自旋极化不超过 2%)。在本征半导体和低浓度时，自旋弛豫时间随着磁场增加而减小，而对高浓度样品，自旋弛豫时间随着磁场增加而增加。同时，除了本征半导体以外，其他三个样品中在各个磁场下自旋弛豫时间都是随着浓度增加而减小。这里自旋弛豫时间在零磁场时可以达到 100 纳秒以上。

随后，在 GaAs 量子阱中也获得了非常长的自旋弛豫时间。Ohno 等人 [77]利用光致发光方法测量发光极化率的时间演化得到 (110) GaAs 量子阱中自旋弛豫时间长达几个纳秒，以及在 (001) GaAs 量子阱中低温下 (低于 10 K)的自旋弛豫时间接近 1 纳秒的结果 [154]。而后，Adachi 等人 [155]在室温下 n 型 GaAs 多量子阱系统中测量得到自旋弛豫时间超过 10 纳秒。同时他们也测量了自旋弛豫时间的温度依赖关系，对于沿着 (110) 方向生长的量子阱，在没有掺杂的样品中观察到自旋弛豫时间随着温度上升，并且在温度高于 20 K 时成 $T^{0.6}$ 关系，根据温度依赖关系，他们认为这里的自旋弛豫时间主要由 BAP 机制决定。而对于沿着 (001) 方向生长的量子阱，在他们的实验参数下，自旋弛豫时间随着温度先是下降，然后在 200 K 左右开始上升，其中自旋弛豫主要由 DP 机制决定。后来，Zhou 等人 [54]用完全微观的动力学自旋 Bloch 方程在无拟合

参数的情况下非常好的拟合了这个结果，这表明这些实验中的自旋弛豫主要是由非均匀扩展引起的自旋弛豫造成的。

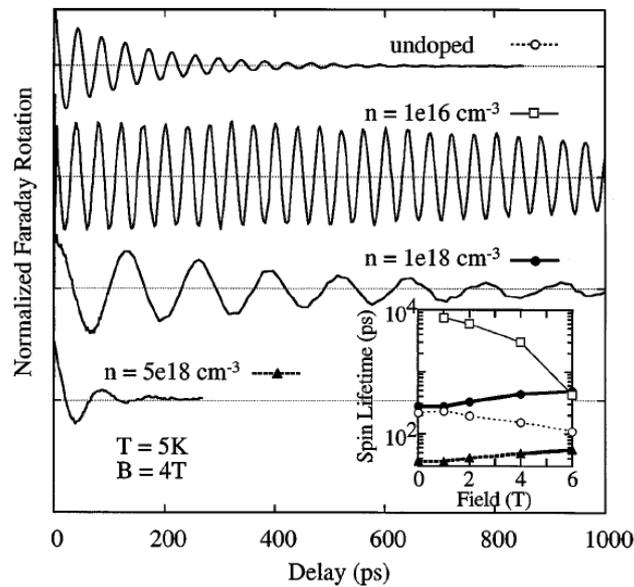


图 1-13: 自旋极化在 GaAs 体材料中时间演化[摘自文献 [75]]。探测方法是时间分辨的 Faraday 旋转，其中的振荡是由于有外加磁场。插图给出自旋弛豫时间随着磁场的变化关系，分别对应电子浓度为 $n = 0, 10^{16}, 10^{18}$ 以及 5×10^{18} ，以及激发浓度 $n = 2 \times 10^{14}, 2 \times 10^{14}, 1.4 \times 10^{15}$ 以及 $3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ，其对应的线型和大图中的一致。由于有些浓度下自旋弛豫时间太长，时间分辨的 Faraday 旋转直接测量比较困难，插图中的自旋弛豫时间是通过自旋共振放大测量方法得到的：通过泵浦光的连续激发，调节磁场的大小可以使信号达到共振，测量对磁场的共振宽度可以得到自旋弛豫时间。具体见文献 [75]。

自旋弛豫时间的温度依赖关系是用来检验理论正确性与否的一个很重要的指标。Adachi 等人 [155]就是根据温度变化关系判断出在 (110) 量子阱中沿着量子阱方向自旋极化的弛豫过程主要是 BAP 机制占主导地位。另外，Malinowski 等人 [173]测量了 (001)-GaAs 量子阱中不同阱宽下自旋弛豫时间随着温度的变化，得到在阱宽为 20 nm 以及温度高于 80 K 时自旋弛豫时间随着温度升高而增加，而在阱宽比较小的时候几乎不随温度变化。这个结果被 Weng 和 Wu [52]用动力学自旋 Bloch 方程很好的解释。Brand 等人 [174]在非常低的温度下 (低于 5 K) 发现即使没有外磁场存在时，自旋极化也会发生振荡，这完全是自旋轨道耦合的作用。并且他们第一次在实验上证明了自旋弛豫所依赖的动量弛豫时间 [见 DP 机制给出的公式(3.56)] 和输运中的弛豫时间是不一样的，说明电子-电子散射在这里会起非常重要的作用。这和理论上 [52, 54, 175]对自旋弛豫时间的研究相一致。

自旋弛豫时间对自旋极化方向各向异性在实验上也有很多研究。Döhrmann 等人 [176]对 (110) GaAs 量子阱的研究表明，除了沿着量子阱生长方向的自旋弛豫时间非常长以外，在有横向磁场存在时，量子阱平面的自旋弛豫时间非常短 (几百皮秒)，系统

表现出很强的各向异性。他们是根据如下的公式测得平面的自旋弛豫时间:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} s_x \\ s_z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \gamma_x & -\omega \\ \omega & \gamma_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_x \\ s_z \end{pmatrix}, \quad (1.11)$$

其中 $s_{x/z}$ 是自旋极化, $\gamma_{x/z}$ 是沿着 x/z 方向的自旋弛豫率, ω 是 Lamor 进动频率。求解得到

$$s_z(t) = s_0 \frac{e^{-(\gamma_x + \gamma_z)t/2}}{\cos \varphi} \cos(\omega_a t - \varphi), \quad (1.12)$$

其中 $\tan \varphi = \frac{\gamma_x - \gamma_z}{2\omega_a}$ 以及 $\omega_a = \sqrt{\omega^2 - (\gamma_x - \gamma_z)^2/4}$ 。因此在有外加磁场时测量沿着 z 方向自旋极化的时间演化, 按照上面的公式也可以得到平面内的自旋弛豫时间。后来, Stich 等人 [161]用时间分辨的 Faraday 旋转研究了 (001)-GaAs 量子阱中的自旋弛豫时间对自旋极化方向各向异性, 不过他们这里是由于同时存在 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合时, 出现一个特殊的方向 (110), 沿着这个方向的自旋极化弛豫时间要远远长于其他的方向。在理论上, 动力学自旋 Bloch 方程的结果和实验结果拟合的非常好。不管怎么说, 上面实验中的各向异性都是由于自旋轨道耦合产生的有效磁场有一个特殊方向引起的。最近, 实验上也研究了很高的初始自旋极化下的自旋弛豫过程。Stich 等人 [81,82]利用时间分辨的 Faraday 旋转测量 n -型 (001) 方向生长的 GaAs 材料在有很高的激发浓度时的自旋弛豫时间。他们发现随着自旋极化的增加, 自旋弛豫时间也很快得增加; 同时, 在高极化下的自旋弛豫时间随着温度的升高而下降, 和低极化下的结果相反; 另外, 随着极化变大, 有效 g -因子的大小快速减小。这些结果验证了 Weng 和 Wu [52]最早关于高极化下自旋弛豫过程的理论预测。

除此之外, 电子自旋极化和原子核极化之间的相互作用 [177,178]、Si/SiGe 材料中自旋回声 (spin echo) 下的自旋去相位时间 [179]以及氮化物材料 [180]中的自旋弛豫等也得到了相当多的关注。

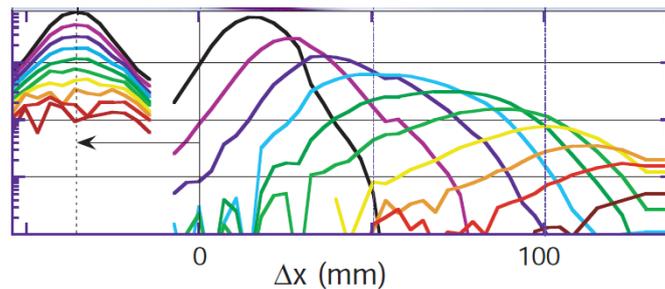


图 1-14: 自旋极化的空间运输[摘自文献 [76]]。(横轴的单位应该是 μm , 原文中有误。)

除了空间均匀系统中的自旋弛豫/去相位以外, 空间不均匀系统中的自旋输运/扩散也得到了大量的关注 [181]。Dzhioev 等人 [182]估计了 n -型 GaAs 材料中的自旋扩散长度大概为 $10 \mu\text{m}$ 左右。Hägele 等人 [183]在本征半导体中激发自旋极化并且在发现它们可以扩散到 $4 \mu\text{m}$ 外的地方复合发光。后来, Kikkawa 等人 [76] 首次采用时间分辨

的 Faraday 旋转测量了 GaAs 体材料中空间分辨的自旋运输，具体测量方法是在相同的时间延迟下测量不同位置上的 Faraday 偏转角度。测量结果见图 1-14，其中每条曲线之间的时间间隔都是激发的脉冲的事件间隔 t_{ep} 。图上分为两部分，左边的是没有电场的结果，可见自旋波包高度逐渐变小，宽度变宽，自旋信号可以扩散到几十 μm 以外；右边的是施加了 10 V/cm 方向向左电场的结果，自旋波包在高度变小以及宽度变宽的同时还在向右运输，此时，自旋极化信号运输到 $100 \mu\text{m}$ 远的距离外；另外，施加方向向右的电场时的结果和电场方向向左时的结果对称。Crooker 和 Smith [55]研究了在有应力的情况下 n -型 GaAs 材料中的自旋波包运输问题，他们发现在有应力的情况下自旋极化会在空间上振荡，这和应力产生的自旋轨道耦合有很大的关系，与 Weng 和 Wu 最早在有 Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合的两维系统中自旋波包在运输过程中会振荡的预测一致 [57,58]。自旋扩散长度对电场有很强的依赖，但是自旋进动周期却几乎不随电场变化，后来 Beck 等人 [56]在实验上验证了这个结果，见图1-15；理论上用动力学自旋 Bloch 方程求解两维电子气中的运输问题也得到了同样的结果 [60–62]。

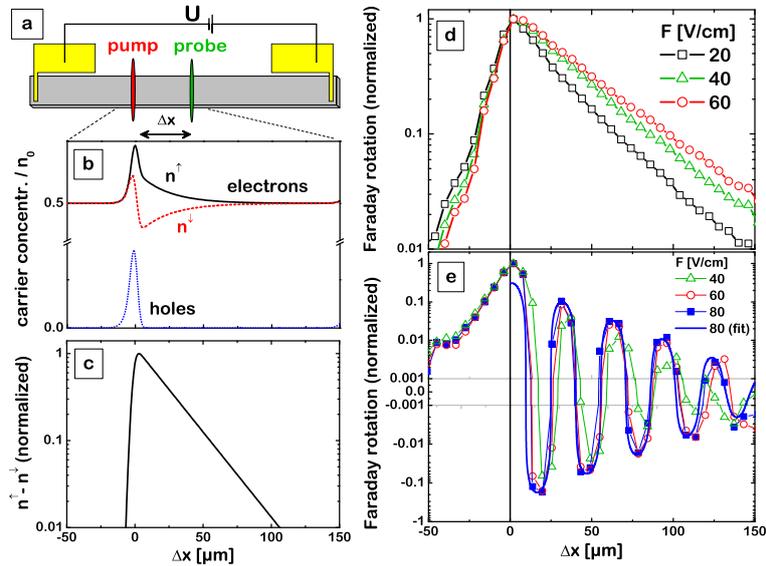


图 1-15: 自旋极化运输中在空间上的振荡[摘自文献 [56]]。(a)是试验装置图；(b) 计算得到的空穴以及自旋朝上和自旋朝下电子浓度的空间分布；(c) 计算得到的自旋极化的空间分布；(d) 没有应力时不同电场下的自旋运输；(e) 有应力时不同电场下自旋运输，可见自旋振荡周期与电场无关。

最近实验上通过对自旋光栅 (Spin Grating)的测量得到自旋弛豫时间以及自旋扩散系数 [184–187]。如果在空间两束相对入射的激光的极化方向不是同一个方向，虽然光场在空间上是均匀的，但是极化方向却是在左旋、线偏以及右旋光之间变化。如果用于半导体中激发自旋，则得到的极化会在空间上周期变化，从而产生自旋光栅。通过分析不同波长激光激发下的自旋信号的衰减速率 Γ_q ，根据公式 [184]

$$\Gamma_q = D_s q^2 + 1/\tau_s \quad (1.13)$$

可以得到自旋扩散系数 D_s 和自旋弛豫时间 τ_s 。由于在扩散区的自旋输运和自旋弛豫过程是紧密联系在一起的，上面的这个公式是否合适还是需要检验的。Weber 等人 [187]发现在自旋光栅中自旋信号的衰减其实是一个双指数的形式 Γ_q^\pm ，Weng 等人 [188]用完全微观的动力学自旋 Bloch 方程解析和数值的仔细研究了这个问题，给出了如何根据实验结果得到真正的 D_s 和 τ_s 的方法。

1.5.2 理论进展

半导体中自旋弛豫/去相位机制主要包括 EY 机制、DP 机制、BAP 机制以及电子和原子核超精细相互作用导致的自旋弛豫。其中 EY 机制和 BAP 机制来源都是自旋翻转的散射，可以直接用费米黄金规则处理，给出自旋翻转速率。然而对于 DP 机制，它来源于自旋轨道耦合和自旋守恒散射共同作用产生的有效自旋翻转，使用动力学方程处理，给出自旋弛豫时间是由自旋轨道耦合以及动量弛豫时间共同决定。不过对于 DP 机制，都是对强散射区域以及各向异性的自旋轨道耦合研究的。另外因为电子-电子散射对动量弛豫没有贡献，导致人们在很长时间内认为电子-电子散射不会造成自旋弛豫。最近 Wu 提出了采用非均匀扩展的观点来重新理解自旋系统的弛豫过程，指出在有非均匀扩展的自旋系统中，任何散射包括自旋守恒散射，特别是电子-电子散射，都会造成不可逆自旋弛豫/去相位。这种新的理解远远超出了 DP 机制的内容。通过求解动力学自旋 Bloch 方程，他们的理论结果非常好的预测和解释了实验结果。我们将在第3章详细讨论这些内容。

自旋极化在空间上的输运/扩散也引起了广泛地关注。最早的研究是建立在两分量的漂移扩散方程基础上的 [30, 189–194]，主要是把自旋朝上和自旋朝下的电子看成两类不同的粒子，每一类单独使用漂移扩散方程。Flatté 和 Byers [189]最早利用这个理论研究了在本征/掺杂半导体系统中的电荷和自旋波包的扩散过程。对于电荷波包的输运，扩散系数以及迁移率是由下式决定：

$$\mu_a = \frac{(n-p)\mu_e\mu_h}{n\mu_e + p\mu_h}, D_a = \frac{n\mu_e D_h + p\mu_h D_e}{n\mu_e + p\mu_h}. \quad (1.14)$$

可以看出对于 n 型掺杂系统， $n \gg p$ ， $\mu_a \sim \mu_h$ 以及 $D_a \sim D_h$ ，系统的扩散是由空穴的性质决定。而对于 n 型掺杂系统的自旋波包的输运，扩散系数以及迁移率是由

$$\mu_a = \frac{(n_\uparrow + n_\downarrow)\mu_\uparrow\mu_\downarrow}{n_\uparrow\mu_\uparrow + n_\downarrow\mu_\downarrow} = \mu_e, D_a = \frac{n_\uparrow\mu_\uparrow D_h + n_\downarrow\mu_\downarrow D_e}{n_\uparrow\mu_\uparrow + n_\downarrow\mu_\downarrow} = D_e \quad (1.15)$$

决定，和电子的扩散系数以及迁移率一样。从这里可以看出，电荷波包的扩散行为和自旋波包的扩散行为完全不一样。不过，后来的研究表明自旋系统的扩散系数要比上面两分量模型讨论的结果复杂的多，并且由于库仑拽引效应，自旋扩散系数要比电荷扩散系数小的多 [187, 188]。紧接着，Yu 和 Flatté [190, 191]利用漂移扩散方程考虑了自旋极化

在半导体内的扩散和从铁磁到半导体内的注入。利用方程

$$\nabla^2(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) + \frac{e\mathbf{E}}{k_B T} \cdot \nabla(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{L_s^2}. \quad (1.16)$$

给出当电场方向沿着或者逆着自旋扩散方向时的自旋扩散长度 $L_{d/u} = \left\{ - (+) \frac{|eE|}{2k_B T} + \sqrt{\left(\frac{eE}{2k_B T}\right)^2 + \frac{1}{L_s^2}} \right\}^{-1}$ 。Csontos 和 Ulloa [194]考虑了空间电荷不均匀系统的自旋输运，指出电场梯度在界面的输运中起着很重要的作用。

但是在使用漂移扩散方程时只考虑了自旋朝上和自旋朝下的电子各自的输运，没有考虑它们之间的关联在输运中的作用。Weng 和 Wu [195]最早指出自旋相干在空间自旋极化输运中起着非常重要的作用。在考虑了自旋相干项以后，他们预测在 200 K 的温度下自旋波包的空间输运过程中即使没有外磁场的时候也会出现振荡 [57, 58]。这个预测已经被随后的理论 [60, 196]和体材料中在非常低的温度下的实验 [55, 56]证实。在这之后，大部分的理论工作中都考虑了自旋相干的贡献 [59–62, 197–206]。Jiang 等人 [59]使用动力学自旋 Bloch 方程指出库仑拽引会有效地减小自旋扩散的速度。我们采用一套新的数值求解方法求解动力学自旋 Bloch 方程 [61]，研究了 GaAs 系统中在有外磁场以及外电场下的静态扩散/输运问题，发现自旋扩散长度与振荡周期与平面内磁场的方向有非常大的关系，并且证实了实验上电场作用下的振荡周期不变 [55, 56, 60]。在同时考虑了 Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合的系统中，自旋输运的各向异性也被仔细的研究 [62, 63]。我们的研究表明，此时的自旋扩散长度不仅仅对自旋极化方向有个很强的各向异性，更为重要的是，对自旋扩散方向有很强的各向异性。当 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的强度可以比拟时，沿着 $(\bar{1}10)$ 方向的输运可以获得更长的自旋扩散长度。

另外，漂移扩散方程可以写成与自旋极化有关的方程 [197–200]:

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \mathbf{S}}{\partial x^2} - \alpha \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial x} + \beta \mathbf{S} = 0. \quad (1.17)$$

其中 \mathbf{S} 是自旋极化矢量， D 是扩散系数， α 和 β 是与外场以及自旋轨道耦合相关的系数。Takahashi 等人 [207]计算了由散射导致的自旋弛豫过程，得到自旋扩散系数随着温度的变化不是单调的。Dery 等人 [208]利用这种方法研究了侧向注入自旋输运问题。Qi 和 Zhang [209]推导了一组宏观的方程用于研究在同时考虑了电场和磁场的条件下的自旋输运问题，不过对于散射项他们采用了弛豫时间近似。此外，系综 Monte-Carlo 模拟也被广泛地用于自旋输运 [196, 210]、自旋注入 [201–205]的研究。自旋注入中，Shen 等人的研究指出 [201–203]，从铁磁到半导体的注入过程中，会在界面处形成 Schottky 势垒，不过自旋极化的注入长度仍然可以达到 $1 \mu\text{m}$ 以上。而 Wang 和 Wu 的研究 [204]发现，由于形成了 Schottky 势垒，会在界面处有一个非常大的垂直于界面的电场，导致很强的 Rashba 自旋轨道耦合，使得自旋极化快速弛豫，

注入长度远远小于 $1 \mu\text{m}$ 。

1.5.3 THz 场对自旋的影响

自旋电子学的最终目标是操纵或者相干控制自旋自由度，以实现可以应用的自旋电子学器件，因此除了需要了解半导体中的自旋弛豫/去相位机制以及扩散/输运过程以外，还需要有有效地调控自旋信号的手段。很多外界条件，如温度、磁场以及电场都可以有效地改变自旋相干性 [6]。比如在量子点中可以通过施加一个周期性的电场可以对其中量子态进行操纵，从而可以实现量子位操作 [211]。半导体系统中自旋相关的能量范围一般都在 meV 量级，刚好处在 THz 场的能量范围内，因此研究 THz 场对自旋系统的影响会有非常重要的意义。在自旋无关的系统中，THz 场可以导致动态的 Franz-Keldysh 效应以及光学子带现象并且已经被广泛地研究。THz 场可以强烈的改变电子的轨道动量及其态密度。而 THz 场等快速变化的电信号对自旋系统的作用却在不久前才得到实验和理论的关注。Kato 等人 [212] 已经证实 GHz (Gigahertz) 电场可以控制量子自旋信息。Tarasenko [141] 指出高频的电场可以和自旋偏转散射共同作用在两维电子气中激发出自旋极化，并且实验上用这种方法产生了自旋流 [125, 213]。Pershin [214] 通过使用一系列磁脉冲有效地延长了两维电子气的自旋弛豫/去相位时间，并且在脉冲的频率范围在 THz 范围内的时候，自旋去相位时间可以延长好几个数量级。Xu [215, 216] 研究了强的 THz 电子对有自旋轨道相互作用的系统的自旋相关的态密度的影响，发现和自旋无关的现象一致，THz 场强烈的改变着每一支的自旋态密度以及系统的费米能，同时他们指出 THz 场会在二维电子气中产生自旋极化。但是我们的研究发现 [217]，THz 场并不会在实验室坐标下激发出自旋极化，但是却可以诱导出一个平面内的 THz 的磁信号。后来，我们在仔细推导了 Xu 的工作以后，指出在他的文章中求解含时 Schrödinger 方程时有错误 [218]，而 Xu 也承认了这点并相应的修改了他的文章 [219]。这里得到的 THz 的磁信号可能可以应用在无磁场存在的磁共振实验中。Jiang 等人 [220] 研究了 THz 场对量子点系统的作用，发现和二维系统的结果类似，THz 也强烈的改变了量子点中的电子能级结构，产生了非常多的子带结构。他们后来的研究表明这些子带结构可以强烈的改变量子点系统的自旋弛豫过程 [221]。Zhou [222] 在二维空穴气中也得到了相同的结果。

1.6 量子点系统

量子点系统指的是其约束尺寸和其中的载流子在各个方向上的德布罗意波长都可以比拟的纳米结构，其特征尺度一般在几十到几百纳米之间，能量尺度在 meV 量级。在这种尺度上，量子点系统中的载流子将表现出非常强的量子效应和分立能级结构，与原子的能级结构非常类似，同样存在壳层结构，故又被称作为“人造原子” [40, 223, 224]。研究量子点系统的性质对于理解量子力学的基础以及量子信息都有

非常重要的意义：这是因为现在实验上已经可以通过调节量子点的约束势来改变量子点的大小以及其中载流子的数目，从而使量子点成为不仅仅是单体的能级结构，而且也是量子的多体效应以及多体之间的关联的研究载体。实验上可以造出不同材料以及不同尺寸的量子点：如夹在两个电极 [225]、正常金属 [226] 或者超导体之间的单个分子 [227, 228]，铁磁的纳米颗粒 [229]，自组织量子点系综 [230]，半导体侧向 [231] 或垂直 [232] 生长的量子点，或者半导体的纳米线或者是碳纳米管等结构 [233–235]。

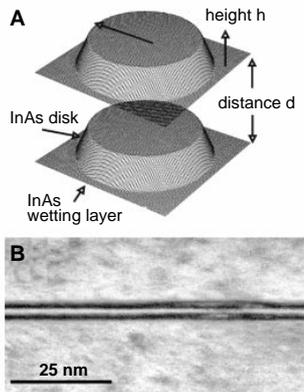


图 1-16: 自组织生长的垂直量子点[摘自文献 [236]]。图 (A) 是生长在 GaAs 衬底上的 InAs 量子点，图 (B) 是被 GaAs 势垒隔开的 InAs 量子点的 TEM 图像。

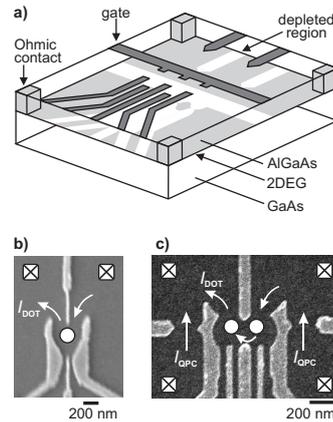


图 1-17: 电极约束的量子点系统[摘自文献 [40]]。其中图 (b) 和 (c) 分别是单个量子点和侧向生长的双量子点示意图。

半导体量子点可以通过自组织生长或者是通过电极约束而形成。早期研究的半导体量子点都是通过自组织生长 [236–239]，其示意图见图 1-16。一般用这种方法生长的量子点数目比较多，可以用光学方法探测其中电子的性质，比如利用光学谱探测其中电子的能级结构 [236, 237] 或者泵浦-探测方法探测自旋弛豫时间 [240] 等。由于量子点是利用不同材料的能带结构的不同生成的，在其长好以后结构就已经固定，很难用外界手段调节。现在的实验技术可以在量子阱/异质结结构上利用电子束刻蚀方法制作大小只有几十纳米的电极，在电极上施加合适的偏压以后可以在量子阱/异质结结构中隔离开相同精度大小的区域而形成量子点 [40, 232, 241, 242]。其结构见图 1-17。对于这种量子点结构，可以通过调节其偏压来控制量子点的约束势，从而控制量子点的大小以及其中电子数目的多少。

量子点的电子性质主要由如下两个方面决定 [40]：(i) 库仑作用。当向量子点中加入一个额外的电子时，需要额外耗费能量用在这个电子和其它电子之间的库仑排斥能量。由于这部分能量，会使得低温下电子电极向量子点中隧穿几率被非常大的抑制，给出所谓的库仑阻塞效应 [243, 244]。很多实验都是利用这个效应来实现的，特别是用在控制量子点中电子的数目。图 1-18 给出控制量子点中电子数目的实验示意图 [232]。其中量子点生长在两层势垒层之间 (见图 (a))，势垒层两边分别为源极和漏极。在量子点的周围加上一个负的偏压，则会减小量子点的半径。这个操作会减小量子点中的电子数目，一

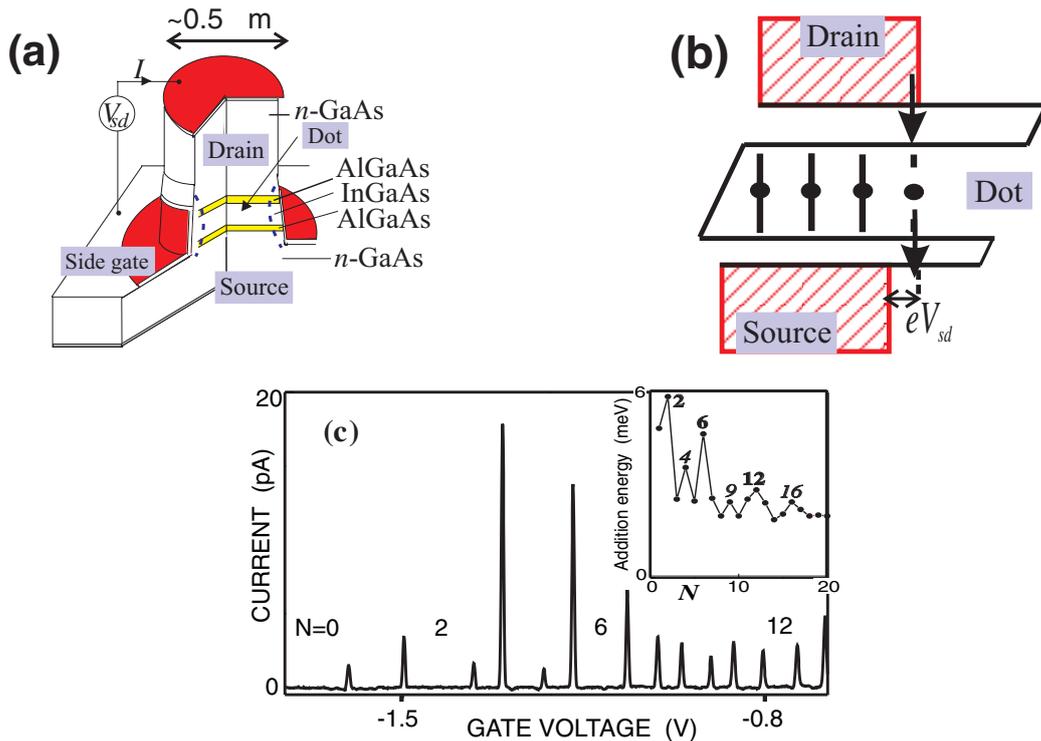


图 1-18: 电极约束的单个量子点示意图 (a) 以及其相应的能带图 (b) [摘自文献 [232]]。(c) 对应进入到量子点中的电子数目和控制量子点大小的门电压之间的关系。

个一个的减少，直到其中没有电子为止。在调节偏压的过程中，电子系统的能级结构会变化。由于库仑阻塞效应，只有从源极出来的电子进入到量子点以后占据的能级仍然匹配源极和漏极的费米面时 (图 1-18 (b))，才会有电流通过。因此测量得到的电流会对应一系列的峰值，并且每个峰值附近都对应着量子点内部电子数目的变化 (图 (c))。(ii) 分立能级结构。量子点在各个方向的约束所给出的分立能级结构将会强烈的影响电子系统的动力学性质，包括自旋性质。

1.6.1 量子点中自旋弛豫：实验测量

对于自组织生长的量子点，形成的量子点数目非常多，可以通过光学方法测量和调控其中载流子的性质 [245–248]。而对于电极约束而成的量子点，实验上是将自旋信号的测量转化为电流信号测量，从而得到量子点中载流子的自旋态 [211, 249–260]。这种方法直接测量量子点中的单个电子状态，随着实验技术的改进，已经可以实现一次性的读出操作 (single-shot readout)，其精度已经达到65% (辩真度 (fidelity) 达到 82%) [253]。从原理上可以分为如示意图 1-19 所示的两类不同的测量 [40]：(a) 通过能量选择读出 [250, 251, 253, 254]。电极的化学势处在两个电子自旋能级能量之间，则只有处在高激发态 ES 上的电子可以隧穿出去，形成电流；而处在基态 GS 上的电子由于能量关系不能隧穿。因此电荷测量中如果显示有电子隧穿出量子点的话，则表示电子占

据在激发态 ES 上，否则占据在基态 GS 上。(b) 通过隧穿率选择读出 [255, 259]。通过不同自旋态和电极之间的隧穿率的不同，比如 ES 态的隧穿率远大于 GS 态的隧穿率 $\Gamma_{ES} \gg \Gamma_{GS}$ 。如果初始时选择电极的化学势远低于这两个态的能量，则这两个态上的电子都可以从量子点隧穿出来。在时间 τ 满足 $\Gamma_{GS}^{-1} \gg \tau \gg \Gamma_{ES}^{-1}$ 以后，则如果电子初始处在态 ES 时， τ 时间后电子几乎全部隧穿出去，而如果电子处在态 GS 时，电子几乎不会隧穿出去，由此可以知道初始时的自旋占据态。

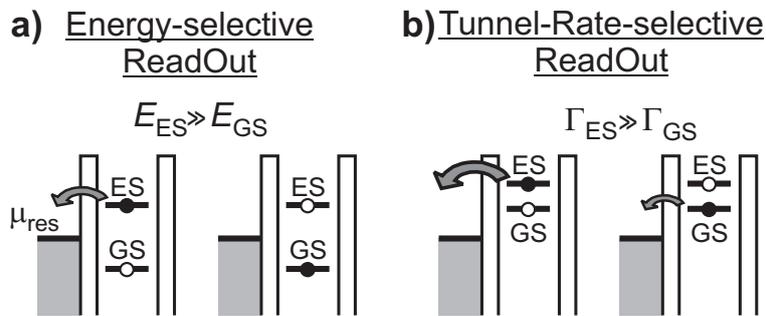


图 1-19: 一次性读出操作的两种不同的测量方式[摘自文献 [40]]。(a) 能量选择读出操作；(b) 隧穿率选择读出。

应用上面的测量方法，实验上测量了单个量子点 [253, 255, 259–261]和双量子点 [211, 249, 256–258, 262] 中的自旋性质。单量子点中，Elzerman 等人 [253]和 Amasha 等人 [259]测量得到的单个电子自旋弛豫时间，以及 Hanson 等人 [255]测量得到双电子系统三态到单态的弛豫时间都是在毫秒量级。Sasaki 等人 [240]利用泵浦-探测技术测量了从自旋三态到自旋单态的弛豫时间，他们讨论了选择定则在自旋弛豫中的作用，测得的自旋弛豫时间在几百微秒量级。Meunier 等人 [260]在双电子系统中通过改变外磁场来改变自旋三态和自旋单态之间的能量差，他们发现声子对三单态之间弛豫时间的影响随着这个能量差的变化不是单调的。Shen 和 Wu [45]对这个问题用严格对角化的方法求解了三单态之间的能量差，然后用费米黄金规则计算了自旋弛豫时间，同时指出了在三单态弛豫中广泛应用的选择定则 [240, 260, 263]只有在反交叉点附近才是成立的。实验上得到的自旋弛豫时间比较短，还不能够满足 Divincenzo 所要求的足够长的自旋弛豫时间。为了获得可以扩展的量子逻辑器件，双量子点系统的自旋性质也得到了广泛地关注。Ono 等人 [249] 最早在弱耦合的双量子点中根据自旋阻塞效应实现了整流：他们实验示意图见图 1-20，其中一个量子点中始终占据一个电子 (通过一个小的偏压可以实现)。由于是弱耦合，正向偏压下量子点 1 中可以等几率的注入不同自旋的电子，不过由于自旋阻塞效应，自旋朝上的电子在隧穿到量子点 2 时需要形成的自旋三态的能量太高从而被禁止，因此只有自旋朝下的电子可以隧穿通过量子点 2。如果系统的自旋弛豫时间足够的长，则量子点 1 总是有机会被自旋朝上的电子占据而不再隧穿出去，从而不会有电流。但是如果是反向偏压，自旋朝下的电子始终可以通过这两个量子点。从而实现了整流效应。

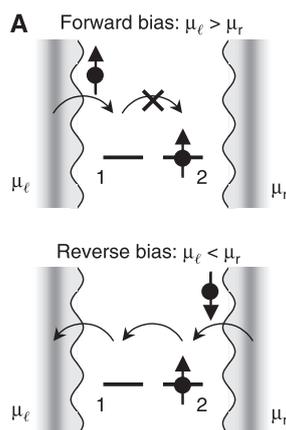


图 1-20: Ono 等人用双量子点利用自旋阻塞效应实现整流的示意图[摘自文献 [249]]。

如果量子点是通过自组织生长或者对单个量子点多次测量的话，相当于量子点系综的性质，上面介绍的大部分实验都是这种类型。此时，由于量子点的尺寸差异或者是在不同时刻测量时量子点所处的环境的变化，比如原子核和电子之间的超精细相互作用产生的随机有效磁场在不同时刻有不同的取向 [211, 257, 262]，都会使电子自旋围绕磁场进动的周期有个展宽，导致最终测量的横向自旋弛豫时间为系综自旋弛豫时间 T_2^* ，仅为几十纳秒左右。不过，这种量子点尺寸的扩展或者测量时超精细相互作用的影响可以通过实验手段消除。Petta 等人 [211] 在自旋回声 (spin echo) 实验中以及 Greilich 等人 [264] 在单个量子点中使用锁相技术都发现系综的横向自旋弛豫时间可以延长到微秒量级。这种测量所对应的是不可逆自旋去相位时间 T_2 ，和我们理论计算 [41–43, 45] 得到的单个量子点中不可逆的自旋弛豫时间 T_1 类似，都对应单个量子点中不可逆的弛豫过程。图 1-21 给出实验上 Petta 等人 [211] 在单个用电极约束的量子点中通过调节电极的偏压来实现自旋回声的步骤和结果。从图 (A) 上可见，初始激发自旋到 S 态上，会在原子核的超精细相互作用场下向 T 态进动，由于超精细相互作用场的随机性，在不同时刻下测量在相同时间间隔 τ_s 内得到的旋转角度不同，会使自旋极化有个额外的衰减。然后在 τ_E 时间使自旋信号快速的旋转 π 角度以后，接下来的 $\tau_{s'}$ 时间内会恢复这部分由于进动不同而导致的衰减。具体见第 3.2 节的详细推导。图 (C) 给出的是测量结果，通过调节不同的 τ_s 和 $\tau_{s'}$ 的大小，对 $\tau_s + \tau_{s'}$ 时刻的自旋极化的大小用指数函数拟合就可以得到不可逆的自旋去相位时间 T_2 。其中自旋极化对 $\tau_s - \tau_{s'}$ 的演化就是通常测量的系综的自旋去相位时间。可见，系综的自旋弛豫过程和单个量子点中不可逆的自旋弛豫过程有着非常大的差别。Greilich 等人 [264] 采用锁相技术测量了量子点系综中的自旋弛豫过程。在量子点系综中施加很强的横向磁场，由于量子点尺寸的涨落，会使得其进动频率有展宽。当有一列周期远小于单个量子点中电子自旋弛豫时间的 π -脉冲的圆偏光入射到量子点系综以后，会使得不同频率的电子自旋在每次脉冲到达时刻处在同步的状态，可以消除不同量子点中 g 因子展宽引起的相干相消，得到单个量子点的自旋弛豫时间。具体见图 1-22 及其说明。

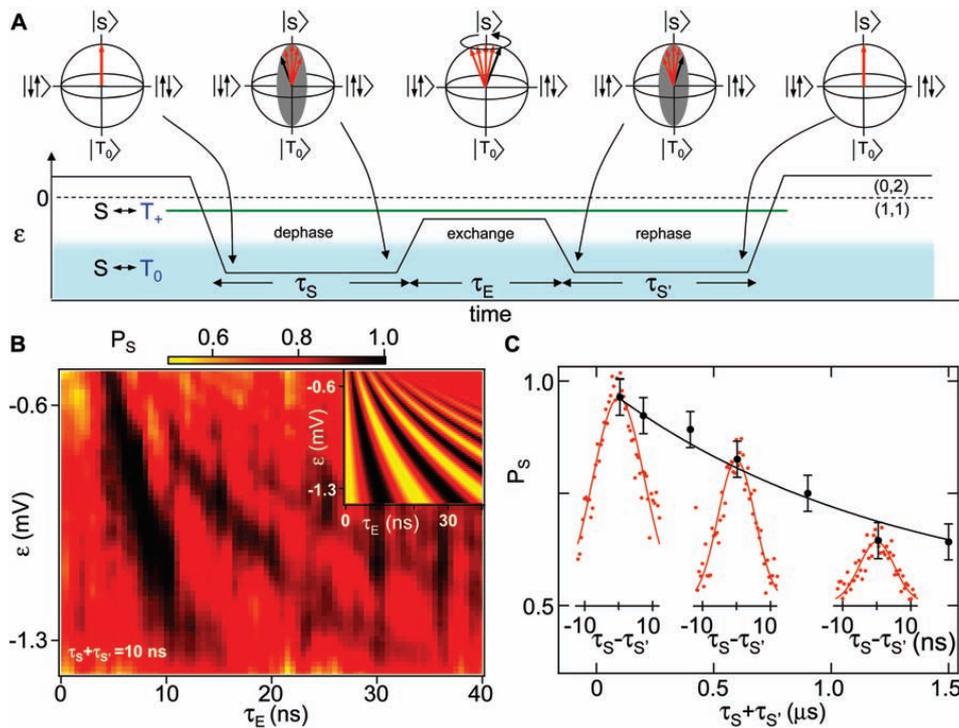


图 1-21: 在量子点系统中利用自旋回声实验测量不可逆的自旋弛豫时间[摘自文献 [211]]。图(A)是实验的流程图, 图(C)是实验测量的结果。

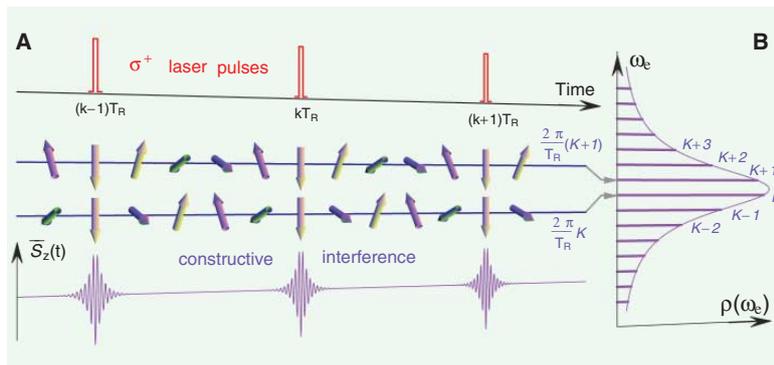


图 1-22: 锁相测量量子点系统的自旋弛豫[摘自文献 [264]]。图 A 的上图给出一列周期为 T_R 的 π 相位的 σ^+ 圆偏光; 图 B 给出量子点系统中不同进动频率上的分布, 由于很大的外磁场作用, 这个频率分布可以写为 $\omega_e = 2\pi K/T_R = K\Omega$ 的形式。由于单个量子点的自旋弛豫时间非常长, 在脉冲到达后的 t 时间内自旋演化可以写为 $-0.5 \cos(K\Omega t)$ 的形式, 磁场的进动被同步。图 A 的中图给出两个不同频率进动的量子点被同步的结果。下图给出系统总得自旋极化的时间演化 $\bar{S}_z(t) = -0.5\Omega \sum_{K=-\infty}^{\infty} \cos(K\Omega t)\rho(K\Omega)$ 。

1.6.2 量子点中自旋弛豫：理论进展

理论上首先要考虑的就是量子点系统中的电子的定态波函数。由于半导体系统的 Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合，电子的自旋朝上和自旋朝下的态会混合在一起，形成新的本征态。其能级结构可以用完全对角化的方法求得 [265–267]。然而，一般的说，和量子点的约束相比，自旋轨道耦合的能量要小的多，因此很多研究自旋弛豫问题的工作中都是把自旋轨道耦合当作微扰处理 [268–271]。因为闭合的轨道态的平均动量始终为零，所以线性项的自旋轨道耦合不能直接耦合轨道态相同的 Zeeman 能级，得到的本征态都是实验室坐标下的自旋朝上/下的混合态，一般都将此时本征态的自旋取向定为其中占绝大部分的自旋 [270] 的方向，给出自旋“朝上”和自旋“朝下”的态。不过对于两电子系统，自旋单态和自旋三态本身就是由不同的轨道态构成，从而自旋轨道耦合可以直接耦合自旋三单态。然而我们指出 [41]，如果微扰考虑只考虑最低几个能级之间的微扰，并且没有考虑自旋轨道耦合对能量的修正，用微扰得到的自旋弛豫时间会和用完全对角化的方法得到的结果有着定性以及数量级上的差距；即使考虑了自旋轨道耦合对能量的修正而没有考虑足够多得能级之间的微扰，两种方法得到的结果也有定量的差别。在这之后，很多工作 [42–45, 272, 273] 都采用完全对角化的方法来求解。

如果量子点中电子有初始自旋极化，在电子和环境耦合如电子-声子散射以及原子核和电子之间的超精细相互作用的影响下，自旋极化会弛豫。文献中讨论的自旋弛豫机制主要有有以下几种：

1. 自旋轨道耦合和电子-声子散射共同作用 [41–45, 268–271, 273]。虽然电子-声子散射不能使不同的自旋本征态之间直接跃迁，但是它却可以使 Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合扰动以后的不同自旋取向的本征态之间跃迁，导致自旋弛豫/去相位。这种弛豫机制和体材料或二维系统的 DP 机制很类似。由于考虑的温度非常的低，电子-声子散射中电子-声学声子散射占主导地位。并且理论研究表明，GaAs 材料中电子-压电声学声子散射对自旋弛豫过程贡献最大 [41, 271]。声子的跃迁速率的大小与自旋轨道耦合的强弱、声子数目的多少、电子-声子散射在不同的电子态之间矩阵元的强弱、以及外磁场都有很大的关系。对于 GaAs 量子点来说，声子一般采用体声子近似。不过由于量子点的结构非常小，也可以激发出表面声子，对量子点的自旋弛豫也有显著的影响 [274]。声子的波长和量子点的尺寸可以比拟的时候，电子-声子之间的有效的耦合比较强，可以给出比较大的跃迁速率 [271, 275, 276]，低温下表现在对自旋朝上和自旋朝下态之间的能量差有个最大值 [260, 276]。对于磁场的作用，主要是用来在能量上区分不同的自旋态。零磁场下，根据 Kramers 简并可知具有相同轨道态的自旋朝上/朝下态简并，它们之间的自旋弛豫率为零；不过不同轨道态之间的弛豫还是存在的。然而对于这种弛豫过程，由于能量差太大（基本上就是量子点的约束能量）从而抑制了它们之间的跃迁。

2. 自旋轨道耦合和电子-表面声子散射的共同作用 [43, 274]。在形成量子点的过程中，材料空间分布的不均匀会造成额外的声子，即表面声子。实验上可以明确的激发出表面声子，这种情况下有比较大的贡献 [274]。并且一般认为对于小量子点，表面声子的贡献会比较重要。但是 Jiang 等人 [43]通过理论计算最近指出，和体声子的贡献相比，表面声子对自旋弛豫的影响始终是可以忽略的。
3. 自旋依赖的电子-声子相互作用 [270, 271]。这是一个两声子过程 [271]。由于自旋轨道耦合作用，导带电子的波函数和价带空穴波函数之间会有混合。因此电子-声子散射可以通过空穴波函数耦合导带电子不同自旋态。这种机制类似于体材料或二维系统自旋弛豫中的 EY 机制。Woods 等人 [271]检验了所有的两声子过程，指出只有这个过程对量子点的自旋弛豫影响最大。两声子过程在低磁场下的贡献比较重要 [277]。
4. 应力作用会在半导体系统中给出额外的自旋轨道耦合贡献，而声子的振动引起的应变会导致直接的自旋声子耦合 [42, 43, 268, 270]。和自旋依赖的电子-声子相互作用一样，这种自旋声子耦合会直接导致自旋弛豫/去相位。
5. 电子和原子核之间超精细相互作用 [43, 278–281]。每个原子核和电子的超精细相互作用给电子提供了一个随机的磁场，使电子自旋做频率和方向都随机变化的磁场进动，导致电子系统的自旋去相位；但是不会引起电子的能量弛豫。不过如果通过声子提供不同能级之间跃迁的能量，也可以导致电子自旋弛豫 [282, 283]。对于自旋去相位而言，超精细相互作用始终有着比较重要的贡献，并且在大阱宽以及小量子点尺寸时占主导地位 [43]。不过超精细相互作用只对电子的自旋去相位有影响，对于空穴的自旋去相位没有影响 [69]。
6. 声子导致的 g 因子随机涨落 [284]。

在处理方法上，大部分的有关自旋弛豫的工作 [41, 42, 45, 268, 268–271, 273]都是采用费米黄金规则计算自旋弛豫时间，而自旋去相位 [43, 278–281]则必须用运动方程的方法求解。不过 Jiang 等人 [43]后来的研究指出，费米黄金规则只有在非常低的温度以及自旋轨道耦合不是很强的情况下才能给出正确的结果。但是运动方程方法却可以严格的给出自旋极化的时间演化，然后拟合出自旋弛豫/去相位时间。大部分的工作只讨论某一种或者少数几种自旋弛豫机制的贡献。Jiang 等人用运动方程的方法比较了各种自旋弛豫机制的相对大小以及在什么时候占主导地位，他们发现随着磁场、温度、量子点的尺寸等条件的变化，没有某一种弛豫机制可以占主导地位，但是 g -因子随机涨落导致的自旋弛豫和表面声子的贡献却是始终不重要的。同时，他们指出只有在温度非常低以及不考虑超精细相互作用的时候，自旋弛豫时间 T_1 和自旋去相位时间 T_2 之间的比值才满足 $T_1/T_2 = 1/2$ [276]，而在高温下，这个比值可以达到一个非常大的值。

后面的章节安排如下：第2章中我们简单的回顾闪锌矿结构的半导体材料的能级结构，给出各种自旋轨道耦合的来源及表达式；在第3章简单回顾了单体系统以及自旋

系综下的自旋弛豫机制，以及动力学自旋 Bloch 方程在自旋弛豫/扩散中的应用。接下来第4章中研究了 GaAs 量子点系统电子自旋弛豫；第5章研究了在考虑了 Rashba 自旋轨道耦合时强的 THz 场对 InAs 二维电子气的态密度及自旋极化密度的影响。第6章首先回顾了受限系统中动力学自旋 Bloch 方程的推导，然后在二维电子气以及一维量子线中简单讨论了只有电子-杂质散射时非均匀扩展引起的自旋弛豫。第7章研究了量子线系统的自旋弛豫；第8章给出在等强度的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合时的二维电子气中的自旋弛豫，给出了不同的统计对自旋弛豫过程的影响。第9章给出量子阱系统自旋运输的结果；第10章给出在同时考虑 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合以后量子阱中的自旋运输中的各向异性。第11章介绍了外禀的自旋霍尔效应动力学过程。最后我们做个总结。

第二章 能带结构和有效哈密顿量

固体中，由于周期性晶格势的作用，电子从原子物理中束缚在原子实附近运动的束缚电子变成了在整个固体中运动的公有化电子。根据绝热近似，可以先假定原子实是处在平衡位置附近，原子实的偏移看成扰动，电子在原子实形成的周期性晶格势下运动。对应的单电子定态薛定谔方程写为：

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) \right] \psi = E\psi . \quad (2.1)$$

这里 m_0 是自由电子质量， $V_0(\mathbf{r}) = \sum_i v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ 是晶格周期势， \mathbf{R}_i 取遍所有的晶格格点。根据周期性晶格势的特点以及和原子波函数的关联，方程 (2.1) 表示的公有化的电子波函数可以在等价的布洛赫 (Bloch) 表象或者瓦尼尔 (Wannier) 表象表示出来：(i) 根据布洛赫定理，周期性晶格势作用下电子波函数可以写成布洛赫形式：

$$\psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) . \quad (2.2)$$

这里 \mathbf{k} 是倒格子空间的倒格矢， ν 是能带指标， $u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)$ 是和晶格势有同样对称性的周期函数。 $u_{\mathbf{k},\nu}$ 对能带指标 ν 是正交归一的。(ii) 若是和局域的原子波函数联系在一起，可以按照瓦尼尔函数展开为：

$$\psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} W_\nu(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (2.3)$$

这里 N 是元胞数目， $W_\nu(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ 表示不同能带的定域瓦尼尔函数，并且对于坐标位置 i 和能带指标 ν 是正交归一的。在紧束缚近似(Tight-Binding Approximation)下， $W_\nu(\mathbf{r})$ 近似为原子波函数 $\phi_n(\mathbf{r})$ 。很容易得出，瓦尼尔波函数和布洛赫波函数的关系为： $u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)} W_\nu(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ 。

需要说明的是，由于固体中有大量电子，并且每个电子的运动都要受其它电子运动的牵连，从而使这种多电子系统的严格求解是不可能的。然而能带理论是一个近似理论：使用单电子近似处理，将原子内除价电子以外的其它电子和原子核近似看成一个离子实，同时其它电子的作用用平均场代替后组成近似的晶格势 $v(\mathbf{r})$ 。然而和原子能级结构不同，在固体中的能级被周期性晶格势扩展成连续的能带，我们可以用 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法近似给出单电子的能级结构以及固体的等价哈密顿量。

2.1 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法

将布洛赫波函数 (2.2) 代入方程 (2.1) 得到:

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = E_{\nu}(\mathbf{k})u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

其中,

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \quad (2.5)$$

给出在有限大小的动量 \mathbf{k} 时的有效哈密顿量。其中的 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 项对电子的有效质量以及能带结构有非常大的影响。从而这种方法也被称作 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法 [285, 286]。一般来说, 对于倒格子空间的高对称点, 如 $\Gamma: \mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 点, $u_{\Gamma,\nu}$ 具有很高的对称性, 由对称性分析出波函数对应的性质, 从而可以用紧束缚近似等方法构造出本征波函数, 然后将高对称点附近的 \mathbf{k} 对这点作微扰展开。 Γ 点对应的方程 (2.4) 化作

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) \right] u_{0,\nu}(\mathbf{r}) = E_{\nu}(0)u_{0,\nu}(\mathbf{r}),$$

其中

$$u_{0,\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{i}} W_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i).$$

在紧束缚近似下, $W_{\nu}(\mathbf{r})$ 和可以用原子轨道波函数近似。得到的本征解记作 $\{u_{0,\nu}(\mathbf{r}), \nu = 1, 2, \dots\}$, 是一组对于半导体能带指标正交完备的基 [286]。而对于一般的 \mathbf{k} 点, 将 $u_{\mathbf{k},\nu}$ 在这组基下展开为

$$u_{\mathbf{k}} = \sum_{\nu'} c_{\nu'}(\mathbf{k})u_{0,\nu'}. \quad (2.6)$$

$\mathcal{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})$ 在这组基下的矩阵元为

$$\langle u_{0,\nu} | \mathcal{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) | u_{0,\nu'} \rangle = \left[E_{\nu}(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \right] \delta_{\nu\nu'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{\nu\nu'}. \quad (2.7)$$

这里 $\mathbf{p}_{\nu\nu'} = \langle u_{0,\nu} | \mathbf{p} | u_{0,\nu'} \rangle$ 。一般来说, 能带数目 μ 是无穷多的。然而在考虑的能带附近, 只有简并或近简并的能带才会对其有很大影响, 其余的可以做微扰, 则上面的方程的数目就可以截断为有限多个。

对于半导体系统, 自旋轨道耦合对决定原子的能级有非常重要的影响, 需要在 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法中考虑。在原子物理中, 自旋轨道耦合是有外场的相对论狄拉克方程作非相对论近似得到的额外相互作用:

$$H_{so} = -\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times (\nabla v(\mathbf{r})). \quad (2.8)$$

这里 c 是光速， \hbar 是普朗克常数。 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 是泡利矩阵矢量， $v(\mathbf{r})$ 是原子势。在半导体材料中，电子的波函数在晶格周期势的作用下由束缚态变成扩展态，并且电子的有效质量比自由电子小很多，导致自旋轨道耦合作用的影响要比原子内的大得多。考虑了自旋轨道耦合以后， $u_{\mathbf{k},\nu\sigma} = \sum_{\nu',\sigma'} c_{\nu'(\mathbf{k})\sigma'} u_{0,\nu'\sigma'}$ 包括了自旋指标，有效哈密顿量化作：

$$\langle u_{0,\nu\sigma} | \mathcal{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) | u_{0,\nu'\sigma'} \rangle = \left[E_{\nu\sigma}(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \right] \delta_{\nu\nu'} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\nu\nu'} + \Delta_{\nu\nu'} \quad (2.9)$$

这里

$$\mathbf{P}_{\nu\nu'} = \langle u_{0,\nu\sigma} | \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0 | u_{0,\nu'\sigma'} \rangle, \quad (2.10)$$

$$\Delta_{\nu\nu'} = \langle u_{0,\nu\sigma} | \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \mathbf{p} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) | u_{0,\nu'\sigma'} \rangle, \quad (2.11)$$

包括了自旋轨道耦合的修正。

2.2 Kane 模型

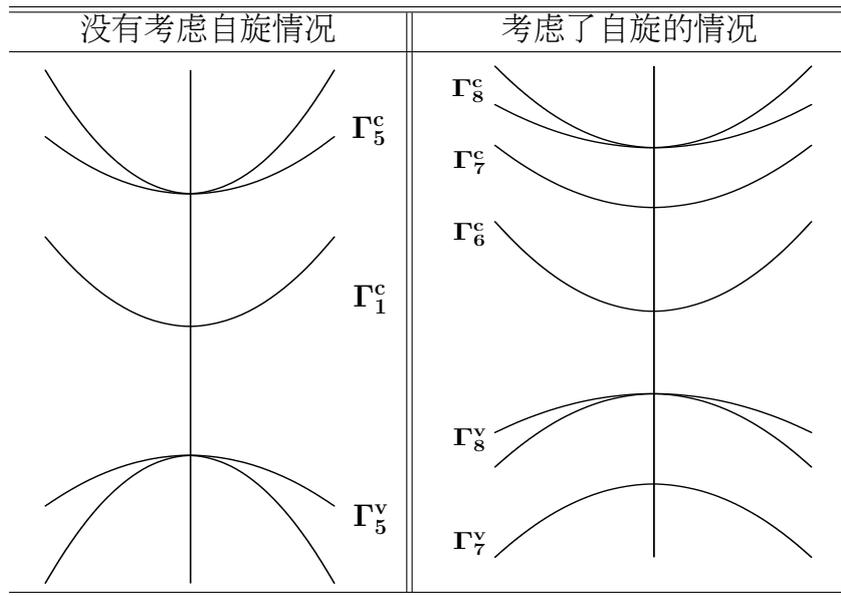


表 2-1: GaAs 半导体能带示意图 [286]

对于闪锌矿结构的 III-V 族半导体材料 GaAs，每个元胞中有两个原子，没有反演对称中心。每个原子只考虑最外层的 s 态和 \mathbf{p} 态原子波函数，则元胞内 Ga 和 As 原子在考虑了自旋以后共能形成 16 个原子波函数： \mathbf{p} 型反键态 (X, Y, Z)， s 型反键态 (S)， \mathbf{p} 型成键态 (X', Y', Z')， s 型成键态 (S')。 s 型成键态总是填满的并且能量很低，因此可以不用考虑。从对称性角度分析，没考虑自旋之前， s 型反键态的

波函数轨道角动量 $l = 0$ ，对应于 T_d 群的 Γ_1 不可约表示 (Γ_1^c)，是导带；**p** 型键的波函数轨道角动量 $l = 1$ ，对应于 T_d 群的 Γ_5 不可约表示 (成键态为价带 Γ_5^v ，反键态为导带 Γ_5^c)。见表 2-1 的左边的示意图。其中在 Γ 点 Γ_5 带对应3重简并。当考虑了自旋自由度以后，按照总角动量 J 划分， $l = 0$ 带变为具有 Γ_6 对称性的 $J = 1/2$ 子带， $l = 1$ 子带分裂成一个四重简并的具有 Γ_8 对称性的 $J = 3/2$ 子带 (轻、重空穴带) 和一个二重简并的具有 Γ_7 对称性的 $J = 1/2$ 子带，这个子带和空穴带的分裂是由自旋轨道耦合引起的，能带 Γ_7^v 又叫自旋劈裂带。示意图见表 2-1 的右图。

Γ_8^c	$ \frac{3}{2}\frac{3}{2}\rangle_{c'} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} X'+iY' \\ 0 \end{vmatrix}$	$ \frac{3}{2}-\frac{1}{2}\rangle_{c'} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} X'-iY' \\ 2Z' \end{vmatrix}$
	$ \frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle_{c'} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 2Z' \\ -X'-iY' \end{vmatrix}$	$ \frac{3}{2}-\frac{3}{2}\rangle_{c'} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 0 \\ X'-iY' \end{vmatrix}$
Γ_7^c	$ \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle_{c'} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{vmatrix} Z' \\ X'+iY' \end{vmatrix}$	$ \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle_{c'} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{vmatrix} X'-iY' \\ -Z' \end{vmatrix}$
Γ_6^c	$ \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle_c = \begin{vmatrix} S \\ 0 \end{vmatrix}$	$ \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle_c = \begin{vmatrix} 0 \\ S \end{vmatrix}$
Γ_8^v	$ \frac{3}{2}\frac{3}{2}\rangle_v = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} X+iY \\ 0 \end{vmatrix}$	$ \frac{3}{2}-\frac{1}{2}\rangle_v = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} X-iY \\ 2Z \end{vmatrix}$
	$ \frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle_v = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 2Z \\ -X-iY \end{vmatrix}$	$ \frac{3}{2}-\frac{3}{2}\rangle_c = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 0 \\ X-iY \end{vmatrix}$
Γ_7^v	$ \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle_v = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{vmatrix} Z \\ X+iY \end{vmatrix}$	$ \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle_v = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{vmatrix} X-iY \\ -Z \end{vmatrix}$

表 2-2: 扩展 Kane 模型的基函数 $\{|jm\rangle\}$ [286]: 根据时间反演对称性可以选择 $|X\rangle$, $|Y\rangle$ 和 $|Z\rangle$ 是实的, $|S\rangle$, $|X'\rangle$, $|Y'\rangle$ 和 $|Z'\rangle$ 是纯虚的。

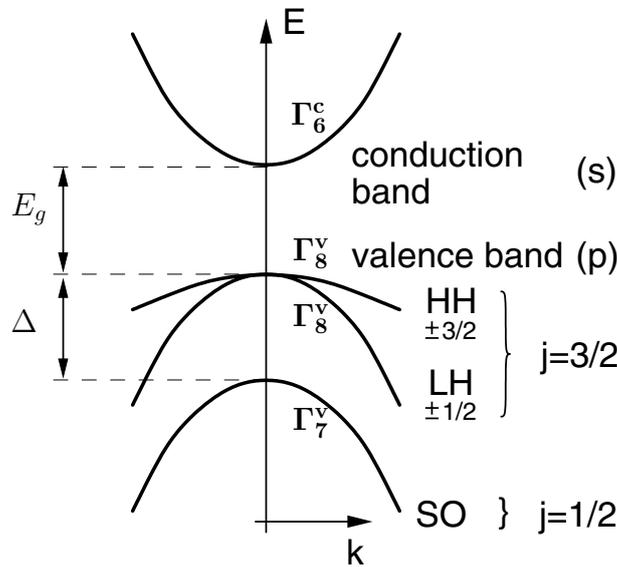


图 2-1: GaAs 半导体在 Γ 点附近能带草图，摘自文献 [286]。

每个能带在高对称点 Γ 点的波函数 $u_{0,\nu\sigma}$ ，可以通过晶格具有的对性求出其具有的对性，从而可以最大程度的简化 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 有效哈密顿量在这组基下的表示。由于 Γ 点

对应的动量 $\mathbf{k} = 0$ ，其在晶格点群对称操作下保持不变，不容易分析其对称性。因此可以通过对其等价点 $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{a}(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ 集合的对称性分析，可以得出 Γ 点波函数具有的对称性，具体形式见表 2-2。 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 有效哈密顿量 $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})$ 在这组基下的表示是一个 14×14 的关于 \mathbf{k} 的矩阵 [286]，即扩展的 Kane 模型。 Γ_8^c 和 Γ_7^c 子带由于能量比较高，对于自旋弛豫或者输运问题而言，这两个子带不用考虑。因此可以将这两个子带对导带和价带的贡献看作微扰。在二阶近似下， $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})$ 用由子带 Γ_6^c 、 Γ_8^v 和 Γ_7^v 构成的 8×8 的 Kane 模型就可以很好的描述 (见图 2-1)，其它子带的影响主要表现在哈密顿量中系数的修正。如何用微扰的方法计入 Γ_8^c 和 Γ_7^c 子带在下面会有详细的介绍。

下面我们先给出 Kane 模型描述的有效哈密顿量的矩阵表达形式 $\mathcal{H}_{8 \times 8}(\mathbf{k})$:^①

$$\mathcal{H}_{8 \times 8}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{6c6c} & \mathcal{H}_{6c8v} & \mathcal{H}_{6c7v} \\ \mathcal{H}_{8v6c} & \mathcal{H}_{8v8v} & \mathcal{H}_{8v7v} \\ \mathcal{H}_{7v6c} & \mathcal{H}_{7v8v} & \mathcal{H}_{7v7v} \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

其中 \mathbf{k} 的各个分量分别是沿着 [100], [010], [001] 晶向，并且

$$\mathcal{H}_{6c6c} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e'} + C_1 \varepsilon$$

是有效哈密顿量对应 Γ_6^c 子带的两个波函数 $|\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$ 下的 2×2 矩阵元。同理，

$$\mathcal{H}_{7v7v} = \frac{G' - F'}{2} - E_g - \Delta$$

是 Γ_7^v 子带的两个波函数 $|\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle_v$ 下的 2×2 矩阵元。这两个子带对自旋而言都是简并的。 \mathcal{H}_{8v8v} 对应 Γ_8^v 价带的 4×4 表示矩阵，形式如下：

$$\mathcal{H}_{8v8v} = \begin{pmatrix} F' - E_g & H' & I' & 0 \\ H'^{*} & G' - E_g & 0 & I' \\ I'^{*} & 0 & G' - E_g & -H' \\ 0 & I'^{*} & -H'^{*} & F' - E_g \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

非对角部分是各个带之间的关联，

$$\mathcal{H}_{6c8v} = \mathcal{H}_{8v6c}^\dagger = \begin{pmatrix} -K_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}K_z & \sqrt{\frac{1}{3}}K_- & 0 \\ 0 & -\sqrt{\frac{1}{3}}K_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}K_z & K_- \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

^①这里的哈密顿量是按照文献 [69]写出；而文献 [286]的附录中是按照角动量展开写出，或许这个形式更方便于推导

$$\mathcal{H}_{6c7v} = \mathcal{H}_{7v6c}^\dagger = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{1}{3}}K_z & -\sqrt{\frac{2}{3}}K_- \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}K_+ & \sqrt{\frac{1}{3}}K_z \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

$$\mathcal{H}_{8v7v} = \mathcal{H}_{7v8v}^\dagger = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{1}{2}}H' & -\sqrt{2}I' \\ -\frac{G'-F'}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{2}{3}}H' \\ \sqrt{\frac{2}{3}}H'^* & \frac{G'-F'}{\sqrt{2}} \\ \sqrt{2}I'^* & -\sqrt{\frac{1}{2}}H'^* \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

这里 $K_z = \frac{\hbar}{m_0}Pk_z - \frac{i}{m_{cv}}k_xk_y - iC_2\varepsilon_{xy} - id_2U_z$, K_x 和 K_y 可以通过指标 x, y, z 的轮换得到。 $K_\pm = \sqrt{\frac{1}{2}}(K_x \pm iK_y)$, $P = \langle S|p_z|Z \rangle$ 。

$$F' = A'k^2 + \frac{1}{2}B'(k^2 - 3k_z^2) + a\varepsilon + \frac{1}{2}b(\varepsilon - 3\varepsilon_{zz}),$$

$$G' = A'k^2 - \frac{1}{2}B'(k^2 - 3k_z^2) + a\varepsilon - \frac{1}{2}b(\varepsilon - 3\varepsilon_{zz}),$$

$$H' = -D'k_z(k_x - ik_y) - d(\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz}) - d_0(U_y - iU_x),$$

$$I' = -\frac{\sqrt{3}}{2}B'(k_x^2 - k_y^2) + iD'k_xk_y - \frac{\sqrt{3}}{2}b(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) + id\varepsilon_{xy} + id_0U_z.$$

其中 m'_e 、 A' 、 B' 和 D' 是其他的能带对 Γ_6^c 、 Γ_7^v 和 Γ_8^v 的能量贡献相关的量 (就是通过微扰作用进来的项), m_{cv} 是和导带和价带之间相互作用相关的量, E_g 是带隙大小, Δ 是自旋劈裂大小, a 、 b 和 d 是空穴的形变势常数, d_0 是空穴和光学声子的形变势声子, C_1 是电子的形变势常数, C_2 、 d_2 是声学和光学声子的带间形变势常数。 \mathbf{U} 是晶格的相对位移 (晶胞内的原子之间 $\mathbf{U} = \frac{2\sqrt{M_1M_2}}{M_1+M_2}(\mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2)$), 和晶格形变光学声子联系在一起。 ε_{xy} 等是应变张量 ε 的分量, $\varepsilon = \text{Tr}[\varepsilon]$ 。

2.3 包络函数近似: 对外场的处理

上节的有效哈密顿量是在没有外场作用下给出的。在有外场如电场或者磁场的情况下, 对应的薛定谔方程 (2.1) 化作

$$\left[\frac{(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \times (\nabla V_0(\mathbf{r})) + V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}g_0\mu_B\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (2.17)$$

这里 $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ 是磁场项, $\mu_B = e\hbar/(2m_0)$ 是玻尔磁子, $e = -|e|$ 是电子电量, $g_0 = 2$ 是自由电子的 g 因子, $V(\mathbf{r})$ 是一个缓变的势场。这里缓变是相对于晶格势或者原子波函数而言的, 因此我们没有计入这一项对自旋轨道耦合的作用。由于有外场作用, 准动量 \mathbf{k} 不再是一个好的量子数, Bloch 波函数不再是本征解, 需要用包络函数近似来代

替 [286]。我们将 $\Psi(\mathbf{r})$ 展开到完备基 $\{u_{0,\nu\sigma}; \nu\sigma\}$ 下

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu',\sigma'} \psi_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r}) u_{0,\nu',\sigma'}(\mathbf{r}). \quad (2.18)$$

系数 $\psi_{\nu',\sigma'}$ 类似于 Bloch 波函数中的平面波部分，并且相对于快变的原子波函数是缓变的，被称作包络函数。将上式带入薛定谔方程并将方程左乘 $u_{\nu,\sigma}$ 并对位置积分得 [287]，

$$\sum_{\nu',\sigma'} \left\{ \left[E_{\nu'}(0) + \frac{(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right] \delta_{\nu\nu'} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{1}{m_0} (-i\hbar\nabla - e\mathbf{A}) \cdot \mathbf{P}_{\nu\nu',\sigma\sigma'} \right. \\ \left. + \Delta_{\nu\nu',\sigma\sigma'} + \frac{1}{2} g_0 \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \delta_{\nu\nu'} \right\} \psi_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r}) = E \psi_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}). \quad (2.19)$$

其中 $\mathbf{P}_{\nu\nu',\sigma\sigma'}$ 和 $\Delta_{\nu\nu',\sigma\sigma'}$ 的定义见式 (2.10) 和 (2.11)，推导出这个公式利用到外场 \mathbf{A} ， $V(\mathbf{r})$ 和包络波函数 $\psi_{\nu,\sigma}$ 相对于原子波函数 $u_{\nu\sigma}$ 而言变化缓慢，在一个元胞内可以看作是不变的，则将积分式化到每个元胞内的积分后有以下式

$$\int d\mathbf{r} u_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}) \mathbf{P} \sum_{\nu',\sigma'} \psi_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r}) u_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_i \sum_{\nu',\sigma'} [(-i\nabla_{\mathbf{R}}) \psi_{\nu',\sigma'}(\mathbf{R}_i)] \delta_{\nu\nu'} \delta_{\sigma\sigma'} \\ + \psi_{\nu',\sigma'}(\mathbf{R}_i) \mathbf{P}_{\nu\nu',\sigma\sigma'}, \\ \int d\mathbf{r} u_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \sum_{\nu',\sigma'} \psi_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r}) u_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_i \sum_{\nu',\sigma'} V(\mathbf{r}) \psi_{\nu',\sigma'}(\mathbf{R}_i) \delta_{\nu\nu'} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (2.20)$$

这里的 \mathbf{R}_i 表示元胞的位置， N 表示总的元胞数目。然后在薛定谔方程两边对相同位置 \mathbf{R}_i 上量相等就可以得到式 (2.19)。②

我们可以看出，在式 (2.19) 除了将 \mathbf{k} 用 $(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})$ 以及多了 Zeeman 劈裂项以外，有效哈密顿量中其余的项都和公式 (2.9) 是一样的。记 $\hbar\mathbf{k} = -i\hbar\nabla - e\mathbf{A}$ 为广义动量后，我们可以继续沿用无外场时候的哈密顿量，并且将是下面我们考虑问题的出发点。这里广义动量的各个分量之间不再对易，满足关系： $\mathbf{k} \times \mathbf{k} = i\frac{e}{\hbar} \mathbf{B}$ ，且 $[\mathbf{k}, V(r)] = -i\nabla V(\mathbf{r})$ 。

接下来我们讨论有效质量近似下导带电子的哈密顿量。在约化的过程中，能带结构除了对有效质量有影响外，对自旋轨道耦合以及有效 g 因子 g^* 也同样有很大的影响。对子电子系统的自旋性质来说，自旋轨道耦合更是非常重要，下面我们先讨论体材料中的自旋轨道耦合。

②如果将 $\Psi(\mathbf{r})$ 用包络函数展开到瓦尼尔表象会帮助理解： $\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i \psi_{\nu',i}(\mathbf{r}) W_{\nu'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ 。由于瓦尼尔波函数是对能带指标和晶格元胞指标都是正交的，更容易得出包络方程 (2.19)。

2.4 体材料中的自旋轨道耦合相互作用

对于导带电子，自旋朝上 $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ 和自旋朝下 $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ 的态之间没有直接的耦合 (\mathcal{H}_{6c6c})。但是电子态和空穴带及自旋劈裂带的耦合，导致电子波函数中混合了价带波函数，从而可以实现自旋朝上和自旋朝下的间接耦合。因此通过轻重空穴带和自旋劈裂带的微扰修正，导带电子可以间接的在不同自旋之间翻转。这种修正有三个直接结果：

1. Dresselhaus 内禀自旋轨道耦合 (intrinsic spin orbit coupling) [64]。它是由半导体材料晶格中心反演对称性破缺引起的，称作 BIA (bulk inversion asymmetry) 项，是材料的本征特性。
2. Rashba 内禀自旋轨道耦合。在受限体系中，系统边界的界面电场可以达到一个非常大的值从而会强烈的改变电子的能带波函数。在有外加电场 Kane 模型中重新求解能带的时候，电场会导致额外的自旋轨道耦合。这是由于结构反转不对称引起的，是 SIA (structure inversion asymmetry) 项或者 Rashba 自旋轨道耦合。是由 Bychkov 和 Rashba 在二维电子气中最先提出 [50]。
3. EY 自旋轨道耦合。对自由电子而言，自旋守恒散射不会翻转电子自旋。然而在半导体材料中，导带电子的波函数混合了价带空穴的波函数。因此即使是自旋守恒的散射过程，不同自旋的电子态也可以通过其中混合的空穴波函数来翻转自旋。我们称这种导带电子的波函数为 Elliott-Yafet (EY) 自旋轨道耦合，它最早 Elliott 和 Yafet 在 EY 自旋弛豫机制中讨论 [169, 288]。它是最近被广泛关注的外禀自旋流效应 (extrinsic spin Hall effect) 最主要的来源 [102]。另外，如果这种自旋轨道耦合作用在电子-空穴散射中，就会导致被广泛讨论的 BAP 自旋弛豫机制 [171]。

同样，导带电子和自旋劈裂带也会对空穴的不同自旋之间关联有额外的贡献。接下来我们主要仔细回顾一下导带电子的这几种自旋轨道耦合 [69, 286]。

现在我们采用附录 A 中介绍的准简并微扰理论求解导带电子和价带轻重空穴能谱。我们先考虑导带电子。对于准简并微扰理论中的各阶近似，我们取：

$$\begin{aligned}
 H^0 &= \begin{pmatrix} 0_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & (-E_g)_{4 \times 4} & 0 \\ 0 & 0 & (-E_g - \Delta)_{2 \times 2} \end{pmatrix} & H^2 &= \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{H}_{6c8v} & \mathcal{H}_{6c7v} \\ \mathcal{H}_{8v6c} & 0 & 0 \\ \mathcal{H}_{7v6c} & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 H^1 &= \begin{pmatrix} (\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e})_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_{8v8v} + E_g & \mathcal{H}_{8v7v} \\ 0 & \mathcal{H}_{7v8v} & (\frac{G' - E'}{2})_{2 \times 2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_c(r) & 0 & 0 \\ 0 & V_v(r) & 0 \\ 0 & 0 & V_{v'}(r) \end{pmatrix} \quad (2.21)
 \end{aligned}$$

其中 H^0 是非微扰项， H^2 是和导带价带关联项有关的微扰项， H^1 是带内的扰动项。这里的带间关联项和带隙相比都是小量。 $V_c(\mathbf{r})$, $V_v(\mathbf{r})$, $V_{v'}(\mathbf{r})$ 是作用在各个能带上的外

场，和带隙相比是小量。么阵变化的矩阵为

$$S = \begin{pmatrix} 0 & s \\ -s^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

按照附录 A 中的方法，公式 (A.6) 化作

$$\begin{aligned} -s^{(1)} \begin{pmatrix} (-E_g)_{4 \times 4} & 0 \\ 0 & (-E_g - \Delta)_{2 \times 2} \end{pmatrix} &= -(\mathcal{H}_{6c8v} \quad \mathcal{H}_{6c7v}), \\ -s^{(2)} \begin{pmatrix} (-E_g)_{4 \times 4} & 0 \\ 0 & (-E_g - \Delta)_{2 \times 2} \end{pmatrix} &= -(H_c^1 s^{(1)} - s^{(1)} H_v^1). \end{aligned} \quad (2.23)$$

所以

$$\begin{aligned} s^{(1)} &= -\left(\frac{1}{E_g} \mathcal{H}_{6c8v} \quad \frac{1}{E_g + \Delta} \mathcal{H}_{6c7v} \right), \\ s^{(2)} &= \left(\frac{1}{E_g^2} (V_c \mathcal{H}_{6c8v} - \mathcal{H}_{6c8v} V_v) \quad \frac{1}{(E_g + \Delta)^2} (V_c \mathcal{H}_{6c7v} - \mathcal{H}_{6c7v} V_{v'}) \right). \end{aligned} \quad (2.24)$$

其中，在三阶微扰 $s^{(2)}$ 中我们只考虑了 V 项，Kane 模型中对应项在二阶扰动中出现。

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}_{6c6c}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{E_g} \mathcal{H}_{6c8v} \mathcal{H}_{8v6c} + \frac{1}{E_g + \Delta} \mathcal{H}_{7c8v} \mathcal{H}_{8v7c} + h.c. \right], \\ \tilde{\mathcal{H}}_{6c6c}^{(3)} &= \frac{1}{2} \left[-V_c \left(\frac{\mathcal{H}_{6c8v} \mathcal{H}_{8v6c}}{E_g^2} + \frac{\mathcal{H}_{6c7v} \mathcal{H}_{7v6c}}{(E_g + \Delta)^2} \right) + \left(\frac{\mathcal{H}_{6c8v} V_v \mathcal{H}_{8v6c}}{E_g^2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\mathcal{H}_{6c7v} V_{v'} \mathcal{H}_{7v6c}}{(E_g + \Delta)^2} \right) + h.c. \right]. \end{aligned} \quad (2.25)$$

带入具体的表达式以后有：

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{6c8v} V_v \mathcal{H}_{8v6c} &= \frac{2}{3} \sum_i K_i V_v K_i^\dagger - \frac{1}{3} \boldsymbol{\sigma} \cdot \begin{pmatrix} i(K_y V_v K_z^\dagger - K_z V_v K_y^\dagger) \\ i(K_z V_v K_x^\dagger - K_x V_v K_z^\dagger) \\ i(K_x V_v K_y^\dagger - K_y V_v K_x^\dagger) \end{pmatrix}, \\ \mathcal{H}_{6c7v} V_{v'} \mathcal{H}_{7v6c} &= \frac{1}{3} \sum_i K_i V_{v'} K_i^\dagger + \frac{1}{3} \boldsymbol{\sigma} \cdot \begin{pmatrix} i(K_y V_{v'} K_z^\dagger - K_z V_{v'} K_y^\dagger) \\ i(K_z V_{v'} K_x^\dagger - K_x V_{v'} K_z^\dagger) \\ i(K_x V_{v'} K_y^\dagger - K_y V_{v'} K_x^\dagger) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

因此，对于二阶和三阶微扰，我们得到如下的结果

$$\tilde{H}_c^{(2)} = \frac{1}{E_g} (1 - \frac{\eta}{3}) \sum_i K_i K_i^\dagger + \frac{2}{3} \frac{\eta}{E_g} \boldsymbol{\sigma} \cdot \begin{pmatrix} \text{Im}[K_y K_z^*] \\ \text{Im}[K_z K_x^*] \\ \text{Im}[K_x K_y^*] \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}_c^{(3)} = & -\frac{1}{2} \left\{ V_c(r), \frac{3-\eta(2-\eta)}{3E_g^2} \sum_i K_i K_i^\dagger + \frac{2\eta(2-\eta)}{3E_g^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \begin{pmatrix} \text{Im}[K_y K_z^*] \\ \text{Im}[K_z K_x^*] \\ \text{Im}[K_x K_y^*] \end{pmatrix} \right\} \\ & + \frac{1}{3E_g^2} \left\{ \sum_i K_i V^d K_i^\dagger + \boldsymbol{\sigma} \cdot \begin{pmatrix} i(K_y V^n K_z^\dagger - K_z V^n K_y^\dagger) \\ i(K_z V^n K_x^\dagger - K_x V^n K_z^\dagger) \\ i(K_x V^n K_y^\dagger - K_y V^n K_x^\dagger) \end{pmatrix} \right\}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

其中, $V^d = 2V_v + (1-\eta)^2 V_{v'}$, $V^n = V_v - (1-\eta)^2 V_{v'}$, $\eta = \frac{\Delta}{\Delta+E_g}$, 以及

$$K_i V K_j^\dagger = \frac{1}{2} \left\{ [K_i, V] K_j^\dagger + K_i [V, K_j^\dagger] \right\} + \frac{1}{2} \left\{ V, K_i K_j^\dagger \right\}$$

2.4.1 Dresselhaus 内禀自旋轨道耦合

对于导带电子, 在考虑空穴对电子二阶微扰以后, Kane 模型中价带对导带的影响主要表现在电子的有效质量以及自旋关联部分, 其中对应的材料反演中心不对称约化成自旋关联作用, 即 Dresselhaus 内禀自旋轨道耦合 (BIA 项) [64, 69, 286]。由二阶微扰 (2.27) 可知导带部分的哈密顿量为

$$\tilde{\mathcal{H}}_c = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Omega}^D(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.29)$$

这里有效质量 $\frac{1}{m^*} = \frac{2P^2}{m_0^2 E_g} (1 - \frac{\eta}{3}) + \frac{1}{m'_e}$, $\frac{1}{m'_e}$ 很小一般不考虑。 $\boldsymbol{\Omega}^D(\mathbf{k})$ 是 Dresselhaus 自旋轨道耦合产生的有效磁场。

$$\Omega_x^D(\mathbf{k}) = \gamma [k_x (k_y^2 - k_z^2) + m_{cv} C_2 (\varepsilon_{xy} k_y - k_z \varepsilon_{zx})]. \quad (2.30)$$

$\boldsymbol{\Omega}^D(\mathbf{k})$ 的其它两个分量可以通过轮换 x, y, z 来获得, 其中 $\gamma = \alpha_c (2m_e^3 E_g)^{-1/2}$ 和 $\alpha_c = \frac{4}{3} \frac{m_e}{m_{cv}} \eta (1 - \frac{\eta}{3})^{-1/2}$ 。后面一项是由形变势引起的自旋轨道耦合作用。

在考虑了外磁场的作用以后, 额外的与磁场有关的一项 $-\frac{\hbar^2 P^2}{3m_0^2} \left[\frac{1}{E_g} - \frac{1}{E_g + \Delta} \right] \frac{|e|\hbar}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$ 将会加入到导带的哈密顿量 $\tilde{\mathcal{H}}_c$ 中。这一项对系统的有效 g 因子的影响是很明显的:

$$g^* = g_0 - \frac{4P^2}{3m_0} \left(\frac{1}{E_g} - \frac{1}{E_g + \Delta} \right) = g_0 - \frac{2\eta}{3-\eta} \left(\frac{m_0}{m^*} - \frac{m_0}{m'_e} \right)$$

同理，轻重空穴带对应的哈密顿量变为：^③

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}}_{8v} &= \mathcal{H}_{8v8v} + \frac{\mathcal{H}_{8v6c}\mathcal{H}_{6c8v}}{-E_g}2m'_e + \frac{\mathcal{H}_{8v7v}\mathcal{H}_{7v8v}}{-E_g - (-E_g - \Delta)} \\ &= \mathcal{H}'_{8v8v} - \frac{1}{2\eta}\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{J}.\end{aligned}\quad (2.31)$$

这里 \mathcal{H}'_{8v8v} 是 Luttinger 哈密顿量，它的形式和 \mathcal{H}_{8v8v} 一样，但是要把将其中带撇的量用不带撇的量代替，即 $A = A' + A_0$ 、 $B = B' + A_0$ 和 $D = D' + \sqrt{3}A_0$ ，带入到 F' 、 G' 、 H' 、 I' 中得到 F 、 G 、 H 、 I 。其中 $A_0 = -\frac{1}{3E_g}(\frac{\hbar P}{m_0})^2 \simeq -\frac{\hbar^2}{6m_e(1-\eta/3)}$ 。和文献 [286] 中的参数相比较可以得到 $A = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_1$ ， $B = -2\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2$ ， $D = -2\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3$ 。第二项是空穴的 Dresselhaus 自旋轨道耦合项，它也是由材料缺少反演中心得到的，其中 \mathbf{J} 是自旋为 3/2 的角动量矩阵，表示如下

$$\begin{aligned}J_x &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, J_y = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \\ J_z &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (2.32)$$

2.4.2 Bychkov-Rashba 内禀自旋轨道耦合

对于量子阱、量子线等受限系统，在材料的边界会形成有界面电场，这种结构反演不对称导致 Rashba 本征自旋轨道耦合 [50]。现在我们在体材料中通过施加电场，来近似给出形成 Bychkov-Rashba 内禀自旋轨道耦合的机理。外加电场和异质结构给出的界面电场的电势在导带和价带分别是 $V_c(\mathbf{r})$ ， $V_v(\mathbf{r})$ ， $V_{v'}(\mathbf{r})$ 。这里，我们取 $V_v(\mathbf{r}) = V_{v'}(\mathbf{r})$ ，当有界面电场存在的时候， $V_c(\mathbf{r})$ 和 $V_v(\mathbf{r})$ 是由导带和价带的能带弯

^③

$$\begin{aligned}& \mathcal{H}_{8v6c}\mathcal{H}_{6c8v} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{K_x^2 + K_y^2}{2} & \frac{-\sqrt{3}}{3}(\text{Re}[K_x^* K_z] - i\text{Re}[K_y^* K_z]) & \frac{-\sqrt{3}}{6}(K_x^2 - K_y^2 - 2i\text{Re}[K_y^* K_x]) & 0 \\ \frac{K_x^2}{2} + \frac{K_y^2}{6} & 0 & 0 & \frac{-\sqrt{3}}{6}(K_x^2 - K_y^2 - 2i\text{Re}[K_y^* K_x]) \\ 0 & \frac{K_x^2}{2} + \frac{K_y^2}{6} & \frac{\sqrt{3}}{3}(\text{Re}[K_x^* K_z] - i\text{Re}[K_y^* K_z]) & \frac{K_x^2 + K_y^2}{2} \\ \frac{2}{3}\mathbf{J} \cdot \begin{pmatrix} \text{Im}[K_x^* K_y] \\ \text{Im}[K_x^* K_z] \\ \text{Im}[K_y^* K_x] \end{pmatrix} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

曲决定，一般不相等。三阶扰动结果 (2.28) 化作：

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}_c^{(3)} = & -\frac{1}{2} \left\{ V_c(r) - V_v(r), \frac{3 - \eta(2 - \eta)}{3E_g^2} \sum_i K_i K_i^\dagger + \frac{(2 - \eta)}{E_g} \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right\} \\ & + \left\{ \sum_i \frac{3 - \eta(2 - \eta)}{6E_g^2} [K_i, V_v] K_i^\dagger + h.c. \right. \\ & \left. + \frac{\eta(2 - \eta)}{6E_g^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \begin{pmatrix} i(K_y[V_v, K_z^\dagger] - K_z[V_v, K_y^\dagger]) \\ i(K_z[V_v, K_x^\dagger] - K_x[V_v, K_z^\dagger]) \\ i(K_x[V_v, K_y^\dagger] - K_y[V_v, K_x^\dagger]) \end{pmatrix} + h.c. \right\}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

在只考虑到 k_i 的线性项的时候，有 [286]

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}_c^{(3)} = & -\frac{3 - \eta(2 - \eta)}{6E_g^2} \left(\frac{\hbar P}{m_0} \right)^2 [\{V_c(r) - V_v(r), \mathbf{k}^2\} - \nabla^2 V_v] \\ & + \frac{\eta(2 - \eta)}{6E_g^2} \left(\frac{\hbar P}{m_0} \right)^2 \boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{k} \times \nabla V_v(\mathbf{r}) - \nabla V_v(\mathbf{r}) \times \mathbf{k}]. \end{aligned} \quad (2.34)$$

显而易见，这里第二项是价带电场对导带的电子自旋翻转的贡献，即 Rashba 内禀自旋轨道耦合：

$$\tilde{\mathcal{H}}_R(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\Omega}^R(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.35)$$

其中有效磁场

$$\boldsymbol{\Omega}^R(\mathbf{k}) = \alpha_0 [\mathbf{k} \times \mathbf{E}_v - \mathbf{E}_v \times \mathbf{k}]. \quad (2.36)$$

这里 $E_v = \frac{1}{|e|} \nabla V_v(\mathbf{r})$ 是价带能带弯曲产生的电场，自旋轨道耦合系数 $\alpha_0 = \frac{|e|\eta(2-\eta)}{3E_g^2} \left(\frac{\hbar P}{m_0} \right)^2$ ，很多文献用系数 $\alpha = \alpha_0 E_v$ 表示 Rashba 耦合的强度。在有外磁场的时候，磁场有关的项 $\frac{\eta(2-\eta)}{3E_g^2} \frac{|e|}{\hbar} (V_c - V_v) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$ 将会加入到哈密顿量 $\tilde{\mathcal{H}}_c^{(3)}$ ，对有效 g 因子产生影响。

很容易看到，Rashba 本征自旋轨道耦合的形式和由形变引起的 Dresselhaus 自旋轨道耦合形式是一样的，都是波矢 \mathbf{k} 的线性项。这两种自旋轨道耦合都可以通过实验手段来有效的调节：通过调节电场或者调节材料的应变压力或者拉力。相比较 Dresselhaus 自旋轨道耦合的三次方项，线性项有更好的性质以及更加容易处理。从而即使是在体材料中，许多自旋有关的实验都是在样品中施加应变力，以期获得可调的自旋轨道耦合来得到更好的实验结果 [55, 56, 78, 118, 162, 163]。

2.4.3 Elliott-Yafet 自旋轨道耦合

由于不同子带之间的波函数的混合，任何外场或者散射在新的导带电子波函数下的矩阵元形式都会变化，即要包括空穴带波函数对散射的影响。导带电子波函数变化为

$$|\mathbf{k}\sigma\rangle^c = e^{S_{\mathbf{k}}} |\sigma\rangle |\mathbf{k}\rangle. \quad (2.37)$$

其中 $|\sigma\rangle$ 为导带电子 s 分量自旋部分的波函数，我们将其选择成与动量 \mathbf{k} 无关的形式。 $|\mathbf{k}\rangle$ 为空间部分的平面波近似的波函数。自旋无关的相互作用 $V(\mathbf{r})$ 在此波函数下近似到二阶的矩阵元是

$$\begin{aligned} {}^c\langle\mathbf{k}\sigma|V(\mathbf{r})|\mathbf{q}\sigma'\rangle^c &= \langle\sigma|e^{-S_{\mathbf{k}}}V(\mathbf{r})e^{S_{\mathbf{q}}}\sigma'\rangle, \\ &\approx V_{\mathbf{kq}}\delta_{\sigma\sigma'} + \langle\sigma| -S_{\mathbf{k}}V_{\mathbf{kq}} + V_{\mathbf{kq}}S_{\mathbf{q}}|\sigma'\rangle \\ &\quad + \frac{1}{2}\langle\sigma|S_{\mathbf{k}}^{(1)2}V_{\mathbf{kq}} - 2S_{\mathbf{k}}^{(1)}V_{\mathbf{kq}}S_{\mathbf{q}}^{(1)} + V_{\mathbf{kq}}S_{\mathbf{q}}^{(1)2}|\sigma'\rangle. \end{aligned} \quad (2.38)$$

其中 $V_{\mathbf{kq}} = \langle\mathbf{k}|V(\mathbf{r})|\mathbf{q}\rangle$ 。一阶和二阶的微扰项都可以引起电子导带带内不同自旋之间散射，不过一阶项的贡献要求 $V_{\mathbf{kq}}$ 可以在导带和价带之间翻转，二阶项需要带内的不同动量态之间可以散射就可以了。

2.4.3.1 长程作用

对于普通的带内散射，如电子-杂质散射、电子-声子散射以及电子-电子散射，可以在导带内的不同动量态之间散射，则对应的二阶项贡献为：

$$\tilde{V}_{\mathbf{kq}}^c = V_{\mathbf{kq}}\left[1 - \frac{1}{2}(s_{\mathbf{k}}^{(1)}s_{\mathbf{k}}^{(1)\dagger} - 2s_{\mathbf{k}}^{(1)}s_{\mathbf{q}}^{(1)\dagger} + s_{\mathbf{q}}^{(1)}s_{\mathbf{q}}^{(1)\dagger})\right] \quad (2.39)$$

由公式 (2.24) 中 $s^{(1)}$ 中得到 $s_{\mathbf{k}}^{(1)}s_{\mathbf{q}}^{(1)\dagger} = -\frac{i}{3}\frac{\eta(2-\eta)}{E_g^2}(\mathbf{K} \times \mathbf{Q}^*) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ ， $V(\mathbf{r})$ 矩阵元最终化作：

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{\mathbf{kq}}^c &= V_{\mathbf{kq}}[1 + \mathcal{F}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\sigma}], \\ \mathcal{F}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= -i\lambda_c(\mathbf{k} \times \mathbf{q}) + \lambda_s\gamma\boldsymbol{\varepsilon} \times (\mathbf{q} + \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (2.40)$$

这里 $\lambda_c = \frac{\eta(1-\eta/2)}{3m_eE_g(1-\eta/3)}$ ， $\lambda_s = \frac{(2-\eta)}{4E_g}C_2$ ， $\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix}$ 。这一项导致了直接的自旋翻转散

射，对低迁移率的窄带半导体中的自旋弛豫 [289, 290]、自旋流都有非常大的影响，并且也是外禀自旋流 [100] 的主要来源之一。下面我们重新写出电子-杂质、电子-声子、电子-电子散射在包括 EY 自旋轨道耦合相互作用以后的形式。

1. 电子-杂质散射：

$$H_{ei} = \sum_{\mathbf{k}\sigma_1;\mathbf{q}\sigma_2} v^i(\mathbf{k}-\mathbf{q})[\delta_{\sigma_1\sigma_2} + \mathcal{F}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_1\sigma_2}]\rho_i(\mathbf{k}-\mathbf{q})c_{\mathbf{k}\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{q}\sigma_2}, \quad (2.41)$$

其中 $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ 表示在态产生一个准动量为 \mathbf{k} 自旋为 σ 电子， $\rho_i(\mathbf{q}) = \sum_j e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_j}$ 是杂质分布， \mathbf{R}_j 表示第 j 个杂质的位置。 $v^i(\mathbf{q}) = \frac{-Z_i e^2}{\epsilon_0 \kappa_0 (\mathbf{q}^2 + \kappa^2)}$ 是电子和杂质间库仑相互作用， Z_i 是杂质带的电荷数， ϵ_0 是真空介电常数， κ_0 是材料的静态介电常数， κ 是

电子气的屏蔽常数。

2. 电子-声子散射:

$$H_{ep} = \sum_{\mathbf{k}\sigma_1\mathbf{q}\sigma_2\lambda} M_\lambda(\mathbf{q}) [\delta_{\sigma_1\sigma_2} + \mathcal{F}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_1\sigma_2}] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma_2} (a_{\mathbf{q};\lambda} + a_{-\mathbf{q};\lambda}^\dagger). \quad (2.42)$$

其中 $M_\lambda(\mathbf{q})$ 是电子和 λ 支声子的散射矩阵元, $a_{\mathbf{q};\lambda}^\dagger$ 表示产生一个 λ 支的准动量为 \mathbf{q} 的声子。

3. 电子-电子散射

$$H_{ee} = \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) (\rho(\mathbf{q})\rho(-\mathbf{q}) - \rho(0)).$$

其中 $\rho(\mathbf{q}) = \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i}$ 是电子分布的傅立叶变换形式, $v(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\epsilon_0\kappa_0(\mathbf{q}^2 + \kappa^2)}$ 是电子电子库仑作用。写到二次量子化表象为:

$$\rho(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k};\sigma_1\sigma_2} [1 + \mathcal{F}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_1\sigma_2}] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma_2}.$$

$$H_{ee} = \sum_{\substack{\mathbf{q};\mathbf{k};\sigma_1\sigma_2 \\ \mathbf{k}';\sigma_3\sigma_4}} v(\mathbf{q}) [\delta_{\sigma_1\sigma_2}\delta_{\sigma_3\sigma_4} + \mathcal{F}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_1\sigma_2}\delta_{\sigma_3\sigma_4} + \mathcal{F}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \mathbf{k}') \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_3\sigma_4}\delta_{\sigma_1\sigma_2}] c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma_3}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma_2} c_{\mathbf{k}'\sigma_4}. \quad (2.43)$$

这里我们略去了自旋翻转的二阶项。对于电子电子散射, 除了 EY 作用可以翻转自旋外, 电子和空穴之间的交换作用也同样可以翻转自旋。Bir, Aronov 和 Pikus 指出电子空穴之间的交换作用翻转自旋更有效 [171], 给出 BAP 自旋弛豫机制, 我们将在下面 (3.2.3) 节讨论。

在这里需要强调的一点是, EY 自旋轨道耦合和 Dresselhaus 自旋轨道耦合是起源相同 (都是价带的空穴波函数对导带电子的影响) 的不同相互作用。Dresselhaus 项由相同动量的不同自旋态 (朝上或朝下) 通过空穴波函数关联在一起, 这个过程是动量没有变化。不过 EY 项则是电子在经过散射中心时候, 伴随着电子动量的变化, 自旋态同时变化。

2.4.3.2 短程相互作用

在 Kane 模型哈密顿量中, 电子可以通过声子直接在导带和价带之间跃迁 (\mathcal{H}_{6c8v} 和

\mathcal{H}_{6c7v} 中的与 \mathbf{U} 成正比的项)。带间的电子声子相互作用是:

$$\begin{aligned}\mathcal{V}_{6c8v}^{ep} &= -id_2 \begin{pmatrix} -U_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}U_z & \sqrt{\frac{1}{3}}U_- & 0 \\ 0 & -\sqrt{\frac{1}{3}}U_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}U_z & U_- \end{pmatrix}, \\ \mathcal{V}_{6c7v}^{ep} &= -id_2 \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{1}{3}}U_z & -\sqrt{\frac{2}{3}}U_- \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}U_+ & \sqrt{\frac{1}{3}}U_z \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (2.44)$$

在公式 (2.38) 中一阶作用不为零, 变为

$$\tilde{V}_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^c = -s_{\mathbf{k}}^{(1)} v_{cv}^{ep,\dagger} + v_{cv}^{ep} s_{\mathbf{q}}^{(1)} \quad (2.45)$$

这里 $v_{cv}^{ep} = \begin{pmatrix} \mathcal{V}_{6c8v}^{ep} & \mathcal{V}_{6c7v}^{ep} \end{pmatrix}$ 。带入 $s_{\mathbf{k}}^{(1)}$ 的表达式, 得到

$$\tilde{V}_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^c = -\frac{\hbar d_2 m_{cv}}{4} \gamma [\mathbf{U} \times (\mathbf{k} + \mathbf{q})] \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.46)$$

俄罗斯 Ioffe 所的 Ivchenko 组对这种相互作用的自旋性质作了很多讨论 [125, 126, 141, 291–293]。

2.4.4 有效质量近似下的哈密顿量

从上面的推导可以看出, 对于导带电子, 无论有没有外场作用, 有效质量近似仍然是可以用的。将其它能带对导带的影响约化到有效质量、自旋轨道耦合相互作用以及有效 g 因子以后, 导带电子的哈密顿量变为

$$H_0 = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}) + H_{so}(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} g^* \mu_B \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.47)$$

其中 $\hbar \mathbf{k} = -i\hbar \nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r})$, A 是磁场产生的矢量势。 $V(\mathbf{r})$ 是缓变的外场作用, 一般是外加的电场作用甚至于异质结中能带弯曲引起的电场。最后一项是 Zeeman 劈裂项, $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, g^* 是有效的 g 因子。

这里的自旋轨道耦合项 $H_{so}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 包括 Dresselhaus 以及 Rashba 项, 其中有效磁场分别由式 (2.30) 和式 (2.36) 给出如下

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Omega}_x^D(\mathbf{k}) &= \gamma [k_x(k_y^2 - k_z^2) + m_{cv} C_2 (\varepsilon_{xy} k_y - k_z \varepsilon_{zx})], \\ \boldsymbol{\Omega}^R(\mathbf{k}) &= \alpha [\mathbf{k} \times \mathbf{E}_v - \mathbf{E}_v \times \mathbf{k}].\end{aligned}$$

其中 Ω_y^D , Ω_z^D 可以通过轮换 x, y, z 得到。对于 Dresselhaus 以及 Rashba 自旋轨道耦合项中耦合强度 γ 以及 α 是由实验决定。

在实验上，自旋轨道耦合系数可以通过拉曼散射 [294, 295]、德·哈斯振荡 [296, 297]、以及弱局域化 [298, 299]等方法确定。不过对于不同的实验，得到的自旋轨道耦合系数的差别很大。很多实验的样品中 (不对称量子阱)，BIA 和 SIA 自旋轨道耦合是同时存在的，可以通过测量不同晶格方向的自旋劈裂来得各自的系数。最近周等人 [54]通过拟合自旋弛豫的实验 [154]后发现用理论值计算的 Dresselhaus 系数 (2.30) 可以和实验吻合的很好，其中 $m_{cv} \approx m_0$ 。最近的实验 [300]中可以直接测量出 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合的系数。

2.5 异质结结构和量子阱

和三维半导体结构不同，受限半导体结构具有更容易的调节电子浓度、迁移率、能带结构的设计以及自旋轨道耦合强度的优点，从而在自旋电子学被提出的初期，受限半导体结构就被认为是非常好的自旋载体。在半导体材料中，量子阱、量子线以及量子点都是基于场效应管结构或者异质结结构中的载流子反型层。因此我们有必要先介绍一下反型层的性质 [301–303]。

2.5.1 不对称量子阱

在半导体衬底上生长一层绝缘层或者氧化物，然后覆盖上铝就形成了金属-绝缘体-半导体结构场效应管 (metal-insulator-semiconductor, 或者 MIS) 或者金属-氧化物-半导体结构场效应管 (metal-oxide-semiconductor, 或者 MOS)。在上世纪六十年代场效应管被广泛的用在半导体集成电路中作为放大器和开关器件，主要是利用其可以很容易的通过调节栅极 (金属层) 和半导体之间的电压来调节器件中电子电导率的特性。图2-2给出了典型的 MIS 结构图。对于这种结构。当电压为正向偏压的时候，则既会在 p 型半导体表面排斥多数载流子空穴，又会吸引少数载流子电子。在小电压情况下，主要是空穴被排斥出去从而形成带负电荷 (受主离子) 宽度为 d 的耗尽层。外加的电压主要将在这里，从而形成很大的电场，这个电场会引起半导体表面能带弯曲，记压降为 V_s 。由于电子最终达到平衡态，所以半导体内的各处的化学势 E_F 是相同的。设半导体内的费米面和本征的费米能的电势差为 V_F ，则当 $V_s < V_F$ ，边界处仍然是空穴为主要载流子；但是当电压大到一定程度，达到 $V_s > V_F$ 的时候，半导体边界处的化学势进入导带内，从而其中的电子浓度将会高于空穴浓度，主要载流子变成了电子，形成反型层。一般形成反型层的条件定做 $V_s > 2V_F$ ，是因为阱必须足够深才能形成束缚态。由能带图可以看到，在反型层内的电子其实是处在一个势阱当中，从而在势阱深到一定程度的时候，可以在 z 方向上形成分立能级。同时电场越大，势阱越深，从而电子浓度越高。因此可以通过电场大小可以调节反型层内的电子浓度。在反型层内的另外两个方向，电子可以自由运动，从而反型层是在垂直于反型层的方向上面被约束的准二维结构。由于 z 方向上的三角势阱，电子在结构上不对称并且受一个很大的电场作用，但是这个电场是和电

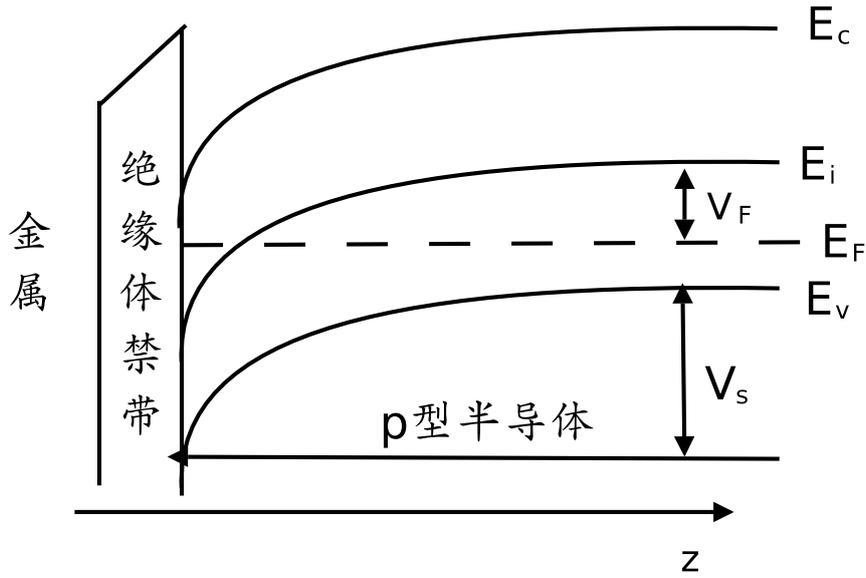


图 2-2: 反型层附近的能带草图。\$E_c\$是导带带底，\$E_v\$是价带带顶，\$E_i\$是本征的费米能级，\$E_f\$是化学势。在半导体表面，能带的弯曲是由表面聚积的电子的电势引起的。

子分布相关。由电子的分布可以得到电势分布，通过电势分布才能求出反型层内的电子的波函数，从而得到电子的分布。因此这是一个需要自洽求解的问题，电子的波函数和电势需要同时求解，下面是薛定谔方程以及泊松方程

$$\begin{aligned} \left[\frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{2m^*} + V(z) \right] \Psi(\mathbf{r}) &= E \Psi(\mathbf{r}), \\ \frac{\partial^2 V(z)}{\partial z^2} &= \frac{e^2}{\epsilon_0} N_s(z). \end{aligned} \quad (2.48)$$

这里 $\Psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} e^{i(k_x x + k_y y)} \phi_n(z)$ 是薛定谔方程的本征态， \mathbf{k} 是反型层平面内的动量， n 是反型层内 z 方向的子带指标。 $V(z)$ 是反型层内的电势分布，满足泊松方程。 $N_s(z) = \sum_{\mathbf{k},n,\sigma} |\Psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})|^2$ 是电子浓度。这里的空穴分布忽略不计。在近似求解中，我们假定电子的总浓度 $\int_0^\infty N_s(z) dz = N_e$ 可以通过实验给定，则在量子极限下，即只有一个子带的时候， $N_s(z) = |\phi_n(z)|^2 N_e$ 。

如果近似求解的话，可以用三角势垒来代替：即用一个平均的电场去代替变化的电场，平均电场 $\bar{\varepsilon}$ 取成界面处最大电场的一半代替，即为

$$\bar{\varepsilon} = N_s e / \epsilon \epsilon_0$$

则势能变化为

$$V(z) = e \bar{\varepsilon} z$$

带入薛定谔方程 (2.48) 可以求出波函数的分布。对应的本征解是Airy函数，本征能量是

$$E_i = \frac{(e\hbar\bar{\epsilon})^{2/3}}{(2m^*)^{1/2}} S_i$$

S_i 由边界条件 $z = 0$ 处波函数为零定出的方程的根。

在 GaAs 材料中，反型层内的电场会引起 Rashba 自旋轨道耦合作用。这是形成 Rashba 自旋轨道耦合作用的主要来源。但是实验上也可以用对称异质结结构形成的对称量子阱来抑制 Rashba 自旋轨道耦合。

2.5.2 对称量子阱

异质结结构 (Heterostructure) 是由不同带隙宽度的半导体材料生长在同一块衬底上形成的结。由于两种材料的带隙宽度、能带结构以及电子的亲和能不同，将会产生一系列新的特性。一般需要两种半导体的晶格常数匹配才能形成性能较好的异质结，如 GaAs 和 AlGaAs 材料的晶格常数差别非常小 (小于 0.16%)，是形成 GaAs 量子阱最常用的材料 [301]。对于 A/B 异质结，由于材料参数的差异，在接触前后，导带底以及价带顶都是不连续的。电子感受到的带底分布为

$$E_c(z) = V(z) + \begin{cases} \chi_1, & z < 0 \\ \chi_2, & z > 0 \end{cases} \quad (2.49)$$

或者空穴感受到的带顶为

$$E_v(z) = -V(z) - \begin{cases} \chi_1 + E_{g,1}, & z < 0 \\ \chi_2 + E_{g,2}, & z > 0 \end{cases} \quad (2.50)$$

这里 $z = 0$ 是两个半导体接触的位置。很容易看出，在 $z = 0$ 两边始终有一个跃变，对电子是 $\Delta E_c = \chi_1 - \chi_2$ ，对空穴是 $\Delta E_v = (\chi_1 + E_{g,1}) - (\chi_2 + E_{g,2})$ 。在接触之前，除了这个跃变以外，载流子保持在各自半导体内的状态，见能带图 2-3 (a)。当两部分半导体接触以后，为了保证两边的化学势相同，载流子在两边半导体内转移，从而形成PN结势垒 $V(z)$ 满足 $V(\infty) - V(-\infty) = E_{F,1} - E_{F,2} = \Delta E_F$ 。和同种材料形成的PN结不一样，这里导带底或者价带顶在 $z = 0$ 处的能带跃变仍然存在，见示意图 2-3 (b)。这里很明显，对电子而言，至少势垒 $E_c(\infty) - E_c(-\infty) = \Delta E_F - \Delta E_c$ 是存在的，不过在位置 $z = 0$ 附近的势垒更高。若做成对称的结构，即A/B/A结构，选取B层材料合适的掺杂浓度，则可以在B层中形成一个对称的量子阱。

在具体求解量子阱中电子的约束能级的时候，量子阱可以看成由有限高的势垒约束

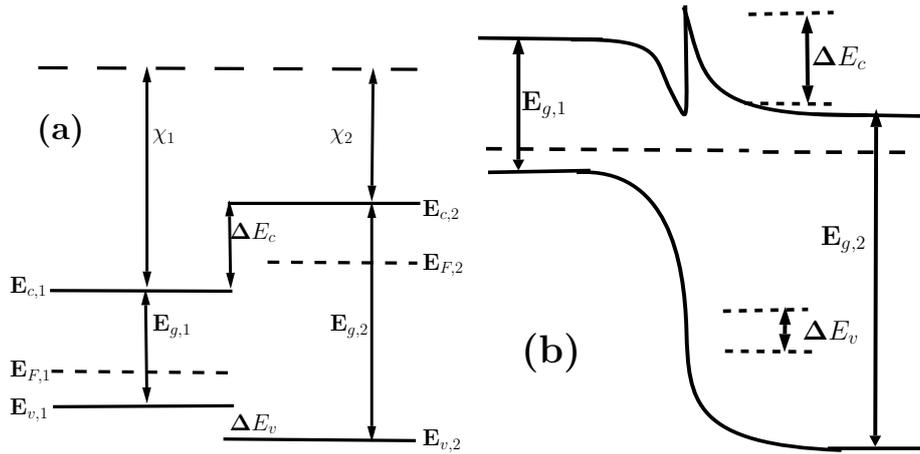


图 2-3: 异质结的能带示意图, 摘自文献 [301]。(a)两部分半导体材料接触前各自的能带图: 对应的亲和势 χ_i 、能带宽度 $E_{g,i}$ 和化学势 $E_{F,i}$ 都不一样; (b) 接触以后的能带图。两块半导体材料达到稳定的条件是对应的化学势相同。

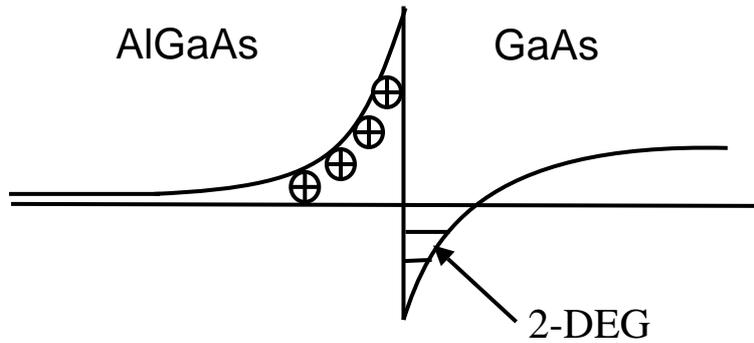


图 2-4: 调制掺杂异质结的能带示意图, 摘自文献 [301]

形成, 设势垒高度为 V_0 , 阱宽为 a 。则 z 方向薛定谔方程化作

$$\left[-\frac{\hbar^2 \partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \phi(z) = E\phi(z),$$

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| < a/2, \\ V_0, & |z| > a/2. \end{cases} \quad (2.51)$$

本征态分为两组, 一组是偶宇称态 $\phi_e(z)$, 一组是奇宇称态 $\phi_o(z)$, 和本征能量方程一起列在表 2-3 中。很多时候, 量子阱可以用无穷深势阱来代替, 即 $V_0 \rightarrow \infty$ 。则本征波函数和本征能量分别为

$$\phi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}\left(x - \frac{a}{2}\right)\right) \quad (2.52)$$

ϕ	$\phi_e(z) = C \begin{cases} \cos(k_1 z) e^{-\frac{1}{2}k_2 a}, & z < a/2, \\ \cos(\frac{1}{2}k_1 a) e^{-k_2 z }, & z > a/2. \end{cases}$	$\phi_o(z) = C \begin{cases} -\sin(\frac{1}{2}k_1 a) e^{k_2 z}, & z < -a/2, \\ \sin(k_1 z) e^{-\frac{1}{2}k_2 a}, & z < a/2, \\ \sin(\frac{1}{2}k_1 a) e^{-k_2 z}, & z > a/2. \end{cases}$
E	$k_2 = k_1 \tan(\frac{1}{2}k_1 a)$	$k_2 = -k_1 \cotan(\frac{1}{2}k_1 a)$

表 2-3: 有限深势阱下的本征波函数和本征能量。本征波函数分成奇宇称态 $\phi_e(z)$ 和偶宇称态 $\phi_o(z)$ 。对于本征能量 $0 < E \leq V_0$ ，且 $k_1^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} E$ 及 $k_2^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E)$ 。常数 C 是归一化波函数。

和

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2.$$

另外一种异质结结构是调制掺杂的抑制结结构 [301,303]: 用 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 和 GaAs 生长成异质结结构，在宽带隙的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 中掺以施主杂质，而 GaAs 中不掺杂。则施主释放出来的电子将迁移到 GaAs 层中形成电子积累，而在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 留下正电荷的耗尽层。图 2-4 给出了能带图。这种掺杂方式可以使量子阱中的电子气获得非常高的电子迁移率并且二维电子气的浓度很容易通过掺杂改变。不过调制掺杂的时候，即使是 A/B 型的异质结，也可以形成量子阱，这时候的波函数和电场作用下的 MIS 或者 MOS 形成的量子阱类似。

2.5.3 量子阱系统的有效哈密顿量

二维系统是由三维系统在一个相对于晶格而言是缓变的势约束而成。这里的约束势可以由异质结形成，也可以通过外加势场 [40] 的方式形成。采用有效质量近似下的有效哈密顿量形式 (2.47)，将 $V(\mathbf{r})$ 用约束势场代替就可以了。则单电子的有效哈密顿量在可以记作 $H = H_0 + H_{so}(\mathbf{p}) + H_I$ ，其中

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + V(z) \quad (2.53)$$

对于量子阱系统， $V(z)$ 一般用三角势、有限深势阱或者无穷深势阱代替。 H_{so} 是自旋轨道耦合相互作用，包括 Dresselhaus 项、Rashba 项以及由应变引起的自旋轨道耦合相互作用。 H_I 是散射项，包括电子-声子散射、电子-杂质散射以及电子-电子散射。 H_0 的本征波函数可以写成

$$\psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}, z) = \frac{1}{2\pi} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \phi_n(z),$$

其中 $\mathbf{r} = (x, y)$ 及 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 。

由于 z 方向波函数变为束缚态，二维系统有效哈密顿量和三维系统的区别就是将 k_z^n 用约束方向的波函数给出的矩阵元 $\langle \phi_i(z) | (-i\partial_z)^n | \phi_j(z) \rangle$ 代替就可以了。一般来说，对于很小的量子阱宽，只需要考虑最低一个子带的贡献就可以了，即 $k_z^n = \langle \phi_1(z) | (-i\partial_z)^n | \phi_1(z) \rangle$ ，并且所有的奇数阶的平均值都是零。这个替换对于自旋轨道耦合项以及散射项都有很大的影响。

2.5.3.1 自旋轨道耦合

由于 k_z 奇数次方项的平均值是零，量子阱的晶向将对自旋轨道耦合系数有非常大的影响。对于三维系统，如果记坐标轴方向为 $\{\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3\}$ 的自旋轨道耦合为

$$H_{so}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} .$$

在坐标轴旋转到方向 $\{\hat{\mathbf{e}}'_i = \sum_j \hat{\mathbf{e}}_j U_{ji}\}$ 以后，自旋轨道耦合的形式化为

$$H'_{so}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} U^{-1} \boldsymbol{\Omega}(U\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} . \quad (2.54)$$

这里的 \mathbf{k} 是新坐标系下的坐标，其中 U 是坐标旋转矩阵。下面我们给出三种比较常见的生长方向的 GaAs 量子阱中 Dresselhaus 自旋轨道耦合形式。

最常见的是沿着 [001] 方向生长的量子阱，对应的 Dresselhaus 项的有效磁场是

$$\boldsymbol{\Omega}_{3d}^D(\mathbf{k}) = \gamma \begin{pmatrix} k_x(k_y^2 - k_z^2) \\ k_y(k_z^2 - k_x^2) \\ k_z(k_x^2 - k_y^2) \end{pmatrix} \implies \boldsymbol{\Omega}_{2d}^D(\mathbf{k}) = \gamma \begin{pmatrix} k_x(k_y^2 - \langle k_z^2 \rangle) \\ k_y(\langle k_z^2 \rangle - k_x^2) \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (2.55)$$

这里 $x//[100]$, $y//[010]$, $z//[001]$ ，对应的有效磁场对任何 \mathbf{k} 都是在量子阱的平面内。在量子阱的阱宽很小并且温度比较低的时候， $\langle k_z^2 \rangle \gg k_{x/y}^2$ ，因此自旋轨道耦合中间关于动量 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 的三次方项可以忽略不计，则两维的自旋轨道耦合项变为 $\boldsymbol{\Omega}_{2d}^D(\mathbf{k}) = \gamma \langle k_z^2 \rangle (-k_x, k_y, 0)$ 。由于 $\langle k_z^2 \rangle \propto \frac{1}{a^2}$ 反比于量子阱的阱宽的平方，通过调节量子阱的阱宽（束缚势）可以有效的改变 Dresselhaus 项的强弱。

若量子阱的生长方向是 [110] 方向，则对应的有效磁场是

$$\boldsymbol{\Omega}_{3d}^D(\mathbf{k}) = \gamma \begin{pmatrix} \frac{1}{2} k_z(k_x^2 + 2k_y^2 - k_z^2) \\ -2k_x k_y k_z \\ \frac{1}{2} k_x(k_z^2 - k_x^2 + 2k_y^2) \end{pmatrix} \implies \boldsymbol{\Omega}_{2d}^D(\mathbf{k}) = \gamma \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} k_x(\langle k_z^2 \rangle - k_x^2 + 2k_y^2) \end{pmatrix} . \quad (2.56)$$

这里 $x//[1\bar{1}0]$, $y//[001]$, $z//[110]$ ，对应的有效磁场对任何 \mathbf{k} 都是垂直于量子阱方向。

若量子阱的生长方向是 $[111]$ 方向，则对应的有效磁场是

$$\Omega_{3d}^D(\mathbf{k}) = \gamma \begin{pmatrix} -\frac{1}{2\sqrt{3}}k_y(k_x^2 + k_y^2 - 4k_z^2) \\ \frac{1}{2\sqrt{3}}k_x(k_x^2 + k_y^2 - 4k_z^2) \\ \frac{1}{\sqrt{6}}k_x(k_x^2 - 3k_y^2) \end{pmatrix} \implies \Omega_{2d}^D(\mathbf{k}) = \gamma \begin{pmatrix} -\frac{1}{2\sqrt{3}}k_y(k_x^2 + k_y^2 - 4\langle k_z^2 \rangle) \\ \frac{1}{2\sqrt{3}}k_x(k_x^2 + k_y^2 - 4\langle k_z^2 \rangle) \\ \frac{1}{\sqrt{6}}k_x(k_x^2 - 3k_y^2) \end{pmatrix}. \quad (2.57)$$

这里 $x//[1\bar{1}0]$, $y//[11\bar{2}]$, $z//[111]$, 对应的有效磁场在三个方向上都有, 不过线性项的有效磁场只在平面内。

2.5.3.2 散射项的变化

散射项的变化主要表现在电子的密度分布算符的矩阵元的变化。电子密度分布算符 $\rho(\mathbf{q}, q_z) = \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i + iq_z z_i}$, 其中 (\mathbf{r}_i, z_i) 是第 i 个电子的坐标。其二次量子化形式为

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{q}, q_z) &= \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 n_1 \\ \mathbf{k}_2 n_2}} \langle \mathbf{k}_1, n_1 | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} + iq_z z} | \mathbf{k}_2, n_2 \rangle c_{\mathbf{k}_1, n_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2, n_2} \\ &= \sum_{\mathbf{k}; n_1 n_2} I_{n_1 n_2}(q_z) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, n_1}^\dagger c_{\mathbf{k}, n_2}. \end{aligned} \quad (2.58)$$

和三维情况相比, 多出了形状因子 $I_{n_1 n_2}(q_z) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi_{n_1}^\dagger(z) e^{iq_z z} \phi_{n_2}(z)$ 。即只需要将三维的散射项中的电子密度分布算符加上形状因子就可以了。

第三章 自旋弛豫和自旋去相位

在自旋电子学可能的应用，比如量子计算机、量子信息、量子存储、自旋晶体管或者自旋阀中，都需要自旋信号能够保持足够长的时间或者输运足够远的距离。在时间或空间上自旋信号的演化是和自旋动力学紧密联系在一起。在时间上自旋系统从不平衡的状态达到平衡状态的过程可以用自旋弛豫 (spin relaxation) 和自旋去相位 (spin depahsing) 描述，相应的这个过程时间的长短给出自旋弛豫时间 (T_1) 和自旋去相位时间 (T_2 和 T_2^*)。简单的说，与能量本征态上自旋占据数有关系的衰减过程给出自旋弛豫，与能量本征态之间的相位有关的衰减过程给出自旋去相位。并且对于单个自旋和自旋系综而言，自旋弛豫过程有着很大的差别。对于单个电子而言，主要来源于环境噪声 (如声子、杂质、原子核以及其它的自旋) 对自旋系统的非相干的影响；而对于自旋系综，不同自旋之间由于相位的差异而引起的相干相消也会对造成自旋信号的衰减。对于前者，自旋弛豫是一个不可逆的过程，用不可逆的自旋弛豫时间 T_1 和自旋去相位时间 T_2 描述；而对于后者，这种相位的差异主要来源于不同自旋的能量劈裂不一样而导致的非均匀扩展。非均匀扩展机制下的自旋弛豫可以用可逆的自旋去相位时间 T_2^* 描述，但是这种机制下豫掉的自旋极化可以在一定的条件下——比如在自旋回声 (spin echo) 实验中——恢复。很多因素都可以导致这种能量的非均匀扩展：比如在气体中的多普勒效应引起的能量修正、半导体中动量相关的自旋轨道耦合以及 g 因子涨落、自组织生长的量子点系综得到的量子点大小的涨落，都提供了非均匀扩展从而引起自旋弛豫。当自旋在空间上分布不均匀时，自旋信号会从化学势高的位置向化学势低的位置转移，从而实现自旋的输运/扩散。在自旋输运/扩散中，自旋信号在空间上的衰减给出自旋输运或者扩散长度 L_d (L_d^*)。除了在输运/扩散中散射的作用引起自旋不可逆转的弛豫以外，不同动量的电子对应的不同速度给出了在输运中才会有的非均匀扩展，从而引起额外的自旋弛豫。但是输运中由非均匀扩展导致弛豫掉的自旋极化不能用普通的自旋回声实验来恢复。

下面我们就单体、系综以及输运/扩散问题回顾自旋弛豫和去相位机制。

3.1 两能级系统中的自旋弛豫

对于单体的自旋弛豫，我们以最简单的两能级系统为例来阐述自旋弛豫时

间 T_1 和 T_2 。单电子两能级系统哈密顿量为:

$$\begin{aligned} H &= H_e + H_{eb} + H_b, \\ H_e &= \frac{\Delta}{2} \sum_{\sigma} \sigma c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma}, \quad H_b = \omega b^{\dagger} b, \\ H_{eb} &= \sum_{\sigma_1 \sigma_2} M_{\sigma_1 \sigma_2} c_{\sigma_1}^{\dagger} c_{\sigma_2} (b + b^{\dagger}). \end{aligned} \quad (3.1)$$

其中 H_e 表示能量差为 Δ 两能级系统, 用一个自旋 $\frac{1}{2}$ 的自旋系统描述, 产生算符 c_{σ}^{\dagger} 表示在自旋为 $\sigma = \uparrow (\downarrow)$ 的态上产生一个电子。 H_b 是单色的声子热库, b^{\dagger} 是声子的产生算符。 H_{eb} 是电子和频率为 ω 声子之间的耦合项。其中系数 $M_{\uparrow\downarrow} (M_{\downarrow\uparrow})$ 给出的项可以在电子对应能量本征态 ($|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$) 之间翻转, 改变在不同自旋态上的占据数。这种自旋翻转也对应电子系统能量的变化。系数 $M_{\sigma\sigma}$ 给出的是与粒子的两个能量本征态的相位有关耦合项, 它不会改变两个能量本征态的占据数, 但是会改变两个态之间的相对相位。然而, 这一项可以在 σ_x 的不同本征态 $|\sigma\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + \sigma|\downarrow\rangle)$ 或者 σ_y 的不同本征态 $|\sigma\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + i\sigma|\downarrow\rangle)$ 之间翻转自旋, 但是和前一种在能级之间跃迁的翻转项不一样, 这种自旋翻转并不改变电子系统的能量, 即 ${}_i\langle\sigma|H_b|\sigma\rangle_i = 0$ ($i = x, y$) 对两个自旋态而言都是相同的。

物理上, 两能级系统是对共振问题很好的近似。在量子点系统或者原子系统内, 粒子的能级是分立的, 在有外界扰动如光学激发或者是处在声子热库的情况下, 只有那些能量和系统能级差相近的扰动才会对粒子在两能级之间跃迁有显著的影响。如此, 可以抽取这样的两个能级和对应频率的扰动单独考虑, 形成两能级系统。两能级系统中, 电子的自旋弛豫时间 T_1 是指两能级上电子占据数从不平衡的分布弛豫到平衡的分布的时间 [6, 304], 对应着电子能量的变化, 给出电子系统能量弛豫时间。对于自旋系统, 能量本征态一般沿着外加磁场的方向, 因此 T_1 也叫被称作纵向自旋弛豫时间; 自旋去相位时间 T_2 是指保持这两个能级之间的相对相位的时间, 对应横项 (x/y) 的自旋极化的弛豫, 也被称作横向自旋弛豫时间。下面我们分别用微扰方法和运动方程的方法给出这两个弛豫时间。

3.1.1 微扰处理

我们先用微扰的方法根据哈密顿量 (3.1) 求解两能级系统的波函数。将电子和声子热库耦合作用当做从 $t = 0$ 时刻施加的微扰, 求解系统波函数随时间的演化。在相互作用表象下, 算符 c 和 b 变换为含时的 $\hat{c}(t)$ 和 $\hat{b}(t)$:

$$\begin{aligned} \hat{c}_{\sigma}(t) &= e^{iH_e t} c_{\sigma} e^{-iH_e t} = e^{-i\Delta/2\sigma t} c_{\sigma}, \\ \hat{b}(t) &= e^{iH_b t} b e^{-iH_b t} = e^{-i\omega t} b, \\ \hat{H}_{eb}(t) &= \sum_{\sigma_1 \sigma_2} M_{\sigma_1 \sigma_2} e^{i\Delta/2(\sigma_1 - \sigma_2)t} c_{\sigma_1}^{\dagger} c_{\sigma_2} (b e^{-i\omega t} + b^{\dagger} e^{i\omega t}). \end{aligned} \quad (3.2)$$

则系统的波函数和任意物理量对应算符 A 可以由零时刻的状态演化为

$$\begin{aligned}\Psi(t) &= U(t,0)\Psi(0), \\ \hat{A}(t) &= e^{i(H_e+H_b)t} A e^{-i(H_e+H_b)t},\end{aligned}\quad (3.3)$$

其中 U 矩阵满足方程 $i\frac{\partial}{\partial t}U(t,0) = \hat{H}_{eb}(t)U(t,0)$ ，它的解是 Dyson 展开表示:

$$U(t,0) = 1 - i \int_0^t \hat{H}_{eb}(\tau)U(\tau,0)d\tau.$$

在一阶近似下得到

$$\begin{aligned}U(t,0) &= 1 - i \int_0^t \hat{H}_{eb}(\tau)d\tau \\ &= 1 - \sum_{\sigma_1\sigma_2} M_{\sigma_1\sigma_2} c_{\sigma_1}^\dagger c_{\sigma_2} (bF_{\sigma_1\sigma_2}^-(t) + b^\dagger F_{\sigma_1\sigma_2}^+(t)),\end{aligned}\quad (3.4)$$

这里的

$$F_{\sigma_1\sigma_2}^s(t) = \frac{e^{i[\Delta\sigma_1(1-\delta_{\sigma_1\sigma_2})+s\omega]t} - 1}{\Delta\sigma_1(1-\delta_{\sigma_1\sigma_2}) + s\omega}.$$

3.1.1.1 纵向自旋弛豫时间 T_1

我们将初态设定为在激发态 $|\uparrow\rangle$ ，通过和声子热库耦合，能量将弛豫到低能量态 $|\downarrow\rangle$ 。系统初始波函数为

$$\Psi(0) = |\uparrow\rangle|n\rangle,$$

其中 $|n\rangle$ 表示个有 n 个声子的声子态。有

$$\begin{aligned}|\Psi(t)\rangle &= U(t,0)|\Psi(0)\rangle \\ &= |\uparrow\rangle|n\rangle - M_{\uparrow\uparrow}(F_{\uparrow\uparrow}^-(t)\sqrt{n}|n-1\rangle + F_{\uparrow\uparrow}^+(t)\sqrt{n+1}|n+1\rangle)|\uparrow\rangle \\ &\quad - M_{\downarrow\uparrow}(F_{\downarrow\uparrow}^-(t)\sqrt{n}|n-1\rangle + F_{\downarrow\uparrow}^+(t)\sqrt{n+1}|n+1\rangle)|\downarrow\rangle.\end{aligned}\quad (3.5)$$

电子系统的能量变化，即两个能量本征态上粒子数的变化为

$$\begin{aligned}\langle\hat{\sigma}_z(t)\rangle &= \frac{\langle\Psi(t)|\hat{\sigma}_z(t)|\Psi(t)\rangle}{\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle} \\ &= 1 - 2|M_{\downarrow\uparrow}|^2(n|F_{\downarrow\uparrow}^-(t)|^2 + (n+1)|F_{\downarrow\uparrow}^+(t)|^2).\end{aligned}\quad (3.6)$$

这里只考虑到 M 的二次项，并且没有考虑两声子过程。在时间 t 足够长的时候 $|F_{\downarrow\uparrow}^s(t)|^2 = \frac{\sin^2(\frac{-\Delta+s\omega}{2}t)}{(\frac{-\Delta+s\omega}{2})^2} \xrightarrow{t\rightarrow\infty} 2\pi t\delta(-\Delta+s\omega)$ ，此时如果考虑跃迁到自旋朝下的几

率则给出费米黄金规则。比较 $\langle \hat{\sigma}_z(t) \rangle - \langle \hat{\sigma}_z(\infty) \rangle = (\langle \hat{\sigma}_z(0) \rangle - \langle \hat{\sigma}_z(\infty) \rangle)e^{-t/T_1}$ 可以得到

$$T_1^{-1} = 4\pi|M_{\uparrow\downarrow}|^2 \frac{(n+1)}{1 - \langle \hat{\sigma}_z(\infty) \rangle} \delta(-\Delta + \omega). \quad (3.7)$$

对声子做统计平均以后，将声子数 n 用平均值 $\bar{n} = 1/(e^{\beta\omega} - 1)$ 代替就可以了，其中 $\beta = 1/(k_B T)$ 。这里 k_B 是玻尔兹曼常数， T 是系统温度。对于电子极化而言，由于是不同能量本征态之间粒子占据数的差别，在一般情况下，它并不是零，可以用 $\langle \hat{\sigma}_z(\infty) \rangle = -[2e^{-\beta\Delta} + 1]^{-1}$ 。这里我们看出，对于纵向自旋弛豫只有可以直接在自旋朝上和自旋朝下态之间翻转自旋的扰动才有贡献。对于用微扰的方法求解自旋弛豫时间，必须满足电子在自旋朝上的态上的占据数要在 1 附近，跃迁到自旋朝下的部分是一个小量。如此就不用考虑自旋朝下态上的电子通过吸收一个声子跃迁到自旋朝上的态上的影响。但是在实际情况中，电子的分布达到平衡的时候是自旋朝下的态上（能量比较低）占据数多于自旋朝上的态，这时吸收声子的过程就不能不考虑了。这一部分的贡献可以通过合理的选取初态来解决，比如选择初态极化在末态极化附近 $\langle \sigma(0) \rangle - \langle \sigma(\infty) \rangle \ll 1$ ，但是这种方法不如运动方程方法方便。

3.1.1.2 横向自旋弛豫时间 T_2

若取初始的系统波函数为 $\Psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)|n\rangle$ ，则 t 时刻的波函数演化为

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ & |\uparrow\rangle|n\rangle - M_{\uparrow\uparrow}(F_{\uparrow\uparrow}^-(t)\sqrt{n}|n-1\rangle + F_{\uparrow\uparrow}^+(t)\sqrt{n+1}|n+1\rangle) |\uparrow\rangle \right. \\ & - M_{\downarrow\uparrow}(F_{\downarrow\uparrow}^-(t)\sqrt{n}|n-1\rangle + F_{\downarrow\uparrow}^+(t)\sqrt{n+1}|n+1\rangle) |\downarrow\rangle \\ & + |\downarrow\rangle|n\rangle - M_{\downarrow\downarrow}(F_{\downarrow\downarrow}^-(t)\sqrt{n}|n-1\rangle + F_{\downarrow\downarrow}^+(t)\sqrt{n+1}|n+1\rangle) |\downarrow\rangle \\ & \left. - M_{\uparrow\downarrow}(F_{\uparrow\downarrow}^-(t)\sqrt{n}|n-1\rangle + F_{\uparrow\downarrow}^+(t)\sqrt{n+1}|n+1\rangle) |\uparrow\rangle \right\}. \quad (3.8) \end{aligned}$$

则横向的自旋极化 $\hat{S}_+(t) = \frac{\hat{\sigma}_x(t) + i\hat{\sigma}_y}{2} = c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\downarrow}e^{i\Delta t}$ 的平均值的绝对值为

$$\begin{aligned} |\langle \hat{S}_+(t) \rangle| &= \frac{|\langle \Psi(t) | \hat{S}_+(t) | \Psi(t) \rangle|}{\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle} \\ &\approx \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{2n+1}{2} [|M_{\uparrow\downarrow}|^2 (|F_{\uparrow\downarrow}^-(t)|^2 + |F_{\downarrow\uparrow}^-(t)|^2) + (M_{\uparrow\uparrow} - M_{\downarrow\downarrow})^2 |F_{\uparrow\uparrow}^-|^2] \right\} \quad (3.9) \end{aligned}$$

这里我们略去了所有的振荡项。这一项随时间的变化给出自旋去相位时间

$$T_2^{-1} = (2n+1)\pi [|M_{\uparrow\downarrow}|^2 \delta(-\Delta + \omega) + (M_{\uparrow\uparrow} - M_{\downarrow\downarrow})^2 \delta(\omega)]. \quad (3.10)$$

这里可以看出，和自旋弛豫时间 T_1 只能由 $\sigma_{x/y}$ 的噪声引起不一样，自旋去相位时

间 T_2 也可以由 σ_z 噪声引起，不过这要求噪声频率是零。一般来说电子和原子核的超精细相互作用或者是无规的杂质势都可以提供零频的噪声。在零温或者 $\beta\Delta \ll 1$ 的条件下，并且只考虑 $\sigma_{x/y}$ 的噪声，我们可以得到

$$T_2^{-1} = \frac{1}{2}T_1^{-1}. \quad (3.11)$$

考虑到 σ_z 噪声的影响，则有

$$T_2^{-1} \geq \frac{1}{2}T_1^{-1} \quad (3.12)$$

在处理 T_2 的过程中，我们是考虑了自旋朝下的态到自旋朝上的态上的跃迁，因为我们给的初始波函数是自旋朝下和自旋朝上的占据数各占一半。但是在有限温度下的 T_1 却没有计入这一部分的贡献。因此，微扰的方法更适合在零温附近求解弛豫时间。

3.1.2 运动方程处理

由于微扰的方法只能得出初态附近的自旋演化情况，为了得到全时间段的自旋演化，可以用运动方程来处理。出发点是 Liouville 方程 [305]

$$i\frac{d}{dt}\rho(t) = [H, \rho(t)]. \quad (3.13)$$

这里 ρ 是系统的密度矩阵，由于只需要关心电子的演化，电子的密度矩阵可以从系统密度矩阵约化为

$$\sigma(t) = \text{Tr}_b \rho(t). \quad (3.14)$$

这里的 Tr_b 表示对声子做统计平均，即 $\text{Tr}_b A = \sum_n \langle n|A|n \rangle$ 。将系统的密度矩阵写成

$$\rho(t) = f(b)\sigma(t) + \eta(t), \quad (3.15)$$

其中 $f(b) = e^{-\beta H_b} / \text{Tr}[e^{-\beta H_b}]$ ， $\eta(t) = (1 - f(b)\text{Tr}_b)\rho(t)$ 。则得到关于 $\sigma(t)$ 和 $\eta(t)$ 的方程如下：

$$i\frac{d}{dt}\sigma(t) = [H_e, \sigma(t)] + \text{Tr}_b[H_{eb}, \eta(t)], \quad (3.16)$$

$$i\frac{d}{dt}\eta(t) = [H_e + H_b, \eta(t)] + (1 - f(b)\text{Tr}_b)[H_{eb}, f(b)\sigma(t) + \eta(t)]. \quad (3.17)$$

这里利用了关系 $\text{Tr}_b[H_e, \eta(t)] = \text{Tr}_b[H_b, \eta(t)] = 0$ ， $\text{Tr}_b[H_{eb}, f(b)\sigma(t)] = 0$ ， $\text{Tr}_b f(b) = 1$ 。将 $\eta(t)$ 和 H_{eb} 看成同阶的小量，则方程 (3.17) 中右边第二项中的 $[H_{eb}, \eta(t)]$ 看成高阶量忽略不计。剩余部分解出

$$\eta(t) = -i \int_0^t d\tau e^{-i(H_e + H_b)(t-\tau)} [H_{eb}, f(b)\sigma(t-\tau)] e^{i(H_e + H_b)(t-\tau)} \quad (3.18)$$

并带入方程 (3.16) 后得到:

$$\frac{d}{dt}\sigma(t) = -i[H_e, \sigma(t)] - \int_0^t d\tau \text{Tr}_b [H_{eb}, e^{-i(H_e+H_b)(t-\tau)} [H_{eb}, f(b)\sigma(t-\tau)] e^{i(H_e+H_b)(t-\tau)}] \quad (3.19)$$

将所有的有关电子的算符写到 σ_z 表象的本征态 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$ 下, 则变为 2×2 的矩阵:

$$\sigma(t) = \begin{pmatrix} f_\uparrow & \rho \\ \rho^* & f_\downarrow \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} M_{\uparrow\uparrow} & M_{\uparrow\downarrow} \\ M_{\downarrow\uparrow} & M_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}, \quad H_e = \frac{\Delta}{2}\sigma_z, \quad H_{eb} = M(b + b^\dagger).$$

则方程 (3.19) 对声子作统计平均以后化作:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\sigma(t) = -i\frac{\Delta}{2}[\sigma_z, \sigma(t)] - \int_0^t d\tau \left\{ \left[M, e^{-i\frac{\Delta(t-\tau)}{2}\sigma_z} M \sigma(\tau) e^{i\frac{\Delta(t-\tau)}{2}\sigma_z} \right] \right. \\ \left. \times [(\bar{n} + 1)e^{-i\omega(t-\tau)} + \bar{n}e^{i\omega(t-\tau)}] + h.c. \right\}. \quad (3.20) \end{aligned}$$

这里 $h.c.$ 表示对大括号中的前面的量取厄密共轭, $\bar{n} = \text{Tr}_b[b^\dagger b f(b)] = [e^{\beta\omega} - 1]^{-1}$ 是声子数目的统计平均值。

我们在 Markov 近似下分别讨论横向和纵向的自旋扰动对电子系统的横向和纵向自旋弛豫时间的影响。由于电声子的耦合作用, 电子和声子波函数经过散射后就会关联在一起。如果热库中声子的寿命足够的短, 那么这个关联可以很快的衰减, 从而电子在和声子散射以后很快就和声子波函数没有关系, 按照电子本身的哈密顿量演化, 直到遇到下一次散射。由于电子和声子的相干性保持的时间很短, 声子对电子的散射是一个不可逆的过程。运动方程 (3.20) 右边的第二项给出声子和电子关联项, 可以写成 $\int_{-\infty}^t f(t-\tau)\sigma(\tau)d\tau$, 这里积分下限从 0 变到 $-\infty$ 可以由绝热引入散射得到。如果 $f(t)$ 的衰减时间尺度 T_m 远比电子和声子耦合 M^{-1} 短, 则可以把 $\sigma(\tau)$ 当成 $\sigma(t)$ 提出积分号外。这里也可以这么理解: 可以认为在某个时刻 t_1 电子受到声子的散射, 在 T_m 时间内散射作用将会消失, 在受到声子下次散射 (M^{-1} 时间后, 这个时间很长) 之前, 电子完全是自由运动的, 因此可以根据 t 时刻电子的状态得知从 $t_1 + T_m$ 后任意时刻 τ 电子的状态:

$$\sigma(\tau) = e^{i\frac{\Delta}{2}\sigma_z(t-\tau)}\sigma(t)e^{-i\frac{\Delta}{2}\sigma_z(t-\tau)} \quad (3.21)$$

带入运动方程 (3.20) 并化简得

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\sigma(t) = -i\frac{\Delta}{2}[\sigma_z, \sigma(t)] - \int_{-\infty}^t d\tau \left\{ \left[M, e^{-i\frac{\Delta(t-\tau)}{2}\sigma_z} M e^{i\frac{\Delta(t-\tau)}{2}\sigma_z} \sigma(t) \right] \right. \\ \left. \times [(\bar{n} + 1)e^{-i\omega(t-\tau)} + \bar{n}e^{i\omega(t-\tau)}] + h.c. \right\}. \quad (3.22) \end{aligned}$$

这时散射项中对时间的积分可以积掉, 出现关于能量的 δ 函数, 给出能量守恒。

3.1.2.1 横向扰动

对于横向扰动，即当 $M_{\uparrow\uparrow} = M_{\downarrow\downarrow} = 0$ 时运动方程 (3.22) 在 Markov 近似下化作

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} f_{\uparrow} & \rho \\ \rho^* & f_{\downarrow} \end{pmatrix} &= -i\Delta \begin{pmatrix} 0 & \rho \\ -\rho^* & 0 \end{pmatrix} - \pi|M_{\uparrow\downarrow}|^2\delta(\Delta - \omega) \\ &\times \begin{pmatrix} 2((\bar{n} + 1)f_{\uparrow} - \bar{n}f_{\downarrow}) & (2\bar{n} + 1)(\rho - \frac{M_{\uparrow\downarrow}}{M_{\downarrow\uparrow}}\rho^*) \\ (2\bar{n} + 1)(\rho^* - \frac{M_{\downarrow\uparrow}}{M_{\uparrow\downarrow}}\rho) & -2((\bar{n} + 1)f_{\uparrow} - \bar{n}f_{\downarrow}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.23)$$

解得

$$\begin{aligned} f_{\uparrow}(t) &= \frac{\bar{n}}{2\bar{n} + 1}(f_{\uparrow}(0) + f_{\downarrow}(0)) + \left[\frac{\bar{n} + 1}{2\bar{n} + 1}f_{\uparrow}(0) - \frac{\bar{n}}{2\bar{n} + 1}f_{\downarrow}(0) \right] e^{-t/T_1}, \\ f_{\downarrow}(t) &= \frac{\bar{n} + 1}{2\bar{n} + 1}(f_{\uparrow}(0) + f_{\downarrow}(0)) - \left[\frac{\bar{n} + 1}{2\bar{n} + 1}f_{\uparrow}(0) - \frac{\bar{n}}{2\bar{n} + 1}f_{\downarrow}(0) \right] e^{-t/T_1}, \\ \rho(t) &= e^{-t/T_2} \left[\left(\cos(\Omega t) - i\frac{\Delta}{\Omega} \sin(\Omega t) \right) \rho(0) + \frac{M_{\uparrow\downarrow}}{M_{\downarrow\uparrow}} \frac{\sin(\Omega t)}{\Omega T_2} \rho^*(0) \right], \end{aligned} \quad (3.24)$$

其中给出纵向和横向弛豫时间为

$$T_1^{-1} = 2T_2^{-1} = 2\pi(2\bar{n} + 1)|M_{\uparrow\downarrow}|^2\delta(\Delta - \omega). \quad (3.25)$$

这里 $\Omega = \sqrt{\Delta^2 - T_2^{-2}}$ 是电子的两个自旋态之间经过散射项修正的振荡频率。

3.1.2.2 纵向扰动

对于纵向的 σ_z 扰动有 $M_{\uparrow\downarrow} = 0$ ，且 $M_{\uparrow\uparrow} = -M_{\downarrow\downarrow}$ ，则运动方程 (3.20) 化作：

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} f_{\uparrow} & \rho \\ \rho^* & f_{\downarrow} \end{pmatrix} = -i\Delta \begin{pmatrix} 0 & \rho \\ -\rho^* & 0 \end{pmatrix} - 4\pi(2\bar{n} + 1)|M_{\uparrow\uparrow}|^2\delta(\omega) \begin{pmatrix} 0 & \rho \\ \rho^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

很明显，和微扰方法得到的结果一样， σ_z 的扰动不会造成 T_1 ，只会对横向的自旋弛豫有影响，给出

$$T_2^{-1} = 4\pi(2\bar{n} + 1)|M_{\uparrow\uparrow}|^2\delta(\omega).$$

并且只有零频的扰动才会造成 T_2 。零频的扰动可以由随机噪声、电子-原子核的超精细相互作用以及随机分布的杂质散射造成。由于原子核达到平衡的时间非常长，电子和原子核的超精细作用不适合用 Markov 近似处理，但是可以用运动方程 (3.20) 很好的处理 [43]。

对两能级系统，微扰方法和运动方程方法都可以给出自旋弛豫时间。对于任何方向的扰动，这两种方法都给出相同的横向自旋弛豫时间。对于纵向自旋弛豫，微扰论方法

在保证正确性的基础上，必须要求系统的演化在初态附近，不能计入自旋翻转到朝下以后再翻转回去的几率。因此在有限温度的时候，在微扰论方法中不能计入自旋朝下态通过吸收声子跃迁到自旋朝上态的贡献。这一部分贡献可以用运动方程方法得到。在零温时，这两种方法给出相同的纵向自旋弛豫时间。在有限温度的时候，运动方程给出的纵向自旋弛豫时间要长于微扰论的结果。从运动方程出发的结果可以明确的看到，自旋翻转的散射对自旋关联的振动频率有一个红移的修正，因此在散射足够强的时候，自旋关联将不会随时间振荡。无论哪种方法，都给出 $T_2^{-1} \geq \frac{1}{2}T_1^{-1}$ 。

3.2 系综的自旋弛豫

系综的自旋弛豫/去相位最初是定义在用 Bloch-Torrey 方程 [306–308] 研究核磁共振中的原子核的磁矩随时间演化的问题中，并将系统总的纵向/横向核磁矩的衰减定义为纵向/横向的自旋弛豫时间；后来被广泛的应用在光学极化的弛豫问题中 [304, 309]。这里我们以两能级原子系综中光学极化的弛豫为例给出系综的自旋弛豫/去相位。对于两能级原子系综，在有外加光场时两能级系综总的自旋极化满足唯象的 Bloch 方程 [304]：

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = g\mu_b \mathbf{\Omega} \times \mathbf{M} - \begin{pmatrix} \frac{1}{T_2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{T_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{T_1} \end{pmatrix} (\mathbf{M} - \mathbf{M}_0). \quad (3.27)$$

其中 $\mathbf{M} = \sum_i \mathbf{m}_i$ 是系统的总磁矩， $\mathbf{m}_i = \begin{pmatrix} \text{Re}[\rho] \\ \text{Im}[\rho] \\ (f_\uparrow - f_\downarrow)/2 \end{pmatrix}$ 是每一个原子的自旋极化， $\mathbf{\Omega} = (-dE, 0, \Delta)$ 是进动场， dE 是光学偶极子， Δ 是两能级的能量差， $\mathbf{S}_0 = S_0 \hat{\mathbf{z}}$ 是系统在平衡时候的极化， T_1 和 T_2 是对应的纵向和横向自旋弛豫时间。这里 T_1 表示的是纵向原子极化达到平衡的时间，等价于系统总极化和环境达到平衡的时间。而 T_2 表示的是最初有共同相位的横向自旋在纵向的磁场下旋转，然后失去相位的过程，这个过程是由均匀影响所有原子的相互作用引起的，如碰撞、辐射衰减或者自旋交换等。除此之外还有另外一种由非均匀效应引起的弛豫，可以记为 T_2' 。最普通非均匀效应的来源是多普勒效应：每个原子都有它自己单独的和它的速度联系起来的共振频率 [304]，从而导致 Δ 对不同的原子有一个不均匀的扩展。在固体中，随机的局域应变场也会造成非均匀扩展。即使没有均匀扩展的衰减 T_2 ，这种随机分布的共振频率会引起自旋系综的极化的衰减，给出一个弛豫时间 T_2' 。这是系综的自旋弛豫和单个粒子的弛豫最大得

不同。因此总的横向弛豫时间可以写作：^①

$$\frac{1}{T_2^*} = \frac{1}{T_2} + \frac{1}{T_2'} . \quad (3.28)$$

下面以半导体光学弛豫为例，对可逆的自旋弛豫时间给一个定量的估计。对于半导体系统，导带电子和价带空穴的能谱是准动量 \mathbf{k} 依赖的，因此分布在不同 \mathbf{k} 上的电子的能量差 δ_k 不一样，则对每个动量 \mathbf{k} 光学极化的唯象的光学 Bloch 方程写为 [309]：

$$\frac{\partial \mathbf{U}_k}{\partial t} = - \begin{pmatrix} \frac{1}{T_2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{T_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{T_1} \end{pmatrix} (\mathbf{U}_k + \hat{\mathbf{z}}) + \boldsymbol{\Omega}_k \times \mathbf{U}_k . \quad (3.29)$$

其中 U_k 是光学极化矢量，其 z 分量是导带电子和价带空穴粒子数差。 $\boldsymbol{\Omega}_k = (dE, 0, \delta_k)$ 表示动量依赖的进动频率。在没有外加光场的时候 $\delta_k = \varepsilon_{c,k} - \varepsilon_{v,k}$ ，可以得到：

$$\begin{pmatrix} U_{1k}(t) \\ U_{2k}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta_k t & -\sin \delta_k t \\ \sin \delta_k t & \cos \delta_k t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{1k}(0) \\ U_{2k}(0) \end{pmatrix} e^{-t/T_2} . \quad (3.30)$$

可知，不同动量 k 的振荡频率不一样，因此系统得总极化 $\mathbf{U} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{U}_k$ 会因为振荡频率的扩展而造成额外的衰减。如果用 $\pi/2$ 脉冲光激发初始的极化为 $U_{1k}(0) = 0$ ， $U_{2k}(0) = -1$ ，则在两维系统中有

$$\begin{aligned} U_1 &= \sum_{\mathbf{k}} U_{1k} = -e^{-t/T_2} \sum_{\mathbf{k}} \sin \delta_k t \\ &= -e^{-t/T_2} \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \frac{\cos \delta_{k_F} t - 1}{t} . \end{aligned} \quad (3.31)$$

其中 m^* 是电子空穴对的有效质量。很容易看出，除了弛豫时间 T_2 以外，还有一个衰减 $\propto \frac{1}{t}$ 。这一部分的衰减就是由振荡频率的非均匀扩展引起的，并且它是可逆的弛豫过程，对应弛豫时间 T_2' 。这里说的可逆指的是这部分衰减掉的极化可以通过光学回声 (photon echo) 实验来恢复。回声实验对应的是在某一时刻 T 光学极化的进动角度是 α 时施加沿着 y 方向 (初始极化方向) 的 π 相位的脉冲光场，其可以把横向的光学极化的相位反向变为 $-\alpha$ ，然后在 $2T$ 时刻所有的光学极化将会回到 0 时刻的位置，从而放出光子，这就是光学回声。 T 时刻的光学极化为

$$\begin{pmatrix} U_{1k}(T) \\ U_{2k}(T) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta_k T & -\sin \delta_k T \\ \sin \delta_k T & \cos \delta_k T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{1k}(0) \\ U_{2k}(0) \end{pmatrix} e^{-T/T_2} . \quad (3.32)$$

^①为了和后面定义的电子自旋系统的横向弛豫时间一致 [310]，这里符号的定义和文献 [304] 有区别：对应关系是 $T_2 \rightarrow T_2'$ ， $T_2' \rightarrow T_2^*$ 以及 $T_2^* \rightarrow T_2$ 。

在施加了脉冲 π 相位后,

$$\begin{pmatrix} U_{1k}(T) \\ U_{2k}(T) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta_k T & \sin \delta_k T \\ -\sin \delta_k T & \cos \delta_k T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{1k}(0) \\ U_{2k}(0) \end{pmatrix} e^{-T/T_2}. \quad (3.33)$$

如此, 在时刻 $2T$ 的光学极化为

$$\begin{pmatrix} U_{1k}(2T) \\ U_{2k}(2T) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta_k T & -\sin \delta_k T \\ \sin \delta_k T & \cos \delta_k T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{1k}(T) \\ U_{2k}(T) \end{pmatrix} e^{-T/T_2} = \begin{pmatrix} U_{1k}(0) \\ U_{2k}(0) \end{pmatrix} e^{-2T/T_2}. \quad (3.34)$$

因此光学回声实验测量的是不可逆的自旋弛豫时间 T_2 。同理, 如果初始激发的极化成份中有 U_{3k} , 那么也会有对应 T_1 的 T_1' , 这一部分也可以通过光学回声实验消除。不仅如此, 四波混频实验测量的弛豫时间中也是去除了 T_2' 弛豫过程的。对于不可逆的弛豫时间 T_i 是由系统和环境发生耗散而引起的信息丢失, 这一部分是和随机的散射过程联系在一起并且不能通过回声实验恢复。为了方便起见, 理论上可以采用光学相干的非相干求和 $P(t) = \sum_{\mathbf{k}} |U_{1k} + iU_{2k}|$ 来直接给出不可逆的弛豫过程, 从而可以避免复杂自旋回声或者四波混频部分的计算。

类似与此, 电子自旋系综的弛豫过程, 也是由可逆的自旋弛豫和不可逆的自旋弛豫过程两部分组成。由于可逆的自旋弛豫完全是相干的, 可以通过自旋回声实验消除, 理论上处理也是很明确的。下面着重考虑不可逆的自旋弛豫过程, 其主要包括有 EY 机制 [169]、D'yakonov-Perel' 机制 [170]、Bir-Aronov-Pikus 机制 [171] 以及由电子和原子核的超精细作用引起的弛豫。最近, Wu 等人 [51, 311, 312] 从多体及非均匀扩展的角度重新考虑守恒散射引起的自旋弛豫, 指出在有非均匀扩展存在的条件下, 任何自旋守恒散射-包括电子-电子散射-都会引起不可逆的自旋弛豫。并且 Wu 等人指出, 可以用自旋相干的非相干求和的时间演化来定义不可逆的自旋弛豫时间。

3.2.1 Elliott-Yafet 弛豫机制^②

Elliott 在 1954 年最早指出, 晶格的自旋轨道耦合相互作用会引起电子不同自旋的波函数之间的混合, 从而使电子在发生动量弛豫的过程中自旋取向也会发生改变 [169]。对于 Elliott 考虑的有对称中心的碱金属元素 (体心立方晶格结构) 而言, 动量为 \mathbf{k} 和能带指标为 n 的自旋朝上的态和自旋朝下的态可以写作 [6, 169]

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}n\uparrow}(\mathbf{r}) &= [a_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})|\uparrow\rangle + b_{\mathbf{k}n}|\downarrow\rangle]e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \\ \Psi_{\mathbf{k}n\downarrow}(\mathbf{r}) &= [a_{-\mathbf{k}n}^*(\mathbf{r})|\downarrow\rangle - b_{-\mathbf{k}n}^*|\uparrow\rangle]e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

这两个 Bloch 态是时间反演和空间反演对称的简并态 [169]。其中 $b \ll 0$ 。根据式 (2.24) 可知, 具体的系数可以正比于自旋轨道耦合能量和能带之间的能量差的比

^②本节的主要内容都是摘自文献 [69]

值 $\lambda_{so}/\Delta E \ll 1$ 。从这里可以看出，自旋轨道耦合本身不能引起自旋弛豫，必须有动量弛豫发生。动量弛豫一般可以由杂质 (低温) 或者声子 (高温) 散射过程提供。Elliott 给出自旋弛豫时间和有效 g 因子对自由电子 g 因子的偏移之间的关系，即 Elliott 关系: $1/\tau_s \approx (\Delta g)^2/\tau_p$ ，这个关系只是一个粗略的估计，其中 $\Delta g \sim b$ 。比较详细的计算由 Yafet [288]系统的给出，可以根据已知的能带以及声子结构求出自旋弛豫，定性给出自旋弛豫时间的温度依赖和电阻率的关系，即 Yafet 关系: $1/T_1(T) \sim \langle b^2 \rangle \rho(T)$ ，并且被 Monod 和 Beuneu [313]在实验上验证。紧接着，Pikus 和 Titkov [69]根据具体的能带结构以及声子或杂质散射，利用 Fermi 黄金规则在 III-V 族半导体高对称点 (Γ 点) 解析的给出 Elliott-Yafet 弛豫机制引起的自旋弛豫时间。

在闪锌矿结构的半导体体材料中，考虑了 Γ_8 、 Γ_7 和导带 Γ_6 带波函数的混合以后，自旋守恒的动量散射给出可以翻转自旋的 EY 自旋轨道耦合，由式 (2.40) 和 (2.46) 给出，分别对应长程相互作用和由光学声子形变引起的短程相互作用。

3.2.1.1 长程相互作用

对于电子-杂质散射和电子-声子散射以及电子-电子散射给出的长程 EY 自旋轨道耦合，重新写出如下:

$$\tilde{V}_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^c = V_{\mathbf{k}\mathbf{q}}[1 - i\lambda_c(\mathbf{k} \times \mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] .$$

后一项给出自旋翻转的散射。对于杂质散射过程，电子能量保持不变。按照第 3.1.1 节中 T_1 表达式 (3.7) 可以得出对于过程 $|\mathbf{k}, \uparrow\rangle \rightarrow |\mathbf{q}, \downarrow\rangle$ ，自旋翻转的几率是 [69]

$$\frac{1}{\tau_s(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{q})} = \frac{4\pi}{\hbar} |\langle \uparrow | \tilde{V}_{\mathbf{k}\mathbf{q}} | \downarrow \rangle|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{q}}) . \quad (3.36)$$

这里我们取平衡的自旋极化 $\sigma(\infty) = 0$ 。则态 $|\mathbf{k}, \uparrow\rangle$ 的弛豫是

$$\frac{1}{\tau_s(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\tau_s(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{q})} . \quad (3.37)$$

考虑到电子在 \mathbf{k} 空间角度方向分布是均匀的，对跃迁几率角度做角度平均后得到

$$\frac{1}{\tilde{\tau}_s(k)} = \int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}}}{4\pi} \frac{1}{\tau_s(\mathbf{k})} . \quad (3.38)$$

动量弛豫时间给出

$$\frac{1}{\tilde{\tau}_p(k)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} |V_{\mathbf{k}\mathbf{q}}|^2 (1 - \cos \theta) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{q}}) , \quad (3.39)$$

其中 θ 是散射过程中出射动量 \mathbf{q} 和入射动量 \mathbf{k} 的夹角。比较动量弛豫时间和自旋弛豫时间后得 [69]

$$\frac{1}{\tilde{\tau}_s(k)} = \frac{16}{27} \frac{1}{\tilde{\tau}_p} \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_g} \right)^2 \eta^2 \left(\frac{1 - \frac{1}{2}\eta}{1 - \frac{1}{3}\eta} \right)^2 \Phi. \quad (3.40)$$

这里

$$\Phi = \frac{\int_{-1}^1 (1 - \mu^2) \sigma_s(\mu) d\mu}{\int_{-1}^1 (1 - \mu) \sigma_s(\mu) d\mu}, \quad (3.41)$$

是散射相关项, σ_s 对应着散射截面。对于弹性杂质或者声子散射, 可以将散射矩阵元记作 $V_{\mathbf{kq}} = V(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|)$, 则 $\sigma_s(\mu) = \frac{m^*k}{(2\pi\hbar)^2} |V(k\sqrt{2-2\mu})|^2$ 。在费米面比较高的系统, 由 LO 声子散射引起的弛豫中, $\Phi = 1$; 而对于杂质散射, $\Phi = \frac{2(2+\beta) \ln(1+\beta) - 2\beta/(2+\beta)}{\beta \ln(1+\beta) - \beta/(1+\beta)}$, 其中 $\beta = (2kL_{\text{Deb}})^2$ 。

给定初始极化分布 $\Delta f_{\mathbf{k}}$, 自旋系综由 EY 机制引起的自旋弛豫需要对初始的分布做统计平均, 即

$$\frac{1}{\tau_s} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\tilde{\tau}_s(k)} \Delta f_{\mathbf{k}} / \sum_{\mathbf{k}} \Delta f_{\mathbf{k}}. \quad (3.42)$$

在高温下, 将电子动能 $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ 用 $k_B T$ 估计后, 可知在动量散射时间不变的情况下, 自旋弛豫时间和温度成 T^2 关系。

我们讨论一下上式给出的系综弛豫/去相位时间的正确性: 系综的自旋弛豫/去相位时间是通过系综的自旋极化的时间演化做指数衰减 (或振荡衰减) 得到的特征时间。在第 3.1.2 节用运动方程方法得到 $\rho_{\mathbf{k}}(t)$ 后, 自旋极化的时间演化为 $\mathbf{P}(t) = \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(t)\boldsymbol{\sigma}]/2$ 。然而对于微扰方法, 在得出单个动量的电子自旋翻转速率 $\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}}$ 后, 如何得到系综的自旋弛豫/去相位时间呢? 简单的做法是将每个动量的电子的 z 方向自旋极化演化写为 $\Delta f_{\mathbf{k}}(t) = \Delta f_{\mathbf{k}}(0)e^{-t/\tau_{\mathbf{k}}}$, 则 $\Delta N(t) = \sum_{\mathbf{k}} \Delta f_{\mathbf{k}}(t)$ 。当 $t/\tau_{\mathbf{k}} \ll 1$ 时, 得到 $\Delta N(t) \sim \sum_{\mathbf{k}} \Delta f_{\mathbf{k}}(0)(1 - t/\tau_{\mathbf{k}}) = \Delta N(0)(1 - t/\tau)$, 其中 $\frac{1}{\tau} = \sum_{\mathbf{k}} \Delta f_{\mathbf{k}}(0) \frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} / \Delta N(0)$ 近似是系综的自旋弛豫时间。这种近似的适用范围是需要考虑的: 比如在小极化的强简并的电子气很容易满足; 然而, GaAs 量子阱系统中 DP 机制引起的自旋弛豫的计算 [314] 表明这种近似在弱简并系统会有非常大的误差。

3.2.1.2 短程作用

对于短程 EY 自旋轨道耦合, 重新写出公式 (2.46) 如下 [69]

$$\tilde{V}_{\mathbf{kq}}^c = -\frac{1}{3} \frac{\eta \hbar d_2 [\mathbf{U} \times (\mathbf{k} + \mathbf{q})] \cdot \boldsymbol{\sigma}}{[2m_e E_g (1 - \frac{1}{3}\eta)]^{1/2}}. \quad (3.43)$$

和长程作用不同, 短程作用中不仅仅纵向声子有贡献, 横向声子也有贡献。对于极化的光学声子散射, 在忽略纵向和横向声子的能量差以后, EY 引起的自旋弛豫时间可以由

公式 (3.36–3.38) 得到 [69]:

$$\frac{1}{\tilde{\tau}_s} = \frac{16}{27} \frac{1}{\tilde{\tau}_p} \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2}{E_g E_0} \frac{\eta^2}{1 - \frac{1}{3}\eta}. \quad (3.44)$$

其中 $E_0 = C^2 \hbar^2 / 4d_2 m_e$, $C = e\omega_{L0} \times (4\pi\rho_0(\epsilon_{\infty}^{-1} - \epsilon_0^{-1}))^{1/2}$ 。

在体材料中, EY 弛豫机制在窄带半导体 (如 InAs 材料, 给出比较大 γ) 中比较重要。不过对于二维系统, 长程 EY 自旋轨道耦合 (见公式 2.40) 只能翻转 x/y 方向的自旋, 不能翻转 z 方向的自旋。因此, 在两维系统中, 长程 EY 自旋轨道耦合不会引起自旋弛豫, 只会导致自旋去相位。但是短程的 EY 自旋轨道耦合却既可以导致自旋去相位, 也可以导致自旋弛豫。然而, EY 自旋翻转散射在三维和两维下系数变化不大, 相比较对维度有非常大的依赖的自旋轨道耦合 (维度强烈影响 DP 机制给出的自旋弛豫) 而言, EY 机制对维度的依赖可能不是很强。

3.2.2 D'yakonov-Perel' 弛豫机制

在 III-V (如 GaAs) 族或 II-VI (如 ZnSe) 族半导体中, 由于晶格缺少反演对称中心, 自旋轨道耦合会混合导带电子和价带空穴的波函数, 从而使导带电子自旋态在 $\mathbf{k} \neq 0$ 处解简并。从上一章可知, 这个自旋劈裂给出 BIA (Dresselhaus) 或者 SIA (Rashba) 自旋轨道耦合相互作用 $H_{so}(\mathbf{k})$ 。D'yakonov 和 Perel' 指出由翻转自旋的自旋轨道耦合和动量散射一起导致的自旋弛豫在缺少反演中心的材料中会更有效 [170]。自旋轨道耦合等价于一个大小和方向都依赖于电子动量 \mathbf{k} 的有效磁场, 并且电子自旋绕着该磁场做频率为 $\Omega_{\mathbf{k}}$ 的 Larmor 进动。则电子受碰撞而改变其动量时, 电子的进动方向以及频率也会随之改变, 两者的共同作用产生一个有效的自旋翻转散射, 导致自旋弛豫/去相位。对于弱散射极限 $\Omega_{\mathbf{k}} \tilde{\tau}_p(k) \gg 1$, 则电子横向自旋极化会在碰到散射之前可以进动超过一周, 从而平均值约为零。对于另外一种强散射极限 $\Omega_{\mathbf{k}} \tilde{\tau}_p(k) \ll 1$, 电子自旋在受到散射之前只进动了一个非常小的角度, 散射将会大大减小自旋弛豫。大部分的 III-V 族半导体体材料, 导带电子都满足 $\Omega_{\mathbf{k}} \tilde{\tau}_p(k) \ll 1$ 。但是异质结结构中的电子或者空穴, 自旋轨道耦合系数由于约束的原因会大大提高, 对于比较高的能量的载流子可能满足 $\Omega_{\mathbf{k}} \tilde{\tau}_p(k) > 1$ 。有一点需要强调, 自旋轨道耦合和动量散射都依赖于动量 \mathbf{k} , 并且有着相反的依赖关系: 自旋轨道耦合的强度随着动量变大而增加, 而动量散射却是随着动量增加而减小, 则 $\Omega_{\mathbf{k}} \tilde{\tau}(k)$ 随着动量的增大而变大。因此在高温下, 费米分布趋向于麦克斯韦分布, 不同动量 \mathbf{k} 的电子有可能会分别处在这两种极限下。下面介绍 D'yakonov 和 Perel' 对于强散射极限的处理 [170, 315], 由于散射本身不能翻转自旋, 对于 DP 弛豫机制需要用 Bloch 方程来研究。在后面第 6.2.3 节我们研究任何散射强度的动量弛豫下的 DP 机制。下面我们给出在体材料和二维系统中 DP 机制导致的自旋弛豫时间的大小。

3.2.2.1 三维系统中的 DP 弛豫机制 ^③

对于只考虑弹性散射的情况下，电子单粒子密度矩阵对应的 Bloch 方程给出如下：

$$\frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} + i[H_{so}(\mathbf{k}), \rho_{\mathbf{k}}] + \sum_{\mathbf{q}} W_{\mathbf{kq}}(\rho_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{q}}) = 0 \quad (3.45)$$

其中 $W_{\mathbf{kq}} = V(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|)\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{q}})$ 是自旋守恒弹性散射矩阵元。由于自旋轨道耦合是产生自旋弛豫的驱动项，并且它本身是高度各向异性的，因此可以把密度矩阵按照自旋轨道耦合的特点展开：即分成各向同性和各向异性两部分：

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_k &= \overline{\rho_{\mathbf{k}}} = \int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}}}{4\pi} \rho_{\mathbf{k}}, \\ \rho_1(\mathbf{k}) &= \rho_{\mathbf{k}} - \bar{\rho}_k. \end{aligned} \quad (3.46)$$

因此，对这两部分各自的时间演化化为：

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}_k}{\partial t} + i[\overline{H_{so}(\mathbf{k})}, \bar{\rho}_k] &= 0, \\ \frac{\partial \rho_1(\mathbf{k})}{\partial t} + i[H_{so}(\mathbf{k}), \rho_1(\mathbf{k})] - i[\overline{H_{so}(\mathbf{k})}, \rho_1(\mathbf{k})] + i[H_{so}(\mathbf{k}), \bar{\rho}_k] \\ &+ \sum_{\mathbf{q}} W_{\mathbf{kq}}(\rho_1(\mathbf{k}) - \rho_1(\mathbf{q})) = 0. \end{aligned} \quad (3.47)$$

这里只能考虑自旋轨道耦合很小的情况，将 H_{so} 当做一阶小量。对于 ρ_1 ，它是被自旋轨道耦合激发的，也是一阶小量。各向同性部分远远大于各向异性部分 $\rho_1(\mathbf{k}) \ll \bar{\rho}_k$ 。在自旋轨道耦合很小时，自旋进动时间远远大于动量弛豫时间 $\Omega_{\mathbf{k}}\tilde{\tau}_p \ll 1$ ，给出很长的自旋弛豫时间。则 $\frac{\partial \rho}{\partial t} \sim -\frac{\rho}{\tau}$ ，其中 τ^{-1} 也当成一阶小量。因此在式 (3.47) 的第二个方程中，前面三项的阶数至少是二阶，要比后面两项一阶项高，忽略后方程化作：

$$i[H_{so}(\mathbf{k}), \bar{\rho}_k] + \sum_{\mathbf{q}} W_{\mathbf{kq}}(\rho_1(\mathbf{k}) - \rho_1(\mathbf{q})) = 0. \quad (3.48)$$

将自旋轨道耦合和 $\rho_1(\mathbf{k})$ 按照球谐函数展开，即

$$\begin{aligned} H_{so}(\mathbf{k}) &= \sum_{m,l} H_{so,m}^l(k) Y_m^l(\theta_{\mathbf{k}}, \phi_{\mathbf{k}}), \\ \rho_1(\mathbf{k}) &= \sum_{m,l} \rho_{1,m}^l(k) Y_m^l(\theta_{\mathbf{k}}, \phi_{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (3.49)$$

^③本节的主要内容都是摘自文献 [69]

其中 l 是自旋轨道耦合相中 k 的阶数。带入方程 (3.48) 并且利用关系

$$\int Y_m^l(\theta_{\mathbf{q}}, \phi_{\mathbf{q}}) \sigma_s(\cos(\theta_{\mathbf{k}} - \theta_{\mathbf{q}})) \frac{d\Omega_{\mathbf{q}}}{2\pi} = Y_m^l(\theta_{\mathbf{k}}, \phi_{\mathbf{k}}) \int_0^\pi \sigma_s(\cos \theta) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (3.50)$$

可以得到

$$i[H_{so,m}^l(k), \bar{\rho}] + \frac{1}{\tau^*} \rho_{1,m}^l(k) = 0, \quad (3.51)$$

其中

$$\frac{1}{\tau_l^*} = \int_{-1}^1 \sigma_s(\mu)(1 - P_l(\mu)) d\mu = \gamma_l \frac{1}{\tilde{\tau}_p}. \quad (3.52)$$

其中 $\gamma_l = \int_{-1}^1 \sigma_s(\mu)(1 - P_l(\mu)) d\mu / \int_{-1}^1 \sigma_s(\mu)(1 - \mu) d\mu$, P_l 是 Legendre 函数。

最终给出

$$\rho_1(\mathbf{k}) = -i \sum_l \tau_l^* [H_{so}^l(\mathbf{k}), \bar{\rho}_k]. \quad (3.53)$$

并带入 (3.47) 的第一个方程得到:

$$\frac{\partial \bar{\rho}_k}{\partial t} + \sum_l \tau_l^* \overline{[H_{so}^l(\mathbf{k}), [H_{so}^l(\mathbf{k}), \bar{\rho}_k]]} = 0 \quad (3.54)$$

记 $\bar{\rho}_k = \frac{1}{2} \mathbf{s}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 以及 $H_{so}^l(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\Omega}^l(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$, 则自旋极化满足时间演化:

$$\frac{\partial \mathbf{s}_k}{\partial t} = \tilde{\tau}_s^{-1}(k) \mathbf{s}_k \quad (3.55)$$

给出自旋弛豫时间张量

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_s^{-1}(k) &= \tilde{\tau}_{s,l}^{-1}(k), \\ (\tilde{\tau}_{s,l}^{-1})_{i,j} &= \frac{\tilde{\tau}_p}{\gamma_l} (\overline{(\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}}^l)^2} \delta_{ij} - \overline{\Omega_{\mathbf{k},i}^l \Omega_{\mathbf{k},j}^l}), \end{aligned} \quad (3.56)$$

其中 $\overline{\Omega_{\mathbf{k},i}^l \Omega_{\mathbf{k},j}^l} = \int \frac{\Omega_{\mathbf{k}}}{4\pi} \Omega_{\mathbf{k},i}^l \Omega_{\mathbf{k},j}^l$, 且 $\overline{(\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}}^l)^2} = \sum_i \overline{(\Omega_{\mathbf{k},i}^l)^2}$. 从这里可以看出, 自旋弛豫时间通常是一个张量, 表示各个不同方向的自旋之间是可以翻转。开始定义的自旋弛豫时间 (3.27) 是写在主轴方向的。

对于 Dresselhaus 自旋轨道耦合 (2.30):

$$\boldsymbol{\Omega}^D(\mathbf{k}) = \gamma \{k_x(k_y^2 - k_z^2), k_y(k_z^2 - k_x^2), k_z(k_x^2 - k_y^2)\}$$

这里只考虑了三次方项的贡献。平均值 $\overline{\Omega_{\mathbf{k},i}\Omega_{\mathbf{k},j}} = \frac{4}{105}k^6\delta_{ij}$ 给出自旋弛豫时间张量变成一个数，并且给出相同的横向和纵向自旋弛豫时间：

$$\tilde{\tau}_{s,3}^{-1} = \frac{\tilde{\tau}_p}{\gamma_3} \frac{8}{105} \gamma^2 k^6. \quad (3.57)$$

这里 γ_3 是散射相关的，对于杂质散射 $\gamma_3 \approx 6$ 、声学声子散射 $\gamma_3 \approx 1$ 和光学声子散射 $\gamma_3 \approx 41/6$ [6]。不过对于半导体系统而言，电子的浓度比较小导致费米面可能会远低于光学声子的能量，则在光学声子散射中做得弹性散射近似可能会有比较大的误差。对于这种情形，自旋弛豫需要数值求解方程 (3.45)。

对于 Rashba 自旋轨道耦合或者由应变力引起的自旋轨道耦合 (2.30)：

$$\Omega^{strain}(\mathbf{k}) = \gamma m_{cv} C_2 \{ \varepsilon_{xy} k_y - k_z \varepsilon_{zx}, \varepsilon_{yz} k_z - k_x \varepsilon_{xy}, \varepsilon_{zx} k_x - k_y \varepsilon_{yz} \}. \quad (3.58)$$

则 $\overline{\Omega_{\mathbf{k},x}\Omega_{\mathbf{k},y}} = -\frac{(\gamma m_{cv} C_2)^2}{3} k^2 \varepsilon_{zx} \varepsilon_{yz}$ 且 $\overline{\Omega_{\mathbf{k},z}^2} = \frac{(\gamma m_{cv} C_2)^2}{3} k^2 (\varepsilon_{zx}^2 + \varepsilon_{yz}^2)$ 。此时自旋弛豫时间的张量的非对角量不为零，可能会给出不相同的纵向和横向的自旋弛豫时间。以应力方向加在 (111) 方向为例，给出 $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = \varepsilon'_{111}/3$ ，则

$$(\tilde{\tau}_{s,1}^{-1})_{ii} = 4(\tilde{\tau}_{s,1}^{-1})_{ij} = \frac{4(\gamma m_{cv} C_2)^2}{3} \tilde{\tau}_p k^2 \left(\frac{\varepsilon'}{3}\right)^2 \quad (3.59)$$

则自旋弛豫时间张量的主轴沿着 (111)、 $(\bar{1}01)$ 和 $(\bar{1}10)$ 三个方向，则沿着 (111) 方向和垂直于这个方向的自旋弛豫时间分别为

$$\tilde{\tau}_{//}^{-1} = 2\tilde{\tau}_{\perp}^{-1} = 6(\tilde{\tau}_s^{-1})_{ij} \quad (3.60)$$

这里可以看出，无论是三次方项还是一次方项的自旋轨道耦合，都给出 $\tau_s \propto \frac{1}{\tau_p \Omega^2}$ 。高温下，在固定动量弛豫时间时，给出温度依赖关系 $\tau_l \propto T^l$ 。

3.2.2.2 二维系统的 DP 弛豫机制

对于二维系统而言，只需要把式 (3.49) 改成按照 $e^{il\theta}$ 展开即可：

$$H_{so}(\mathbf{k}) = \sum_{l,m} C_{l,m} k^l e^{il\theta_{\mathbf{k}}}. \quad (3.61)$$

按照和三维系统中类似的推导，可以得出公式 3.56 中的

$$\frac{1}{\tau_l^*} = \int_0^{2\pi} \sigma(\cos\theta)(1 - \cos(l\theta)) d\theta \quad (3.62)$$

其中 $\sigma_s(\cos\theta) = \frac{m}{(2\pi\hbar)^2} |W(k\sqrt{2-2\cos\theta})|$ 和两维的动量弛豫 $\tilde{\tau}_p^{-1} = \int_0^{2\pi} \sigma(\cos\theta)(1 - \cos(l\theta))d\theta$ 比较后则有

$$\frac{1}{\tau_l^*} = \gamma_l \frac{1}{\tilde{\tau}_p}. \quad (3.63)$$

其中 $\gamma_l = \int_0^{2\pi} \sigma(\cos\theta)(1 - \cos(l\theta))d\theta / \int_0^{2\pi} \sigma(\cos\theta)(1 - \cos(\theta))d\theta$ 。

3.2.2.3 磁场的影响

一般来说，在有外磁场时，电子自旋会围绕外磁场以频率 $\Omega_L = g\mu_B\mathbf{B}$ 作 Larmor 进动，同时轨道部分也会围绕磁场以频率 $\Omega_c = e\mathbf{B}/m^*$ 做回旋进动。这两种效应都会导致自旋弛豫过程变慢：自旋进动会抑制电子自旋绕自旋轨道耦合导致的有效磁场的进动，从而使自旋的有序取向保持的更久，减慢自旋弛豫 [316]；对于回旋进动，它使电子的在垂直于磁场方向的运动由平面波变化为封闭轨道的运动，从而使自旋轨道耦合的有效磁场对每一个回旋轨道态的平均值都变得很小，减慢自旋弛豫。

Larmor 进动对自旋弛豫的影响

最早在光学取向实验中，由于 Hanle 效应 [84]，横向磁场会使带边发光更为无序，因此早先理论上一般都是考虑纵向磁场对自旋弛豫的影响。不过在采用时间分辨的 Faraday 旋转实验精确测量自旋弛豫时间后，一般都是采用 Voigt 位型的磁场，即横向磁场来翻转纵向自旋。对于纵向磁场下的自旋弛豫时间可以估计如下：在散射时间 τ_p 内，自旋围绕内部磁场进动的角度为 $\Delta\phi = \Omega_{so}\tau_p$ 。当 $t \gg \tau_p$ 时，进动角度的均方差可以写成 $\overline{(\Delta\phi)^2} = \overline{(\Omega_{so}\tau_p)^2}t/\tau_p$ 。自旋弛豫时间大体就是使 $\overline{(\Delta\phi)^2} = 1$ 的时间，在外加磁场为零时 $\tau_s^{-1}(0) = \overline{\Omega_{so}^2(\mathbf{k})}\tau_p$ ，和前面得到的结果只差一个系数，因此这个估计是合理的。在有很大的外加磁场的时候，由与 $\Omega_{so}(\mathbf{k})/\Omega_L$ 是电子自旋的进动轴偏离外磁场的最大可能角度，因此在 τ_p 时间内进动角度不超过 $\Delta\phi(B) = \Omega_{so}(\mathbf{k})/\Omega_L\tau_p$ ，自旋弛豫时间大概由下式估计为

$$\overline{(\Omega_{so}^2(\mathbf{k})/\Omega_L^2)}(\tau_s(B)/\tau_p) = 1 \quad (3.64)$$

得到 $\tau_s(B) = \Omega_L^2\tau_p^2\tau_s(0)$ 。

为了能够定量的给出上面的估计，我们仍然从 Bloch 方程出发，加入磁场求解自旋轨道耦合，下面的推导不限定磁场的方向。不失一般性，将磁场方向取为 z 方向，方程 (3.51) 化为：

$$i[H_{\mathbf{B}}, \rho_{1,m}^l(k)] + i[H_{so,m}^l(k), \bar{\rho}] + \frac{1}{\tau^*}\rho_{1,m}^l(k) = 0. \quad (3.65)$$

其中第一项的 $H_{\mathbf{B}} = \frac{1}{2}\Omega_L \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 为外磁场引起的进动项。带入 $\rho_{1,m}^l(k) = \frac{1}{2}\mathbf{s}_{1,m}^l(k) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 后得到

$$\mathbf{s}_{1,m}^l(k) = \left(\frac{1}{\tau^*} - U_{\mathbf{B}}\right)^{-1}U_{so}\bar{\mathbf{s}}(k), \quad (3.66)$$

其中矩阵 $U_{\mathbf{B}/so}$ 满足 $i[H_{\mathbf{B}/so}, \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma}] = (U_{\mathbf{B}/so} \mathbf{A}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$, 这里

$$U_{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} 0 & -|\boldsymbol{\Omega}_L| & 0 \\ |\boldsymbol{\Omega}_L| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{及} \quad U_{so} = \begin{pmatrix} 0 & -\Omega_z & \Omega_y \\ \Omega_z & 0 & -\Omega_x \\ -\Omega_y & \Omega_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.67)$$

带入方程 (3.47) 后得到

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{s}}_{\mathbf{k}}}{\partial t} - U_{\mathbf{B}} \bar{\mathbf{s}}_{\mathbf{k}} + \sum_{l,m} U_{so,-m}^l \left(\frac{1}{\tau^*} - U_{\mathbf{B}} \right)^{-1} U_{so,m}^l \bar{\mathbf{s}}_{\mathbf{k}} = 0, \quad (3.68)$$

其中第三项给出动量散射和自旋轨道耦合引起的自旋弛豫, 给出

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tilde{\tau}_s(\mathbf{B})} &= \sum_{m,l} U_{so,-m}^l \left(\frac{1}{\tau^*} - U_{\mathbf{B}} \right)^{-1} U_{so,m}^l \\ &= \frac{\tau^{*2}}{1 + (|\boldsymbol{\Omega}_L| \tau^*)^2} \sum_{m,l} U_{so,-m}^l \left(\frac{1}{\tau^*} + U_{\mathbf{B}} \right) U_{so,m}^l \\ &= \frac{1}{1 + (|\boldsymbol{\Omega}_L| \tau^*)^2} \left[\tilde{\tau}_s^{-1} + |\boldsymbol{\Omega}_L| \tau^* \begin{pmatrix} 0 & \tilde{\tau}_{s,zz}^{-1} & -\tilde{\tau}_{s,zy}^{-1} \\ -\tilde{\tau}_{s,zz}^{-1} & 0 & \tilde{\tau}_{s,zx}^{-1} \\ \tilde{\tau}_{s,yz}^{-1} & -\tilde{\tau}_{s,xz}^{-1} & 0 \end{pmatrix} \right], \quad (3.69) \end{aligned}$$

其中 $\tilde{\tau}_s^{-1}$ 是未加磁场时系统的自旋弛豫时间张量, $\tilde{\tau}_{s,ij}^{-1}$ 是其 i 行 j 列的分量。由此可以看出, 自旋弛豫时间张量的分量可以写成

$$\tilde{\tau}_{s,ii}^{-1}(B) = \frac{1}{1 + (|\boldsymbol{\Omega}_L| \tau^*)^2} \tilde{\tau}_{s,ii}^{-1}. \quad (3.70)$$

随着磁场的变大弛豫过程变慢。对于具有各向同性的自旋弛豫时间系统, 自旋弛豫时间就等于 $\tilde{\tau}_{s,ii}^{-1}$ 。此时, 上式的第二项和 Larmor 进动项 (式 (3.65)) 都仅仅驱动自旋进动。但是在一些特殊的自旋轨道耦合的形式下, 特别是在低维半导体如量子阱或者量子线系统中, 自旋弛豫时间可以表现出很强的各向异性的时候, 这种结论并不一定是正确。在实验上已经观测到在很强的各向异性系统中测出自旋弛豫时间随着磁场的增加而减小的结果 [161]。这里给出一个简单的例子: 在很窄的 (001)-GaAs 量子阱系统中, 当 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的强度相同时 [286], 即

$$H_{so}(k_x, k_y) = \alpha(-k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + \beta(-k_x \sigma_y + k_y \sigma_x) \quad (3.71)$$

其中 $\alpha = \beta$ 。那么对任意 \mathbf{k} , 自旋轨道耦合的有效磁场都沿着 (110) 方向。对于这个系统, 自旋弛豫时间对自旋极化方向表现出非常强的各向异性 [24, 63, 65, 291, 317, 318]。这个方向的自旋极化将不会有 DP 自旋弛豫。如果在垂直于这个方向施加有外磁场, 则在

外磁场的作用下，这个方向的自旋极化由 DP 弛豫机制引起的自旋弛豫不再为零。

回旋进动对自旋弛豫的影响

在 III-V 族半导体中， $|\Omega_L|/|\Omega_c| = gm^*/2m_0$ 通常比较小 (如 GaAs 材料中为 0.01)，因此回旋运动对自旋弛豫的抑制作用应该远远超过自旋进动的抑制作用。在 $\Omega_c\tau_p$ 很小的时候，回旋运动对自旋弛豫的影响很小，因为和在一个回旋周期内已经发生的很多次散射改变的电子动量相比，回旋运动对电子动量的平均可以不用考虑；在 $\Omega_c\tau_p > 1$ 时，垂直于磁场方向的电子动量平均值基本上为零，从而很大程度上抑制了 DP 机制，自旋弛豫开始减小；在 $\Omega_c\tau_p \gg 1$ 时，自旋弛豫随着磁场的增加而减小的速度变慢，直至饱和。具体的讨论见文献 [319, 320]。

3.2.3 Bir-Aronov-Pikus 弛豫机制

在研究 p -型半导体中电子的自旋弛豫或者光激发的电子空穴对还没有复合的时候，电子和空穴之间的相互作用是必须要考虑的。电子和空穴之间除了正常自旋守恒的库仑作用以外，还有依赖于电子和空穴之间的相对自旋取向的交换作用。这一部分的哈密顿量可以写为 [69, 321, 322]

$$H_{ex} = \pi a_B^3 \mathcal{D} \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} . \quad (3.72)$$

这里 $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$ 是电子空穴之间的相对位置， \mathbf{K} 和 \mathbf{K}' 分别是电子空穴对在初态和末态的总动量。 a_B 是激子的玻尔半径， πa_B^3 是用来将 \mathcal{D} 约化为能量单位。 \mathcal{D} 的来源有两部分：一部分来自于电子和空穴在同一位置上的短程交换作用，对于 A_3B_5 型的化合物，这部分贡献可以写为

$$\mathcal{D}_{ex} = \frac{1}{4} \Delta_{ex} \mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.73)$$

其中 Δ_{ex} 是具有总角动量 $J = 1$ 和 $J = 2$ 的 $\Gamma_7 \times \Gamma_8$ 激子态之间的交换能。另外一项贡献来自于长程的湮灭作用：

$$\pi a_B^3 \mathcal{D}_{ij}^{\text{ann}}(\mathbf{K}) = \frac{4\pi\hbar^2 e^2}{m^2 \epsilon_\infty E_g^2} \frac{(\mathbf{P}_{0i} \cdot \mathbf{K})(\mathbf{P}_{0j} \cdot \mathbf{K})^*}{K^2} . \quad (3.74)$$

其中 \mathbf{P}_{0i} 是动量算符在初态 (基态) 和电子空穴对总动量为 \mathbf{K} 的末态之间的矩阵元。由于自旋轨道耦合的存在，动量算符在自旋不同的初末态之间的矩阵元可以不为零。因此 (3.73) 和 (3.74) 都会引起电子的自旋翻转。

在 p -型半导体内，Bir、Aronov 和 Pikus [171] 给出上面的电子空穴交换作用引起的电子的自旋翻转引起的自旋弛豫，即 BAP 弛豫机制的大小，并且指出这种机制要远比电子空穴相互作用引起的 EY 机制大，并且也在电子和顺磁杂质的散射过程中占主导地位。

位 [69]。BAP 弛豫机制给出

$$\frac{1}{\tau_s(\mathbf{k})} = 4\pi^3 a_B^6 \sum_{\substack{\alpha\alpha' \\ pq}} |\psi(0)|^4 |\mathcal{D}_{m'\alpha',m\alpha}(\mathbf{p}+\mathbf{q}, \mathbf{p})|^2 f_{\mathbf{p}}(1-f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}}+\mathcal{E}_{\mathbf{p}}-\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}-\mathcal{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \quad (m' \neq m) \quad (3.75)$$

这里 m 和 m' 是电子的初末态自旋， α 和 α' 是空穴的初末态自旋， \mathbf{p} 和 $\mathcal{E}_{\mathbf{p}}$ 是空穴的波矢和能量， $f_{\mathbf{p}}(\mathcal{E}_{\mathbf{p}})$ 是空穴的分布， $\psi(\mathbf{r})$ 是电子空穴相对运动的波函数。

最近，Zhou 和 Wu [323]在两维 GaAs 半导体中用动力学自旋 Bloch 方程仔细研究了由 BAP 机制导致的自旋弛豫/去相位。他们首先指出以往文献中采用的费米黄金规则方法的处理中过度的强调了 BAP 作用的重要性，正确的处理需要用动力学自旋 Bloch 方程研究。并且发现此时 BAP 的贡献和体材料中 BAP 机制在低温、高空穴浓度时候占主要地位完全不一样：本征的两维半导体系统中在任何条件-特别是低温下- BAP 机制对自旋弛豫的贡献远远小于 DP 机制的贡献。只有在 p 型以及空穴浓度比较高时，BAP 对自旋弛豫的贡献才和 DP 机制的贡献可比较。这应当和自旋轨道耦合在两维系统中的强度要远强于体材料系统强度有很大关系。

3.2.4 超精细相互作用导致的自旋弛豫

超精细相互作用是电子和核自旋之间磁相互作用，对系综电子自旋去相位以及束缚电子的去相干（包括自旋弛豫和去相位）有很重要的影响。由于超精细相互作用本身非常的弱，对电子的自旋弛豫是正比与电子的散射时间 τ_{int} 。对于束缚电子而言，由于散射比较弱 τ_{int} 时间很长，核自旋的影响不可忽略；对于自由电子， $\tau_{int} \sim \hbar/\varepsilon_{\mathbf{k}}$ 非常小，核自旋引起自旋弛豫几乎可以不用考虑 [69]。不过，电子的自旋信息在弛豫的过程中可以通过超精细相互作用传递给原子核自旋，从而实现动态的核极化 (dynamic nuclear polarization 或者 DNP)，这些已经在电子自旋从铁磁到半导体的注入实验观察到 [178, 324, 325]。由于核自旋弛豫的很慢，也许可以用来作为存储媒质。

超精细作用的有效哈密顿量是 [326]

$$H = \frac{8\pi}{3} \frac{\mu_0}{4\pi} g_0 \mu_B \sum_i \frac{\mu_I}{I} \mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad (3.76)$$

其中 $g_0 \approx 2$ 是自由电子的 g 因子， μ_0 是真空磁导率， μ_B 是玻尔磁子， μ_I 是核磁子， \mathbf{r} 和 \mathbf{R}_i 分别表示电子和第 i 个核的位置， \mathbf{S} 和 \mathbf{I}_i 分别表示电子和原子核的自旋算符。则在电子的轨道波函数为 $\psi(\mathbf{r})$ 式电子自旋感受到的磁场为 [69]

$$\mathbf{B}_n = \frac{2\mu_0}{3} \frac{g_0}{g^*} \sum_i \frac{\mu_I}{I} \mathbf{I}_i |\psi(\mathbf{R}_i)|^2, \quad (3.77)$$

其中 g^* 是有效 g 因子。对于量子点系统而言，每个量子点内电子波函数扩展很多个

晶格位置，电子受到的磁场是所有这些核的磁矩的叠加。特别是在 GaAs 材料中，所有的核都是有自旋的。在核全部被极化的情况下，电子感受到的核自旋引起磁场可以和 1 T 磁场或者 1 K 温度对应的能量相比 [324]。

超精细相互作用对电子自旋去相位/弛豫的影响主要是在束缚电子系统如量子点、杂质态等 [6]。

3.2.5 非均匀扩展引起的自旋弛豫/去相位

最近，Wu 提出了采用非均匀扩展的观点重新理解自旋系统的弛豫过程 [51, 312, 327]，即在有非均匀扩展的自旋系统，任何散射，包括自旋守恒的散射，特别是电子-电子散射，都会造成不可逆的自旋弛豫/自旋去相位。这里的非均匀扩展是指电子自旋在不同的电子态上的进动频率不一样。在空间均匀系统自旋随时间演化中，非均匀扩展主要可以由自旋轨道耦合如 Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合、能量依赖的 g 因子 [51]、 g 因子的随机涨落以及对称量子阱中随机的 Rashba 自旋轨道耦合作用 [328] 所提供；而在空间不均匀系统中的自旋扩散过程中，沿着空间梯度方向的自旋扩散速率对动量的依赖性也可以提供非均匀扩展。而正是由于非均匀扩展的出现，使得包括载流子之间的库仑散射在内的所有散射都会导致不可逆的自旋弛豫/去相位 [51, 312, 327]。同时，散射不仅仅提供了弛豫通道，而且还对非均匀扩展有反作用 [329]：散射促使载流子趋于更具有各向同性的状态从而抑制了非均匀扩展。

从非均匀扩展的角度理解自旋弛豫/去相位过程在很大程度上扩展了 DP 机制对自旋弛豫/去相位的理解。在只有电子-杂质等弹性散射时，体材料中的自旋弛豫/去相位过程可以用 DP 机制来比较好的描述。然而后来的研究 [311, 330] 表明，这种基于单体方法描述的自旋弛豫/去相位对于半导体量子阱系统而言，无论是在空间均匀系统中的时间演化 [51, 52, 54, 65, 81, 147, 147, 161, 311, 312, 314, 327, 329–336] 还是在非均匀系统中的输运过程 [57–59, 61, 62, 195] 中都是不完备的，主要表现在如下一些方面：

1. 由于电子-电子散射不会引起电子系统的动量弛豫，所以以往文献中的 DP 机制在很长一段时间内都认为它不会造成任何的自旋弛豫。由于 Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合提供了非均匀扩展，根据上面的分析可知，电子-电子散射当然会对自旋弛豫/去相位有贡献。后来大量的工作 [51–54, 331, 336] 也都证实了这点，表明电子-电子散射的贡献非常重要。
2. 各向同性的自旋子带的能量劈裂，如能量依赖的 g 因子给出的不均匀的 Zeeman 劈裂 [337–342] 也可以引起非均匀扩展，在散射的作用下就会导致自旋弛豫。但是在 DP 机制中却由于这个关系是各项同性的而认为它不会引起自旋弛豫。
3. 在空间不均匀系统的自旋扩散/输运中，非均匀扩展有个新的来源：自旋分布在空间上的不均匀导致了速度依赖的自旋扩散，另外因为电子自旋极化的进动 (内禀的自旋轨道耦合或者外加磁场下都会给出这个进动)，导致自旋极化在空间上有个动量依赖的振荡频率，给出非均匀扩展。在有散射时，这个非均匀扩展就会导致

空间扩散/输运中的自旋弛豫/去相位。这个新的弛豫过程中扩散起着关键性的作用，是在以往的各种机制中没有考虑的。这种新的非均匀扩展表现出非常不一样的性质，比如即使没有外磁场的时候自旋极化在空间上也会有振荡 [57–62]。

散射和非均匀扩展的相对大小给出不同的自旋弛豫过程 [335]：在强散射区域，散射对非均匀扩展的抑制作用占主导地位，从而自旋弛豫过程会随着散射的变强而变慢，这和 DP 机制对散射的依赖关系一样；同时非均匀扩展导致的可逆的自旋弛豫将会彻底消失，给出 $T_2^* = T_2$ [343]；在弱散射区域，散射对非均匀扩展的抑制几乎可以不计，主要用来提供有效的自旋翻转过程的散射通道，因此随着散射的变强自旋弛豫过程变快。

3.2.6 小结

上面我们介绍了几种自旋弛豫机制：EY 机制、DP 机制、BAP 机制、超精细相互作用引起的自旋弛豫以及非均匀扩展导致的自旋弛豫。这些机制分别在不同的条件下起主导作用：

1. 超精细相互作用引起的自旋弛豫过程非常缓慢，对体材料和二维材料的自旋弛豫影响非常小，一般不考虑。不过对于散射时间比较长的约束系统如量子点系统中有非常重要的影响。
2. 一般文献中认为，体材料中 BAP 机制在低温且高空穴浓度时起主要作用，因此对于 p 型半导体或者是本征半导体而言，BAP 的贡献不可忽略 [6]。但是最近 Zhou 等人的理论结果 [323]表明，在量子阱系统中，BAP 机制对于自旋弛豫的贡献始终是远小于由非均匀扩展导致的自旋弛豫的贡献。另外如果材料的电子-空穴复合时间非常长，那么在光学实验中激发的空穴在电子自旋弛豫时间内仍然没有复合的系统中，BAP 机制可能会有比较重要的贡献。
3. EY 和 DP 自旋弛豫机制都与半导体材料的自旋轨道耦合强度有关。EY 机制给出 $\tau_{EY}^{-1} \propto \frac{\epsilon_k^2}{\tau_p E_g^2}$ ，从体材料到受限体系的变化不是很明显。然而 DP 机制给出 $\tau_{DP}^{-1} \propto \gamma^2 \tau_p$ ，其中 γ 是自旋轨道耦合常数，对于受限体系此常数会变得很大，从而在量子阱/量子线系统非常重要。DP 机制是局限在强散射区域且只考虑了自旋轨道耦合的各向异性作用。由于 $\gamma^2 \propto \frac{1}{E_g}$ ，在弱简并条件下，窄带半导体中 EY 机制比较重要。
4. 在弱简并情况 (高温) 下，EY 机制给出 $\tau_{EY}^{-1} \propto T^2$ ，Dresselhaus 自旋轨道耦合引起的 DP 机制给出 $\tau_{DP}^{-1} \propto T^3$ 而由应力引起的自旋轨道耦合或者 Rashba 自旋轨道耦合给出 $\tau_{DP}^{-1} \propto T$ 。因此很容易看出，随着温度升高，Dresselhaus 项自旋轨道耦合引起的 DP 弛豫机制的弛豫速率增加的最快，然后是以二次方速度增加的 EY 机制。而在窄阱宽二维电子气中，Dresselhaus 自旋轨道耦合中也是以线性项为主，导致 DP 自旋弛豫机制给出的弛豫速率和温度成线性关系。实验上区分哪一种自旋弛豫机制占主导作用主要是测量自旋弛豫时间对温度或者电子能量的变化关系。

5. 非均匀扩展导致的自旋弛豫/去相位在非常大的范围内扩展了 DP 机制对自旋弛豫/去相位的理解：只要系统中存在非均匀扩展—无论是由自旋轨道耦合如 Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合、能量依赖的 g 因子、 g 因子的随机涨落以及对称量子阱中随机的 Rashba 自旋轨道耦合作用 [328]所提供；还是由的自旋扩散过程沿着空间梯度方向的自旋扩散速率对动量的依赖性所提供—以及在任何散射的作用下，自旋极化都会弛豫/去相位。利用这种观点，可以很容易理解强弱散射以及系统处在非平衡状态时的弛豫过程。并且对于弱散射区域也即自旋轨道耦合非常强时的自旋弛豫，由于非均匀扩展不能被散射完全抑制，其给出的可逆的自旋弛豫将会起主要作用。

然而，对于一个自旋系统而言，这些自旋弛豫机制是同时存在的。上面给出的是分别计算每一个单独的自旋弛豫速率，并且是在不同计算方法下得到的：DP 弛豫机制是通过 Bloch 方程给出，而 EY、BAP 机制却是通过费米黄金规则给出。因此会有如下的局限性：(i)他们都是基于费米黄金规则计算的，没有考虑由电子电子散射导致的多体相互作用；(ii) 没有考虑这些机制之间的相互影响。比如非均匀扩展对 BAP 机制的影响，或者反作用；(iii) 只能在近平衡附近考虑；(iv) 不容易推广到输运过程中。为了自洽的求解实际系统的自旋弛豫，需要同时考虑所有的弛豫过程，动力学自旋 Bloch 方程方法可以满足这些要求。下面我们主要介绍一下动力学自旋 Bloch 方程在自旋弛豫/去相位研究中的主要结果。

3.3 动力学自旋 Bloch 方程

动力学 Bloch 方程最早在核磁共振 [306–308]中提出并广泛的应用在光学极化 [309]问题中。在 2000 年，Wu 将光学 Bloch 方程推广到本征 ZnSe/Zn_{1-x}CdSe 材料中载流子自旋问题中，基于导带电子自旋 ($\pm\frac{1}{2}$) 和重空穴自旋 ($\pm\frac{3}{2}$) 构成的四自旋子带模型，给出了包括了导带和价带自旋自由度的微观的动力学自旋 Bloch 方程 [330]，定性的研究了在有自旋守恒散射和电子空穴交换自旋相互作用 (给出 BAP 弛豫机制) 下对光学弛豫和时间域导带电子自旋弛豫/去相位的影响。文中指出本征半导体中自旋守恒的库仑作用对自旋弛豫的影响甚小，但是 BAP 弛豫机制给出快速的电子自旋弛豫，同时使 g 产生红移。紧接着，Wu 等人利用动力学自旋 Bloch 方程在研究 n -型 GaAs 半导体系统中指出：即使没有自旋翻转散射，自旋轨道耦合导致的非均匀扩展也会在任何自旋守恒的散射下引起不可逆自旋弛豫/去相位 [51, 311, 312, 344]；如此，不导致动量弛豫的电子电子散射对自旋弛豫过程有着非常重要的影响，这是从单体角度考虑所不能得到的。

接着，Weng 和 Wu 定量的研究了高温下的二维电子气中非均匀扩展引起的多体效应 [52, 147, 314, 329, 331]。这里他们忽略了动力学自旋 Bloch 方程中的光学关联和空穴，只考虑导带电子自旋关联，并且分别讨论了 Dresselhaus 和 Rashba [314]自旋轨道

耦合所引起的非均匀扩展对自旋弛豫/去相位的作用。他们最早研究了单体公式不能处理的高极化 [52, 147, 314, 329, 331] 和强电场条件下 [147]的自旋弛豫/去相位：对于高极化的电子分布，得到 Hartree-Fock 给出的有效磁场在高极化下有非常重要的影响，最近已经被实验证实 [81]；而热电子效应却可以给出净的有效磁场，会使自旋在弛豫的过程围绕这个磁场振荡，和实验的结果一致 [78]。我们利用这组方程研究了量子线系统中的自旋弛豫，指出非均匀扩展在量子线系统中可以用 Lamor 频率的方差定量的描述，并且可以和自旋退相干时间相对应 [333]。Jiang 等人利用这组方程指出可以用应力产生的自旋轨道耦合有效的调节自旋弛豫速率 [334]。Zhou 等人考虑了低温下的声学声子对自旋弛豫的贡献以后，研究了自旋弛豫时间对温度的依赖关系，在无拟合参数下和实验符合的非常好，进一步验证了动力学自旋 Bloch 方程的正确性 [54]。同时给出无杂质系统中当电子分布从非简并变到简并时，自旋弛豫时间会有一个峰值，这个结果完全是库仑作用引起的。Zhou 和 Wu 运用动力学自旋 Bloch 方程仔细的讨论了 Bir-Aronov-Pikus (BAP) 机制 [345]引起的自旋轨道耦合 [323]，并且仔细讨论了非均匀扩展和 BAP 机制之间的相互影响。此外，Bronold 等人用半经典的运动方程来求解电子自旋弛豫，并且将 EY 机制、BAP 机制和 DP 机制做同样的处理，然后研究了二维系统的电子自旋弛豫 [346]。

进一步，Weng 和 Wu 将动力学自旋 Bloch 方程扩展到空间不均匀系统中 [57,195]。他们最早指出自旋关联项在自旋输运过程中起着非常重要的作用，这一点是广泛采用的两分量自旋模型中没有包括的。在考虑了自旋关联以后，他们预言了自旋在输运/扩散的过程中将会在自旋轨道耦合的作用下在空间上振荡 [57,58]，后来实验上也观察到这个振荡 [55,56]。他们指出扩散项也对非均匀扩展有贡献，因此输运过程中总的非均匀扩展是由扩散项和自旋轨道耦合项共同产生的：即使在没有自旋轨道耦合，而只有外加磁场的系统中，由扩散项提供的非均匀也会产生自旋弛豫。但是库仑作用的影响没有考虑。Jiang 等人 [59]在波包扩散中计入库仑作用的影响，指出库仑拽引效应的重要性，以及电场可以加强/抑制扩散等效应。Hruska 等人 [60]将动力学自旋 Bloch 方程约化为迁移扩散方程并在弛豫时间近似下研究了空间不均匀系统的自旋输运。

在上面的工作中，自旋轨道耦合都是没有放入基态统计中的。考虑了自旋轨道耦合对基态统计的影响 (Helix 统计) 以后，Lechner 和 Rössler 在只考虑电子-声子散射的时候给出了动力学自旋 Bloch 方程 [347]，但是他们没有考虑电子-电子散射并且没有具体的数值结果。Grimaldi 在 Helix 统计下求解了只有杂质散射时 DP 机制下的自旋弛豫/自旋去相位 [348]。我们进一步给出了在 Helix 统计下包括所有散射的自旋 Bloch 方程，并且在相同强度的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合下研究了电子的自旋弛豫 [65]。

下面我们简要介绍用动力学自旋 Bloch 研究自旋弛豫/去相位的方法和结果。

3.3.1 四自旋子带模型

Wu 最早将动力学自旋 Bloch 方程应用在本征 ZnSe/Zn_{1-x}Cd_xSe 量子阱中导带和重空穴带之间的光学和自旋相干 [330] 问题中。量子阱沿 z 方向生长，在 x 方向上施加一个中等大小的磁场 \mathbf{B} 。由于量子阱中的应力和 z 方向束缚势的作用，轻重两个空穴带有很大的能量劈裂 [286]，并且轻空穴带的能量较低，基本上填满电子，可以不用考虑。磁场按照 Voigt 位型施加在 x 方向，这个方向的磁场不会造成不同电子的自旋态之间的能量劈裂。这是因为重空穴 $\pm\frac{3}{2}$ 自旋之间不能直接通过横向磁场翻转，而必须通过轻空穴间接的翻转，在轻重空穴之间的能量劈裂很大的时候，对于小磁场而言这种翻转将在很大程度上被抑制 ($\propto B_{x/y}^2/\Delta_{hl}$, Δ_{hl} 是轻重空穴之间的能量差)，只由 z 方向的磁场才能造成可观的能量劈裂。因此对于小的横向磁场而言，重空穴不同自旋之间的能量劈裂可以不用考虑。选择合适频率的泵浦光能够只激发重空穴带的电子到导带。系统的哈密顿量写成

$$H = \sum_{\mu\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mu\mathbf{k}} c_{\mu\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mu\mathbf{k}\sigma} + g\mu_B \mathbf{B} \cdot \sum_{\mu\mathbf{k}\sigma\sigma'} (\mathbf{S}_\mu)_{\sigma\sigma'} c_{\mu\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mu\mathbf{k}\sigma'} + H_E + H_I, \quad (3.78)$$

其中产生算符 $c_{\mu\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ 是在能带 μ 上产生动量为 \mathbf{k} 自旋为 σ 的电子， (\mathbf{S}_μ) 为能带 μ 的自旋矩阵：对于导带电子就是 Pauli 矩阵；对于重空穴而言有 $S_v^z = \frac{3}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $S_v^{x/y} = 0$ 。 H_E 是电子-空穴在光场 $E_\sigma(t)$ 中的偶极作用，其中 $\sigma = \pm$ 是光的圆偏振性。由于选择性定则，重空穴带中自旋为 $3/2(-3/2)$ 的电子只能吸收左(右)旋光子从而被激发到自旋为 $1/2(-1/2)$ 的导带上。因此

$$H_E = -d \sum_{\mathbf{k}} [E_-(t) c_{\mathbf{k}\frac{1}{2}}^\dagger c_{v\mathbf{k}\frac{3}{2}} + h.c.] - d \sum_{\mathbf{k}} [E_+(t) c_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}}^\dagger c_{v\mathbf{k}-\frac{3}{2}} + h.c.]. \quad (3.79)$$

方程中 d 为光学偶极矩矩阵元。光场可以进一步写成 $E_\sigma(t) = E_\sigma^0(t) \cos(\omega t)$ ，其中 ω 为光脉冲的中心频率。 $E_\sigma^0(t)$ 为宽度为 δt 的高斯脉冲 $E_\sigma^0(t) = E_\sigma^0 e^{-t^2/\delta t^2}$ 。 H_I 是相互作用 Hamiltonian，它即包括了自旋守恒散射，也有自旋翻转散射。他们的文章中只考虑了自旋守恒的电子-空穴散射和给出 BAP 效应的自旋翻转的库仑作用。

由于光场以及磁场的关联，对于单粒子密度矩阵他们考虑如下的关联项：导带和价带之间的光学极化(相干) $P_{\mathbf{k}\frac{1}{2}\frac{3}{2}} \equiv e^{i\omega t} \langle c_{v\mathbf{k}\frac{3}{2}}^\dagger c_{\mathbf{k}\frac{1}{2}} \rangle$ 和 $P_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}} \equiv e^{i\omega t} \langle c_{v\mathbf{k}-\frac{3}{2}}^\dagger c_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}} \rangle$ ，导带电子的自旋相干 $\rho_{c\mathbf{k}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \equiv \langle c_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}}^\dagger c_{\mathbf{k}\frac{1}{2}} \rangle$ ，以及光学禁戒相干 $P_{\mathbf{k}\frac{1}{2}-\frac{3}{2}} \equiv e^{i\omega t} \langle c_{v\mathbf{k}-\frac{3}{2}}^\dagger c_{\mathbf{k}\frac{1}{2}} \rangle$ 和 $P_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}\frac{3}{2}} \equiv e^{i\omega t} \langle c_{v\mathbf{k}\frac{3}{2}}^\dagger c_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}} \rangle$ ，小磁场下重空穴不同自旋之间不能直接翻转，因此它们之间的关联 $\rho_{v\mathbf{k}\frac{3}{2}-\frac{3}{2}} \equiv \langle c_{v\mathbf{k}-\frac{3}{2}}^\dagger c_{v\mathbf{k}\frac{3}{2}} \rangle$ 不计。具体见示意图 3-1。

应用非平衡 Green 函数方法 [309, 349]，Wu 得到半导体中的 Bloch 方程：

$$\dot{\rho}_{\mu\nu\mathbf{k}\sigma\sigma'} = \dot{\rho}_{\mu\nu\mathbf{k}\sigma\sigma'}|_{\text{coh}} + \dot{\rho}_{\mu\nu\mathbf{k}\sigma\sigma'}|_{\text{scatt}}. \quad (3.80)$$

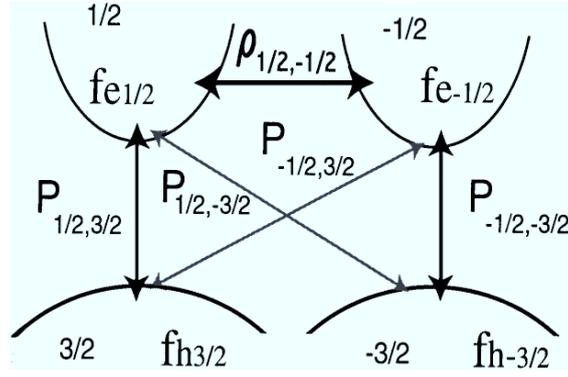


图 3-1: 四自旋子带模型, 摘自文献 [312]。

这里 $\rho_{\mu\nu\mathbf{k}\sigma\sigma'}$ 是单粒子密度矩阵矩阵元。其对角项 $\rho_{\mu\mu\mathbf{k}\sigma\sigma} = f_{\mu\mathbf{k}\sigma}$ 是 μ 子带上动量为 \mathbf{k} 、自旋为 σ 的分布函数。 $f_{c\mathbf{k}\sigma} \equiv f_{e\mathbf{k}\sigma}$ 是导带电子分布函数； $f_{v\mathbf{k}\sigma} = 1 - f_{h\mathbf{k}\sigma}$ 为价带电子分布，其中 $f_{h\mathbf{k}\sigma}$ 代表重空穴的分布函数。非对角项就是中定义的不同子带之间的极化（相干）， $\rho_{c\nu\mathbf{k}\sigma\sigma'} = P_{\mathbf{k}\sigma\sigma'} e^{-i\omega t}$ 是价带—导带光学极化，下标中的第一个 $\sigma = \pm\frac{1}{2}$ 是电子自旋指标，而第二个 $\sigma' = \pm\frac{3}{2}$ 是空穴的自旋指标； $\rho_{c\mathbf{k}\sigma\sigma'}$ 是自旋相干。方程右边的 $\dot{\rho}_{\mu\nu\mathbf{k}\sigma\sigma'}|_{\text{coh}}$ 和 $\dot{\rho}_{\mu\nu\mathbf{k}\sigma\sigma'}|_{\text{scatt}}$ 分别是相干项和散射项，它们的具体形式依赖于相互作用哈密顿量 H_I ，详细的表达式可以见文献 [330]。通过求解方程 (3.80) 即可得到电子/空穴分布函数以及关联函数随时间的演化，从而和实验测量量联系在一起。

实验上一般通过测量 Faraday 旋转角来测量自旋去相位 [74–76]：使用两束相干的脉冲激光，第一束是泵浦光，用于产生自旋极化，它是传播方向为 \mathbf{k}_1 的圆偏振光；第二束是探测光，它是传播方向为 \mathbf{k}_2 的线偏振光，它和泵浦光在时间上延迟 τ ，强度上也远远弱于泵浦光。泵浦光和探测光的光场可以分别写为 $E_{\text{pump}}^0(t) = E_-^0(t)$ ，以及 $E_{\text{prob}}^0(t) = E_{\text{prob,-}}^0(t - \tau) + E_{\text{prob,+}}^0(t - \tau) \equiv \chi [E_-^0(t - \tau) + E_+^0(t - \tau)]$ ，其中 $\chi \ll 1$ 。则探测光束的偏振方向变化的角度，即 Faraday 旋转角，可以用下式计算 [156, 172]：

$$\Theta_F(\tau) = C \sum_{\mathbf{k}} \int \text{Re} \left[\bar{P}_{\mathbf{k}\frac{1}{2}\frac{3}{2}}(t) E_{\text{prob,-}}^{0*}(t - \tau) - \bar{P}_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}}(t) E_{\text{prob,+}}^{0*}(t - \tau) \right] dt, \quad (3.81)$$

其中 $\bar{P}_{\mathbf{k}\sigma\sigma'}$ 表示在探测方向（即 \mathbf{k}_2 ）上的光学跃迁； C 是一个常数。实验上确定自旋去相位时间由 Faraday 旋转角的包络线的斜率来确定，但是求 Faraday 旋转角需要对光学极化做多次投影 [350, 351]，需要耗费大量的计算时间。考虑到光学中可以用极化的非相干和

$$P_{\sigma\sigma'}(t) = \sum_{\mathbf{k}} |P_{\mathbf{k}\sigma\sigma'}(t)| \quad (3.82)$$

来定义不可逆的光学去相位 [352], Wu 定义了自旋相干的非相干和:

$$\rho(t) = \sum_{\mathbf{k}} |\rho_{cck\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}| . \quad (3.83)$$

用它的包络线的斜率来定义不可逆的自旋去相位时间。虽然公式 (3.81) 中没有出现电子的自旋关联 $\rho_{cck\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$, 但是由于探测光的时间延迟 τ 远比光学弛豫时间长, 这时泵浦光产生光学相干和光学禁戒相干在探测时已经为衰减到零, 只留下导带电子的自旋关联, 从而对法拉第旋转角有影响。

Wu 将上面方法应用在 ZnSe/Zn_{1-x}Cd_xSe 本征体材料中研究了 BAP 效应对自旋弛豫/去相位的影响, 得到如下结果: BAP 效应给出的自旋弛豫时间在几十 ps 量级, 同时 BAP 效应会引起有效 g 因子的红移 [330]; 在比较了微观多体方法和弛豫时间近似的结果后发现, 两种方法得到的弛豫时间以及有效 g 因子都不一样。并且指出, 弛豫时间近似只有在电子浓度非常低, 接近 Maxwell 分布的时候才适用, 在高载流子浓度下必须用动力学方程自治求解才能得到正确结果 [312]。

3.3.2 自旋守恒散射下非均匀扩展导致的自旋弛豫/去相位

Wu 最早指出, 即使没有自旋翻转散射 (如 BAP 散射), 当系统存在有非均匀扩展的自旋能量劈裂时, 自旋极化在自旋守恒散射下也会有不可逆的自旋弛豫/去相位 [51, 311, 312, 327, 344]。这一点和光学相干很类似。所谓的自旋守恒散射是指散射项对动量的平均和系统的总自旋算符对易:

$$\sum_{\mathbf{k}} \dot{\rho}_{\mu\nu\mathbf{k}\sigma\sigma'}|_{\text{scatt}} = 0 \quad (3.84)$$

而自旋不守恒散射不对易。很容易推导, 在自旋守恒散射下, 如果系统自旋的能量劈裂 (表现在相干项里) 是均匀扩展的, 则系统的自旋极化将不会弛豫 [312]。Wu 指出有如下两种方法引入非均匀扩展: 类似于光学中导带和价带的能量差 $\propto k^2$, 对于电子系统而言是有能量依赖的 g 因子、或者是自旋轨道耦合产生的动量依赖能量劈裂。这两种非均匀扩展机制都可以在自旋守恒散射下产生自旋弛豫。在只有自旋守恒散射作用下, Wu 等人对有能量依赖的 g 因子系统 [312] 以及有自旋轨道耦合的 n -型半导体材料 [51, 52, 147, 311, 314, 327, 329, 331, 332, 344] 中的自旋弛豫的研究都证实了这一点。

在光学弛豫/去相位中, 非均匀扩展是由导带和价带的能量差 $\Delta_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k},c} - \varepsilon_{\mathbf{k},v} = \frac{\mathbf{k}^2}{2m_c^*} + \frac{\mathbf{k}^2}{2m_v^*}$ 给出。可以看出, 这个能量劈裂对不同的动量 \mathbf{k} 的大小不一样。类似于早先的 DP 机制, 非均匀扩展是出现在相干项的, 对应着不同的动量的光学偶极矩对应的进动频率是不同的。因此在发生随机的动量散射以后, 光学极化进动的频率将会改变, 对应进动角度的无规性将会给出光学弛豫/去相位。对于自旋相干, 能量依赖的 g 因子给出自旋能级之间的能量差 $\Delta E = g(E)\mu_B \mathbf{B}$, 或者自旋轨道耦合给出 $\Delta_{\mathbf{k}} = \mathbf{\Omega}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 都是

能量/动量依赖的，在发生动量散射的过程中同样会有自旋弛豫发生。和早先的 DP 机制的区别在于：DP 机制只考虑自旋轨道耦合的各向异性引起的有效的自旋翻转，而忽略了非均匀扩展产生的自旋弛豫。比如对于早先的 DP 机制不能得到能量依赖的 g 因子产生的自旋弛豫。

3.3.3 n 型材料中的动力学自旋 Bloch 方程

对于 $n(p)$ -型掺杂的半导体系统，电子(空穴)是多数载流子，系统的自旋性质只由电子(空穴)的自旋性质决定。在上一节给出的 (3.83) 式可以描述自旋弛豫后，则只需要建立多数载流子的动力学方程就可以了。Wu 建立了只有导带电子的动力学自旋 Bloch 方程，并且研究了体材料 GaAs [51,311]，(100) [327] 和 (110) [344] 方向生长的 GaAs 量子阱中的自旋弛豫。动力学自旋 Bloch 方程写作：

$$\dot{\rho}_{\mathbf{k}\sigma\sigma'} = \dot{\rho}_{\mathbf{k}\sigma\sigma'}|_{\text{coh}} + \dot{\rho}_{\mathbf{k}\sigma\sigma'}|_{\text{scatt}} . \quad (3.85)$$

和本征材料不同，对于 n -型半导体材料，载流子的浓度比较高，占据在动量比较大的态上，自旋轨道耦合不可忽略。相干项给出：

$$\dot{\rho}_{\mathbf{k}\sigma\sigma'}|_{\text{coh}} = -i[[g\mu_B\mathbf{B} + \mathbf{\Omega}(\mathbf{k})] \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}, \rho_{\mathbf{k}}] \quad (3.86)$$

散射项见文章 [311]，在后文中我们也会再次推导出这两项。相干项导致自旋极化围绕着有效磁场的进动，给出自旋进动频率对动量分布的非均匀扩展。这种非均匀扩展在有任何散射，包括自旋守恒散射存在的情况下，都会引起不可逆的自旋弛豫/去相位。他们的结果都表明和以前的单体模型给出的 DP 机制计算得到的结果有很大的区别。特别是在 (100) 量子阱中，两种模型计算的结果相差好几倍，这个差别来源于如下几个方面：一是考虑了不同能量的之间进动频率不同引起的弛豫，而不仅仅是各向异性，即要考率所有的非均匀扩展；二是我们在前面讨论的在知道了单体的跃迁速率以后求得系综的自旋弛豫时间的近似上。

紧接着 Weng 和 Wu 使用这套方程仔细研究在半导体量子阱材料中，特别是在强电场、高极化等单体模型根本就不能应用的条件下电子的自旋弛豫性质 [52, 147, 314, 329, 331, 332]。Cheng 等人研究了量子线中 Rashba 自旋轨道耦合导致的自旋弛豫 [333]，定量的给出了量子线系统的非均匀扩展。Lü 等人将其推广到空穴系统，研究了重空穴和轻空穴的自旋弛豫 [335]。上面的两维系统中的研究中，都是在光学声子占主要贡献的高温下做得。Zhou 等人发展了一套数值计算方法，可以有效的处理声学声子散射中的奇点，从而可以在全温度范围内讨论自旋弛豫问题，在没有拟合参数的情况下和实验吻合的非常好 [54]。他们的结果见图 3-2。后来，stich 等人在实验上 [81,82]验证了 Weng 和 Wu [52]关于自旋弛豫时间对初始自旋极化的依赖关系的预测，以及他们后来实验上 [161]得到的自旋弛豫时间的磁各向异性和用动力学自旋 Bloch 方程的理论结

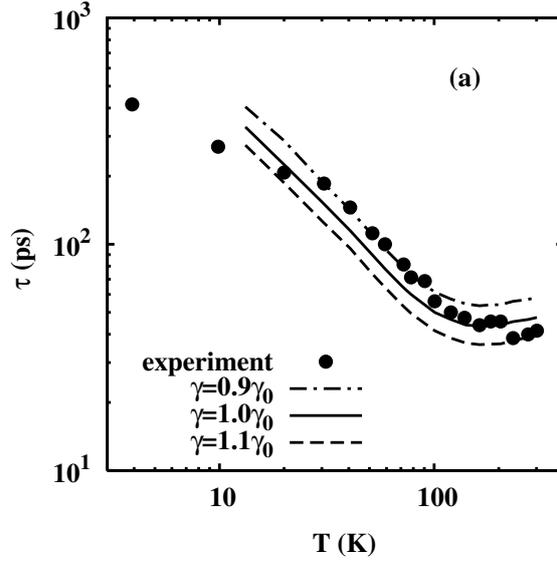


图 3-2: 全温度范围内动力学自旋 Bloch 方程和实验的比较[摘自文献 [54]]。理论计算中取的量子阱的阱宽为 5 nm, 而电子浓度为 $4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$; 圆点是实验数据, 取至文献 [154]; 线是理论计算的结果。可以看出当取自旋轨道耦合为 γ_0 时[对应公式 (2.30) 中 Dresselhaus 自旋轨道耦合系数中取 $m_{cv} = m_0$ 对应的值。]理论结果和实验结果吻合的非常好。

果非常好的拟合, 都进一步的表明动力学自旋 Bloch 方程求解自旋弛豫过程的正确性。他们的结果分别见图 3-3和图 3-4。

3.3.4 空间输运中的非均匀扩展及动力学自旋 Bloch 方程

Weng 和 Wu 将动力学自旋 Bloch 方程推广到空间自旋分布不均匀系统, 研究自旋输运和扩散问题 [57, 147, 195]。在外加电场沿着 x 方向以及磁场下, 动力学自旋 Bloch 方程化为 [57]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} - \frac{1}{2} \{ \nabla_{\mathbf{R}} \bar{\varepsilon}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t), \nabla_{\mathbf{k}} \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \} + \frac{1}{2} \{ \nabla_{\mathbf{k}} \bar{\varepsilon}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t), \nabla_{\mathbf{R}} \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \} \\ - \left. \frac{\partial \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{coh}} = \left. \frac{\partial \rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{scatt}} \end{aligned} \quad (3.87)$$

其中 $\rho(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) = \begin{pmatrix} f_{\uparrow} & \rho_{\uparrow\downarrow} \\ \rho_{\downarrow\uparrow} & f_{\downarrow} \end{pmatrix}$ 是单粒子的密度矩阵, 除了它们是在位置 \mathbf{R} 上的量以外, 矩阵元的意义和前面给出的相同。方程左边第二项是驱动项, 用来描述电子在外电场的驱动下的运动, 其中

$$\bar{\varepsilon}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) = \varepsilon_k \delta_{\sigma\sigma'} + [g\mu_B \mathbf{B} + \mathbf{h}(\mathbf{k})] \cdot \frac{\vec{\sigma}_{\sigma\sigma'}}{2} - e\Psi(\mathbf{R}, t) + \Sigma_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t). \quad (3.88)$$

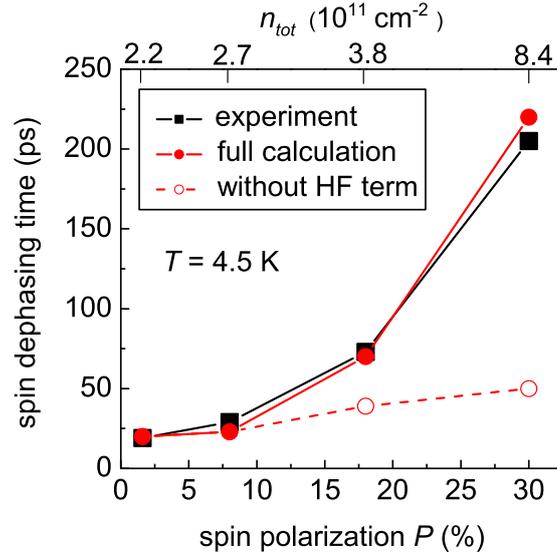


图 3-3: 实验对高初始自旋极化的验证[摘自文献 [81]]。从图上可以看出, 理论上考虑了 Hartree-Fock 项 (●) 以后和实验数据 (■) 吻合的很好, 然而没有考虑 Hartree-Fock 项 (○) 时的结果和实验相差非常大。这表明高自旋极化时 Hartree-Fock 项导致的有效磁场起着非常重要的作用, 证实了 Weng 和 Wu [52] 在 2003 年对高初始自旋极化下的弛豫时间的预测。

给出系统的能量, 这里 $\Psi(\mathbf{R}, t)$ 是外电场的电势, Hartree-Fock 项给出:

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

方程 (3.87) 第三项是扩散项, 描述了电子从一个位置移动到另外一个位置的快慢, 这一项是电子的动量相关的。第四项和方程右边分别给出相干项以及散射项。方程 (3.87) 和泊松方程 [353]

$$\nabla_{\mathbf{r}}^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = -e[n(\mathbf{r}, t) - n_0(\mathbf{r})]/\kappa_0 \quad (3.89)$$

联立, 可以自洽的求出电子在实空间及 \mathbf{k} 空间的分布, 不需要任何拟合参数就能得到所有的输运性质, 如迁移率、电荷扩散深度、自旋扩散/注入深度等。Weng 和 Wu [195] 最早指出, 文献中普遍采用漂移扩散方程来描述自旋扩散/输运是不够, 其中自旋关联项 $\rho_{\mathbf{k}, \uparrow \downarrow}$ 起着非常重要的作用。在输运/扩散过程中, 自旋关联不仅仅会引起在固定位置上的自旋随时间振荡, 也会导致自旋在空间上的振荡。同时由于这种振荡是电子动量依赖的, 它们提供了非均匀扩展。Weng 和 Wu 指出, 和时域上的非均匀扩展不一样, 空间上的非均匀扩展不仅由相干项提供, 扩散项也起着非常重要的作用。扩散项中 $\nabla_{\mathbf{k}} \bar{\epsilon}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) \approx \frac{\hbar^2 \mathbf{k}}{m^*}$ 和动量 \mathbf{k} 相关, 这一项给出电子扩散速度的非均匀扩展。则空间上的非均匀扩展是由 $|g\mu_B B + \Omega_{\mathbf{k}}|/k_x$ 提供。因此即使在没有自旋轨道耦合项, 外加磁场项也提供了非均匀扩展。在有任何散射存在的情况下都会导致自旋弛豫/去相位。同时由于空间上的非均匀扩展的特殊性, 即使在没有外加磁场的时候, 自旋波包在扩散的

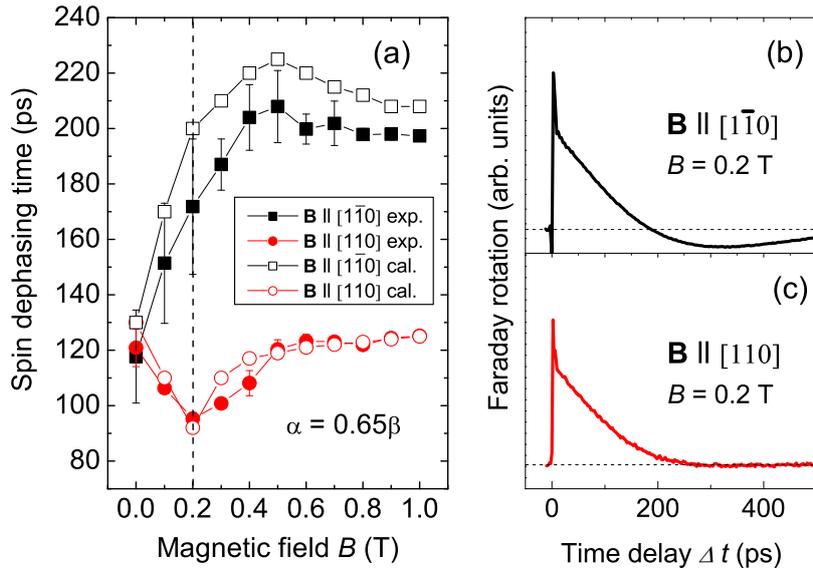


图 3-4: 实验上得到磁各向异性和理论拟合的结果[摘自文献 [161]]。

时候同时还会有振荡，这一振荡已经被稍后的实验 [55, 56]观察到。在这些工作中，只考虑了电子-杂质散射和电子-LO 声子散射。紧接着，Jiang 等人用这组方程在波包扩散问题中考虑了库仑散射的作用，指出库仑拽引效应非常重要、电场可以加强/抑制自旋扩散等效应。

3.3.5 讨论

利用动力学自旋 Bloch 方程讨论自旋弛豫/输运/扩散问题，可以方便的自洽考虑所有的散射的机制。由于库仑散射的重要性，这组方程可以求解近平衡或者远平衡情况；同样也适用于强散射和弱散射极限。不方便之处在于：(i) 数值求解这组方程比较困难，以往的工作中由于电子-电子散射的计算复杂度太高，以及在采用单边注入时数值求解输运问题需要引入计算参数—粘滞系数来保证计算结果的光滑和稳定性，从而在输运问题中只能考虑很短的样品长度并且没有考虑电子-电子散射。针对这个问题，我们改进了电子-电子散射的数值处理方法 (详见附录 D)，可以在输运问题中考虑库仑作用。随后又进一步改进了对输运方程微分部分的数值处理 (详见附录 E)，采用双边注入的方法避免了引入粘滞系数，可以计算更长的样品长度。(ii) 这组方程中没有考虑自旋轨道耦合对系统基态的影响。Lechner 等人在只有电子-声子散射时公式上给出了自旋轨道耦合对系统基态的影响 [347]，但是没有具体的计算结果；Grimaldi 在 Helix 统计下求解了只有杂质散射时 DP 机制下的自旋弛豫/自旋去相位 [348]。这里我们进一步将其推广到考虑所有的散射，并且数值求解方程比较了两种基态下的自旋弛豫时间的差别。(iii) 这里只考虑了 DP 弛豫机制，没有将 EY 以及 BAP 弛豫机制放在同样的地位来考虑。虽然文献 [346]自洽的考虑了这三种机制，但是并没有确切的进行

数值计算，同时以往费米黄金规则对 BAP 机制和 EY 机制的处理是否合适也需要检验。Zhou 和 Wu [323]在动力学自旋 Bloch 方程的框架下对 BAP 机制进行了研究。

在接下来几章，我们应用上面介绍的几种自旋弛豫机制到不同的系统中，研究其自旋弛豫/去相位以及自旋输运/扩散性质。安排如下：在单体方面，在第4章介绍应用完全对角化方法和 Fermi 黄金规则研究 GaAs 量子点中电子自旋弛豫时间，指出在量子点系统中只有通过完全对角化方法才能得到准确的电子波函数，进一步利用费米黄金规则研究了自旋弛豫时间；在第5章介绍强 Terahertz 场量子阱系统内的态密度/自旋极化密度的影响，指出可以通过将 Terahertz 的电信号转化为 Terahertz 的磁信号。在多体理论方面，我们先在第6章给出一维和二维系统的动力学自旋 Bloch 方程，并且在只考虑电子-杂质散射时在空间均匀系统中解析求解，证实了非均匀扩展和散射之间的关系。然后在第7章和第8章介绍用 Bloch 方程研究量子线以及量子阱中的自旋弛豫/去相位问题，给出量子线系统中的非均匀扩展的表达式以及自旋轨道耦合对系统基态的影响不会对自旋弛豫过程产生影响；在第9章和第10章介绍量子阱系统的自旋输运问题。最后我们介绍在量子阱中用 Bloch 方程研究自旋流的时间演化以及自旋极化的产生问题。

第四章 GaAs 量子点中的电子自旋弛豫

本章主要介绍我们对 GaAs 量子点系统中电子自旋弛豫研究的结果。我们采用严格对角化单个量子点中包括了自旋轨道耦合在内的电子哈密顿量的表示矩阵的方法，得到本征波函数以及本征能量后，利用费米黄金规则给出电子不同的“自旋”本征态之间的由声学声子散射导致的自旋弛豫时间。然而以往的文献却广泛采用微扰方法得到自旋轨道耦合对电子波函数的二阶修正，然后考虑 Zeeman 分裂的不同自旋态之间的自旋弛豫时间。在详细的比较了严格对角化的方法和微扰方法以后，我们指出自旋轨道耦合对电子不同自旋态之间的能量差有着和 Zeeman 分裂可以比拟的影响，会导致微扰方法给出的自旋弛豫时间和严格对角化的结果有着数量级的差别。接着我们利用完全对角化的方法详细的讨论了电子自旋弛豫时间对外加磁场、量子点的大小、温度以及量子阱的阱宽的依赖关系。

4.1 理论模型

4.1.1 哈密顿量

在量子阱的水平方向加上抛物型约束势可以形成在三个方向上都受到约束的量子点系统。量子点中电子受到的约束势可以写作

$$V_c(\mathbf{r}, z) = \frac{1}{2}m^*\omega_0^2\mathbf{r}^2 + V_z(z), \quad (4.1)$$

其中 ω_0 用来表征量子点束缚的强弱，给出量子点的直径 $d = \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m^*\omega_0}}$ ，即谐振子的基态波函数的径向位置平均值。 $V_z(z)$ 是量子阱生长方向的约束势，采用无穷深势阱近似 (2.51)，即

$$V_z(z) = \begin{cases} 0 & \text{当 } -a/2 < z < a/2; \\ \infty, & \text{其他情况,} \end{cases} \quad (4.2)$$

其中 a 是量子阱的阱宽。在此约束势下，量子点中的电子的能级是分立的。当外加磁场 \mathbf{B} 沿着量子阱生长方向时，第2章中给出的有效质量近似下的电子哈密顿量写作：

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m^*} + V_c(\mathbf{r}, z) + H_B, \quad (4.3)$$

其中 $\mathbf{P} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}$ 是包含了磁场矢量势的广义动量，垂直于量子阱方向的磁场给出矢量势 $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ ，电子电荷 $e = -|e|$ 及 $\mathbf{p} = -i\nabla$ 。 $H_B = \frac{1}{2}g\mu_B\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 给出 Zeeman 劈裂项。考虑到自旋轨道耦合作用以及电子和声子之间的散射，则电子和声子系统总的哈密顿量写作

$$H = H_e + H_{ph} + H_{ep}, \quad (4.4)$$

其中 $H_e = H_0 + H_{so}$ 给出电子总的哈密顿量， H_{so} 是自旋轨道耦合相互作用，一般为 Dresselhaus 或者 Rashba 自旋轨道耦合。GaAs 材料中是 Dresselhaus 自旋轨道耦合占主导作用，并且由于量子阱生长方向的约束要远强于量子点其它两个方向的约束，Dresselhaus 自旋轨道耦合的三次方的贡献不是很大，只用考虑公式 (2.30) 线性方项就可以了，则

$$H_{so} = \gamma_c(-P_x\sigma_x + P_y\sigma_y), \quad (4.5)$$

其中 $\gamma_c = \gamma(\pi/a)^2$ 表示有约束情况下的自旋轨道耦合的强度。 $H_{ph} = \sum_{\mathbf{Q}} \omega_{\mathbf{Q},\lambda} a_{\mathbf{Q},\lambda}^\dagger a_{\mathbf{Q},\lambda}$ 是声子的哈密顿量， $\omega_{\mathbf{Q},\lambda}$ 指的是声子的第 λ 支的动量为 $\mathbf{Q} = (\mathbf{q}, Q_z)$ 能谱， $\mathbf{q} = (Q_x, Q_y)$ 表示平面内的动量。 H_{ep} 是电子-声子相互作用，

$$H_{ep} = \sum_{\mathbf{Q},\lambda} M_{\mathbf{Q},\lambda} (a_{\mathbf{Q},\lambda}^\dagger + a_{-\mathbf{Q},\lambda}) e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}}, \quad (4.6)$$

其中 $M_{\mathbf{Q},\lambda}$ 为电声相互作用矩阵元， $\mathbf{R} = (\mathbf{r}, z)$ 是电子坐标。在低温范围，主要是电子-声学声子散射其主要作用，包括电子-形变势引起的纵向声学声子之间散射 [354]

$$|M_{\mathbf{Q},sl}|^2 = \frac{\Xi^2}{2Dv_{sl}} Q, \quad (4.7)$$

电子-压电势引起的纵向声学声子之间散射 [355]

$$|M_{\mathbf{Q},pl}|^2 = \frac{32\pi^2 e^2 e_{14}^2 (3Q_x Q_y Q_z)^2}{\kappa^2 D v_{sl} Q^7}, \quad (4.8)$$

以及电子-压电势引起的两支横向声学声子之间散射

$$|M_{\mathbf{Q},pt}|^2 = \frac{32\pi^2 e^2 e_{14}^2}{\kappa^2 D v_{st}} \left(\frac{Q_x^2 Q_y^2 + Q_y^2 Q_z^2 + Q_z^2 Q_x^2}{Q^5} - \frac{(3Q_x Q_y Q_z)^2}{Q^7} \right). \quad (4.9)$$

其中 $Q = |\mathbf{Q}|$ 是声子动量大小， Ξ 是声学形变势能， D 是 GaAs 材料的密度， e_{14} 是压电常数， κ 是静态介电常数。对于纵向声学声子，声子谱给出 $\omega_{\mathbf{Q},sl} = v_{sl}Q$ 和 $\Omega_{\mathbf{Q},pl} = v_{sl}Q$ ；对于横向声子，声子谱为 $\omega_{\mathbf{Q},pt} = v_{pt}Q$ 。这里 v_{sl} 和 v_{pt} 分别表示纵向和横向的声速。GaAs 材料参数具体值见表 4-1 [356]。

D	$5.3 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$	κ	12.9
v_{st}	$2.48 \times 10^3 \text{ m/s}$	g	-0.44
v_{sl}	$5.29 \times 10^3 \text{ m/s}$	Ξ	7.0 eV
e_{14}	$1.41 \times 10^9 \text{ V/m}$	m^*	$0.067m_0$
γ	$27.5 \text{ \AA}^3 \cdot \text{eV}$	a	5 nm

表 4-1: GaAs 量子阱材料参数

4.1.2 电子本征波函数和本征能量

在讨论电子自旋弛豫/去相位之前，我们先给出量子点中的电子在考虑了自旋轨道耦合的情况下的能级结构以及波函数的结构。在没有考虑自旋轨道耦合之前，电子的哈密顿量由 H_0 给出，即

$$H_0 = H_{//} + H_z - \Omega_B L_z + H_B, \quad (4.10)$$

其中 $H_{//} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\Omega^2(x^2 + y^2)$ 给出水平方向哈密顿量，是两个没有耦合的谐振子，其中 $\omega_B = \frac{eB}{2m^*}$ ， $\Omega^2 = \omega_B^2 + \omega^2$ 。 $H_z = \frac{p_z^2}{2m^*} + V_z(z)$ 是 z 方向部分的哈密顿量，这里系统总哈密顿量可以在 z 方向和水平方向分离变量， $L_z = xp_y - yp_x$ 是轨道角动量的 z 方向分量。由 $[H_0, L_z] = 0$ 以及 $[H_{//}, L_z] = 0$ 可知 H_0 和 L_z 以及 $H_{//}$ 有共同本征态，因此 H_0 对应的本征波函数以及本征能量可以写为

$$\begin{aligned} \Psi_{nl\sigma}^0(\mathbf{r}, z) &= \langle \mathbf{r}, z | n, l, \sigma \rangle = R_{nl}(r)\Phi_l(\theta)\phi_1(z)\chi_\sigma, \\ E_{n,l,\sigma} &= \hbar\Omega(2n + |l| + 1) - \hbar\omega_B l + \sigma E_B + E_1 \end{aligned} \quad (4.11)$$

其中 χ_σ 是自旋算符 σ_z 的本征值为 σ 的本征态， $H_z\phi_1(z) = E_1\phi_1(z)$ 给出量子阱约束方向的本征波函数以及本征能量， $\phi_1(z)$ 和 E_1 由公式 (2.52) 给出。 $\Phi_l(\theta) = e^{il\theta}$ 是角动量 L_z 的本征函数，满足 $L_z\Phi_l(\theta) = l\Phi_l(\theta)$ 。 $R_{nl}(r)$ 谐振子的波函数，给出

$$R_{nl}(r) = N_{n,l}(\alpha r)^{|l|} e^{-(\alpha r)^2/2} L_n^{|l|}((\alpha r)^2) \quad (4.12)$$

这里 $n = 0, 1, 2, \dots$ 和 $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 分别是谐振子和角动量的量子数，其中 $\alpha = \sqrt{m^*\Omega/\hbar}$ ， $N_{n,l} = \sqrt{\frac{\alpha^2 n!}{\pi(n+|l|)!}}$ 是归一化系数， $E_B = \frac{1}{2}g\mu_B B$ 是 Zeeman 分裂能量， $L_n^{|l|}$ 是勒让德函数。

在考虑了线性项的 Dresselhaus 自旋轨道耦合 H_{so} 以后， H_0 的不同自旋本征态会混和在一起。此时轨道角动量和自旋角动量单独都不再是守恒量，然而算符 $J_z = L_z - \frac{1}{2}\sigma_z$ 仍然是守恒量，即和总的哈密顿量 $H_e = H_0 + H_{so}$ 对易 $[H_e, J_z] = 0$ 。为了得到 H_e 的本征态，我们先从 H_0 的本征态中找出 J_z 的本征态，由于

$$J_z |n, l, \sigma\rangle = (l - \frac{1}{2}\sigma) |n, l, \sigma\rangle, \quad (4.13)$$

很容易可以看出, 对于给定的 J_z 的本征值 $l - \frac{1}{2}$, 对应的 J_z 的所有的本征态构成的空间为:

$$l - \frac{1}{2} \quad : \quad \{|n, l, \uparrow\rangle, |n, l - 1, \downarrow\rangle; n = 0, 1, 2, \dots\} \quad (4.14)$$

由于 J_z 和 H_e 对易, 此空间也是 H_e 的本征空间, H_e 的本征态可以由其中的基函数线性组合构成。另外, $[H_{so}, J_z] = 0$ 给出自旋轨道耦合作用 H_{so} 只在 J_z 的简并的本征态之间有矩阵元, 不简并的本征态之间的矩阵元为零。因此只有矩阵元

$$\langle n, l, \uparrow | H_{so} | n', l - 1, \downarrow \rangle \quad (4.15)$$

和它的厄密共轭项不为零。我们把自旋轨道耦合重新写为:

$$H_{so} = \gamma_c(-P_x\sigma_x + P_y\sigma_y) = -2\gamma_c(P_+\sigma_+ + P_-\sigma_-), \quad (4.16)$$

其中算符 $A_{\pm} = (A_x \pm iA_y)/2$ 。采用柱坐标系, 则有

$$P_+ = -\frac{i}{2}e^{i\theta} \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2}eBr \right]. \quad (4.17)$$

带入矩阵元 (4.15) 以后得到

$$\begin{aligned} & \langle n, l, \uparrow | H_{so} | n', l - 1, \downarrow \rangle \\ &= 2\pi i \gamma_c \int_0^\infty r dr R_{n,l}(r) \left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l-1}{r} + \frac{1}{2}eBr \right] R_{n',l-1} \\ &= 2\pi i \gamma_c \alpha \left[\frac{\omega B}{\Omega} A_{n,n';l,l-1}^{(1)} - (l-1)A_{n,n';l,l-1}^{(2)} + A_{n,n';l,l-1}^{(3)} \right], \end{aligned} \quad (4.18)$$

其中

$$\begin{aligned} A_{n,n';l,l-1}^{(1)} &= \alpha \int_0^\infty r^2 dr R_{n,l}(r) R_{n';l-1}(r) \\ A_{n,n';l,l-1}^{(2)} &= \frac{1}{\alpha} \int_0^\infty dr R_{n,l}(r) R_{n';l-1}(r) \\ A_{n,n';l,l-1}^{(3)} &= \frac{1}{\alpha} \int_0^\infty r dr R_{n,l}(r) \frac{\partial}{\partial r} R_{n';l-1}(r). \end{aligned} \quad (4.19)$$

由于 $R_{n,l} = R_{n,-l}$, 这里我们只考虑 $l > 1$ 的结果, 积分以后得到:

$$\begin{aligned} A_{n,n';l,l-1}^{(1)} &= A_{n,n';-l,-l+1}^{(1)} = A_{n',n;l-1,l}^{(1)} = A_{n',n;-l+1,-l}^{(1)} \\ &= \frac{1}{2\pi} (\sqrt{n+l} \delta_{n,n'} - \sqrt{n'} \delta_{n,n'-1}), \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned}
A_{n,n';l,l-1}^{(2)} &= A_{n,n';-l,-l+1}^{(2)} = A_{n',n;l-1,l}^{(2)} = A_{n',n;-l+1,-l}^{(2)} \\
&= \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{n!(n'+l-1)!}{n'!(n+l)!}} & , \text{ 如果 } n' \leq n; \\ 0 & , \text{ 其它情况.} \end{cases} \quad (4.21)
\end{aligned}$$

根据 $\frac{\partial}{\partial r} R_{n,l}(r) = \frac{l}{r} R_{n,l} - \alpha^2 r R_{n,l} - 2\alpha\sqrt{n} R_{n-1,l+1}$ 得到

$$\begin{aligned}
A_{n,n';l,l-1}^{(3)} &= A_{n,n';-l,-l+1}^{(3)} = -A_{n,n';-l,-l+1}^{(2)} - A_{n',n;-l+1,-l}^{(3)} \\
&= (l-1)A_{n,n';l,l-1}^{(2)} - A_{n,n';l,l-1}^{(1)} - \frac{\sqrt{n'}}{\pi} \delta_{n,n'-1} . \quad (4.22)
\end{aligned}$$

在基空间 (4.14) 中我们将电子的本征波函数按照基函数展开

$$l - \frac{1}{2} \quad : \quad |\Psi_\ell\rangle = \sum_n C_{n,l,\uparrow}^\ell |n, l, \uparrow\rangle + C_{n,l-1,\downarrow}^\ell |n, l-1, \downarrow\rangle \quad (4.23)$$

这个波函数对应 J_z 的本征值为 $l - \frac{1}{2}$ 。带入薛定谔方程 $H_e|\Psi_\ell\rangle = \epsilon_\ell|\Psi_\ell\rangle$ 后得本征矩阵方程:

$$\begin{aligned}
(E_{n,l,\uparrow} - \epsilon_\ell)C_{n,l,\uparrow}^\ell + \sum_{n'} \langle n, l, \uparrow | H_{so} | n', l-1, \downarrow \rangle C_{n',l-1,\downarrow}^\ell &= 0 , \\
\sum_{n'} \langle n, l-1, \downarrow | H_{so} | n', l, \uparrow \rangle C_{n',l,\uparrow}^\ell + (E_{n,l-1,\downarrow} - \epsilon_\ell)C_{n,l-1,\downarrow}^\ell &= 0 , \\
n, n' = 0, 1, 2, \dots . \quad (4.24)
\end{aligned}$$

数值求解这个方程就可以得到展开系数，以及电子的本征波函数 $|\Psi_\ell\rangle$ 和本征能量 ϵ_ℓ 。这个过程就是求解量子点中电子的本征波函数和本征能量的**完全对角化方法**。新的本征态将不是 σ_z 算符的本征态，因此我们需要重新定义自旋朝上和自旋朝下的态：计算 σ_z 的平均值 $\bar{\sigma}_z = \langle \Psi_\ell | \sigma_z | \Psi_\ell \rangle$ ，如果 $\bar{\sigma}_z > 0$ 则定义态 $|\Psi_\ell\rangle$ 为自旋“朝上”，否则就定义为自旋“朝下”的态。由于这种自旋“朝上”和自旋“朝下”态混合了实验室坐标系下的自旋朝上和自旋朝下态，它们之间可以通过电子-声学声子的散射来“翻转自旋”。一般来说，由于自旋轨道耦合作用和量子点的约束势相比比较小，新的自旋“朝上”的本征态中真正的自旋朝下的态占得比重很小，可以近似的认为这个态就是实验室下的自旋态。如此按照第3章中的方法计算得到的在自旋“朝上”和自旋“朝下”态之间的由电子-声学声子散射引起的跃迁速率就可以近似的看作实验室坐标系下的自旋跃迁速率。

4.1.3 自旋态之间的跃迁几率和自旋弛豫时间

从初态 $|\Psi_i\rangle$ 到自旋相反的末态 $|\Psi_f\rangle$ 由电子-声学声子散射引起的跃迁几率可以费米黄金规则得到

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{Q}\lambda} |M_{\mathbf{Q}\lambda}|^2 |\langle f | e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} | i \rangle|^2 [\bar{n}_{\mathbf{Q}\lambda} \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \omega_{\mathbf{Q}\lambda}) + (\bar{n}_{\mathbf{Q}\lambda} + 1) \delta(\epsilon_f - \epsilon_i + \omega_{\mathbf{Q}\lambda})]. \quad (4.25)$$

其中 $\bar{n}_{\mathbf{Q}\lambda} = [e^{\omega_{\mathbf{Q}\lambda}/k_B T} - 1]^{-1}$ 是声子的粒子数分布。在有限温度下，不仅仅电子会从高能级态通过放出一个声子跃迁到低能级态，也可以通过吸收一个声子从低能级态跃迁到高能级态，从第3章可知，这两个过程都会引起自旋极化的弛豫。因此电子系统的自旋弛豫时间为 [43]

$$\tau^{-1} = \sum_i f_i \sum_f \Gamma_{i \rightarrow f}. \quad (4.26)$$

这里末态 f 是和初态 i 自旋相反的态，初态对所有的本征态求和。 f_i 是热平衡状态下在 i 态上的粒子数分布，对于量子点系统而言，这个分布满足麦克斯韦分布： $f_i = \frac{1}{Z} e^{-\epsilon_i/k_B T}$ ，其中配分函数 $Z = \sum_i e^{-\epsilon_i/k_B T}$ 。

我们将波函数写为一般的形式 $|i\rangle = \sum_{n,l,\sigma} C_{n,l,\sigma}^i |n, l, \sigma\rangle$ 并带入到公式 (4.25) 中得到：

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \sum_{\lambda} \frac{1}{(2\pi)^2 v_{\lambda}} N_{\mathbf{Q}\lambda} \int_0^{Q_{\lambda}} dq \frac{Q_{\lambda} q}{q_z} \exp\left(-\frac{q^2}{2\alpha^2}\right) \int_0^{2\pi} d\theta G_{i,f}^2\left(\frac{q^2}{(2\alpha)^2}, q_z, \theta\right) |M_{\mathbf{Q}\lambda}|^2, \quad (4.27)$$

其中 $\mathbf{Q} = (q \cos \theta, q \sin \theta, q_z)$ 且 $Q_{\lambda} = |\mathbf{Q}| = |\epsilon_i - \epsilon_j|/v_{\lambda}$ ， $q_z = \sqrt{Q_{\lambda}^2 - q^2}$ 。如果 $\epsilon_i > \epsilon_j$ ， $N_{\mathbf{Q}\lambda} = \bar{n}_{\mathbf{Q}\lambda}$ ；如果 $\epsilon_i < \epsilon_j$ ， $N_{\mathbf{Q}\lambda} = \bar{n}_{\mathbf{Q}\lambda} + 1$ 。方程中的 $G_{i,f}$ 满足

$$G_{i,f}^2\left(\frac{q^2}{(2\alpha)^2}, q_z, \theta\right) = \sum_{n_1, l_1, n_2, l_2, \sigma} C_{n_1, l_1, \sigma}^i C_{n_2, l_2, \sigma}^{f,*} \langle n_2, l_2 | e^{i(q_x x + q_y y)} | n_1, l_1 \rangle e^{\frac{q^2}{2\alpha^2}} I(q_z), \quad (4.28)$$

其中 $I(q_z) = \langle \phi_1(z) | e^{iq_z z} | \phi_1(z) \rangle$ 是形状因子，及

$$\begin{aligned} e^{\frac{q^2}{2\alpha^2}} \langle n_2, l_2 | e^{i(q_x x + q_y y)} | n_1, l_1 \rangle &= \sqrt{\frac{n_1! n_2!}{(n_1 + |l_1|)! (n_2 + |l_2|)!}} e^{i(l_1 - l_2)(\frac{\pi}{2} + \theta)} \left[\text{sgn}(l_1 - l_2) \frac{q}{2\alpha} \right]^{|l_1 - l_2|} \\ &\times \sum_{i=0}^{n_1} \sum_{j=0}^{n_2} C_{n_1, |l_1|}^i C_{n_2, |l_2|}^j n! L_n^{|l_1 - l_2|} \left(\frac{q^2}{(2\alpha)^2} \right), \end{aligned} \quad (4.29)$$

这里 $\text{sgn}(x)$ 是符号函数， $C_{n,l}^m = \frac{(-1)^m}{m!} \binom{n+l}{n-m}$ 和 $n = i + j + \frac{|l_1 + l_2| - |l_1 - l_2|}{2}$ 。

4.2 结果

J_z	$ n, l, \sigma\rangle$	$E_{n,l,\sigma} - \Omega(2n+1)$	J_z	$ n, l, \sigma\rangle$	$E_{n,l,\sigma} - \Omega(2n+1)$
$-\frac{3}{2}$	$ n, -1, \uparrow\rangle$	$\Omega + \omega_B + E_B$	$\frac{3}{2}$	$ n, 2, \uparrow\rangle$	$2(\Omega - \omega_B) + E_B$
	$ n, -2, \downarrow\rangle$	$2(\Omega + \omega_B) - E_B$		$ n, 1, \downarrow\rangle$	$\Omega - \omega_B - E_B$
$-\frac{1}{2}$	$ n, 0, \uparrow\rangle$	E_B	$\frac{1}{2}$	$ n, 1, \uparrow\rangle$	$\Omega - \omega_B + E_B$
	$ n, -1, \downarrow\rangle$	$\Omega + \omega_B - E_B$		$ n, 0, \downarrow\rangle$	$-E_B$

表 4-2: 没有考虑自旋轨道耦合时量子点中电子的能级结构, 其中对于正向的磁场 $\omega_B, E_B < 0$, 并且 $\frac{E_B}{\omega_B} = |\frac{g^*m^*}{2m_0}| \ll 1$ 。

在没有考虑自旋轨道耦合的影响时, 系统的能级结构如表 4-2。其中 $\omega_B < 0$ 和 $E_B < 0$, 并且对于一般大小的量子点, $\Omega + \omega_B \gg |E_B|$ 。对于正向磁场, $J_z < 0$ 的本征态之间的能量间隔小于 $J_z > 0$ 对应的量, 且能量基态对应 $n = 0$ 时的 $J_z = -\frac{1}{2}$; 而对于反向磁场, 情况刚好反过来, $J_z > 0$ 的本征态之间的能量间隔小于 $J_z < 0$ 对应的量, 且能量基态对应 $n = 0$ 时的 $J_z = \frac{1}{2}$ 。

由于方程 (4.24) 是无穷维的, 数值求解的过程中需要截断 n 的取值范围, 选取 n 上限的依据是根据我们所关心本征态的能量的收敛性来决定的。比如考虑 GaAs 量子阱的阱宽是 $a = 5$ nm, 外磁场大小 $B = 1$ T 的情况: 此时 $|\omega_B| = 0.86$ meV 和 Zeeman 劈裂能 $|E_B| = |\frac{g^*m^*}{2m_0}\omega_B| = 0.0127$ meV; 当量子点的大小是 $d = 20$ nm 时, 对应束缚能 $\omega_0 = 8.95$ meV, 自旋轨道耦合的能量约为 $E_{so} \sim \gamma(\pi/a)^2/d \sim 0.54$ meV。为了让最低能量的 2 (100) 个能级收敛(能量误差在 0.1% 内), 我们一共要取按照能量排列是 12 (120) 个基函数; 然而当量子点的直径变为 $d = 60$ nm 时, 对应束缚能 $\omega_0 \sim 1$ meV, 自旋轨道耦合的能量约为 $E_{so} \sim 0.18$ meV。最低的 2 (100) 能级的收敛需要 20 (200) 个基函数。从这里可以看出, 无论量子点的大小是 20 nm 或者 60 nm, 自旋轨道耦合引起的能量修正 E_{so}^2/ω_0 都比 Zeeman 劈裂能大。然而在以往文献中考虑量子点中电子的自旋弛豫过程时, 电子的波函数是通过最低的四个能级微扰得到, 能量的修正仅仅考虑 Zeeman 劈裂能。从上面的分析可以, 自旋轨道耦合对能量的修正要比 Zeeman 劈裂能大很多 (阱宽是 5 nm 时), 将在自旋弛豫过程中起重要作用。

4.2.1 $T = 4$ K 时和以前微扰的结果比较

我们首先在低温下比较严格对角化方法和以前文献中 [268, 270, 271] 所广泛使用的微扰方法得到的结果, 以保证我们使用的数值计算的程序的正确性。这里我们取量子点的大小是 $d = 20$ nm, 量子阱阱宽 $a = 5$ nm 且温度为 $T = 4$ K。首先介绍文献中广泛使用微扰方法: 把自旋轨道耦合当做微扰项处理, 求出 H_0 的高激发态对最低两个能级 ($|0, 0, \uparrow\rangle$ 和 $|0, 0, \downarrow\rangle$) 波函数的扰动, 然后利用微扰后的波函数求出这两个

能级之间的自旋轨道弛豫时间。由于自旋轨道耦合对能量的一阶修正为零，这两个能级之间的能量差就是 Zeeman 劈裂的能量 $\Delta E = 2E_B$ 。在只考虑能量较高的激发态 $|0, 1, \uparrow\rangle$ 和 $|0, 1, \downarrow\rangle$ 对能量最低的两个态 $|0, 0, \uparrow\rangle$ 、 $|0, 0, \downarrow\rangle$ 的微扰后，微扰波函数为：

$$\begin{aligned}\Psi_{\uparrow} &= \langle r|0, 0, \uparrow\rangle, \\ \Psi_{\downarrow} &= \langle r|0, 0, \downarrow\rangle - \mathcal{A}\langle r|0, 1, \uparrow\rangle,\end{aligned}\quad (4.30)$$

其中 $\mathcal{A} = i\hbar\gamma_c(\frac{\pi}{a})^2 \frac{\alpha(1-eB/(2\hbar\alpha^2))}{E_{0,1,\uparrow}-E_{0,0,\downarrow}}$ 。则这两个态之间的自旋弛豫时间 τ 给出和文献中一样的结果如下：

$$\frac{1}{\tau} = c|\mathcal{A}|^2 \bar{n}_q Q^3 \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^5 \theta (\sin^4 \theta + 8 \cos^4 \theta) \exp(-\frac{1}{2}q^2 \sin^2 \theta) I^2(q \cos \theta), \quad (4.31)$$

这里 $q = \Delta E/(\hbar v_{st}\alpha)$, $c = 9\pi\alpha e^2 e_{14}^2/(\hbar D v_{st}^2 \kappa^2)$ 以及 $I(q_z) = 8\pi^2 \sin(aq_z/2)/\{aq_z[4\pi^2 - (aq_z)^2]\}$ 。

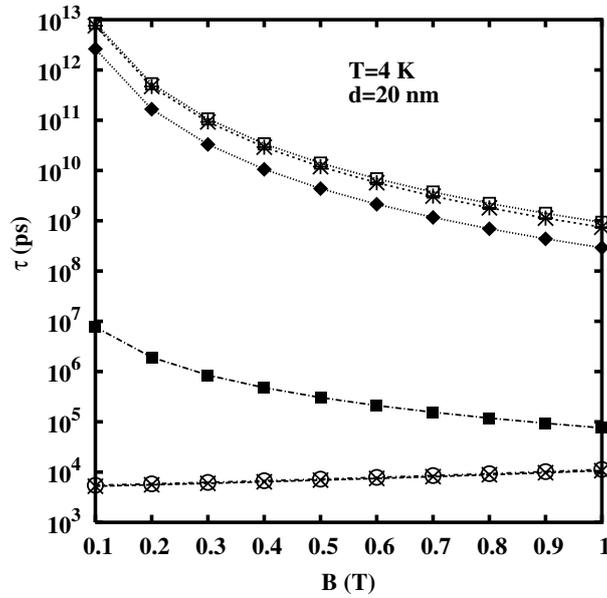


图 4-1: 自旋弛豫时间 τ 随外加磁场 B 的变化关系。(■): 没有考虑自旋轨道耦合对能量修正的微扰结果; (○): 在只考虑了最低四个能级作为基函数是严格对角化的结果; (×): 考虑自旋轨道耦合对能量的二阶修正的微扰结果; (◆): 能量收敛时严格对角化的结果; (□): 最低 6 个态作为基函数的严格对角化结果; (*): 考虑了最低 6 个能级并且考虑了能量二阶修正的微扰方法的结果。

在图 4-1 中，我们给出自旋弛豫时间 τ 随着外加磁场 B 的变化关系。其中 (■) 是公式 (4.31) 利用微扰方法给出的结果。(○) 是我们采用和微扰方法相同基函数时完全对角化方法给出的自旋弛豫时间。我们发现不仅仅微扰方法得到的结果在数值上至少要比完全对角化的结果大上一个量级，在变化趋势上也给出相反的结果。我们指出这种差别主要来源于在微扰方法中仅仅考虑了能量的一阶修正，即 Zeeman 劈裂的能量 $2E_B$ ，

而忽略了自旋轨道耦合引起的能量的二阶修正。在考虑了自旋轨道耦合引起的修正以后， $\Delta E = 2E_B + |\mathcal{A}|^2(\epsilon_{0,1,\uparrow} - \epsilon_{0,0,\downarrow})$ ，自旋弛豫时间由 (×) 给出，我们发现此时微扰方法和完全对角化的方法给出几乎一样的结果。这是和本节开始的分析一致的，自旋轨道耦合引起的能量修正虽然是二阶的，但是这部分修正却要大于 Zeeman 劈裂能，从而对自旋轨道弛豫时间产生非常大的影响。

这里我们用于完全对角化的基函数仅仅包括了能量最低的 4 个态，然而在前面一节我们指出要收敛能量最低的两个本征态至少需要 12 个基函数，因此我们需要检验扩大基空间对自旋弛豫的影响。在图 4-1 中 (◆) 给出能量收敛以后的最低两个能级之间的自旋弛豫时间随着磁场的变化关系。令人震惊的是，收敛的结果和微扰的结果在数量级上就有着巨大的差别。为了理解这种差异，我们仍然用微扰的方法来解析的分析。前面分析可知， J_z 是守恒量，自旋轨道耦合只有在态 $|0, 0, \uparrow\rangle$ 和类似 $|n, -1, \downarrow\rangle$ 的态之间的矩阵元才不为零，因此在能量最低的 4 个态组成的空间中， $|0, 0, \uparrow\rangle$ 态不变。现在我们扩大基空间到 6 个波函数 $|0, 0, \uparrow\rangle$ 、 $|0, 0, \downarrow\rangle$ 、 $|0, 1, \uparrow\rangle$ 、 $|0, 1, \downarrow\rangle$ 、 $|0, -1, \uparrow\rangle$ 和 $|0, -1, \downarrow\rangle$ 。微扰的波函数化为

$$\begin{aligned}\Psi_{\uparrow} &= \langle r|0, 0, \uparrow\rangle - \mathcal{B}\langle r|0, -1, \downarrow\rangle, \\ \Psi_{\downarrow} &= \langle r|0, 0, \downarrow\rangle - \mathcal{A}\langle r|0, 1, \uparrow\rangle,\end{aligned}\quad (4.32)$$

这里

$$\mathcal{B} = i\hbar\alpha\gamma_c\left(\frac{\pi}{a}\right)^2\frac{1 + eB/(2\hbar\alpha^2)}{E_{0,-1,\uparrow} - E_{0,0,\downarrow}}. \quad (4.33)$$

这两个态 Ψ_{\uparrow} 和 Ψ_{\downarrow} 之间的能量差化作

$$\Delta E = 2E_B + |\mathcal{A}|^2(E_{0,1,\uparrow} - E_{0,0,\downarrow}) - |\mathcal{B}|^2(E_{0,-1,\uparrow} - E_{0,0,\uparrow}). \quad (4.34)$$

则自旋弛豫时间 τ 变为

$$\frac{1}{\tau} = c|\mathcal{A} - \mathcal{B}|^2\bar{n}_q q^3 \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^5 \theta (\sin^4 \theta + 8 \cos^4 \theta) e^{-\frac{1}{2}q^2 \sin^2 \theta} I^2(q \cos \theta), \quad (4.35)$$

数值结果见图 4-1 中 (*), 可见高激发态的加入大大的增加了自旋弛豫时间。在图上我们用点 (□) 也给出了这组基下完全对角化方法给出的自旋弛豫时间，和微扰方法的结果几乎重合，并且结果已经非常靠近最终收敛的结果。和收敛的结果之间的差别也说明更高的激发态对自旋弛豫时间还是有比较大的贡献。

从上面的结果可以看出，即使考虑了能量的二阶修正，文献中广泛使用的微扰方法仍然不适合用来描述量子点系统中的自旋弛豫问题，因为高激发态对自旋弛豫也有非常大的贡献。后来 2005 年 Destefani 和 Ulloa [273] 重复了我们的工作，进一步验证了完全对角化方法的正确性。原则上，为了使用微扰方法计算自旋弛豫时间，即使是 H_e 最低的两个能级之间的自旋弛豫，也必须包括足够多的基函数而不是仅仅考虑能量最低

的 4 个基函数。然而在量子点的半径比较大的时候，微扰方法将会变得比较不可实施：不仅仅需要的用来收敛能量的基函数数目将会大大增加，同时自旋弛豫时间也将会由 H_e 更多的能级决定而不仅仅是最低的两个能级。由于高激发态的加入，偶然简并或者近简并的能级将会变多，也是导致微扰方法失效的原因之一。因此，选用完全对角化方法可以避免这些问题。

不仅垂直磁场的情况需要考虑足够多的能级才能给出正确的自旋弛豫过程，平行磁场下也有相同的结果^①。图 4-2 给出了自旋弛豫时间 τ 随外加平行磁场 B 的变化关系。从图上可以看出，在只有最低能量的 4 个或者 6 个基函数空间里面的电子弛豫和最终的考虑了足够多的基函数有比较大的差别。说明上面的结论仍然是正确的。

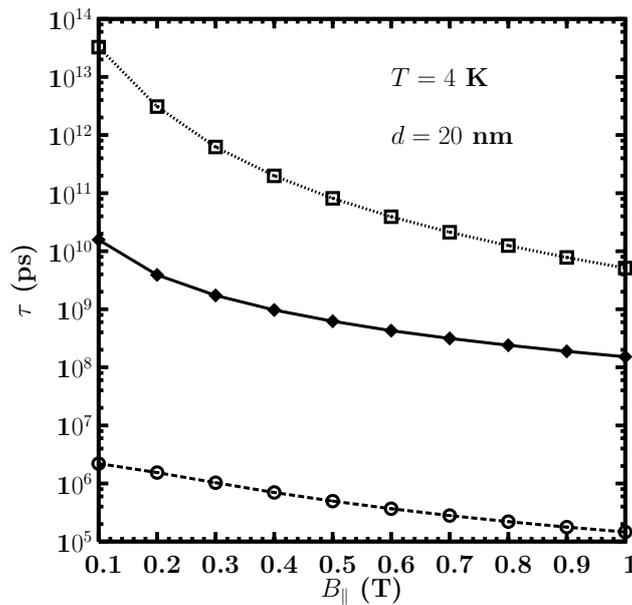


图 4-2: 自旋弛豫时间 τ 随外加平行磁场 B 的变化关系。这里我们只考虑了不同数目的基函数对完全对角化的结果的影响。(○): 在只考虑了最低四个能级作为基函数是严格对角化的结果; (◆): 能量收敛时严格对角化的结果; (□): 最低 6 个态作为基函数的严格对角化结果;

接下来我们用完全对角化方法研究施加了垂直磁场的量子点中的自旋弛豫性质。

4.2.2 $T = 4$ K 时直径为 $d = 20$ nm 量子点中的自旋弛豫时间

在上一小结我们指出，当量子点的直径为 $d = 20$ nm 并且温度为 $T = 4$ K 时，自旋弛豫时间将由 H_e 的最低两个能级决定，虽然这两个能级的能量需要在 H_0 的能量最低的 12 个基函数张开的希尔伯特空间中才能收敛。这一节我们讨论自旋弛豫时间随着外磁场的变化关系。

在公式 (4.31) 和 (4.35) 中，我们发现自旋弛豫率与最低两个能级之间的能量差 ΔE 的关系是由两部分相互竞争的项决定：(i) $q^3 \bar{n}_q$ ，这一项随着 ΔE 是递增

^①数值计算结果是由我们组的王元元同学提供，这里向她表示感谢。

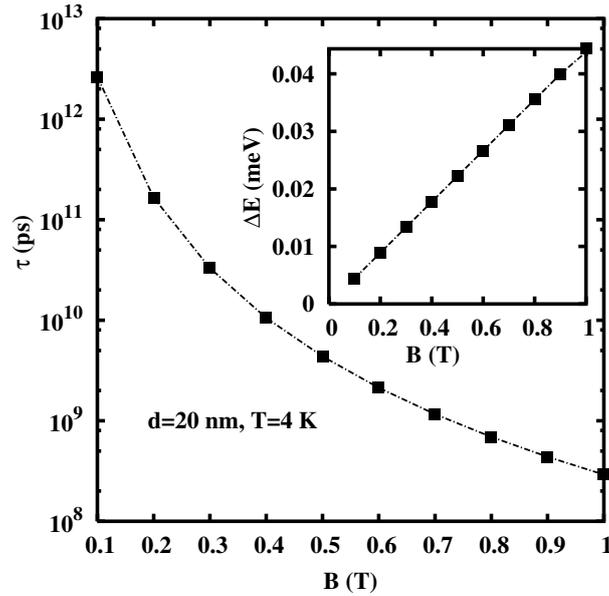


图 4-3: 自旋弛豫时间随外加磁场的变化关系, 其中 $T = 4$ K 和 $d = 20$ nm。插图给出 H_e 的最低两个能级的能量差随着磁场的变化关系。

的; (ii) $\exp(-\frac{1}{2}q^2 \sin^2 \theta) I^2 (q \cos \theta)$, 这一项随着 ΔE 是递减的。这两项的交界点在 $\Delta E \sim 7.0\hbar v_{st}/d$, 此时, 这两项对自旋弛豫时间有着相同的贡献。在量子点的直径是 $d = 20$ nm 时且 $\Delta E \lesssim 0.57$ meV 时, 自旋弛豫时间将有 (i) 决定, 从而随着 ΔE 递减。当 $\Delta E \gtrsim 0.57$ meV 时, (ii) 占主要作用, 从而自旋弛豫时间随着 ΔE 递增。图 4.2.2 给出了自旋弛豫时间随着磁场 B 的变化关系。可以看出, 自旋弛豫时间随着磁场的增加而减小。这时因为在磁场增加时, 最低两个能级之间的能量差也随着磁场增加, 即使对于 $B = 1$ T 能量劈裂最大时, 劈裂能是 0.04 meV, 仍然远远小于 0.57 meV, 因此 (i) 占主导地位, 给出自旋弛豫时间随着磁场的增加而减小。

4.2.3 磁场依赖关系

图 4.2.3 中给出了自旋弛豫时间在不同的量子点大小以及不同温度下随着外加磁场的变化关系。和前一节中自旋弛豫是由 H_e 能量最低的两个态所决定的不同, 此时由于量子点比较大且温度比较高, 大部分情况下自旋弛豫将由更多的态决定。从图上可以看出, 对于不同的量子点大小和温度, 自旋弛豫时间都是随着磁场的增加而减小的。这和体材料 [69]、二维 [52, 314, 329] 或者一维 [333] 中的自旋弛豫时间随着磁场增加而增加是完全不一样的, 这时因为在点中所有的能级都是分立的, 并且磁场对自旋弛豫的影响是由上一节中讨论的机制所决定。同时, 从图上可以看出, 随着量子点尺寸变大, 自旋弛豫时间减小的很快: $d = 60$ nm 的量子点中的自旋弛豫时间比 $d = 20$ nm 的量子点要小了几近 6 个量级, 这时因为在大量子点情形下, 更多的能级对自旋弛豫有贡献, 从而使自旋弛豫时间变短。

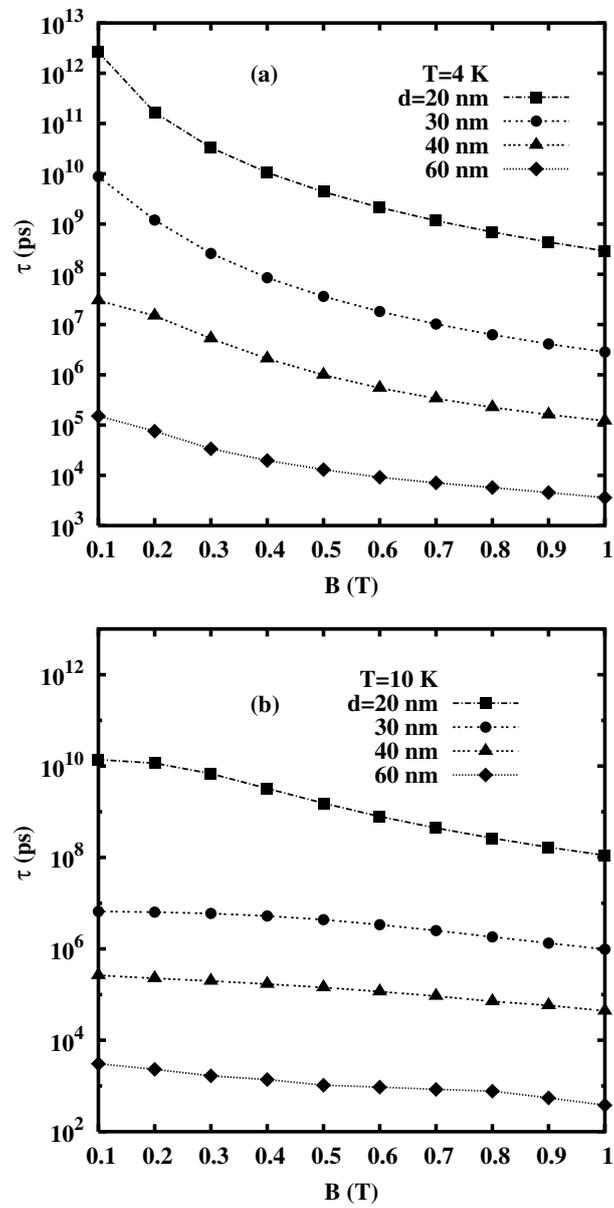


图 4-4: 在不同量子点大小以及不同温度下自旋弛豫时间的磁场依赖关系。(a) $T = 4$ K; (b) $T = 10$ K。其中: (■): $d = 20$ nm, (●): $d = 30$ nm, (▲): $d = 40$ nm, 以及(◆): $d = 60$ nm

4.2.4 温度依赖关系

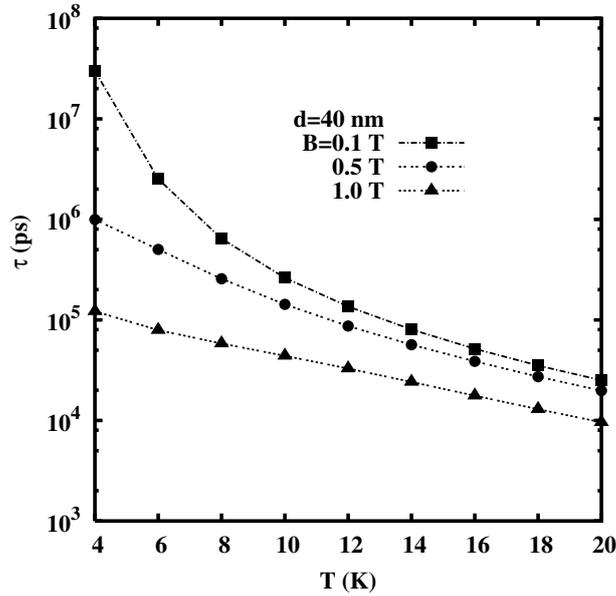


图 4-5: 自旋弛豫时间在不同磁场下的温度依赖关系。量子点的直径是 $d = 40 \text{ nm}$ 。(■): $B = 0.1 \text{ T}$, (●): $B = 0.5 \text{ T}$ 以及(▲): $B = 1 \text{ T}$ 。

图 4.2.4 给出在量子点的直径是 $d = 40 \text{ nm}$ 时自旋弛豫时间在不同磁场下的温度依赖关系。从图上可以看出，随着温度的增加，不同磁场下的自旋弛豫时间都是减小的，并且磁场越小，自旋弛豫时间下降的越快。这个结果可以如下理解：随着温度增加，平均声子数目 $\bar{n}_{q\lambda}$ 快速增加，从而使电子-声学声子散射变强并且是自旋跃迁速率变大。以往文献中用微扰方法并且只考虑最低两个能级之间的自旋弛豫时间时，温度的升高对自旋弛豫时间的影响主要表现在声子的数目的增加上。但是在用完全对角化方法求解的过程中，除此之外，温度的升高还对应着更多的 H_e 激发态将对自旋弛豫作出贡献：在温度升高时，在高能级上电子占据几率将会大大增加，从而只考虑最低的两个能级是不够的。在小磁场时，不同能级之间的间隔 (Ω) 比较小，因此电子在温度升高时可以快速的占据在更多的高能级上，导致自旋弛豫时间快速下降，特别是在低温时，更多的高能级对自旋弛豫的贡献更加明显。在温度比较高时，电子已经占据在非常多的能级上，从而能级占据数目的进一步增加将不会引起自旋弛豫时间很明显的变化，这表现在图上在温度 $T > 16 \text{ K}$ 时，不同磁场下的自旋弛豫时间的变化趋势几乎一样。

4.2.5 量子阱的阱宽依赖关系

从第2章可知，量子阱中 Dresselhaus 自旋轨道耦合与量子阱的阱宽 a^2 成反比关系，并且自旋轨道耦合对量子点的能级结构影响甚大，从而很有必要研究自旋弛豫时间的量子阱的阱宽依赖关系。图 (4.2.5) 给出自旋弛豫时间在不同温度下的阱宽依赖关

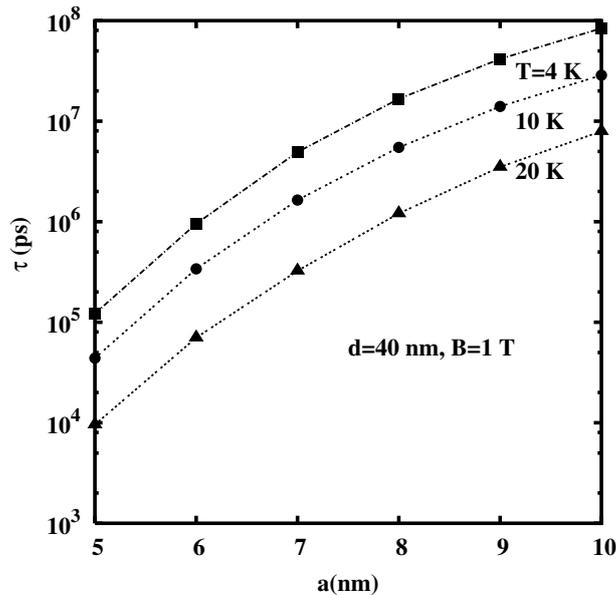


图 4-6: 自旋弛豫时间在不同温度下的量子阱的阱宽依赖关系。外加磁场大小为 $B=1\text{ T}$ 。(■): $T=4\text{ K}$, (●): $T=10\text{ K}$;以及 ▲: $T=20\text{ K}$ 。

系。从图上可见，随着阱宽变大，不同温度下的自旋弛豫时间都变长。在我们的计算中，量子阱的阱宽要远比量子点的尺寸小，从而对于量子阱生长方向我们只用考虑最低的一个子带 $\phi_1(z)$ 就可以了。此时更大的自旋轨道耦合将会导致不同自旋的电子波函数更大的混合，从而使自旋跃迁速率变大，自旋弛豫时间减小。当量子阱的阱宽可以和量子点的尺寸相比较时，不仅仅需要考虑更多的子带，同时 Dresselhaus 自旋轨道耦合中的三次方项的贡献也将变得不可忽略，导致随着量子阱阱宽变宽自旋弛豫时间会有变小的趋势。

4.3 小结

我们用完全对角化的方法研究了在施加垂直外磁场的 GaAs 量子点系统中电子的自旋弛豫过程。通过比较完全对角化方法和在文献中广泛使用的微扰方法的结果，我们发现后者对于计算量子点中的电子能级结构以及自旋弛豫时间都是不充分的。这是因为自旋轨道耦合导致的能量劈裂在小阱宽以及小尺寸的量子点中要比在微扰方法中使用的 Zeeman 能级的劈裂大上好几倍；同时即使在只考虑 H_e 能量最低的几个本征态的情况下，自旋轨道耦合也会耦合 H_0 的高激发态从而对能量最低的几个态有显著贡献。因此我们重新用完全对角化方法仔细研究了自旋弛豫时间的磁场、温度、量子点大小以及量子阱的宽度依赖关系。我们发现自旋弛豫时间随着磁场的增加而下降，这和体材料系统、量子阱系统以及量子线系统都是不一样的；自旋弛豫时间也随着量子点的尺寸变大而减小，但是随着量子阱的阱宽变宽而增加。在高温下，自旋弛豫变快是因为更强的电

子-声学声子散射以及电子占据在更多的激发态上。所有的结果都显示获得准确的电子能级结构的重要性。

在这之后, Lü 等人 [42]用完全对角化的方法研究了沿着不同晶向 (001) 和 (111) 生长的量子阱中的量子点中空穴的自旋弛豫问题。他们使用完全对角化方法求解量子点中空穴的 Luttinger 哈密顿量, 然后使用费米黄金规则得到空穴的自旋弛豫时间。从他们的结果可知, 应力、磁场、量子点的尺寸、量子阱的阱宽以及温度都对空穴的自旋弛豫有非常大的影响。其中应力可以非常有效的调节空穴的自旋弛豫时间, 同时自旋弛豫时间的量子点尺寸、量子阱阱宽、磁场的依赖关系都表现出与电子系统有非常大的不同, 这是由空穴系统中的轻重空穴的关联所决定的。Jiang 等人 [43]后来在 GaAs 量子阱中研究了各种不同弛豫机制对 T_1 及 T_2 的贡献, 他们指出: 量子点中自旋弛豫时间用费米黄金规则并不能始终给出正确的结果, 很多时候必须要用运动方程的方法求解, 特别是在自旋轨道耦合强度比较大且温度比较高时, 两者的结果有非常大的差距。不过依照他们的结果, 在我们采用的计算参数下, 除了温度 $T = 20$ K 时稍微有点偏离外, 其他的都是可以用费米黄金规则计算。

第五章 强 THz 场对两维电子气的影响

本章主要讨论强 Terahertz (THz) 场对 InAs 两维电子气的影响。我们用 Floquet 定理严格求解包括自旋轨道耦合的薛定谔方程，利用求出的波函数得到态密度以及自旋极化密度。我们发现，THz 场对态密度和自旋极化密度有非常大的影响，并且在垂直于 THz 电场方向上诱导出一个 THz 的磁矩。我们指出这个效应可以用来把 THz 的电信号转化成 THz 的磁信号。

5.1 理论模型

考虑 InAs 量子阱，将其生长方向定为 z 方向。在量子阱平面内中施加沿着 $-x$ 方向周期为 $T_0 = \frac{2\pi}{\Omega}$ 的均匀强 THz 电场 $\mathbf{E}_{\text{THz}}(t) = -E \cos(\Omega t)\hat{\mathbf{e}}_x$ ，在库仑规范下，矢量势和标量势分别为 $\mathbf{A}(t) = \frac{E}{\Omega} \sin(\Omega t)\hat{\mathbf{e}}_x$ 和 $\phi = 0$ 。电子的哈密顿量写为

$$H(t) = \frac{\mathbf{P}^2}{2m^*} + H_{\text{so}}, \quad (5.1)$$

其中 $P = -i\nabla - eA(t)$ 是广义动量。 H_{so} 是自旋轨道耦合，在 InAs 材料中，Rashba 自旋轨道耦合占据主导作用，由式 (2.35) 给出，可以写为

$$H_{\text{so}}(t) = \alpha(\sigma_x P_y - \sigma_y P_x). \quad (5.2)$$

这里我们考虑量子阱的阱宽足够小，只需要考虑 z 方向的第一个子带，由于 z 方向波函数对我们考虑的问题影响不大，故没有在 H 中包括 z 方向的约束势，从而将 H 写成为一个两维的哈密顿量。

5.1.1 THz 场作用下的本征态

薛定谔方程写为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = H(t) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.3)$$

由于动量 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 仍然是好量子数，并且动能部分是可积的，本征态可以写作 $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Phi_{\mathbf{k}}(t)$ ，且

$$\Phi_{\mathbf{k}}(t) = e^{-i\{(E_{\mathbf{k}} + E_{\text{em}})t + r_0 k_x [\cos(\Omega t) - 1] - \gamma \sin(2\Omega t)\}} u(\mathbf{k}, t).$$

其中 $E_{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}^2}{2m^*}$ 是电子的动能, $E_{\text{em}} = \frac{e^2 E^2}{4m^* \Omega^2}$ 是 THz 场引起的动态 Franz-Keyldysh 效应对应的能量, $r_0 = eE/m^* \Omega^2$ 是电子在 THz 场作用下的位置偏移, $\gamma = E_{\text{em}}/(2\Omega)$, $u(t)$ 满足新的薛定谔方程:

$$i \frac{\partial}{\partial t} u_s(\mathbf{k}, t) = H_{\text{so}}(\mathbf{k}, t) u_s(\mathbf{k}, t). \quad (5.4)$$

这里 $H_{\text{so}}(\mathbf{k}, t) = \alpha [\sigma_x k_y - \sigma_y (k_x - e \frac{E}{\Omega} \sin(\Omega t))]$ 是自旋轨道耦合相互作用, 也是时间的周期函数。根据 Floquet 定理可以写出 $u_s(\mathbf{k}, t) = \phi_s(\mathbf{k}, t) e^{-iq_s(\mathbf{k})t}$, 其中 q_s 是准能量, $s = \pm$ 表示自旋的不同支, $\phi(\mathbf{k}, t)$ 是一个周期为 T_0 的旋量函数, 且满足:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{k}, t) + q_s \phi(\mathbf{k}, t) = H_{\text{so}}(\mathbf{k}, t) \phi(\mathbf{k}, t). \quad (5.5)$$

将 $\phi(\mathbf{k}, t)$ 按照周期展开为 $\phi(\mathbf{k}, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi_n e^{in\Omega t}$, 展开系数 $\phi_n = \phi_n^\uparrow \chi_\uparrow + \phi_n^\downarrow \chi_\downarrow$ 是一个旋量, χ_σ 是 σ_z 的本征态。 ϕ_n 满足本征方程

$$(n\Omega - q_s) \phi_n + \beta \sigma_y (\phi_{n-1} - \phi_{n+1}) + \alpha (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) \phi_n = 0. \quad (5.6)$$

其中 $\beta = \frac{1}{2} \alpha m^* \Omega r_0$ 。现在我们先讨论一下上面方程 (5.4) 和 (5.6) 的对称性:

1. 对于方程 (5.4), 哈密顿量满足 $T [i\partial_t - H_{\text{so}}(\mathbf{k}, t)] T^{-1} = -[i\partial_t - H_{\text{so}}(\mathbf{k}, t)]$, 其中 $T = -i\sigma_y K$ 是时间反演算符, K 是复共轭算符。因此, 如果 $u_+(\mathbf{k}, t)$ 是方程 (5.4) 的一个本征态, 那么 $u_-(\mathbf{k}, t) = T u_+(\mathbf{k}, t)$ 也是方程的本征态。 $u_+^\dagger u_- = 0$ 可知这两个态之间正交, 因此 u_- 就是方程的另外一个本征态。对于方程 (5.6) 而言, 如果

$$q_+ \quad : \quad \{\phi_{n,+} = \phi_n, n = -\infty, \dots, \infty\}$$

是方程的一个本征能量和本征态, 那么

$$q_- = -q_+ \quad : \quad \{\phi_{n,-} = -i\sigma_y \phi_{-n}^*, n = -\infty, \dots, \infty\}$$

就是对应的另外的本征能量和本征态。

2. 由 $T [i\partial_t - H(\mathbf{k}, t)] T^{-1} = [i\partial_{-t} - H(-\mathbf{k}, -t)]$ 可以得到

$$\begin{aligned} u_{-s}(-\mathbf{k}, -t) &= T u_s(\mathbf{k}, t), \\ q_{-s}(-\mathbf{k}) &= -q_s(\mathbf{k}), \\ \phi_{n,-s}(-\mathbf{k}) &= T \phi_{-n,s}(\mathbf{k}). \end{aligned}$$

则电子的波函数也满足类似的对称性

$$\Phi_{-\mathbf{k},-s}(-t) = T \Phi_{\mathbf{k},s}(t). \quad (5.7)$$

3. 由 $\sigma_y [i\partial_t - H(\mathbf{k}, t)] \sigma_y^{-1} = [i\partial_t - H(k_x, -k_y, t)]$ 可以得到

$$\begin{aligned} u_s(k_x, -k_y, t) &= \sigma_y u_s(\mathbf{k}, t), \\ q_s(k_x, -k_y) &= q_s(\mathbf{k}), \\ \phi_{n,s}(k_x, -k_y) &= \sigma_y \phi_{n,s}(\mathbf{k}). \end{aligned}$$

同样的有

$$\Phi_{k_x, -k_y, s}(t) = \sigma_y \Phi_{\mathbf{k}, s}(t). \quad (5.8)$$

4. 由于方程 (5.6) 是无穷维的，它的本征值也有无穷多个。但是方程 (5.4) 只有两个本征解，因此本征方程 (5.6) 的本征根之间存在如下的关系：如果

$$q_s \quad : \quad \{\phi_{m,s} = \phi_m, m = -\infty, \dots, \infty\}$$

是其本征值和本征向量，则

$$n\Omega + q_s \quad : \quad \{\phi_{m,s} = \phi_{m-n}, m = -\infty, \dots, \infty\}$$

也是其本征值和本征向量，其中 $-\frac{\Omega}{2} < q_s \leq \frac{\Omega}{2}$ 。

5.1.2 自旋空间的表示：Collinear 表象和 Helix 表象

在文献中，对于有自旋轨道耦合相互作用的系统，自旋空间的表示除了最常用的有 Collinear 表象以外，Helix 表象也得到了广泛的应用。它们对应不同的自旋哈密顿量的本征表示，其中 Collinear 表象就是 σ_z 的本征态所构成希尔伯特空间，而 Helix 表象是没有外加 THz 场时 $H_{so}(k_x, k_y)$ 的本征态所构成的希尔伯特空间。这两个表象的区别见表 (5-1)。

	哈密顿量	基函数
Collinear 表象	σ_z	$\chi_\sigma: \chi_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \chi_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
Helix 表象	$\alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x)$	$\eta_s(\mathbf{k}): \eta_+(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{ik_x - k_y}{k} \end{pmatrix}, \eta_-(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{ik_x - k_y}{k} \end{pmatrix}$

表 5-1: Collinear 表象和 Helix 表象

它们之间的可以相互变换:

$$\begin{aligned}\eta_s(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_{\uparrow} + s \frac{ik_x - k_y}{k} \chi_{\downarrow} \right), \\ \chi_{\uparrow} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\eta_+(\mathbf{k}) + \eta_-(\mathbf{k})), \\ \chi_{\downarrow} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{-ik_x - k_y}{k} (\eta_+(\mathbf{k}) - \eta_-(\mathbf{k})).\end{aligned}\quad (5.9)$$

在不同的自旋表象下，物理量对应分量的物理意义是不同的。在上一小结中，所有的自旋分量都是写在 Collinear 表象下的。和 Collinear 表象下的基函数不同，Helix 表象下的基函数都是动量 \mathbf{k} 相关的，并且对应的自旋极化方向也是动量相关。不过对于方程 (5.6) 而言，无论是 Helix 表象还是 Collinear 表象的两支自旋都被强烈的关联在一起，这种关联是 THz 场对有自旋轨道耦合相互作用的系统中电子自旋的影响，不同于动态 Franz-Keyldysh 效应和子带效应。并且，从方程中可以看出，这个关联的强弱和 $\lambda = \beta/(\Omega/2)$ 有关：当 λ 越大关联越强。

5.1.3 态密度和自旋极化密度

在得到 THz 场下的系统的波函数以后，我们进一步研究系统的自旋相关的态密度以及自旋极化密度，从而可以得到 THz 场对二维电子气在自旋性质方面的影响，从而方便以后研究在 THz 场作用下二维电子气中的自旋弛豫和输运。由于在含时系统，系统不存在定态的本征能量，这里我们采用 Green 函数方法求解态密度和自旋极化密度。

在零温下，推迟和超前格林函数为

$$\begin{aligned}G^r(\mathbf{k}; t_1, t_2) &= -i\theta(t_1 - t_2) \sum_{s=\pm} \Phi_s(\mathbf{k}, t_1) \Phi_s^\dagger(\mathbf{k}, t_2), \\ G^a(\mathbf{k}; t_1, t_2) &= i\theta(t_2 - t_1) \sum_{s=\pm} \Phi_s(\mathbf{k}, t_1) \Phi_s^\dagger(\mathbf{k}, t_2).\end{aligned}\quad (5.10)$$

其中 Φ_s 是 THz 场作用下的本征态。则谱函数 $A = i(G^r - G^a)$ 为

$$A(\mathbf{k}; t_1, t_2) = \sum_{s=\pm 1} \Phi_s(\mathbf{k}, t_1) \Phi_s^\dagger(\mathbf{k}, t_2). \quad (5.11)$$

这里，考虑了自旋以后，谱函数是自旋空间 2×2 的矩阵，在不同的自旋表象中有着不同的矩阵元。设自旋表象中的基为 η_s ：Collinear 表象下 $\eta_{\xi=\uparrow\downarrow} = \chi_{\uparrow\downarrow}$ ，而在 Helix 表象下 $\eta_{\xi=\pm} = \eta_{\pm}$ ，则对应的矩阵元为 $A_{\xi_1, \xi_2}(\mathbf{k}; t_1, t_2) = \eta_{\xi_1}^\dagger A(\mathbf{k}; t_1, t_2) \eta_{\xi_2}$ 。对动量 \mathbf{k} 积分以后得到

$$\rho_{\xi_1, \xi_2}(t_1, t_2) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} A_{\xi_1, \xi_2}(\mathbf{k}; t_1, t_2).$$

对时间做 Wigner 变化 [309], 即 $T = (t_1 + t_2)/2$ 和 $t = t_1 - t_2$ 。然后对时间 t 作傅立叶变换到能量空间得到态密度和自旋极化密度:

$$\begin{aligned}
& \rho_{\xi_1, \xi_2}(T, \omega) \\
&= \int dt \rho_{\xi_1, \xi_2}(T + t/2, T - t/2) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int d\mathbf{k} \sum_{s=\pm} \sum_{\substack{l_1, l_2 \\ n, m=-\infty}}^{\infty} R_{\xi_1, \xi_2}(s; n, m; \mathbf{k}) e^{i(n-m)\Omega T} J_{l_1}(2r_0 \mathbf{k}_x \sin(\Omega T)) J_{l_2}(2\gamma \cos(2\Omega T)) \\
&\quad \times \delta(\omega - [E_{\mathbf{k}} + E_{em} - (l_1 + 2l_2 + n + m)\Omega/2 + q_s(\mathbf{k})]) , \tag{5.12}
\end{aligned}$$

其中 $R_{\xi_1, \xi_2}(s; n, m; \mathbf{k}) = (\eta_{\xi_1}^\dagger \phi_{n,s}(\mathbf{k}))(\phi_{m,s}^\dagger(\mathbf{k}) \eta_{\xi_2})$ 。对角项 $\rho_{\xi, \xi}$ 给出态密度; 非对角项 $\rho_{\xi, \xi' \neq \xi}$ 给出自旋极化密度, 是由不同支自旋之间的关联引起的。在 Collinear 表象下, $\rho_{\uparrow\uparrow}$ 和 $\rho_{\downarrow\downarrow}$ 分别表示自旋朝上和自旋朝下态上占据的态密度, 给出沿着 z 方向的自旋极化; 而 $\rho_{\uparrow\downarrow}$ 表示自旋朝上和自旋朝下之间的关联, 给出横向 x/y 自旋极化的极化密度。而在 Helix 表象下, ρ_{++} 和 ρ_{--} 分别表示自旋“+”支和“-”支上占据的态密度; 而 ρ_{+-} 分别表示自旋“+”支和“-”支之间的关联。它们并不能直接给出自旋极化。

在给出具体的数值结果之前, 我们分析谱函数和态密度以及自旋极化密度的对称性:

1. 根据公式 (5.8), 很容易得到 $A(\mathbf{k}; t_1, t_2) = \sigma_y A(\mathbf{k}; t_1, t_2) \sigma_y$ 以及在 Collinear 表象下 $\rho(T, \omega) = \sigma_y \rho(T, \omega) \sigma_y$ 。即:

$$\begin{aligned}
\rho_{\uparrow\uparrow}(T, \omega) &= \rho_{\downarrow\downarrow}(T, \omega) , \\
\rho_{\uparrow\downarrow}(T, \omega) &= -\rho_{\downarrow\uparrow}^*(T, \omega) . \tag{5.13}
\end{aligned}$$

因此在 Collinear 表象下, $\rho_{\uparrow\downarrow}$ 的实部一直为零, 只有虚部不为零。

2. 根据公式 (5.8) 和 (5.7), 可以得到 $\Phi_{-k_x, k_y}(t) = \Phi_{k_x, k_y}^*(-t)$, 以及

$$\rho(T_0 - T, \omega) = \rho(T, \omega)^* \tag{5.14}$$

在 Collinear 表象和 Helix 表象下都满足。

3. 由于 $\text{Tr}[\rho(T, \omega)]$ 表示系统中电子总的态密度, 与表象无关, 故 $\sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \rho_{\sigma\sigma} = \sum_{s=\pm} \rho_{ss}$ 。

5.2 结果

下面我们给出数值计算的结果。对于 InAs 材料，有效质量 $m^* = 0.0239m_0$ ，Rashba 自旋轨道耦合系数的大小是 $\alpha = 3 \times 10^{-11} \text{eV}\cdot\text{m}$ [296, 297]。在没有特别说明的时候，THz 场的频率和场强分别取为 $\Omega = 2\pi \text{ THz}$ 和 $E = 6 \text{ kV/cm}$ 。在这些参数下， $\hbar\Omega = 4.14 \text{ meV}$ ， $E_{\text{em}} = 16.7 \text{ meV}$ ， $\beta = 2.17 \text{ meV}$ ， $k_0 = \sqrt{\frac{2m^*\hbar\Omega}{\hbar^2}} = 5.0 \times 10^7/\text{m}$ ， $\alpha k_0 = 1.5 \text{ meV}$ 。从这里可以看出，对于方程 (5.6) 而言，在给定的 k_0 处， Ω 、 β 和 αk_0 都在同一个量级上，这导致 THz 场将不同自旋态强烈的耦合在一起。

5.2.1 准能量

图 5-1 中给出准能量 $q_+(\mathbf{k})$ 在动量空间不同角度 θ_k 下随着波矢大小 k 的变化，其中 $\mathbf{k} = (k, \theta)$ 。从图上可以看出，随着动量变大，准能量越来越接近没有加 THz 场的时候

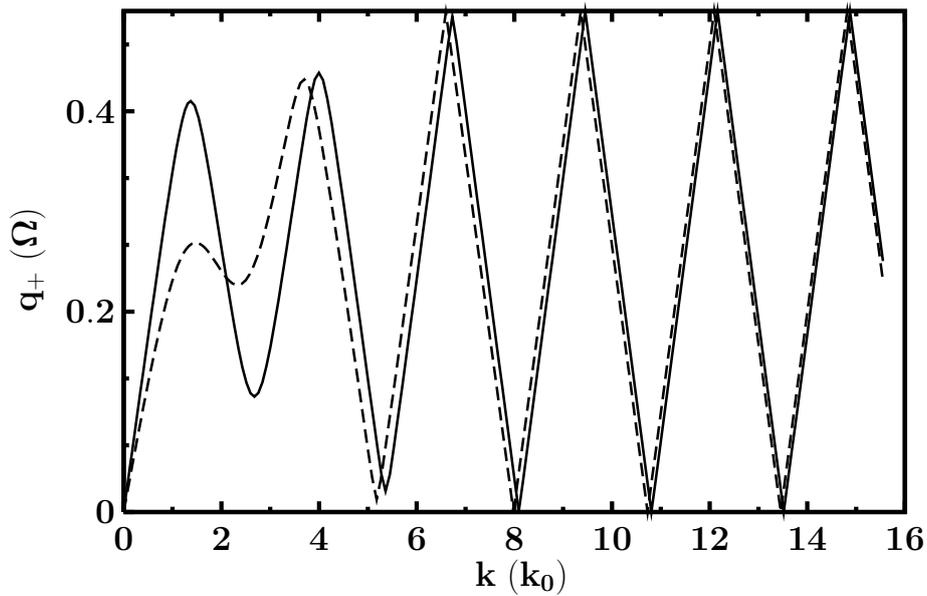


图 5-1: 动量空间不同角度下准能量随着波矢大小的变化。实线: $\theta_k = \pi/10$ ，虚线: $\theta_k = \pi/4$ 。其中 $\Omega = 2\pi \text{ THz}$ 以及 $E = 6 \text{ kV/cm}$ 。

时候自旋轨道耦合对应的能量 αk (这里我们把“+”支本征态的准能量限制在 $[0, \Omega/2]$ 范围内，根据前面的讨论，不同支之间的能量可以差 THz 场频率的整数倍)。这时因为对于大的动量，自旋轨道耦合 αk 渐渐变大，在方程 (5.6) 中占主要地位，从而 THz 场的影响变弱。在小动量值处，准能量已经远远偏离了自旋轨道耦合对应的能量，体现出在小动量范围内 THz 场造成很强的除了 Rashba 引起的自旋耦合外的耦合。

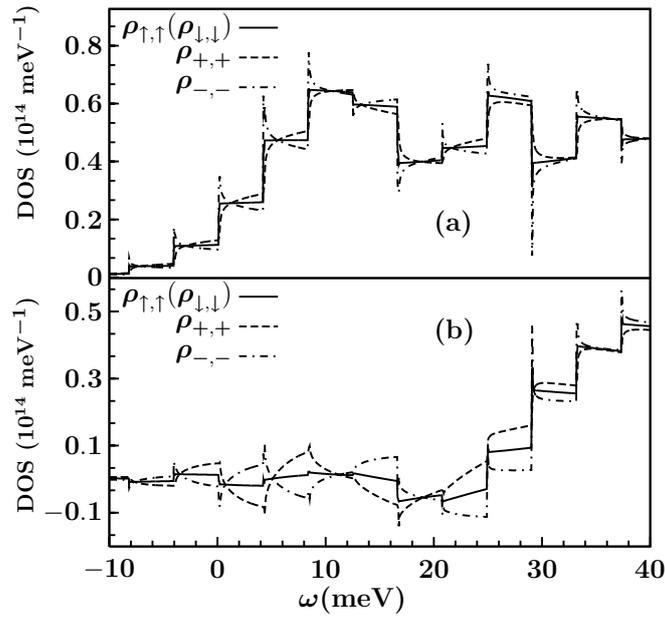


图 5-2: $\Omega = 2\pi$ THz和 $E = 6$ kV/cm 时不同时刻的态密度。(a) $T = 0$; (b) $T = T_0/4$ 。其中实线是在 Collinear 表象下, 虚线是在 Helix 表象下。

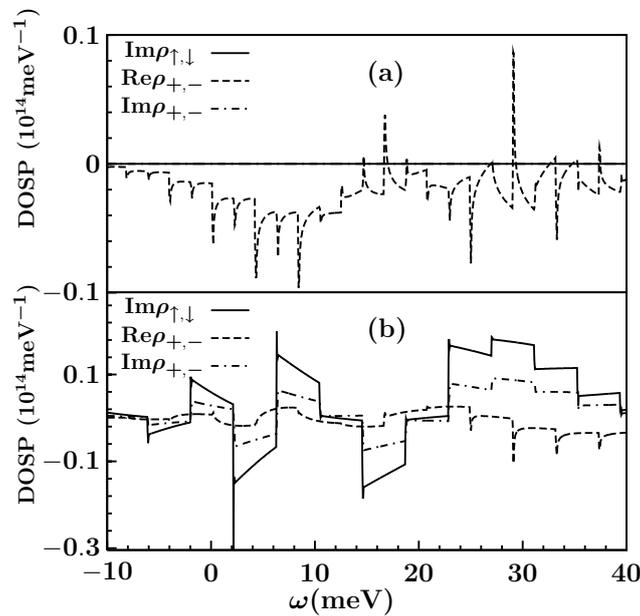


图 5-3: $\Omega = 2\pi$ THz和 $E = 6$ kV/cm 时不同时刻的自旋极化密度。(a) $T = 0$; (b) $T = T_0/4$ 。其中实线是在 Collinear 表象下自旋极化密度的虚部, 虚线是在 Helix 表象下自旋极化密度的实部, 点划线是 Helix 表象下自旋极化密度的虚部。

5.2.2 态密度和自旋极化密度

图 5-2 和 5-3 中分别给出两个自旋表象下的态密度和自旋极化密度随着能量和时间的变化。从图上可以看出，态密度和自旋极化密度同时表现出 THz 场和 Rashba 自旋轨道耦合效应。其中子带效应和主吸收峰的蓝移都是由 THz 场引起 [357]；每个子带左边的能量平方根发散是由 Rashba 自旋轨道耦合引起，另外自旋轨道耦合也会对主吸收峰造成 $m^*\alpha^2/2$ 蓝移。所有的这些结果都是和公式 (5.12) 中的 δ 函数项对应。另外，尽管在图 5-2 中 Helix 表象下态密度的两支 ρ_{++} 和 ρ_{--} 在很大程度上被分开，但是这并不表示可以引起任何的沿着 z 方向自旋极化，因为相应的 Collinear 表象 (也是实验室坐标系) 下自旋朝上和自旋朝下态的态密度完全一样。图 5-3 中 $\rho_{\uparrow\downarrow}$ 的虚部不为零表示系统产生沿着 y 方向的自旋极化。

5.2.3 平均磁矩

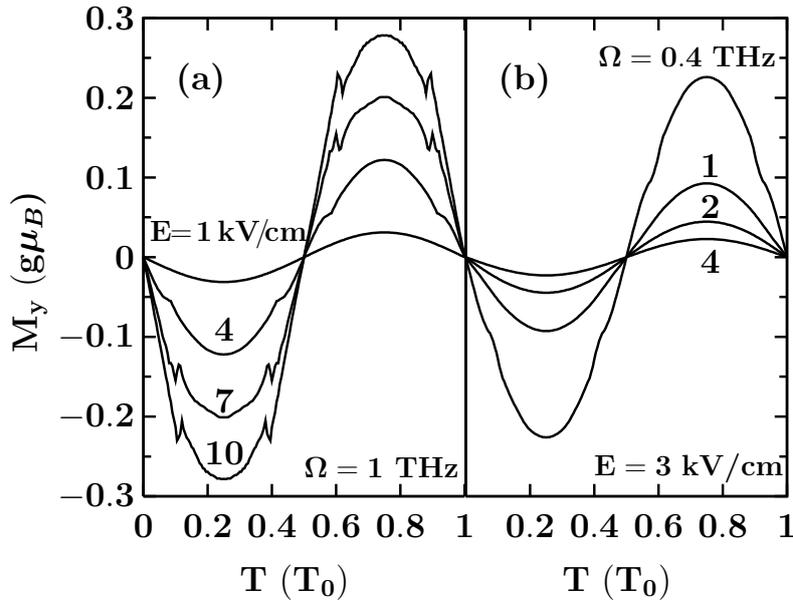


图 5-4: 给定电子浓度 $N_e = 10^{11}/\text{cm}^2$ 时 y 方向的平均磁矩随着时间的演化。(a) 给定频率 $\Omega = 1$ THz 时不同电场 $E=1, 4, 7$ 和 10 kV/cm 下的平均磁矩；(b) 给定电场 $E = 3$ kV/cm 时不同频率 $\Omega=0.4, 1.2$ 和 4 THz 下的平均磁矩；

现在我们研究 THz 场和 Rashba 自旋轨道耦合引起的沿着 y 方向的自旋极化。利用 $n_\sigma = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{E_f(T)} d\omega \rho_{\sigma,\sigma}(\omega, T)$ 可以得到在给定电子浓度下系统的费米能 $E_f(T)$ 。THz 场对系统周期性的激发导致费米能也随时间变化。我们可以得到 y 方向的平均磁矩：

$$\mathbf{M}(T) = \left(0, -\frac{g\mu_B}{n_\uparrow + n_\downarrow} \int_{-\infty}^{E_f(T)} d\omega \text{Im}\rho_{\uparrow,\downarrow}(\omega, T), 0 \right). \quad (5.15)$$

图 5-4 给出对于不同的 THz 场的频率和场强下平均磁矩 M 随着时间的变化。这里我们取电子浓度 $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = 0.5 \times 10^{11} / \text{cm}^2$ 。从图上可以看出, THz 场的电信号诱发出沿着 y 方向的 THz 频率的磁信号, 这个信号的强度由 THz 场的频率和场强以及自旋轨道耦合的强度决定, 要远大于由电磁感应引起的磁信号的强度。这里需要说明的是, 即使将 $E_f(T)$ 用对时间的平均值代替也会得到同样的振荡结果。这种从电信号到磁信号的转化可能可以应用在不用外加磁场的自旋磁共振实验中。

5.3 结论

我们通过利用 Floquet 定理严格求解薛定谔方程得到在有外加 THz 场以及 Rashba 自旋轨道耦合下的波函数, 然后得到系统的态密度以及自旋极化密度。在这个系统中, THz 的电信号可以被转化成 THz 的磁信号, 并且磁信号的强度由 THz 场的频率和场强以及自旋轨道耦合的强度决定。这种周期性的磁信号可能可以应用在不用外加磁场的自旋磁共振实验中。

在此之后, Jiang 等人 [220] 讨论了 THz 场对 GaAs 量子点系统单个电子自旋的影响, Zhou [222] 讨论了 THz 场对 GaAs 空穴系统的影响。同样的, 他们都发现 THz 场强烈的改变着系统的态密度, 并且可以转化为 THz 的磁信号。这些都是在没有耗散时的工作。Jiang 和 Wu [221] 最早在有耗散的量子点系统中研究了 THz 对自旋弛豫时间的影响。他们发现自旋弛豫时间随着 THz 场的强度和频率可以被很强烈的改变, 这是由于子带调节的自旋声子耦合引起的。

第六章 一维和二维系统的自旋弛豫和自旋去相位

在本章中我们首先给出在受限系统中的基于任意的非微扰哈密顿量展开的动力学自旋 Bloch 方程。然后给出量子阱和量子线系统中 Collinear 统计和 Helix 统计下的动力学方程的具体形式，并且仔细讨论了方程在两种不同表象 Collinear 表象和 Helix 表象下的差别。另外，我们通过求解只有杂质散射时的动力学方程后给出非均匀扩展对自旋弛豫的影响以及散射对非均匀扩展的影响。

6.1 受限体系动力学自旋 Bloch 方程

根据式 (2.53) 我们将半导体系统的有效质量近似下的哈密顿量记作

$$\begin{aligned} H &= H_e + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} + H_I, \\ H_e &= \frac{\mathbf{P}^2}{2m^*} + H_{so}(\mathbf{P}) + V(\mathbf{r}_c) + \frac{1}{2}g^*\mu_B\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \end{aligned} \quad (6.1)$$

其中下标 c 表示受约束方向的坐标，不带下标的表示自由方向的坐标，因此位置坐标记作 $\mathbf{R} = (\mathbf{r}, \mathbf{r}_c)$ ，动量坐标记作 $\mathbf{Q} = (\mathbf{q}, \mathbf{q}_c)$ 。 $\mathbf{P} = -i\hbar\nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{R})$ 是电子的广义动量， \mathbf{A} 是磁场的矢量势，满足 $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ 。 H_e 的第一项是动能项；第二项是自旋轨道耦合项，包括 Dresselhaus 自旋轨道耦合、Rashba 自旋轨道耦合以及由应变力引起的自旋轨道耦合；第三项是电子的约束势，这可以由生长样品时形成的异质结提供或者是外界施加的，根据约束势的形式可以形成量子阱、量子线或者量子点；第四项是 Zeeman 分裂项。

电子在约束势 $V(\mathbf{r}_c)$ 作用下，可以分离变量为两部分：自由方向 (\mathbf{r}) 的运动是动量为 \mathbf{k} 的平面波表示，以及约束方向 \mathbf{r}_c 的可以用分立量子数 n 表示的分立波函数表示。这里我们把自旋的量子数也计入分立量子数当中，电子的本征态可以由自由部分 $|\mathbf{k}\rangle$ 和约束部分 $|n\rangle_{\mathbf{k}}$ 组成。这里下标 \mathbf{k} 表示约束方向的波函数可能与自由运动的波矢有关。则薛定谔方程给出

$$H_e|\mathbf{k}, n\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{k})|\mathbf{k}, n\rangle.$$

其中 $|\mathbf{k}, n\rangle = |\mathbf{k}\rangle|n\rangle_{\mathbf{k}}$ ， $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 是电子系统的能量本征值。

6.1.1 基空间的选取

利用上面求解出来的电子波函数 $|\mathbf{k}, n\rangle$ 构成的希尔伯特空间类似于第5章中定义的 Helix 表象。一般来说，约束方向的波函数依赖于自由运动的动量 \mathbf{k} ，这种关系会使动力学方程的推导变得复杂，具体见附录 B。因此在下文中，类似于第5章中的 Collinear 表象，我们取某个固定 \mathbf{k} 的波函数如 $\{|n\rangle_0\}$ 作为约束方向的完备基。因此，我们采用如下的正交完备的波函数基：

$$\left\{ |\mathbf{k}\rangle |n\rangle_0 \right\}. \quad (6.2)$$

系统的本征态在这组波函数基下的展开为

$$|\mathbf{k}, n\rangle = \sum_{\mathbf{m}} \langle \mathbf{k}|_0 \langle n | \mathbf{k}, n \rangle | \mathbf{k} \rangle | n \rangle_0. \quad (6.3)$$

对于给定的动量 \mathbf{k} ，电子的哈密顿量在这组基 $\{|n\rangle_0\}$ 写成矩阵形式 $E_{\mathbf{k}}$ ，其矩阵元为：

$$(E_{\mathbf{k}})_{n_1 n_2} = {}_0 \langle n_1 | \langle \mathbf{k} | H_e | \mathbf{k} \rangle | n_2 \rangle_0. \quad (6.4)$$

一般来说，由于 $|\mathbf{k}, n_0\rangle$ 并不是系统哈密顿量的本征态，这个表示矩阵不是对角的。在后面我们会多次遇到关于能量矩阵的函数表达式 $G(E_{\mathbf{k}})$ 的计算，方法为将其展开为投影算符的形式：

$$E_{\mathbf{k}} = \sum_n \varepsilon_n(\mathbf{k}) T_{\mathbf{k}, n}, \quad (6.5)$$

其中投影算符

$$T_{\mathbf{k}, n} = |\mathbf{k}, n\rangle \langle \mathbf{k}, n|. \quad (6.6)$$

由此可得

$$G(E_{\mathbf{k}}) = \sum_n G(\varepsilon_n(\mathbf{k})) T_{\mathbf{k}, n}. \quad (6.7)$$

电场项 $e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ 是电子在自由方向的驱动场，约束方向的电势则成为约束势。因此对于量子点系统而言，任意方向的电场都是量子点额外的约束势。 H_I 是电子受到的散射相互作用，包括电子-非磁性杂质、电子-声子以及电子-电子散射。这些散射和自旋轨道耦合可以按照第 2.5.3 节中二维系统电子气的散射的形式给出。在波函数基 6.2 下电子的密度分布算符的变化

$$\rho(\mathbf{Q}) = \sum_{\mathbf{k}; n_1, n_2} I_{n_1 n_2}(\mathbf{q}_c) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, n_1}^\dagger c_{\mathbf{k}, n_2}, \quad (6.8)$$

这里 $I_{n_1 n_2}(\mathbf{q}_c) = {}_0 \langle n_1 | e^{i\mathbf{q}_c \cdot \mathbf{r}_c} | n_2 \rangle_0$ 是形状因子，我们列出散射项如下：

1. 电子—杂质散射

$$H_{ei} = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{Q};n_1n_2} v_i(\mathbf{Q}) I_{n_1n_2}(\mathbf{q}_c) \rho_i(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},n_1}^\dagger c_{\mathbf{k},n_2} . \quad (6.9)$$

2. 电子—声子散射

$$H_{ep} = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{Q};n_1n_2;\lambda} M_\lambda(\mathbf{Q}) I_{n_1n_2}(\mathbf{q}_c) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},n_1}^\dagger c_{\mathbf{k},n_2} (a_{\mathbf{q};\lambda} + a_{-\mathbf{q};\lambda}^\dagger) . \quad (6.10)$$

3. 电子—电子散射

$$H_{ee} = \sum_{\mathbf{Q}; \substack{\mathbf{k}; n_1n_2 \\ \mathbf{k}'; n_3n_4}} v(\mathbf{Q}) I_{n_1n_2}(\mathbf{q}_c) I_{n_3n_4}(\mathbf{q}_c) c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},n_3}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{q},n_1}^\dagger c_{\mathbf{k},n_2} c_{\mathbf{k}',n_4} . \quad (6.11)$$

6.1.2 动力学自旋 Bloch 方程

根据文献 [57, 330] 中的推导方法，我们将电场项和散射项当成微扰，在采用了推广的 Kadanoff-Baym 假设以及对空间的梯度展开以后，利用闭路格林函数方法 [309] 建立了关于电子的单粒子密度矩阵的动力学自旋 Bloch 方程 [57, 65, 330]：

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{dr}} + \left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{dif}} + \left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{coh}} + \left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{scat}} . \quad (6.12)$$

动力学方程具体的推导见附录 B。这里 $\rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$ 是动量为 \mathbf{k} 的电子在位置 \mathbf{r} 上 t 时刻的单粒子密度矩阵。相对于分离能级 (如自旋) 的弛豫来说，不同动量之间的关联一般会在动量弛豫时间内很快的弛豫，可以不用考虑，因此这里对于动量 \mathbf{k} 密度矩阵是对角的。分立能级之间的关联为：

$$\rho_{\mathbf{k};n_1n_2} = {}_0\langle n_1 | \rho_{\mathbf{k}} | n_2 \rangle_0 .$$

动力学自旋 Bloch 方程 (6.12) 右边的第一项是电场的驱动项

$$\left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|_{\text{dr}} = \frac{1}{2} \{ \nabla_{\mathbf{r}} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t), \nabla_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \} . \quad (6.13)$$

其中 $\{A, B\} = AB + BA$ 是反对易关系，矩阵元

$$(\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t))_{n_1, n_2} = (E_{\mathbf{k}})_{n_1 n_2} + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} \delta_{n_1 n_2} + (\mathcal{E}_{\text{HF}}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t))_{n_1, n_2} .$$

这里 $\mathcal{E}_{\text{HF}}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = -\sum_{\mathbf{Q}} I(\mathbf{q}_c) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(\mathbf{r}, t) v(\mathbf{Q}) I(-\mathbf{q}_c)$ 是 Hartree-Fock 项。右边的第二项是扩散项，表示电子从一个位置移动到其它位置的快慢：

$$\left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|_{\text{dif}} = -\frac{1}{2} \{ \nabla_{\mathbf{k}} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t), \nabla_{\mathbf{r}} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \}. \quad (6.14)$$

右边第三项是相干项：

$$\left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|_{\text{coh}} = -i [\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t), \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)]. \quad (6.15)$$

其中 $[A, B] = AB - BA$ 给出对易关系。两维电子气中电子自旋的进动就是由这项给出。最后一项是散射项，这一项是不可逆的自旋弛豫的主要来源，可以写作：

$$\left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|_{\text{scat}} = - \left\{ S(>, <) - S(<, >) + S(>, <)^{\dagger} - S(<, >)^{\dagger} \right\}. \quad (6.16)$$

对于非 Markovian 过程，电子-杂质散射、电子-声子散射以及电子-电子散射给出：

$$\begin{aligned} S(>, <) &= \sum_{\mathbf{Q}} \int_{-\infty}^t d\tau v_i(\mathbf{Q}) I(\mathbf{q}_c) e^{-iE_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t-\tau)} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^>(\tau) v_i(-\mathbf{Q}) I(-\mathbf{q}_c) \rho_{\mathbf{k}}^<(\tau) e^{iE_{\mathbf{k}}(t-\tau)} \\ &+ \sum_{\mathbf{Q}} \int_{-\infty}^t d\tau M_{\lambda}(\mathbf{Q}) I(\mathbf{q}_c) e^{-iE_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t-\tau)} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^>(\tau) M(-\mathbf{Q}) I(-\mathbf{q}_c) \rho_{\mathbf{k}}^<(\tau) e^{iE_{\mathbf{k}}(t-\tau)} \\ &\quad \times (N^<(\mathbf{Q}) e^{i\omega_{\mathbf{Q}}(t-\tau)} + N^>(\mathbf{Q}) e^{-i\omega_{\mathbf{Q}}(t-\tau)}) \\ &+ \sum_{\mathbf{Q}; \mathbf{k}', \mathbf{q}'_c} \int_{-\infty}^t d\tau v(\mathbf{Q}) I(\mathbf{q}_c) e^{-iE_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t-\tau)} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^>(\tau) v(-\mathbf{q}'_c) I(-\mathbf{q}'_c) \rho_{\mathbf{k}}^<(\tau) e^{iE_{\mathbf{k}}(t-\tau)} \\ &\quad \text{Tr}[I(-\mathbf{q}_c) e^{-iE_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}(t-\tau)} \rho_{\mathbf{k}'}^> I(\mathbf{q}'_c) \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^<(\tau) e^{-iE_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}(t-\tau)}]. \end{aligned} \quad (6.17)$$

其中 $N^<(\mathbf{Q}) = N(\mathbf{Q})$ 是声子的统计分布， $N^>(\mathbf{Q}) = N(\mathbf{Q}) + 1$ ， $\rho_{\mathbf{k}}^> = 1 - \rho_{\mathbf{k}}$ ， $\rho_{\mathbf{k}}^< = \rho_{\mathbf{k}}$ 。

一般电子系统中自旋轨道耦合比较弱，进动周期以及自旋弛豫时间都比较长，散射是 Markovian 过程。Markov 近似给出时间积分内的密度矩阵可以化作：

$$\rho_{\mathbf{k}}(\tau) = e^{iE_{\mathbf{k}}(t-\tau)} \rho_{\mathbf{k}}(t) e^{-iE_{\mathbf{k}}(t-\tau)}, \quad (6.18)$$

根据式 (6.7) 可知

$$e^{iE_{\mathbf{k}}t} = \sum_{\mathbf{n}} e^{i\varepsilon_{\mathbf{n}}(\mathbf{k})t} T_{\mathbf{k}, \mathbf{n}}. \quad (6.19)$$

则将对 τ 的时间积分积掉以后给出能量守恒，散射项 (6.16) 中 S 化作：

$$\begin{aligned}
S(>, <) &= \pi \sum_{\mathbf{Q}; n_1 n_2} v_i(\mathbf{Q}) I(\mathbf{q}_c) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^>(t) T_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, n_1} v_i(-\mathbf{Q}) I(-\mathbf{q}_c) T_{\mathbf{k}, n_2} \rho_{\mathbf{k}}^<(t) \delta(\varepsilon_{n_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{n_2}(\mathbf{k})) \\
&+ \pi \sum_{\mathbf{Q}; n_1, n_2} M_\lambda(\mathbf{Q}) I(\mathbf{q}_c) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^>(t) T_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, n_1} M(-\mathbf{Q}) I(-\mathbf{q}_c) T_{\mathbf{k}, n_2} \rho_{\mathbf{k}}^<(t) \\
&\quad \times [N^<(\mathbf{Q}) \delta(\varepsilon_{n_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{n_2}(\mathbf{k}) - \omega_{\mathbf{Q}}) + N^>(\mathbf{Q}) \delta(\varepsilon_{n_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{n_2}(\mathbf{k}) + \omega_{\mathbf{Q}})] \\
&+ \pi \sum_{\substack{\mathbf{Q}; \mathbf{k}', \mathbf{q}' \\ n_1, n_2, n_3, n_4}} v(\mathbf{Q}) I(\mathbf{q}_c) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^>(t) T_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, n_1} v(-\mathbf{q}') I(-\mathbf{q}'_c) T_{\mathbf{k}, n_2} \rho_{\mathbf{k}}^<(t) \\
&\quad \times \text{Tr}[I(-\mathbf{q}_c) \rho_{\mathbf{k}'}^>(t) T_{\mathbf{k}', n_3} I(\mathbf{q}'_c) T_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, n_4} \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^<(t)] \\
&\quad \times \delta(\varepsilon_{n_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{n_2}(\mathbf{k}) + \varepsilon_{n_3}(\mathbf{k}') - \varepsilon_{n_4}(\mathbf{k}'-\mathbf{q})) . \tag{6.20}
\end{aligned}$$

然而对空穴系统而言，自旋轨道耦合非常强，使得自旋进动周期和自旋弛豫时间很短，几乎可以和动量弛豫时间相比，因此空穴自旋弛豫过程散射中对应于非 Markovian 过程。本论文中我们只研究 Markov 近似下的自旋弛豫过程。不过 Zhang 和 Wu [358] 仔细研究了这个问题，发现在非 Markovian 过程中，不仅自旋去相位时间会被有效的延长，而且自旋相干的非相干求和随时间的演化会出现自旋拍现象。

6.2 量子阱系统

下面我们给出量子阱系统中电子动力学自旋 Bloch 方程。在量子阱系统中，约束方向设为 z 方向，在窄量子阱系统，约束方向只用考虑最低一个子带就足够了。一般 z 方向的波函数可以采用有限深势阱 (表 2-3 中偶宇称的波函数) 或者是无限深势阱 (公式 (2.52)) 给出的波函数。并且由于量子阱的阱宽很窄，对于平面内的磁场我们可以不用考虑磁场对轨道的影响，只计入 Zeeman 分裂。则电子的平面内的哈密顿量 H_e 写作

$$H_e = \frac{\mathbf{k}^2}{2m^*} + \mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} .$$

其中 $\mathbf{h}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}[\boldsymbol{\Omega}^{2D}(\mathbf{k}) + g^* \mu_B \mathbf{B}]$ 。可以求得自旋本征态和本征能量为

$$|\mathbf{k}, \xi = \pm\rangle = \frac{T_{\mathbf{k}, \xi} |\uparrow\rangle}{\langle \uparrow | T_{\mathbf{k}, \xi} | \uparrow \rangle} , \quad \varepsilon_\xi(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}^2}{2m^*} + \xi |\mathbf{h}(\mathbf{k})| . \tag{6.21}$$

这里能量零点取在 z 方向基态对应的能量上，其中投影算符

$$T_{\mathbf{k}, \xi} = \frac{1}{2} [1 + \xi \frac{\mathbf{h}(\mathbf{k})}{|\mathbf{h}(\mathbf{k})|} \cdot \boldsymbol{\sigma}] .$$

如同我们在上一节所说的，当分立能级对应的波函数即自旋波函数中不包括电子的动量 \mathbf{k} 的时候，动力学方程的推导比较简单。在 σ_z 表象中，其自旋本征态 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$ 与动量无关，此时相应的密度矩阵的各个分量为

$$\rho_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \rho_{\mathbf{k}} | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | \rho_{\mathbf{k}} | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | \rho_{\mathbf{k}} | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | \rho_{\mathbf{k}} | \downarrow \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{\mathbf{k},\uparrow} & \rho_{\mathbf{k},\uparrow\downarrow} \\ \rho_{\mathbf{k},\downarrow\uparrow} & f_{\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (6.22)$$

其中对角项 $f_{\mathbf{k},\sigma=\uparrow,\downarrow}$ 表示的是自旋朝上和自旋朝下态的占据数，非对角项 $\rho_{\mathbf{k},\uparrow\downarrow}$ 表示的是自旋朝上和自旋朝下态之间的关联。物理量 A 的统计平均值为

$$\langle A \rangle = \sum_{\mathbf{k};\sigma_1\sigma_2} \langle \sigma_1 | A_{\mathbf{k}} | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | \rho_{\mathbf{k}} | \sigma_1 \rangle.$$

在这种表象下，密度矩阵和实验室中测量的自旋极化是直接对应的：对角项的差对应沿 z 方向的自旋极化，非对角项的实部和虚部分别对应 x/y 方向的自旋极化，这个结果容易在上式中取 $A = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 来验证。这里我们没有考虑不同动量 \mathbf{k} 之间的关联。这是因为在自旋动力学问题中，不同动量之间的关联的弛豫速率以远远大于自旋弛豫速率而很快弛豫到零。不过在自旋流问题当中，side-jump 机制导致的自旋流就必须考虑这种不同动量的关联的贡献 [102, 113]，这部分贡献没有包括在现在的动力学自旋 Bloch 方程。

在外加电场和输运的方向都沿着 x 方向时，动力学自旋 Bloch 方程化作 [57, 65]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = eE \partial_{k_x} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) - \frac{k_x}{m^*} \partial_x \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) - i[\mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathcal{E}_{\text{HF}}, \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)] + \left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{scat}}. \quad (6.23)$$

这里 $\mathcal{E}_{\text{HF}} = -\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(\mathbf{r}, t)$ 。和动能项相比，扩散项和驱动项中的 Hartree-Fock 项以及自旋轨道耦合项的影响都很小而忽略不计。不过对于自旋产生或者自旋流问题，这些项必须考虑并且可能会有很大的影响。其中散射项 (6.16) 中的 $S(>, <)$ 化为:

$$\begin{aligned} S(>, <) &= \pi \sum_{\mathbf{q};\eta_1\eta_2} |U_{\mathbf{q}}|^2 \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^>(t) T_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\eta_1} T_{\mathbf{k},\eta_2} \rho_{\mathbf{k}}^<(t) \delta(\varepsilon_{\eta_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{\eta_2}(\mathbf{k})) \\ &+ \pi \sum_{\mathbf{Q};\eta_1,\eta_2} |g_{\mathbf{Q},\lambda}|^2 \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^>(t) T_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\eta_1} T_{\mathbf{k},\eta_2} \rho_{\mathbf{k}}^<(t) [N^<(\mathbf{Q}) \delta(\varepsilon_{\eta_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{\eta_2}(\mathbf{k}) + \omega_{\mathbf{Q}}) \\ &\quad + N^>(\mathbf{Q}) \delta(\varepsilon_{\eta_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{\eta_2}(\mathbf{k}) - \omega_{\mathbf{Q}})] \\ &+ \pi \sum_{\substack{\mathbf{q},\mathbf{k}' \\ \eta_1,\eta_2,\eta_3,\eta_4}} V_{\mathbf{q}}^2 \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^>(t) T_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\eta_1} T_{\mathbf{k},\eta_2} \rho_{\mathbf{k}}^<(t) \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}'}^>(t) T_{\mathbf{k}',\eta_3} T_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\eta_4} \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^<(t)] \\ &\quad \times \delta(\varepsilon_{\eta_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{\eta_2}(\mathbf{k}) + \varepsilon_{\eta_3}(\mathbf{k}') - \varepsilon_{\eta_4}(\mathbf{k}'-\mathbf{q})), \end{aligned} \quad (6.24)$$

这里 $|U_{\mathbf{q}}|^2 = \sum_{q_z} v_i(\mathbf{Q}) v_i(-\mathbf{Q}) I(\mathbf{q}_z) I(-\mathbf{q}_z)$, $|g_{\mathbf{Q},\lambda}|^2 = M_{\lambda}(\mathbf{Q}) I(\mathbf{q}_z) M_{\lambda}(-\mathbf{Q}) I(-\mathbf{q}_z)$, $V_{\mathbf{q}} = \sum_{q_z} v(\mathbf{Q}) I(\mathbf{q}_z) I(-\mathbf{q}_z)$ 是考虑了形状因子的准二维的散射矩阵元。这里，形状因子

在 σ_z 表象下是对角的，即 $I_{\sigma_1\sigma_2}(q_z) = I(q_z)\delta_{\sigma_1\sigma_2}$ 。

6.2.1 Collinear 表象和 Helix 表象

上面我们给出了关于密度矩阵 $\rho_{\mathbf{k}}$ 在 σ_z 表象下的矩阵元 $f_{\mathbf{k},\sigma}$ 和 $\rho_{\mathbf{k},\uparrow\downarrow}$ 所满足的动力学自旋 Bloch 方程。这组方程是写在 Collinear 表象下。除此之外，电子的未微扰的哈密顿量的本征态 $|\mathbf{k}, \xi\rangle$ 组成的自旋空间也被广泛的使用，我们称此表象为 Helix 表象，它得名于在只有 Rashba 自旋轨道耦合时对应的本征波函数为 Helix 态。对于 Helix 表象下的密度矩阵的矩阵元为：

$$\rho_{\mathbf{k}}^h = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{k}, + | \rho_{\mathbf{k}} | \mathbf{k}, + \rangle & \langle \mathbf{k}, + | \rho_{\mathbf{k}} | \mathbf{k}, - \rangle \\ \langle \mathbf{k}, - | \rho_{\mathbf{k}} | \mathbf{k}, + \rangle & \langle \mathbf{k}, - | \rho_{\mathbf{k}} | \mathbf{k}, - \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{\mathbf{k},+}^h & \rho_{\mathbf{k},+-}^h \\ \rho_{\mathbf{k},-+}^h & f_{\mathbf{k},-}^h \end{pmatrix}. \quad (6.25)$$

这里我们用上标 h 表示 Helix 表象中的量。对角项 $f_{\mathbf{k},\xi=\pm}^h$ 表示的是电子在态 $|\mathbf{k}, \pm\rangle$ 上的占据数，非对角项 $\rho_{\mathbf{k},+-}^h$ 表示电子在这两个态之间的关联。对应的物理量 A 的统计平均值为

$$\langle A \rangle = \sum_{\mathbf{k}\xi_1\xi_2} \langle \mathbf{k}, \xi_1 | A_{\mathbf{k}} | \mathbf{k}, \xi_2 \rangle \langle \mathbf{k}, \xi_2 | \rho_{\mathbf{k}} | \mathbf{k}, \xi_1 \rangle.$$

这两个表象之间可以通过幺阵变换联系起来。即

$$\langle \mathbf{k}, \xi_1 | \rho_{\mathbf{k}} | \mathbf{k}, \xi_2 \rangle = \sum_{\sigma_1\sigma_2} \langle \mathbf{k}, \xi_1 | \sigma_1 \rangle \langle \sigma_1 | \rho_{\mathbf{k}} | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | \mathbf{k}, \xi_2 \rangle. \quad (6.26)$$

记

$$U_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \mathbf{k}, + \rangle & \langle \uparrow | \mathbf{k}, - \rangle \\ \langle \downarrow | \mathbf{k}, + \rangle & \langle \downarrow | \mathbf{k}, - \rangle \end{pmatrix} \quad (6.27)$$

则有

$$\rho_{\mathbf{k}}^h = U_{\mathbf{k}}^\dagger \rho_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}} \quad (6.28)$$

动力学自旋 Bloch 方程写在 Helix 表象下稍微复杂了一些，具体的表达式见附录 C。

6.2.2 Collinear 统计和 Helix 统计

现在我们讨论系统的平衡态对系统的自旋动力学性质的影响。对于不同的平衡态，微扰展开的结果以及在平衡时的分布会有很大的不同。在以往的工作中 [52, 54, 57, 57, 58, 58–60, 81, 147, 161, 195, 314, 329, 331–335]，系统的平衡态都是由哈密顿量 $H_0 = \frac{k^2}{2m^*}$ 的本征态 $\chi_{\uparrow\downarrow}$ 和本征能量 $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{k^2}{2m^*}$ 对应的费米分布所决定，给出

$$\rho_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{\exp([H_0(\mathbf{k}) - \mu]/k_B T) + 1} = f(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu). \quad (6.29)$$

其中 $f(x) = \frac{1}{e^{x/k_B T} + 1}$ 给出费米分布。我们称此费米分布为 Collinear 费米分布，对应的统计为 Collinear 统计。在这个统计下，散射项的数值处理已经被很仔细的研究过 [147]，具有很高的计算精度及速度。然而我们知道，在有自旋轨道耦合以及外磁场的系统，自旋本征态和本征能量由式 (6.21) 给出，和 Collinear 统计下的本征态和本征能量完全不一样，可以看出自旋轨道耦合对系统自旋性质有非常大的影响 [347]。此时系统的平衡态是由系统哈密顿量 H_e 的本征波函数和本征能量对应的费米分布所决定，其中包括了自旋轨道耦合和外磁场的影响，给出

$$\rho_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{\exp([H_e(\mathbf{k}) - \mu]/k_B T) + 1} = \sum_{\xi} f(\varepsilon_{\mathbf{k},\xi} - \mu) T_{\mathbf{k},\xi}. \quad (6.30)$$

我们称这种费米分布为 Helix 费米分布，它所对应的统计为 Helix 统计。由此可见，对于每个动量 \mathbf{k} 来说，Helix 费米分布是自旋极化的，并且极化方向沿着总有效磁场 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 方向，这和 Collinear 费米分布有着极大的不同。但是对于 Helix 统计而言，系统的基态仍然是没有自旋极化的，这是因为只有自旋轨道耦合作用而无外磁场的系统中，时间反演对称性可以保证系统的总的自旋极化为零。因此，对于不同的统计，系统对应着不同的平衡态，这对其动力学性质有着很大的影响。一般来说，对于量子点系统中的自旋弛豫 [41, 42] 以及自旋霍尔效应问题 [128, 359, 360] 是在 Helix 统计下讨论的。在这种统计下，由于不同自旋对应的能谱不再简并以及能带也不再是抛物带，动力学方程高精度的数值求解比较困难。原则上，在自旋轨道耦合很弱时，Collinear 统计是 Helix 统计的一个很好的近似。然而一旦进入强耦合区域——很容易在窄量子阱系统中实现——如下的两种效应将会非常显著：(i) 自旋轨道耦合引起的强有效磁场将会导致电子自旋快速进动，从而给出很强的自旋相干效应以及由此引起和自旋去相位不同的自旋去极化；(ii) Helix 统计对自旋弛豫过程的影响将会很大。因此需要研究这两种统计下自旋弛豫过程的差别，我们将在后面给出这两种统计下自旋弛豫时间的比较 [65]。

Helix 统计和 Collinear 统计下给出的动力学 Bloch 方程中除了散射项不一样以外，相干项、驱动项以及扩散项都给出相同的形式。在上面章节中给出的动力学方程都是在 Helix 统计下给出的。下面我们给出在 Collinear 统计下的两维系统的自旋动力学 Bloch 方程。在忽略了自旋轨道耦合对系统能量的影响以后，利用

$$\delta(\varepsilon_{\eta_1}(\mathbf{q}) - \varepsilon_{\eta_2}(\mathbf{k})) \rightarrow \delta(\varepsilon(\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}))$$

以及

$$\sum_{\eta} T_{\mathbf{k},\eta} = 1$$

则散射项化为

$$\left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|_{\text{scat}} = - \left\{ S(>, <) - S(<, >) + S(>, <)^{\dagger} - S(<, >)^{\dagger} \right\}.$$

其中

$$\begin{aligned}
S(>, <) &= \pi \sum_{\mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^>(t) \rho_{\mathbf{k}}^<(t) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \\
&+ \pi \sum_{\mathbf{Q}} |g_{\mathbf{Q},\lambda}|^2 \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^>(t) \rho_{\mathbf{k}}^<(t) [N_{\mathbf{Q}}^< \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{Q}}) + N_{\mathbf{Q}}^> \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{Q}})] \\
&+ \pi \sum_{\mathbf{q}; \mathbf{k}'} V_{\mathbf{q}}^2 \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^>(t) \rho_{\mathbf{k}}^<(t) \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}'}^>(t) \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^<(t)] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}), \quad (6.31)
\end{aligned}$$

也就是以往的工作 [52, 57, 311, 327, 344] 中散射的形式。

6.2.3 空间均匀时的非均匀扩展

现在我们考虑空间均匀系统中自旋极化的时间演化。为了简单起见，自旋轨道耦合我们采用 Rashba 自旋轨道耦合，散射只考虑电子-杂质散射，并且忽略 Hartree-Fock 项的贡献，动力学自旋 Bloch 方程化作：

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(t) = -i[\alpha(k_y \sigma_x - k_x \sigma_y), \rho_{\mathbf{k}}(t)] - 2\pi \sum_{\mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) (\rho_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}). \quad (6.32)$$

将密度矩阵 $\rho_{\mathbf{k}}$ 按照角度展开，

$$\rho_{\mathbf{k}} = \sum_l \rho_l(k) e^{il\theta_{\mathbf{k}}}, \quad (6.33)$$

由 $\rho_{\mathbf{k}}$ 的厄密性很容易得出 $\rho_l(k) = \rho_{-l}^\dagger(k)$ 。则动力学自旋 Bloch 方程化作：

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l(k, t) = \alpha k \left\{ [S^\dagger, \rho_{l+1}(k, t)] - [S, \rho_{l-1}(k, t)] \right\} - |U_l(k)|^2 \rho_l(k, t). \quad (6.34)$$

其中 $S^\dagger = \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2}$ 是自旋升算符，由于 $|U_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}|^2$ 只与向量的大小 $|\mathbf{k} - \mathbf{q}|$ 有关，故 $|U_l(k)|^2 = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \int_0^{2\pi} d\theta |U(\sqrt{2k^2(1 - \cos\theta)})|^2 (1 - \cos l\theta)$ ，则

$$\begin{aligned}
|U_0(k)|^2 &= 0, \\
|U_{-1}(k)|^2 &= |U_1(k)|^2 \equiv \frac{1}{\tau_p(k)}. \quad (6.35)
\end{aligned}$$

其中 $\frac{1}{\tau_p(k)}$ 是由公式 (3.39) 定义的动量弛豫时间。建立关于自旋极化傅立叶分

量 $\mathbf{s}_l(k, t) = \frac{1}{2} \text{Tr}[\rho_l(k, t)\boldsymbol{\sigma}]$ 的方程。利用矩阵 $\mathcal{F} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -i \\ -1 & i & 0 \end{pmatrix}$ ，我们得到

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \text{Tr}[[S^\dagger, \rho_l]\boldsymbol{\sigma}] &= \frac{1}{2} \text{Tr}[\rho_l[\boldsymbol{\sigma}, S^\dagger]] = \mathcal{F}^\dagger \mathbf{s}_l(k, t), \\ \frac{1}{2} \text{Tr}[[S, \rho_l]\boldsymbol{\sigma}] &= \mathcal{F} \mathbf{s}_l(k, t). \end{aligned} \quad (6.36)$$

则运动方程化作

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{s}_l(k, t) = \alpha k [\mathcal{F}^\dagger \mathbf{s}_{l+1}(k, t) - \mathcal{F} \mathbf{s}_{l-1}(k, t)] - |U_l(k)|^2 \mathbf{s}_l(k, t). \quad (6.37)$$

简单起见，我们只考虑阶数 $l = 0, \pm 1$ 的自旋 \mathbf{s}_l ，则上面的方程可以化作

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \alpha k \begin{pmatrix} -\frac{1}{\alpha k \tau_p(k)} & -\mathcal{F} & 0 \\ \mathcal{F}^\dagger & 0 & -\mathcal{F} \\ 0 & \mathcal{F}^\dagger & -\frac{1}{\alpha k \tau_p(k)} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \mathbf{s}_1 \\ \mathbf{s}_0 \\ \mathbf{s}_{-1} \end{pmatrix} = 0. \quad (6.38)$$

这个方程可以严格的求解，在给定初始条件是沿着 z 方向的费米分布的自旋极化时

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_1(k, 0) &= 0, \\ \mathbf{s}_0(k, 0) &= f(\varepsilon_k - \mu) \hat{\mathbf{z}}, \\ \mathbf{s}_{-1}(k, 0) &= 0. \end{aligned} \quad (6.39)$$

则方程 (6.38) 的解为:

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_1(k, t) &= -\frac{x_k}{2\sqrt{1-x_k^2}} e^{-\frac{t}{2\tau_p(k)}} \sinh\left(\frac{t}{2\tau_p(k)\sqrt{1-x_k^2}}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} f(\varepsilon_k - \mu), \\ \mathbf{s}_0(k, t) &= e^{-\frac{t}{2\tau_p(k)}} \left[\frac{\sinh\left(\frac{t}{2\tau_p(k)\sqrt{1-x_k^2}}\right)}{\sqrt{1-x_k^2}} + \cosh\left(\frac{t}{2\tau_p(k)\sqrt{1-x_k^2}}\right) \right] \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} f(\varepsilon_k - \mu), \\ \mathbf{s}_{-1}(k, t) &= -\frac{x_k}{2\sqrt{1-x_k^2}} e^{-\frac{t}{2\tau_p(k)}} \sinh\left(\frac{t}{2\tau_p(k)\sqrt{1-x_k^2}}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} f(\varepsilon_k - \mu), \end{aligned} \quad (6.40)$$

其中 $x_k = 4\alpha k\tau_p(k)$, 则单个动量 \mathbf{k} 对应的自旋极化

$$\mathbf{s}_{\mathbf{k}}(t) = s_0(k, t) + s_1(k, t)e^{i\theta_{\mathbf{k}}} + s_{-1}(k, t)e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} . \quad (6.41)$$

其中 z 方向分量为

$$\begin{aligned} s_{\mathbf{k}}^z(t) &= s_0^z(k, t) \\ &= e^{-\frac{t}{2\tau_p(k)}} \left[\frac{\sinh\left(\frac{t}{2\tau_p(k)/\sqrt{1-x_k^2}}\right)}{\sqrt{1-x_k^2}} + \cosh\left(\frac{t}{2\tau_p(k)/\sqrt{1-x_k^2}}\right) \right] f(\varepsilon_k - \mu) \\ &= \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1-x_k^2}}\right) e^{-\frac{t}{2\tau_p(k)}(1-\sqrt{1-x_k^2})} + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1-x_k^2}}\right) e^{-\frac{t}{2\tau_p(k)}(1+\sqrt{1-x_k^2})} \right] \\ &\quad \times \frac{f(\varepsilon_k - \mu)}{2} . \end{aligned} \quad (6.42)$$

从这里可以看出, 对于不同大小的 x_k , z 方向的自旋极化的时间演化行为有很大的区别。

1. $x_k > 1$, 即 $\alpha k\tau_p(k) > 1/4$, 对应着弱散射区域。

公式 (6.42) 中第二行 [...] 内是一个振荡的项, 不会给出自旋极化的衰减。从而自旋弛豫时间为

$$\frac{1}{\tau_s(\mathbf{k})} = \frac{1}{2\tau_p(k)} .$$

不过自旋极化的进动频率为 $\omega_k = \sqrt{(2\alpha k)^2 - (\frac{1}{2\tau_p(k)})^2}$ 。和前面运动方程得到的结果 (3.24) 一致, 散射使自旋进动的频率变慢, 从而对自旋进动起到了抑制作用。这种进动频率的不同会给出一个可逆的自旋弛豫。

2. $x_k < 1$, 即 $\alpha k\tau_p(k) < 1/4$, 对应着强散射区域。

此时自旋极化不仅仅不会出现振荡, 它的衰减也变成了两个指数的形式, 它们对应的时间分别是

$$\frac{1}{\tau_{s,\pm}(\mathbf{k})} = \frac{1 \pm \sqrt{1 - (4\alpha k\tau_p(k))^2}}{2\tau_p(k)} \quad (6.43)$$

这和一般讨论的单指数衰减的弛豫过程不同。在强散射近似下, 即 $x_k \ll 1$, 此时

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{s,+}(k)} &= \frac{1}{\tau_p(k)} , \\ \frac{1}{\tau_{s,-}(k)} &= (2\alpha k)^2 \tau_p(k) . \end{aligned} \quad (6.44)$$

这里 $\tau_{s,-}(k)$ 和前面第3章中 DP 机制得到的自旋弛豫结果一样, 但是要比原来多出另外一个弛豫时间 $\tau_{s,+}(k)$, 即动量弛豫时间部分。由于这两衰减部分的大小在

强散射近似下几乎一样，从而自旋信号的衰减应当以自旋弛豫时间 $\tau_{s,\pm}$ 中长的量 $\tau_{s,-}$ 为准。此处，我们通过严格求解动力学方程解析的验证了 DP 机制在强散射下的结果。

不过由于在半导体中高温下电子分布扩展的比较大，从而对自旋弛豫有贡献的电子的动量可以从很小的值到很大的值，由于动量弛豫时间对于动量的大小而言是单调上升的，故 x_k 对于动量的大小而言也是单调上升的，所以对于整体的电子而言，在弹性散射近似下，其中有部分是处在强散射区域，有部分处在弱散射区域。而 DP 机制只计算了其中一部分，从而不能给出最终正确的自旋弛豫时间，和数值求解动力学自旋 Bloch 方程的结果会有很大的区别 [52, 331]。

可见，单体公式 (3.56) 只有在强散射区域才能给出正确的自旋弛豫时间。这个结果也定量的解释了非均匀扩展导致的自旋弛豫/去相位：(i) 在弱散射极限下，非均匀扩展比较大，散射提供了弛豫通道，故散射越强，自旋弛豫时间越短，即对应这里的 $\tau_s(k) = 2\tau_p$ 。此时散射对自旋进动的抑制作用是非常明显的，随着散射的增强，自旋进动频率减小。(ii) 在强散射极限下，可以看到自旋极化已经不再进动。散射对非均匀扩展的反作用使得自旋弛豫速率变慢。并且随着散射变强，非均匀扩展变弱，使得自旋弛豫时间变长。从这里可以看出，从非均匀扩展的观点来理解自旋弛豫远比 DP 机制包括了更多的内容。

6.3 量子线系统

下面我们给出量子线系统中的自旋动力学 Bloch 方程。对于量子线系统，只有沿着量子线方向电子可以自由运动，其余两个方向被方势阱约束。电子本征波函数的量子数可以记为 (n, m, k) ，其中 n/m 分别是约束方向 x/y 的子带指标，而 k 是沿着量子线方向的动量。如果量子线的线宽足够小，各个方向的约束只用考虑最低的一个子带，那么波函数的量子数标记约化为 $(1, 1, k)$ 。在 Collinear 表象以及 Collinear 统计下，电子的动力学 Bloch 方程给出：

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_k(z, t) = eE \partial_k \rho_k(z, t) - \frac{k}{m^*} \partial_z \rho_k(z, t) - i[H_{so} + \mathcal{E}_{HF}, \rho_k(z, t)] + \left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_k(z, t) \right|_{\text{scat}}. \quad (6.45)$$

对于 InAs 量子线材料，Rashba 自旋轨道耦合占主导地位， H_{so} 由公式 (2.35) 给出。Hartree-Fock 项以及散射项都和量子阱系统中的形式一样，不过对应的形状因子 $I(q_z)$ 要用 $I(q_x)I(q_y)$ 代替。即：

$$\mathcal{E}_{HF} = - \sum_q V_q \rho_{k-q}(z, t). \quad (6.46)$$

和散射项中的

$$\begin{aligned}
S(>, <) &= \pi \sum_{\mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 \rho_{k-q}^>(t) \rho_k^<(t) \delta(\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k) \\
&+ \pi \sum_{\mathbf{Q}} |g_{\mathbf{Q}, \lambda}|^2 \rho_{k-q}^>(t) \rho_k^<(t) [N_{\mathbf{Q}}^< \delta(\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k + \omega_{\mathbf{Q}}) + N_{\mathbf{Q}}^> \delta(\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k - \omega_{\mathbf{Q}})] \\
&+ \pi \sum_{q; k'} V_q^2 \rho_{k-q}^>(t) \rho_k^<(t) \text{Tr}[\rho_{k'}^>(t) \rho_{k'-q}^<(t)] \delta(\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k + \varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k'-q}) . \quad (6.47)
\end{aligned}$$

其中 $\mathbf{Q} = (q_x, q_y, q)$ 且

$$\begin{aligned}
|U_{\mathbf{q}}|^2 &= \sum_{q_x, q_y} v_i(\mathbf{Q}) v_i(-\mathbf{Q}) I(q_x) I(q_y) I(-q_x) I(-q_y) , \\
|g_{\mathbf{Q}, \lambda}|^2 &= M_{\lambda}(\mathbf{Q}) I(q_x) I(q_y) M_{\lambda}(-\mathbf{Q}) I(-q_x) I(-q_y) , \\
V_q &= \sum_{q_x, q_y} v(\mathbf{Q}) I(q_x) I(q_y) I(-q_x) I(-q_y) . \quad (6.48)
\end{aligned}$$

6.3.1 空间均匀时的非均匀扩展

我们考虑第7章中的位型 (i) 对应的系统，可以取有效磁场沿着 y 方向。则只考虑杂质散射并且忽略 Hartree-Fock 项的动力学方程化作：

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_k(t) = -i[-\alpha k \sigma_y, \rho_k(t)] - 2\pi \sum_{\mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 \delta(\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k) (\rho_k - \rho_{k-q}) . \quad (6.49)$$

即

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_k(t) = -i[-\alpha k \sigma_y, \rho_k(t)] - \frac{1}{\tau_p(k)} (\rho_k - \rho_{-k}) . \quad (6.50)$$

其中 $\frac{1}{\tau_p(k)} = \frac{m^*}{\hbar^2 |k|} |U_{2k}|^2$ 。将其化作自旋矢量 $\mathbf{s}(k)$ 的方程，由于这个方程只能耦合 x 和 z 方向的自旋极化，故可以记 $\mathbf{s}(k, t) = \begin{pmatrix} s^x(k, t) \\ s^z(k, t) \end{pmatrix}$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{s}(k, t) = -2\alpha k \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{s}(k, t) - \frac{1}{\tau_p(k)} [\mathbf{s}(k, t) - \mathbf{s}(-k, t)] . \quad (6.51)$$

通过联立 $\mathbf{s}(\pm k, t)$ 的方程，即

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + 2\alpha k \begin{pmatrix} y_k & 1 & -y_k & 0 \\ -1 & y_k & 0 & -y_k \\ -y_k & 0 & y_k & -1 \\ 0 & -y_k & 1 & y_k \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \mathbf{s}(k, t) \\ \mathbf{s}(-k, t) \end{pmatrix} = 0 . \quad (6.52)$$

其中 $y_k = \frac{1}{x_k} = \frac{1}{2\alpha k\tau_p(k)}$ 。在初始条件为沿着 z 方向分布极化时，即

$$\mathbf{s}(k, 0) = \mathbf{s}(-k, 0) = \begin{pmatrix} 0 \\ f(\varepsilon_k - \mu) \end{pmatrix}. \quad (6.53)$$

可以求解出

$$\mathbf{s}(\pm k, t) = \begin{pmatrix} \mp \frac{2\alpha k\tau_p(k)}{\sqrt{1-[2\alpha k\tau_p(k)]^2}} \sinh\left(\frac{t}{\tau_p(k)/\sqrt{1-[2\alpha k\tau_p(k)]^2}}\right) \\ \cosh\left(\frac{t}{\tau_p(k)/\sqrt{1-[2\alpha k\tau_p(k)]^2}}\right) + \frac{\sinh\left(\frac{t}{\tau_p(k)/\sqrt{1-[2\alpha k\tau_p(k)]^2}}\right)}{\sqrt{1-[2\alpha k\tau_p(k)]^2}} \end{pmatrix} e^{-\frac{t}{\tau_p(k)}} f(\varepsilon_k - \mu). \quad (6.54)$$

可以看出，和两维系统的结果一样，对于强散射和弱散射，量子线中电子自旋给出不一样的弛豫过程。不过这里

1. 强散射区域: $2\alpha k\tau_p(k) < 1$ 。自旋弛豫时间为 $\tau_s(k) = \frac{\tau_p}{1-\sqrt{1-[2\alpha k\tau_p(k)]^2}}$ 。
2. 弱散射区域: $2\alpha k\tau_p(k) > 1$ 。自旋弛豫时间为 $\tau_s(k) = \tau_p(k)$ ，不过此时自旋极化进动频率为 $\omega_k = \frac{\sqrt{1-[2\alpha k\tau_p(k)]^2}}{\tau_p}$ 。

6.4 小结

我们通过闭路格林函数方法建立了受限系统的动力学自旋 Bloch 方程，分别给出了 Collinear 表象和 Helix 表象下的表达形式。同时也讨论 Collinear 统计和 Helix 统计下动力学自旋 Bloch 方程的异同点。对于量子阱和量子线系统，在只考虑电子-杂质散射时方程可以解析的求解，它们表明用非均匀扩展的观点会对自旋弛豫过程给出一个完整的描述。

第七章 量子线系统中自旋弛豫和自旋调控

本章我们研究了 InAs 量子线中由 Rashba 自旋轨道耦合引起的电子自旋弛豫。在对两种不同位型下的自旋去相位时间进行研究以后，我们发现对于给定大小的磁场，在其中一种位型（自旋极化方向沿着量子线方向而外加磁场方向垂直于量子线方向）下自旋去相位时间可以由界面电场的方向调控；然而在另外一种位型（自旋极化方向垂直于量子线方向而外加磁场方向沿着量子线方向）下自旋去相位时间与界面电场的方向无关。量子线中的自旋去相位可以用 Rashba 自旋轨道耦合给出的非均匀扩展和自旋守恒散射的共同作用来理解。这里我们指出在量子线系统中非均匀扩展可以由自旋进动频率的均方差描述，以帮助我们进一步理解量子线系统中由 Rashba 自旋轨道耦合引起的多体效应。

7.1 模型

我们所研究的量子线系统是用宽度为 a 的无限深方势阱约束的 InAs 纳米结构，见示意图 7-1。由于量子线在两个方向上有约束，需要两个量子数 n 和 m 来表示每个约束方向的波函数。而沿着量子线方向电子可以自由运动，可以用动量 $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{e}}_w$ 描述，其中 $\hat{\mathbf{e}}_w$ 为量子线的生长方向。在量子线线宽 a 足够小以及电子浓度比较低时，所有的电子都占据在最低的一个子带 $n, m = 1$ 上，高子带的贡献可以忽略不计。这两个方向的最低子带的子带波函数都由式 (2.52) 给出。在 InAs 材料中，自旋轨道耦合相互作用主要是 Rashba 相互作用，给出有效磁场

$$\boldsymbol{\Omega}(k) = \alpha_0 k \mathbf{E} \times \hat{\mathbf{e}}_w, \quad (7.1)$$

\mathbf{E} 是界面电场，它的方向和量子线生长方向垂直，并且可以通过两个约束方向的门电压任意调节。因此在量子线系统中，不仅仅电场的大小，而且电场的方向都可以在垂直于量子线方向的平面内任意调节。由于电子的运动方向只能沿着量子线方向，因此在固定了界面电场以后，Rashba 自旋轨道耦合在不同动量下给出的有效磁场的方向是固定的，沿着方向 $\mathbf{E} \times \hat{\mathbf{e}}_w$ ，与界面电场以及量子线生长方向都垂直。在下面的研究中，我们始终把自旋极化的方向定为 z 方向，外加磁场方向为 x 方向。我们考虑两种不同的位型：(i) 见图 7-1 (a)。自旋极化方向沿着量子线生长方向，此时自旋轨道耦合导致的有效磁场 $\boldsymbol{\Omega}$ 和外加磁场的方向都是垂直于自旋极化方向；电场和有效磁场分别给出： $\mathbf{E} = E(\sin \theta, \cos \theta, 0)$ 和 $\boldsymbol{\Omega}(k) = \alpha_0 E k (\cos \theta, -\sin \theta, 0)$ 。(ii) 见图 7-1 (b)。

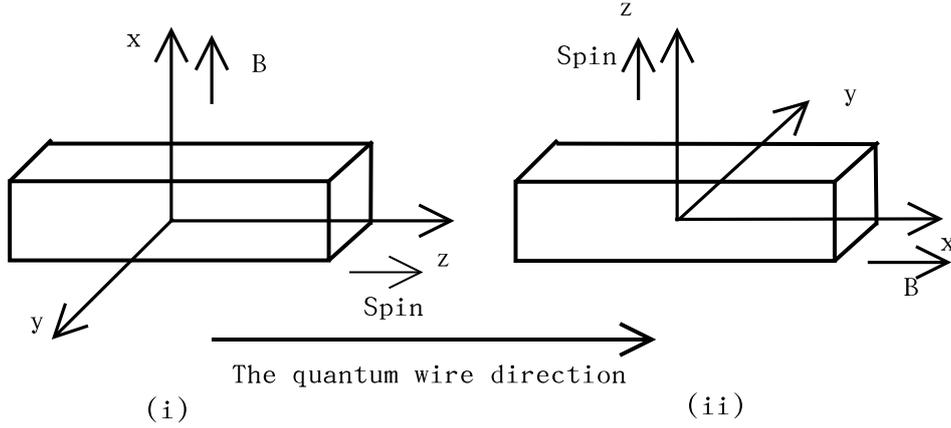


图 7-1: 我们所研究的两种不同的位型: (a) 自旋极化方向沿着量子线生长方向, 此时自旋轨道耦合导致的有效磁场和外加磁场的方向都是垂直于自旋极化方向; (b) 自旋极化方向和量子线生长方向垂直, 此时外加磁场方向沿着量子线生长方向。在两种位型下, 我们都把自旋极化的方向定为 z 方向, 外加磁场方向为 x 方向。

自旋极化方向和量子线生长方向垂直, 此时外加磁场方向沿着量子线生长方向, 给出: $\mathbf{E} = E(0, \cos \theta, \sin \theta)$, $\mathbf{\Omega}(k) = \alpha_0 k E(0, -\sin \theta, \cos \theta)$ 。其中 θ 给出电场和 y 轴的夹角。

动力学自旋 Bloch 方程由公式 (6.45) 给出,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_k(t) + i[(\mathbf{\Omega}(k) + g^* \mu \mathbf{B}/2) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathcal{E}_{\text{HF}}(k), \rho_k(t)] = \left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_k(t) \right|_{\text{scatt}}. \quad (7.2)$$

其中 $\rho_k(t) = \begin{pmatrix} f_{k\uparrow} & \rho_k \\ \rho_k^* & f_{k\downarrow} \end{pmatrix}$ 是空间均匀系统的单粒子密度。Hartree-Fock 项由式 (6.46) 给出

$$\mathcal{E}_{\text{HF}}(k) = - \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \rho_{k-\mathbf{q}}(t)$$

其中

$$V_{\mathbf{q}} = \sum_{q_x, q_y} v(\mathbf{Q}) I(q_x) I(q_y) I(-q_x) I(-q_y).$$

这里 $\mathbf{Q} = (q_x, q_y, q)$ 。我们考虑高温 ($T > 120 \text{ K}$) 下的自旋弛豫, 散射项中只考虑了电子-LO 声子之间的散射, 由式 (6.47) 给出

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_k(t) \right|_{\text{scatt}}^{\text{LO}} &= -\pi \sum_{\mathbf{Q}} |g_{\mathbf{Q}}^{\text{LO}}|^2 \left\{ \delta(\varepsilon_{k-\mathbf{q}} - \varepsilon_k + \omega_{\mathbf{Q}}) [N_{\mathbf{Q}}(1 - \rho_{k-\mathbf{q}}) \rho_k - (1 + N_{\mathbf{Q}}) \rho_{k-\mathbf{q}}(1 - \rho_k)] \right. \\ &\quad \left. + \delta(\varepsilon_{k-\mathbf{q}} - \varepsilon_k - \omega_{\mathbf{Q}}) [(1 + N_{\mathbf{Q}})(1 - \rho_{k-\mathbf{q}}) \rho_k - N_{\mathbf{Q}} \rho_{k-\mathbf{q}}(1 - \rho_k)] \right\} + \left\{ \dots \right\}^\dagger. \quad (7.3) \end{aligned}$$

其中散射矩阵元 $|g_{\mathbf{Q}}^{\text{LO}}|^2 = \frac{\alpha \Omega_{\text{LO}}^{3/2}}{\sqrt{2\mu} \mathbf{Q}^2} I(q_x) I(-q_x) I(q_y) I(-q_y)$ 以及 $\alpha = e^2 \sqrt{\mu / (2\Omega_{\text{LO}})} (\epsilon_{\infty}^{-1} - \epsilon_0^{-1})$, 声子分布函数 $N_{\mathbf{Q}} = \frac{1}{e^{\beta \Omega_{\text{LO}} - 1}}$, 其中 Ω_{LO} 给出 LO 声子的能谱。

7.2 结果

方程 (7.2) 是非线性微分方程组, 需要用数值方法自洽求解。给定初始分布:

$$\begin{aligned} \rho_k(0) &= 0, \\ f_{k\sigma}(0) &= \frac{1}{1 + e^{(\epsilon_k - \mu_{\sigma})/k_B T}}. \end{aligned} \quad (7.4)$$

其中 μ_{σ} 是自旋为 σ 的电子的初始化学势, 它由电子初始浓度决定。计算中使用的参数如下: 温度 $T = 150$ K, 阱宽 $a = 15$ nm, 电子浓度 $N_e = 5.3 \times 10^{16}$ cm $^{-3}$, 电场 $E = 1.4 \times 10^4$ V/cm 和 Rashba 耦合系数 $\alpha_0 = 110$ e \cdot \AA 2 , LO 声子的能量 $\Omega_{\text{LO}} = 28.5$ meV, 有效 g 因子 $g^* = 15.$, 屏蔽常数 $\epsilon_{\infty} = 12.25$ 以及 $\epsilon_0 = 15.15$ 。根据第3章的介绍, 我们用自旋相干的非相干求和 $\rho(t) = \sum_k |\rho_k(t)|$ 的包络线的指数衰减给出自旋去相位时间。

图 7-2 和 7-3 给出了两种不同位型 (i) 和 (ii) 中自旋弛豫时间随着外加电场方向的变化结果。我们可以发现在位型 (i) 中当 Rashba 有效磁场方向和外加磁场方向夹角 $\theta < 60^\circ$ 时, 自旋去相位时间对外加磁场和电场的角度的依赖很小。当 $60^\circ < \theta < 90^\circ$ 自旋去相位时间随着磁场和电场的角度快速增加。比如在外磁场 $B = 2$ T 时, 在 $\theta = 90^\circ$ 时的自旋去相位时间是 $\theta = 60^\circ$ 的 3 倍。并且外加磁场越大, 自旋去相位时间随着电场角度增加的越快。在 $\theta = 90^\circ$ 附近时的时候, 自旋去相位时间随着外磁场增加而增加。然而位型 (ii) 中的自旋弛豫却给出完全不同的结果, 调节外加电场的方向时, 自旋去相位的时间不变, 且其值和位型 (i) 中在 $\theta = 90^\circ$ 的结果几乎一样。

这种自旋去相位时间的电场方向依赖关系可以用第3章中的介绍的非均匀扩展引起的自旋去相位来理解。在量子线系统中, 自旋去相位来源于由 Rashba 自旋轨道耦合所提供的自旋极化进动方向和角度的非均匀展宽。在前面已经指出, 在有非均匀展宽的系统中, 任何一种散射, 即使是自旋守恒散射, 也会造成不可逆的自旋去相位。对于量子线系统, 我们可以用如下的估计给出非均匀扩展的大小: 量子线中的电子自旋感受到 Rashba 自旋轨道耦合给出的有效磁场和外加磁场的合磁场的作用, 从而围绕着这个合磁场做 Lamor 进动。由于 Rashba 有效磁场是电子动量依赖的, 对于不同大小的电子动量电子的 Lamor 进动的频率不一样, 这正是非均匀扩展的来源。因此我们很自然的就会想到用 Lamor 进动的频率的均方差来表示非均匀扩展。从这种观点出发, 我们计算 Lamor 进动频率的均方差如下:

$$\begin{aligned} \Delta^2 &= \langle (g\mu_B B + 2\alpha_0 E k \cos \phi)^2 + (2\alpha_0 E k \sin \phi)^2 \rangle \\ &\quad - \langle \sqrt{(g\mu_B B + 2\alpha_0 E k \cos \phi)^2 + (2\alpha_0 E k \sin \phi)^2} \rangle^2 \end{aligned} \quad (7.5)$$

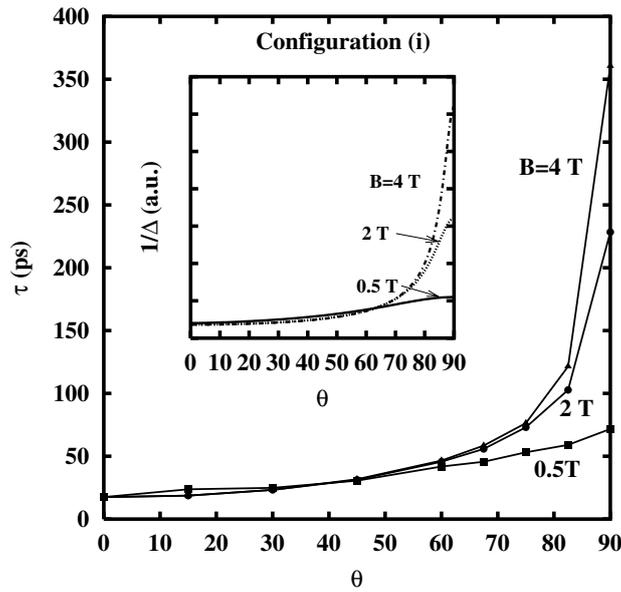


图 7-2: 位型 (i) 中自旋去相位时间在不同磁场下随着外加电场的方向的变化。其中 (■) $B=0.5$ T, (●) $B=2$ T 和(▲) $B=4$ T。插图给出电子感受到的有效磁场对动量的均方差。

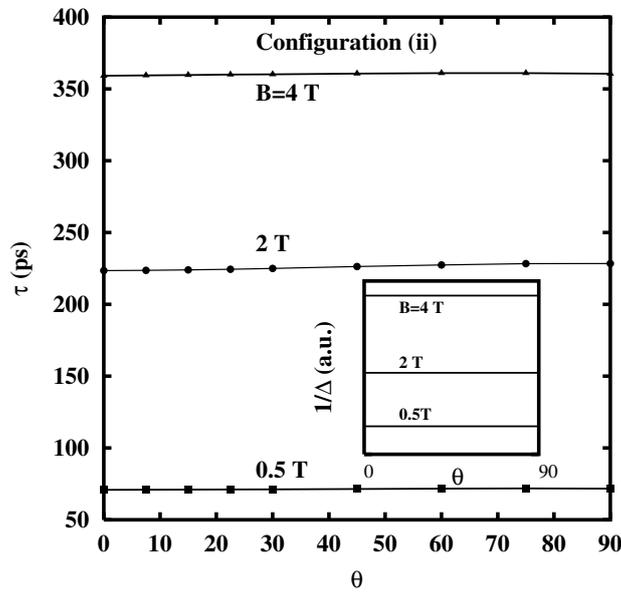


图 7-3: 位型 (ii) 中自旋去相位时间在不同磁场 $B=0.5$ 、 2 和 4 T 下随着外加电场的方向的变化。其中 (■) $B=0.5$ T, (●) $B=2$ T 和(▲) $B=4$ T。插图给出电子感受到的有效磁场对动量的均方差。

其中 ϕ 是 \mathbf{B} 和 $\Omega(\mathbf{k})$ 之间的夹角，在位型 (i) 中给出 $\phi = \theta$ 以及位型 (ii) 中 $\phi \equiv 90^\circ$ 。 $\langle \dots \rangle$ 表示对自旋极化分布求平均：

$$\langle A(k) \rangle = \frac{\int dk (f_{k\uparrow} - f_{k\downarrow}) A(k)}{\int dk (f_{k\uparrow} - f_{k\downarrow})}. \quad (7.6)$$

在图 7-2 和 7-3 的插图中，我们分别给出两种不同位型下的 $1/\Delta$ 随着外加电场角度 θ 的变化。从图上很容易看出， $1/\Delta$ 和自旋去相位时间 τ 的变化趋势几乎一样：对于位型 (i)，在 $\theta < 60^\circ$ 时 $1/\Delta$ 几乎不变化，然后快速的随着 θ 和外磁场的增加而增加；对于位型 (ii)， $1/\Delta$ 不随 θ 变化，并且它的值和位型 (i) 中对应 $\theta = 90^\circ$ 的情况一样。因此在比较了 $\tau - \theta$ 和 $1/\Delta - \theta$ 关系以后可以知道，自旋去相位时间完全是由非均匀扩展决定的。同时，位型 (i) 下的 $\tau - \theta$ 的非线性性质也可以从非均匀扩展中得到理解：当外加磁场要远比 Rashba 产生的有效磁场大的时候， Δ 可以化作：

$$\Delta^2 = \langle (2\alpha_0 E k)^2 \rangle \cos^2 \theta + \frac{1}{4(g\mu_B B)^2} \{ \langle (2\alpha_0 E k)^4 \rangle [1 - 6 \cos^2 \theta + 5 \cos^4 \theta] - \langle (2\alpha_0 E k)^2 \rangle^2 \sin^4 \theta \}. \quad (7.7)$$

其中第二项的值很小，可以忽略。因此当 $\theta \sim 90^\circ$ 时， $1/\Delta \sim 1/\cos \theta$ 给出自旋去相位时间在 $\theta < 60^\circ$ 是变化缓慢而在 $\theta > 60^\circ$ 是快速变化，和自旋去相位时间随着电场方向的变化一致。

第八章 等强度 Dresselhaus 项和 Rashba 项 的 GaAs 量子阱中自旋弛豫

本章我们讨论了两种不同基态对电子自旋弛豫的影响：一种是考虑了自旋轨道耦合对基态的影响，即 Helix 统计；另外一种是没有考虑自旋轨道耦合对基态的影响，即 Collinear 统计。通过在具有等强度的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的 GaAs 量子阱中数值求解动力学自旋 Bloch 方程，得到两种统计下的自旋时间演化，我们发现这两种统计下的自旋弛豫时间几乎没有差别。同时在等强度的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合系统中，不同自旋极化方向的自旋弛豫表现出很强的各向异性：在没有考虑 Dresselhaus 项的三次方项的贡献的时候，沿着 (110) 方向的自旋弛豫时间是无穷长，而其它方向两个方向 (001) 和 $(\bar{1}10)$ 的自旋弛豫时间却非常短；即使考虑了三次方项的贡献，(110) 方向的自旋极化的自旋弛豫时间变为有限长，但是仍然要远远大于另外两个方向的弛豫时间。紧接着，我们研究了 (110) 方向的自旋弛豫时间的温度、电子浓度和量子阱阱宽依赖关系，这些结果都可以由非均匀扩展引起的自旋弛豫机制很好的解释。

8.1 理论模型

在阱宽为 a 的 GaAs 量子阱系统中，我们按照第 6.2 节对其中电子自旋建立动力学方程。在本章我们研究空间均匀系统中分别在 Collinear 统计以及 Helix 统计下的自旋弛豫，我们将运动方程写在 Collinear 表象如下：

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(t) = -i[\mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathcal{E}_{\text{HF}}, \rho_{\mathbf{k}}(t)] + \left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(t) \right|_{\text{scat}}. \quad (8.1)$$

右边第一项是相干项，决定着电子进动的频率。其中 Hartree-Fock 项 $\mathcal{E}_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = -\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ 满足

$$\sum_{\mathbf{k}} \left[\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}, \rho_{\mathbf{k}} \right] = 0. \quad (8.2)$$

由此可见，Hartree-Fock 项不会引起电子系统的自旋翻转，但是它提供了一个动量依赖的有效磁场

$$\frac{1}{2} g \mu_B \mathbf{B}_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = -\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}, \quad (8.3)$$

其中自旋极化 $\mathbf{S}_{\mathbf{k}} = \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}\boldsymbol{\sigma}]/2$ 。可见磁场的大小是和自旋极化成正比，故 Hartree-Fock 项在小极化条件下的贡献不大，但是在高极化条件下有非常重要的贡献。自旋翻转机制主要来源于自旋轨道耦合作用，其有效磁场 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 给出，

$$\mathbf{h}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\Omega}^R(\mathbf{k}) + \boldsymbol{\Omega}^D(\mathbf{k}) . \quad (8.4)$$

其中同时包括 Dresselhaus 项以及 Rashba 项的贡献，即

$$\boldsymbol{\Omega}^R(\mathbf{k}) = \alpha \begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\Omega}^D(\mathbf{k}) = \gamma \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \begin{pmatrix} -k_x \\ k_y \\ 0 \end{pmatrix} + \gamma k_x k_y \begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (8.5)$$

并且我们始终取两项的系数 $\alpha \equiv \beta = \gamma(\pi/a)^2$ ，这个条件可以通过使用门电压调节 Rashba 自旋轨道耦合的强度来实现。其中线性项自旋轨道耦合对应的有效磁场为

$$\mathbf{h}_l(\mathbf{k}) = \sqrt{2}\beta(k_y - k_x)\hat{\mathbf{n}}_1 , \quad (8.6)$$

其中 $\hat{\mathbf{n}}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 。由此可见自旋轨道耦合线性项给出的有效磁场的方向与动量无关，始终沿着 $\hat{\mathbf{n}}_1$ 方向。

散射项倾向于将系统从非平衡态耗散到统计相关的平衡态 $\rho_0(\mathbf{k})$ ，其中 Collinear 统计和 Helix 统计下 ρ_0 分别由公式 (6.29) 和 (6.30) 给出。因此散射项表达式是与系统采用的统计有关，其中在 Collinear 统计下的散射项由式 (6.31) 给出，Helix 统计下的散射项由式 (6.24) 给出，同时考虑了电子-非磁性杂质散射、电子-LO 声子散射以及电子-电子库仑散射。在给定的统计下，当系统处在相应的平衡态，即 $\rho_{\mathbf{k}} = \rho_0(\mathbf{k})$ 时，很容易验证对任何的动量 \mathbf{k} 而言，散射项都是零，即：

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(t) \right|_{\text{scat}, \rho_{\mathbf{k}} = \rho_0} = 0 . \quad (8.7)$$

在没有外场驱动的时候，在系统达到平衡分布 ρ_0 时，方程 (8.1) 中任何一项都是零。

对于自旋守恒散射项，无论是哪一种统计下都很容易得到

$$\sum_{\mathbf{k}} \left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(t) \right|_{\text{scat}} = 0 . \quad (8.8)$$

由方程 (8.1) 可以得到总的自旋极化 $S_{\hat{\mathbf{n}}} = \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ ，其中 $\mathbf{S} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}}$ ，所满足的方程

$$\frac{\partial}{\partial t} S_{\hat{\mathbf{n}}} + i \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr}([H_R + H_D, \rho_{\mathbf{k}}] \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = 0 , \quad (8.9)$$

在只考虑自旋轨道耦合的线性项时,

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}([\mathbf{h}_l(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \rho_{\mathbf{k}}] \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) &= \sqrt{2}\beta(k_y - k_x)\mathrm{Tr}([\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}, \rho_{\mathbf{k}}] \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \\ &= 4\sqrt{2}i\beta(k_y - k_x)(\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{n}}_1) \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}}.\end{aligned}\quad (8.10)$$

因此对于沿着 $\hat{\mathbf{n}}_1$ 方向的自旋极化 $S_{\hat{\mathbf{n}}_1}$ 而言, 系统的总自旋极化将不会弛豫

$$\frac{\partial}{\partial t} S_{\hat{\mathbf{n}}_1} = 0.$$

这是因为在只考虑自旋轨道耦合的线性项时, $\hat{\mathbf{n}}_1$ 方向的自旋极化和自旋轨道耦合提供的有效磁场 \mathbf{h}_l 方向一样, 电子自旋将不会进动, 没有任何的非均匀扩展, 从而系统自旋极化不会弛豫。

8.2 计算结果

在考虑了 Dresselhaus 项的三次方项的贡献以后, 任何一个方向的自旋极化都会弛豫。这时因为三次方向自旋轨道耦合导致的有效磁场的方向依赖与动量 \mathbf{k} 的方向, 任何一个方向的自旋极化都会感受到非均匀扩展, 在散射的作用下就会弛豫。在下面我们分

别研究三个方向的自旋极化的时间演化: $\hat{\mathbf{n}}_1, \hat{\mathbf{n}}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 以及 $\hat{\mathbf{z}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 。即使在

只考虑自旋轨道耦合线性项的贡献的时候, $\hat{\mathbf{n}}_1$ 方向的自旋极化不会弛豫, 但是另外两个方向的自旋极化的弛豫时间是有限的。同时, 不同的统计对自旋弛豫时间的影响也是不清楚的。下面我们通过数值求解方程 (8.1) 来比较这个差别。

8.2.1 数值处理方法

在数值计算中, 如何数值处理散射项是一个难点。对于 Collinear 统计, 文献 [147] 中仔细给出了如何在动量空间分割以及如何处理电子-杂质散射、电子-LO声子散射以及驱动项。对于散射项的处理, 要点是要保证散射项所满足的对称性 (8.7) 和 (8.8), 分别用来保证粒子数守恒和系统可以演化到对应统计下的平衡态。在对 Collinear 统计下对能量和角度 (k^2, θ) 平均分割, 自旋两支对应的分割点是相同的, 这种分割下散射项中的 δ 函数可以积掉并且不破坏对称性。电子-杂质散射和电子-LO声子散射很容易满足上面提到的两个对称性; 对于库仑散射, 虽然散射项中每个密度矩阵对应的能量都可以严格的落到分割点上, 但是角度不一定可以落到分割点上, 需要对角度进行插值。由于库仑散射的复杂度很高, 导致计算速度很慢。我们给出一种新的数值处理库仑散射的方法, 在没有降低计算精度的情况下大大提高了数值计算速

度，具体见附录 D。无论如何，对于 Collinear 统计下的数值计算，给出的计算结果在定量上是可以得到保证的。

然而在 Helix 统计下，由于两支自旋对应的能谱不再简并，按照能量分割对两支自旋给出不同的分割格点，如果仍然把散射项中的 δ 函数积掉的话，则不再能严格保证散射项所满足的对称性，不仅会大大的降低计算精度，还会导致方程的稳定性变差，不容易收敛。因此对于 Helix 统计下的散射项的处理，我们将 δ 函数用高斯分布 $\delta(x) = \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{e^{-x^2/\sigma^2}}{\sqrt{\pi}\sigma}$ 代替。在我们给定的分割中，对应能量分割间距 ΔE ，选取高斯展宽 $\sigma = 0.5\Delta E$ ，在比较多的分割格点下，计算精度可以在一定程度上保证。因此这种方法不仅仅需要多计算一重积分，并且还需要大量的分割格点，从而计算速度非常的慢。

对于沿着方向 $\hat{\mathbf{n}}$ 的自旋极化的时间演化，我们采用初始分布：

$$\rho_{\mathbf{k}}(t=0) = \frac{1}{2} \left[\sum_{\xi=\pm 1} f(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu_{\xi}) + \sum_{\xi=\pm 1} \xi f(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu_{\xi}) \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]. \quad (8.11)$$

这个条件是统计相关的，给出的自旋极化沿着方向 $\hat{\mathbf{n}}$ 。通过总的电子浓度 $N_e = \sum_{\mathbf{k}, \xi} f_{\mathbf{k}, \xi}$ 以及自旋极化率 $P = S_{\hat{\mathbf{n}}}/N_e$ ，可以得到化学势 μ_{ξ} ，从而给出具体的初始分布。在下文中，我们始终取 $N_e = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 和 $P = 5\%$ 。GaAs 材料的其它参数如下：有效质量 $m^* = 0.067 m_0$ ，其中 m_0 是自由电子质量；介电常数 $\kappa_{\infty} = 10.8$ 和 $\kappa_0 = 12.9$ ；LO 声子能量 $\Omega_{\text{LO}} = 35.4 \text{ meV}$ ；Dresselhaus 自旋轨道耦合常数 $\gamma = 25 \text{ meV} \cdot \text{\AA}^3$ ；除了特别说明以外，量子阱的阱宽取 $a = 5 \text{ nm}$ 。

8.2.2 两种统计下自旋极化的时间演化

在图 8-1 中我们给出沿着不同方向 $\hat{\mathbf{z}}$ (图 (a))、 $\hat{\mathbf{n}}_1$ (图 (b)) 以及 $\hat{\mathbf{n}}_2$ (图 (c)) 的自旋极化在 Collinear 统计 (实线) 和 Helix 统计 (虚线) 下的时间演化结果。在计算中我们只考虑电子-杂质散射和电子-LO 声子散射，其中杂质的浓度取为 $N_i = 0.5N_e$ 。在比较这两种统计下的时间演化结果时，我们没有考虑电子-电子库仑散射，因为在 Helix 态下库仑散射的计算需要大量的 CPU 时间，并且对于电子-杂质散射和电子-LO 声子散射已经可以大致反应两种不同统计下数值结果的差别。

从图上可以看出，在考虑了 Dresselhaus 三次方向的贡献以后， $\hat{\mathbf{n}}_1$ 方向的自旋弛豫时间变为有限值 (几百 ps)，但是仍然要比其它两个垂直的方向 $\hat{\mathbf{z}}$ 和 $\hat{\mathbf{n}}_2$ 的弛豫时间 (小于 1 ps) 要长的多。这个结果来源于自旋轨道耦合产生的有效磁场具有很强的各向异性：我们知道，在高温下如果没有外磁场的时候，自旋极化将不会振荡并且一直沿着初始极化方向；而在文献 [343] 中指出，强散射下每一个动量的自旋极化的时间演化都保持同样的相位。因此对于沿着方向 $\hat{\mathbf{n}}$ 的自旋极化，只有沿着垂直于这个方向的有效磁场

$$\mathbf{h}_{\hat{\mathbf{n}}}^{\perp} = \mathbf{h}(\mathbf{k}) - \mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{n}} \hat{\mathbf{n}}$$

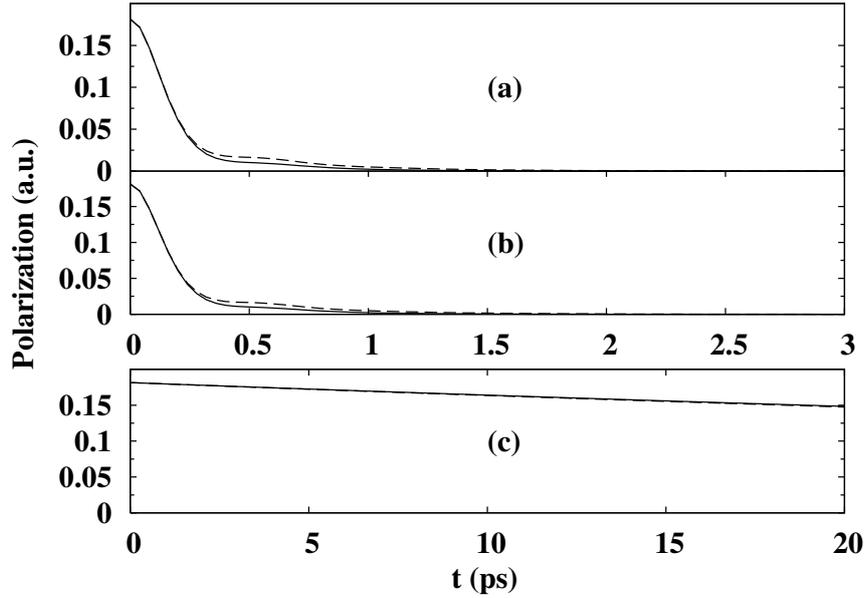


图 8-1: 沿着方向 (a) \hat{z} 、(b) \hat{n}_2 以及 (c) \hat{n}_1 的自旋极化的在两种统计下的时间演化。其中电子浓度取 $N_e = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, 杂质浓度 $N_i = 0.5N_e$ 以及温度 $T = 200 \text{ K}$ 。图中实线给出 Collinear 统计下的结果, 虚线给出 Helix 统计下的结果。

才能翻转自旋从而对非均匀扩展以及自旋弛豫有贡献。在当前同时考虑了 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的情况下, 不同方向的 $\mathbf{h}_{\hat{n}}^{\perp}$ 有着非常大的差别: (i) 对于方向 \hat{n}_1 , $\mathbf{h}_{\hat{n}_1}^{\perp} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\gamma k_x k_y (k_x + k_y)\hat{n}_2$; (ii) 对于沿着方向 \hat{n}_2 , $\mathbf{h}_{\hat{n}_2}^{\perp} = (\sqrt{2}\beta + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma k_x k_y)(k_y - k_x)\hat{n}_1$; (iii) 对于沿着方向 \hat{z} , $\mathbf{h}_{\hat{z}}^{\perp} = \mathbf{h}(\mathbf{k})$ 。由于量子阱的阱宽非常窄, 故 $\beta \gg \gamma k_x k_y$, 因此有效的自旋翻转磁场中 $\mathbf{h}_{\hat{n}_1} \ll \mathbf{h}_{\hat{n}_2} \sim \mathbf{h}_{\hat{z}}$, 导致在自旋极化沿着方向 \hat{n}_1 时的非均匀扩展最小, 给出最长的自旋弛豫时间, 而其它两个方向给出较短的自旋弛豫时间。因此在等强度的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合下, 系统的自旋弛豫时间沿着各个方向表现出极大的各向异性。后来, Stich 等人 [161] 在有不等强度的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合系统化总也发现了各向异性, 同时发现此时的磁场依赖关系非常复杂, 不同方向的自旋弛豫时间随着磁场变化不再是单调上升 [52, 69, 329], 而是有一个振荡。

图上也同时给出了 Collinear 统计 (实线) 和 Helix 统计 (虚线) 下的自旋弛豫随时间的演化。可以看出沿着 \hat{n}_1 方向自旋极化的自旋弛豫过程在两种不同的统计下几乎一样, 而另外两个方向的自旋极化的自旋弛豫过程在经历了一开始的快速衰减—这是由于这两个方向 $\mathbf{h}_{\hat{n}}^{\perp}$ 要远比 $\mathbf{h}_{\hat{n}_1}^{\perp}$ 要大, 自旋进动导致相干相消的结果—以后, 两种统计下的自旋弛豫时间只有很小的差别, 对总的自旋弛豫时间几乎没有影响。由此可知, 即使自旋轨道耦合非常强的条件下, 两种统计下的自旋弛豫时间几乎没有区别, 统计几乎不会影响自旋极化的时间演化过程。

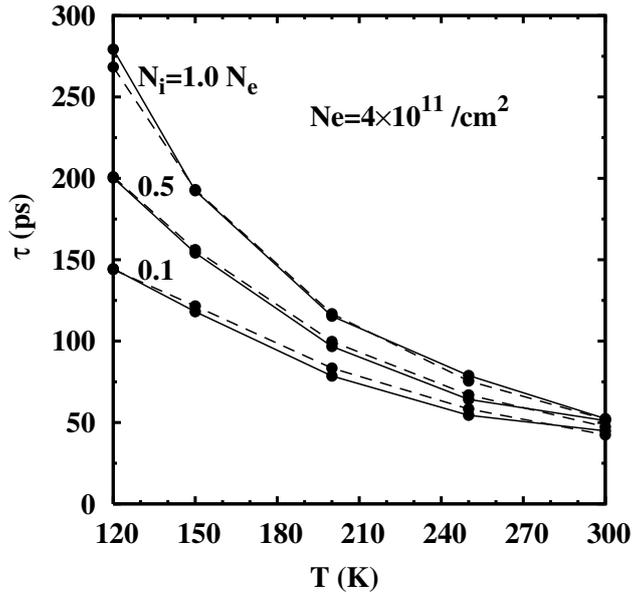


图 8-2: 两种统计下 (110) 方向的自旋弛豫时间在不同的杂质浓度 $N_i = 0.1N_e$, $0.5N_e$ 以及 $1.0N_e$ 时随着温度的变化。实线: Collinear 统计; 虚线: Helix 统计。

8.2.3 两种统计下 (110) 方向自旋弛豫时间的比较

现在我们比较两种统计下沿着方向 \hat{n}_1 的自旋弛豫时间, 结果见图 8-2, 其中实线和虚线分别给出 Collinear 统计和 Helix 统计下的自旋弛豫时间, 在计算中我们仍然只考虑电子-杂质散射以及电子- LO 声子散射。这里我们取杂质浓度为 $N_i = 0.1N_e$, $0.5N_e$ 以及 $1.0N_e$, 温度从 120 K 变化到 300 K。从图上可以看出, 沿着 (110) 方向的自旋弛豫时间随着温度的升高而变短, 并且随着杂质浓度的升高而变长。这个结果可以和以前的结果一致 [52, 147, 332, 334], 都可以非均匀扩展来解释: 由于沿着 (110) 方向的非均匀扩展主要来源于 $\mathbf{h}_{\hat{n}_1}^{\perp}$, 这一项是动量的三次方项。在温度升高的过程中, 电子在动量空间的分布更广, 从而给出更大的非均匀扩展, 使自旋弛豫时间变短; 然而同时温度升高散射项也变强, 将会进一步抑制非均匀扩展, 从而使自旋弛豫时间变长, 这两种效应给出一个竞争效应 [52, 332, 334]。对于三次方项的自旋轨道耦合, 非均匀扩展随温度变大的更快, 从而使自旋弛豫时间变短。随着杂质浓度的升高散射变强, 自旋弛豫时间变长。

从这里的结果可以看出, 即使在不同的温度以及杂质浓度下, 自旋弛豫时间在 Collinear 统计和 Helix 统计下也几乎没有差别。虽然在计算过程中由于在 Helix 统计下计算速度的问题没有考虑电子-电子散射, 但是从包括了电子-杂质散射和电子- LO 声子散射的结果来看, 我们有理由相信即使考虑了电子-电子散射, 这两种统计下的自旋弛豫时间也没有差别。但是最近的研究表明 [52, 53, 311, 312, 327, 330, 332, 334], 电子-电子散射对自旋弛豫有非常大的影响, 并且由于两种统计下的自旋弛豫过程几乎一样, 因此接下来我们考虑在 Collinear 统计下-可以定量的数值处理电子-电子散射-加入了电子-电子散射以后自旋弛豫时间随着外界条件变化的结果。

8.2.4 Collinear 统计下考虑了库仑散射的 (110) 方向自旋弛豫时间

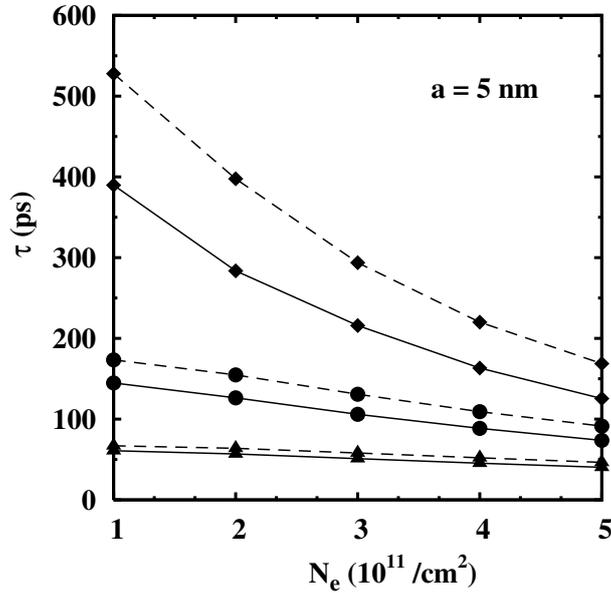


图 8-3: Collinear 统计下 (110) 方向的自旋弛豫时间在不同的杂质浓度 $N_i = 0$ (实线), $0.5N_e$ (虚线) 以及不同的温度 $T = 120 \text{ K}$ (◆), 200 K (●) 以及 300 K (▲) 时随着电子浓度的变化。这里我们考虑所有的散射。

在图 8-3 中我们给出 (110) 方向的自旋弛豫时间随着电子浓度变化的结果。实线和虚线分别对应着是没包括以及包括了电子杂质散射 $N_i = 0.5N_e$, 其中温度取为 $T = 120 \text{ K}$ (◆), 200 K (●) 和 300 K (▲)。通过和图 8-2 的结果比较, 很容易看出在考虑了电子电子散射以后, 自旋弛豫时间变长, 这是和以前的结果一致的 [52, 147, 332]: 随着散射变强, 非均匀扩展被进一步抑制, 从而使自旋弛豫时间变长。从图上可以看出, 随着电子浓度的增加, 自旋弛豫时间变小, 并且减小的比例随着温度的升高而变小。这一点仍然可以用非均匀扩展理解 [51]: 对于高电子浓度, 电子将占据在更大的动量上, 导致非均匀扩展变大从而给出较小的自旋弛豫时间。然而, 当温度足够高时, 即使在电子浓度比较小时电子也会占据到大动量上, 从而非均匀扩展变得对电子浓度不再敏感, 导致在高温下自旋弛豫时间和电子浓度关系不大。

图 8-4 给出 (110) 方向的自旋弛豫时间随着量子阱阱宽变化的结果。实线和虚线分别表示电子浓度为 $N_e = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 和 $4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, 其中温度取为 $T = 120 \text{ K}$ (●) 和 300 K (▲), 杂质浓度取为零。在计算过程中, 我们始终保证 $\beta \equiv \alpha$, 因此在量子阱的阱宽变化的时候, 我们同时要调节量子阱的门电压, 从而使 Rashba 自旋轨道耦合的强度和 Dresselhaus 自旋轨道耦合的线性项的强度相同。从图上可以看出, 自旋弛豫时间随着量子阱的阱宽变宽而减小, 这和以前只考虑了 Dresselhaus 自旋轨道耦合的 (001) 方向的自旋弛豫时间 [52, 332, 334] 相反: 在只考虑一个子带时, 随着量子阱的阱宽变大, 自旋轨道耦合由于是线性项 $\beta \propto (\pi/a)^2$ 占主导而变弱, 从而导致非均

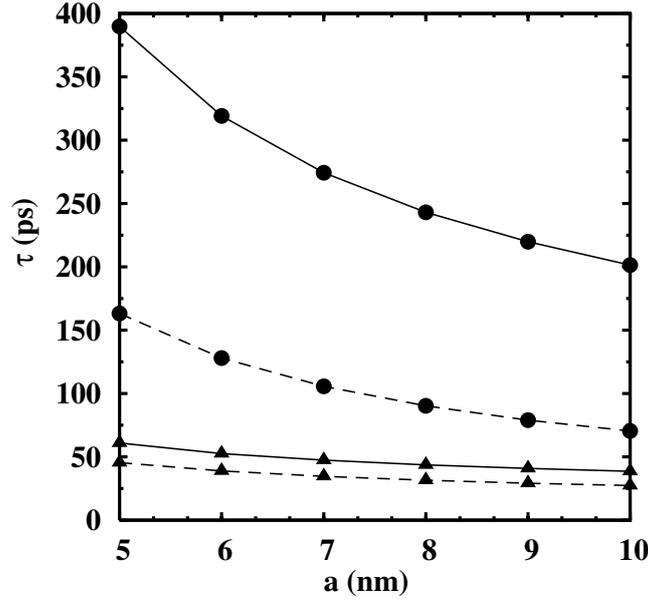


图 8-4: Collinear 统计下 (110) 方向的自旋弛豫时间在不同的电子浓度 $N_e = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (实线) 和 $4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (虚线) 以及不同的温度 $T = 120 \text{ K}$ (●) 和 300 K (▲) 随着量子阱阱宽的变化。

匀扩展变小，自旋弛豫时间变长。然而在同时考虑了 Dresselhaus 和 Rashba 相互作用以后，沿着 (110) 方向的自旋弛豫主要是由三次方项 $\mathbf{h}_{\hat{\mathbf{n}}_1}^{\perp}$ 决定，这一项给出的非均匀扩展与量子阱的阱宽几乎没有关系。然而 $\mathbf{h}_l(\mathbf{k}) \propto (\pi/a)^2$ 却随着量子阱的变宽而变小。对于沿着 $\hat{\mathbf{n}}_1$ 方向的有效磁场越大，电子自旋极化就越容易保持在 $\hat{\mathbf{n}}_1$ 方向而不容易被 $\mathbf{h}_{\hat{\mathbf{n}}_1}^{\perp}$ 翻转，从而抑制了非均匀扩展，给出较长的自旋弛豫时间。因此随着量子阱阱宽变大，自旋弛豫时间变小。

8.3 结论

通过自洽数值求解动力学自旋 Bloch 方程，我们研究了等强度 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合的 (001) GaAs 量子阱系统在 Collinear 统计和 Helix 统计下的自旋弛豫过程。我们指出：(i) 在这两种统计下的沿着各个方向的自旋弛豫过程几乎没有差别，物理上看是因为自旋轨道耦合对应的能量要远小于费米面以及温度。这一点对于自旋弛豫/去相位的研究是非常重要的，因为大部分的自旋弛豫/去相位问题都是在 Collinear 统计下研究并且在 Collinear 统计下的数值计算要远比 Helix 统计下的容易和准确。(ii) 电子自旋弛豫时间对自旋极化方向表现出很强的各向异性。在没有考虑 Dresselhaus 的三次方项的贡献时，沿着 (110) 方向的自旋弛豫时间是无穷长，而其它方向两个方向 (001) 和 $(\bar{1}10)$ 的自旋弛豫时间却非常的短；即使考虑了三次方项的贡献，(110) 方向的自旋极化的自旋弛豫时间变为有限长，但是仍然要远远大于另外两个方向的弛豫时间。(iii) 沿着 (110) 方向的自旋弛豫时间，随着温度上升、电子浓度变

大、以及量子阱宽变宽而变短，同时随着杂质浓度的增加而变长，这些结果都可以由非均匀扩展引起的自旋弛豫机制很好地解释。

第九章 n -型 GaAs 量子阱中的自旋扩散/输运

在接下来两章，我们讨论自旋极化在半导体系统中的输运问题。本章中我们通过建立和自洽地数值求解动力学自旋 Bloch 方程和泊松方程，研究了高温条件下 ($T \geq 120$ K) n -型 (001) GaAs 量子阱的自旋扩散/输运。这里只考虑了 GaAs 量子阱中的 Dresselhaus 自旋轨道耦合。由于这个理论以及求解过程中都明确包括所有的散射—特别是电子-电子散射—使得我们可以研究远离平衡态的系统，比如由沿着量子阱平面内的电场导致的热电子效应下的电子自旋输运。我们得到在即使没有外磁场的条件下，自旋极化/相干也会在扩散/输运方向上出现振荡；并且在散射足够强时—内禀散射即电子-电子散射就满足这个条件—不同动量的电子自旋具有相同的振荡频率以及相位，导致横向的自旋注入长度和系综的横向注入长度相等。振荡的周期和外加电场无关，这一点是和最近体材料中低温下的实验 [56] 结果一致。进一步我们研究了自旋扩散/输运长度的散射、温度、量子阱宽、磁场以及电场的依赖关系。所有的结果都可以由在输运过程中的非均匀扩展导致的自旋弛豫机制很好的解释。下一章我们会研究在有等强度的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合时自旋输运中的各向异性。

9.1 理论模型

自旋扩散/输运主要建立在第6章中给出的量子阱系统中输运方程 (6.23)

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = eE \partial_{k_x} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) - \frac{k_x}{m^*} \partial_x \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) - i[\mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathcal{E}_{\text{HF}}, \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)] + \left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{scat}} \quad (9.1)$$

以及泊松方程

$$\nabla_{\mathbf{r}}^2 \Psi(\mathbf{r}) = e[n(\mathbf{r}) - N_0(\mathbf{r})]/(a\kappa_0) \quad (9.2)$$

上，其中 $\mathbf{h}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}[\Omega^{2D}(\mathbf{k}) + g^* \mu_B \mathbf{B}]$ ， $n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})]$ 给出位置 \mathbf{r} 上总电子浓度以及 $N_0(\mathbf{r})$ 表示背景的正电荷浓度， a 是量子阱阱宽。我们假定自旋扩散和输运方向沿着 x 方向，在 y 方向上的分布是均匀的，因此泊松方程中 $\nabla_{\mathbf{r}}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ 。采用 Collinear 统计时，散射项中的 $S(>, <)$ 由式 (6.31) 给出。

要想求解方程 (9.1) 和 (9.2)，必须给出合适的初始条件以及边界条件。在以前的文章中 [57, 195]，边界条件是由单边边界决定，即假设在左边边界 $x = 0$ 处有一个恒定的自旋极化流注入，并且在界面是欧姆接触且施加的电场是在线性输运的范围内，则边界

的分布为漂移的Fermi 分布函数

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{k},\sigma}(x=0,t) &= \frac{1}{\exp[(\varepsilon_{\mathbf{k}} - m^* \mathbf{v}_d - \mu_\sigma)/k_B T] + 1}, \\ \rho_{\mathbf{k},\uparrow\downarrow}(x=0,t) &= 0. \end{aligned} \quad (9.3)$$

其中 $\mathbf{v}_d = \mu_E \mathbf{E}$ 是漂移速度, μ_E 是电子的线性迁移率。在采用这种边界条件的情况下, 输运方程的数值求解必须要引入一个额外的参数-粘滞系数-来保证方程解的光滑性, 即使在没有电荷不平衡以及外电场时候也需要泊松方程来保证方程的稳定性。这一点可以由以下分析看出来: 在考虑静态输运时, 我们略去相干项并且将散射项用弛豫时间近似代替, 则输运方程化作

$$\frac{k_x}{m^*} \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x)}{\partial x} = -\frac{\rho_{\mathbf{k}}(x) - \rho_{\mathbf{k}}^0}{\tau_p}, \quad (9.4)$$

这里 $\rho_{\mathbf{k}}^0$ 表示平衡时电子的密度矩阵, τ_p 是动量弛豫时间。从这个方程可以很容易的看出, 对于 $k_x < 0$ 的电子, $\rho_{\mathbf{k}}(x)$ 在 $x \rightarrow \infty$ 时是发散的。为了解决这个发散问题, 在以前的工作中联立了泊松方程并且将空间分割间距取得非常小, 数值计算时需要大量的时间。

这里我们从另外一个方面考虑: 在物理上对于 $k_x > 0$ 的电子, 电子从样品的左边向右边运动, 因此样品内 $k_x > 0$ 电子自旋极化分布是由左边边界的电子极化决定; 对于 $k_x < 0$ 的电子, 电子从样品的右边向左边运动, 样品内 $k_x < 0$ 电子自旋极化分布由右边边界的电子极化决定, 即对应着两边注入情况, 边界条件由两边的边界决定。这种分析是和电荷输运时广泛使用的求解 Boltzmann 方程方法 [361-363]一致的。对应两边注入的边界条件变为

$$\begin{cases} \rho_{\mathbf{k}}(x=0,t) = F(\varepsilon_{\mathbf{k},\mathbf{E}} - \mu(0)), & \text{当 } k_x > 0, \\ \rho_{\mathbf{k}}(x=L,t) = F(\varepsilon_{\mathbf{k},\mathbf{E}} - \mu(L)), & \text{当 } k_x < 0. \end{cases} \quad (9.5)$$

这里 $F(\varepsilon_{\mathbf{k},\mathbf{E}} - \mu(x)) \equiv [\exp(\varepsilon_{\mathbf{k},\mathbf{E}} - \mu(x))/(k_B T_e) + 1]^{-1}$ 是热电子状态下的漂移的费米分布, 其中两边边界的化学势为 $\mu(0) = \begin{pmatrix} \mu_\uparrow & 0 \\ 0 & \mu_\downarrow \end{pmatrix}$ 和 $\mu(L) = \begin{pmatrix} \mu_0 & 0 \\ 0 & \mu_0 \end{pmatrix}$ 。 $\varepsilon_{\mathbf{k},\mathbf{E}} = (\mathbf{k} - m^* \mu_E \mathbf{E})^2/2m^*$ 是漂移以后的能谱, T_e 是热电子温度。初始条件给出

$$\rho_{\mathbf{k}}(x,t=0) = F(\varepsilon_{\mathbf{k},\mathbf{E}} - \mu(x)), \quad (9.6)$$

其中化学势 $\mu(0) = \begin{pmatrix} \mu_\uparrow & 0 \\ 0 & \mu_\downarrow \end{pmatrix}$ 和 $\mu(x \neq 0) = \begin{pmatrix} \mu_0 & 0 \\ 0 & \mu_0 \end{pmatrix}$ 。化学势 $\mu_{\uparrow(\downarrow)}$ 和 μ_0 通过总粒子

数以及边界上的自旋极化给出:

$$\sum_{\mathbf{k}} \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(x, 0)] = n(x), \quad (9.7)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(0, 0)\sigma_z] = Pn(0), \quad (9.8)$$

其中 P 是左边边界的初始极化。在双边注入条件下, 不再需要数值计算中粘滞系数这个额外的数值计算参数, 其中输运方程输运部分的迭代方法见附录 E。从我们后面的结果可以看出, 当散射足够强的时候, 比如高温下考虑了电子-电子散射以及电子-LO 声子散射以后, 双边注入的结果可以用单边注入的结果来近似。

泊松方程的边界条件给出

$$\begin{cases} \Psi(0) = 0, \\ \Psi(L) = EL, \end{cases} \quad (9.9)$$

其中 E 是外电场的场强。

9.1.1 输运中的非均匀扩展

通过分析方程 (9.1), 我们很容易得到系统在时间和空间上的非均匀扩展。为了给出时间域中的非均匀扩展, 我们将空间不均匀部分设为零, 即 $\partial\rho_{\mathbf{k}}(x, t)/\partial x = 0$, 在没外场并且忽略散射项和 Hartree-Fock 项的情况下, 输运方程中化作:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{\mathbf{k}}(t) = -i[\mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \rho_{\mathbf{k}}(t)]. \quad (9.10)$$

解为

$$\rho_{\mathbf{k}}(t) = e^{-i\mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}t} \rho_{\mathbf{k}}(0) e^{i\mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}t}. \quad (9.11)$$

这个解给出初始自旋极化 $\rho_{\mathbf{k}}(0)$ 绕着有效磁场 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 以频率 $2|\mathbf{h}(\mathbf{k})|$ 进动。进动频率的动量依赖给出时间域的非均匀扩展。根据前面的结果我们可以知道, 在有非均匀扩展的条件下, 任何自旋守恒的散射, 包括电子-电子库仑散射都会造成不可逆的自旋弛豫。除了动量依赖自旋轨道耦合会给出非均匀扩展以外, 对能量有非均匀扩展的 g 因子、随机的自旋轨道耦合等也都会造成自旋进动中非均匀扩展。在时间域的自旋弛豫中, 除非 g 因子是能量扩展的, 否则外加磁场本身不会引起非均匀扩展, 因此在只有外磁场而自旋轨道耦合 $\Omega^{2D}(\mathbf{k}) = 0$ 的系统中, 电子自旋极化不会弛豫。对于自旋输运中的非均匀扩展, 我们仅仅考虑静态扩散/输运情况, 即 $\partial\rho_{\mathbf{k}}(x, t)/\partial t = 0$ 。在没有外场驱动并且不考虑散射项和 Hartree-Fock 项的影响时, 方程(9.1) 化作

$$\frac{k_x}{m^*} \partial_x \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -i[\mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})] \quad (9.12)$$

在给定边界条件 (9.5) 可以解析的解出的密度矩阵的空间分布

$$\rho_{\mathbf{k}}(x) = \begin{cases} e^{-i\frac{m^*}{k_x}\mathbf{h}(\mathbf{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}_x} \rho_{\mathbf{k}}(x=0) e^{i\frac{m^*}{k_x}\mathbf{h}(\mathbf{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}_x}, & k_x > 0 \\ \rho_{\mathbf{k}}(x=L), & k_x < 0 \end{cases}. \quad (9.13)$$

这个解表示在没有散射的情况下，对于动量 $k_x > 0$ 的电子，来源于左边有自旋极化的边界，在注入到样品内以后，电子自旋会绕着有效进动磁场

$$\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} = 2\frac{m^*}{k_x}\mathbf{h}(\mathbf{k}) = \frac{m^*}{k_x}(\boldsymbol{\Omega}^{2D}(\mathbf{k}) + g\mu_B\mathbf{B}) \quad (9.14)$$

以空间频率 $|\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}}|$ 进动；而对于动量 $k_x < 0$ 的电子来自样品右边界的无极化的电子，注入到样品内部后也一样没有极化。但是这仅仅是在没有考虑散射的时候才是正确的，考虑了散射以后右边注入的电子会和左边注入的电子发生散射而产生极化。对于以前工作中的单边注入边界条件 (9.3)，则方程 (9.12) 的解化作

$$\rho_{\mathbf{k}}(x) = e^{-i\frac{m^*}{k_x}\mathbf{h}(\mathbf{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}_x} \rho_{\mathbf{k}}(x=0) e^{i\frac{m^*}{k_x}\mathbf{h}(\mathbf{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}_x}. \quad (9.15)$$

这个解和 (9.13) 的区别在于：无论哪个方向运动的自旋极化，都是从左边边界注入并且在空间上进动。很容易看出，不管哪一种边界条件下的电子自旋的空间进动频率都是动量 \mathbf{k} 依赖的，从而造成非均匀扩展。和时间域的非均匀扩展一样，空间输运中的非均匀扩展会在有任何自旋守恒散射—包括电子-电子库仑散射—存在的情况下造成电子自旋在空间上的不可逆的弛豫。但是和时间域的非均匀扩展不同的是，除了自旋轨道耦合给出动量 \mathbf{k} 依赖的时域进动频率以外，方程 (9.1) 中的第三项 (扩散项) 也给出一个动量依赖的注入速度，因此和空间均匀系统中电子自旋极化的时间演化中的非均匀扩展是由 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 决定不一样，在空间输运中空间进动频率是由自旋轨道耦合和注入速度 k_x 的商 $\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}}$ 给出。因为注入速度的非均匀扩展，导致在空间输运中，即使只有外磁场的时候自旋进动也会有非均匀扩展，从而引起自旋弛豫/去相位。另外，空间域中非均匀扩展的大小可能也与注入的方向有关。

9.1.2 空间注入/扩散长度 L_d , L_p 和 L_p^*

和时间域的自旋弛豫时间可以用自旋极化、自旋相干的非相干求和以及自旋相干的相干求和来描述一样 [343]，稳态下空间扩散/输运长度可以由相对应的三个物理量来描述：

1. 自旋相关的电子浓度：

$$N_{\sigma}(x) = \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k},\sigma}(x). \quad (9.16)$$

2. 自旋相干的非相干求和:

$$\rho(x) = \sum_{\mathbf{k}} |\rho_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}(x)|. \quad (9.17)$$

3. 自旋相干的相干求和:

$$\rho'(x) = \left| \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}(x) \right|. \quad (9.18)$$

将这些定义中的空间 x 变化成时间 t , 则为时间域对应的量的定义。对这些量的空间演化包络线用指数衰减函数拟合, 可以得到对应的特征长度: 自旋极化 $\Delta N = N_{\uparrow} - N_{\downarrow}$ 的包络线的衰减给出 L_d , 自旋相干的非相干 $\rho(x)$ 包络线的衰减给出 L_p [195, 352], 自旋相干的相干求和 $\rho'(x)$ 包络线的衰减给出 L_p^* 。对应的时间域的弛豫时间分别为 T_1 , T_2 和 T_2^* 。

9.2 计算结果

现在我们按照附录 E 中的方法自洽迭代求解输运方程 (9.1) 和泊松方程 (3.89), 其中包括所有的散射: 电子-电子散射、电子-声子散射和电子-杂质散射。由于我们考虑的是高温 ($T \geq 120$ K) 下的自旋输运, 电子-声子散射中我们仅仅需要考虑电子-LO 声子散射, 这是因为电子-声学声子散射只在低温下的贡献比较重要 [285, 364], 而电子-TO 声子在输运过程中没有贡献 [349, 355]。如果没有特别说明, 我们取量子阱宽 $a = 7.5$ nm、电子浓度 $N_e = 4 \times 10^{11}$ cm⁻² 和左边边界的初始极化 $P = 5\%$ 。数值计算中, \mathbf{k} -空间按照文献 [147] 中的方法把能量和角度分割为 $N \times M$ 个区域, 相应的 \mathbf{k} 点为

$$\mathbf{k}_{n,m} = \sqrt{(n + \frac{1}{2})\Delta E} \left(\sin \frac{2m\pi}{M}, \cos \frac{2m\pi}{M} \right), \quad (9.19)$$

其中 $n = 0, 1, \dots, N-1$ 和 $m = 0, 1, \dots, M-1$, ΔE 是能量间隔。因此选择能量截断 $(N + \frac{1}{2})\Delta E$ 使之满足平衡时 $\mathbf{k}_{N,M}$ 上的粒子数分布至多是原点 $\mathbf{k} = 0$ 的分布的 0.1%。同时依照文献 [147] 中的讨论, 能量的分割要保证 LO 声子的能量是处在能量分割点上的。按照这个要求, 对于我们选取的电子浓度, 在 $T = 300$ K 时能量截断是 $10E_f$, 其中 $E_f = 14.3$ meV 是系统的费米能。因为两维 GaAs 电子气中自旋注入的长度大概是 μm 量级, 所以如果没有特别说明, 我们选择样品长度为 $L = 10$ μm , 可以保证自旋在扩散/输运到右边边界的时候已经消失了。数值计算中, 分割点取为 $(N, M) = (16, 18)$ 以及空间格点取为 400, 这种分割下的结果和用分割 $(N, M) = (32, 34)$ 以及空间格点为 800 的结果几乎一样。至于即使采用非常少的分割格点 (对应的能量分割 $\Delta E = 10/(N - 1/2)E_f$) 也可以给出精度很高的结果, 是因为在我们讨论的条件下, 系统的散射足够的强导致所有的电子自旋都保持相同的相位, 因此在动量空间中电子的分布函数一直都很光滑。这一点我们可以从接下来的结果中得到。

9.2.1 动量分辨的自旋极化的瞬时的空间演化

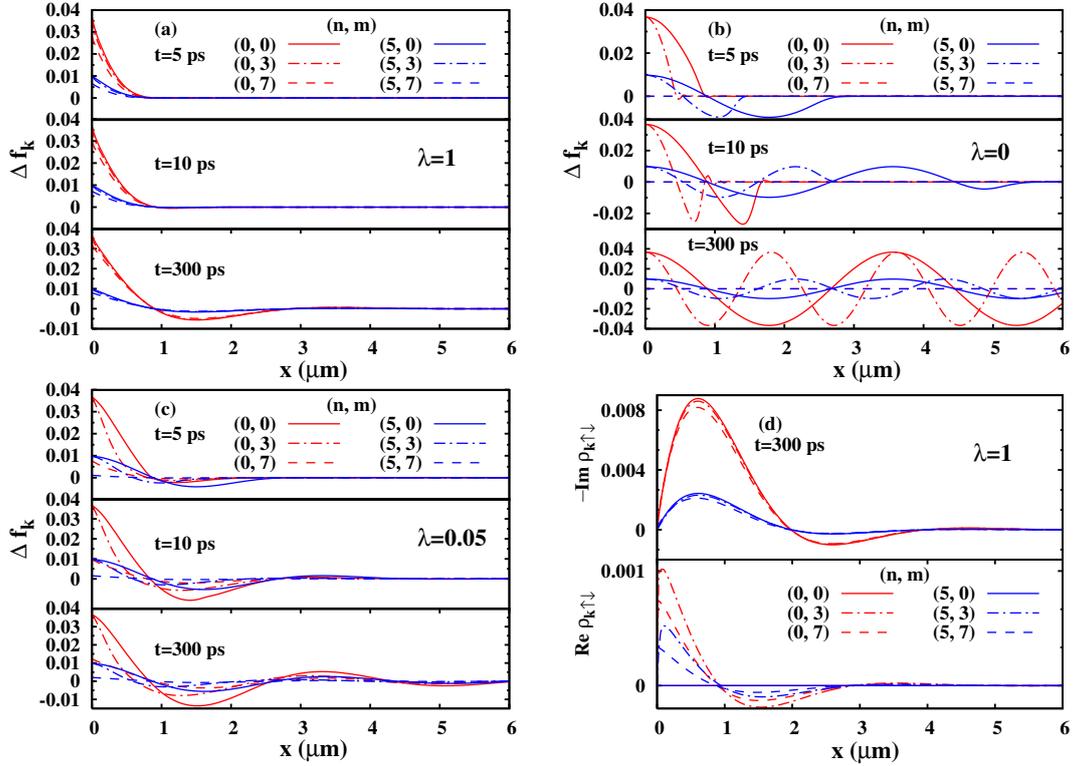


图 9-1: 不同动量 $\mathbf{k}_{0,0}$ 、 $\mathbf{k}_{5,0}$ 、 $\mathbf{k}_{0,3}$ 、 $\mathbf{k}_{5,3}$ 、 $\mathbf{k}_{0,7}$ 和 $\mathbf{k}_{5,7}$ 的 $\Delta f_{\mathbf{k}}$ [图(a)-(c)] 和 $\rho_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}$ [图(d)] 在不同时刻 $t = 5$ ps、 10 ps、 300 ps (系统达到稳态) 时随着空间演化。这里温度 $T = 200$ K 以及外磁场 $B = 0$ 。(b)没有散射, $\lambda = 0$ 。(c) 小散射, $\lambda = 0.05$ 。(a), (d) 正常的散射 $\lambda = 1$ 。这里我们只考虑了电子—电子散射和电子—LO 声子散射。虽然在图上只给出 0 到 $6 \mu\text{m}$ 的空间演化, 但是计算中样品长度是取为 $10 \mu\text{m}$ 。

图 9-1 (a) 中给出不同动量的 $f_{\mathbf{k},\sigma}$ 在不同时刻 $t = 5, 10$ 和 300 ps 时在空间位置上的变化。计算中只考虑电子-电子散射和电子-LO 声子散射, 温度 $T = 200$ K 以及外磁场 $B = 0$ 。前面我们得到在没有考虑任何散射以及驱动项时输运方程的解是 (9.13), 给出电子自旋围绕动量相关的有效进动场 $\Omega_{\mathbf{k}}$ 进动。然而在考虑了散射项以后, 不同电子自旋进动具有相同的进动频率以及相位, 即使对于从右边注入动量 $k_x < 0$ 的电子自旋 (如动量 $\mathbf{k}_{0,7}$ 和 $\mathbf{k}_{5,7}$) 也有相同的相位。为了理解这个结果, 我们把所有的散射项都乘上一个相同的伸缩因子 λ , 即散射项化作 $\lambda \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{scat}}$ 。对于没有散射的情况 $\lambda = 0$ 并且不考虑驱动项即 $\mathbf{E} = 0$ 时, 就对应着解 (9.13), 数值结果见图 9-1 (b)。从图上很容易看出进动频率以及注入速度对于动量 $k_x > 0$ 的电子都不一样, 而对于 $k_x < 0$ 的电子自旋都为零。

我们逐渐引入散射项, 先是较小的散射 $\lambda = 0.05$ [见图 (c)], 接着是正常的散射 $\lambda = 1$ [见图 (a)]。和没有散射的结果相比, 电子自旋表现出非常不同的空间和时间演化行为:

1. 从右边注入的无极化电子 (动量为 $\mathbf{k}_{0,7}$ 和 $\mathbf{k}_{5,7}$ 的电子) 产生了自旋极化。这是因为在有散射存在的情况下, $k_x > 0$ 的电子可以被散射为 $k_x < 0$ 的电子, 并且由于散射过程不改变自旋, 导致自旋极化也从 $k_x > 0$ 的电子转移到 $k_x < 0$ 的电子上。因此即使对于 $k_x < 0$ 的电子也建立了从样品左边到样品右边的自旋极化。
2. 散射项倾向于使不同动量 \mathbf{k} 的电子具有相同的进动频率和扩散速度。这个结果很容易从图 9-1 (a)-(c) 中 $\Delta f_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k},\uparrow} - f_{\mathbf{k},\downarrow}$ 在不同时刻 $t = 5, 10, 300$ ps (系统已经处在稳态) 随着空间位置的变化中得到。这里图 (b) 是没有散射的结果, 各个电子的进动频率以及注入速度都不一样; 而图 (c) 是弱散射的结果, 各个电子的进动频率以及注入速度已经趋于一致; 当散射进一步变强到正常散射时即图 (a), 所有电子的进动频率以及注入速度几乎一样。对于自旋相干 $\rho_{\mathbf{k},\uparrow\downarrow}$ 也得到相同的结果, 稳态时的结果 ($t = 300$ ps) 见图 (d)。这个结果导致了即使在 \mathbf{k} 空间的分割不是很密, 计算结果精度也可以很高。进一步来说, 在强散射下, 各个电子的进动频率以及相位都一样, 系综将不会有相干导致的自旋弛豫, 即 $L_p^* = L_p$ 。这个结果在时间域也是正确的 [343], 不过那里给出 $T_2 = T_2^*$ 。在高温 $T > 120$ K 下, 即使是对于电子浓度为 $N_e = 4 \times 10^{10}$ 的系统而言, 由电子-声子散射和电子-电子散射组成的内禀散射, 就已经的足够强从而可以保证系统的这个性质。这个结果也许可以通过自旋回声实验得到验证。
3. 由于散射项对非均匀扩展的反作用倾向于消除各个电子自旋进动频率的差异, 从而留下来的是电子自旋的共同的进动频率, 即 $\langle \omega_{\mathbf{k}} \rangle = \omega_0 = m^* \gamma (\langle k_y^2 \rangle - \langle k_z^2 \rangle, 0, 0)$, 这里外磁场 $B = 0$ 。对于这里采用的参数 $\gamma = 11.4 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^3$ 以及非简并下 $\langle k_y^2 \rangle \approx \frac{1}{2} \frac{2m^*}{\hbar^2} k_B T$, 有 $\omega_0 = -1.61 / \mu\text{m}$, 对应着自旋极化的空间振荡周期为 $3.88 \mu\text{m}$ 。这和图 (a) 中 $t = 300$ ps 的结果一致。
4. 散射项除了对非均匀扩展有反作用以外, 更为重要的是导致了不可逆的自旋弛豫/去相位 [51]。从图 (b) 中 $t = 300$ ps 的结果可见, 在没有散射时自旋极化不会弛豫/去相位。然而在考虑了散射以后 [见图 (a) 和 (c)], 自旋极化在空间上开始衰减。这和时间域的非均匀扩展导致的自旋弛豫机制是一致的。
5. 左边界的自旋极化率和散射的大小有关。和单边注入时固定的左边界的自旋极化不一样, 双边注入时左边界的自旋极化是随着时间变化, 并且它的稳定值还与散射有关。这是因为双边注入时左边边界我们只固定了 $k_x > 0$ 部分的自旋极化, 而 $k_x < 0$ 的电子极化是从 $k_x > 0$ 部分电子散射而得。因此, 在没有散射的时候, 左边界 $k_x < 0$ 部分的自旋极化一直都是零, 从而稳定时总的自旋极化只有初始值的一般, 即 $P = 2.5\%$ 。散射越强从 $k_x > 0$ 转移到 $k_x < 0$ 的自旋极化越多, 从而在左边界给出较大的自旋极化。因此当 $\lambda = 0.05$, $P = 3.0\%$; 而 $\lambda = 1.0$ 即正常散射时, $P = 4.5\%$ 。因此我们相信, 左边界的自旋极化在有足够强散射的时候将接近初始的极化, 此时单边注入将是双边注入一个很好的近似。不过我们的计算表明, 对于小自旋极化的边界条件, 空域的自旋弛豫/去相位性质如自旋扩散长度和自旋进动周期与边界自旋极化的大小没有关系。双边注入和单边注入在边界

上的差异可能来源于在输运方程中没有自洽包含自旋极化的产生部分，比如从铁磁 (或半金属) 向半导体中的注入或者在边界上光学激发产生。

9.2.2 散射对扩散的作用

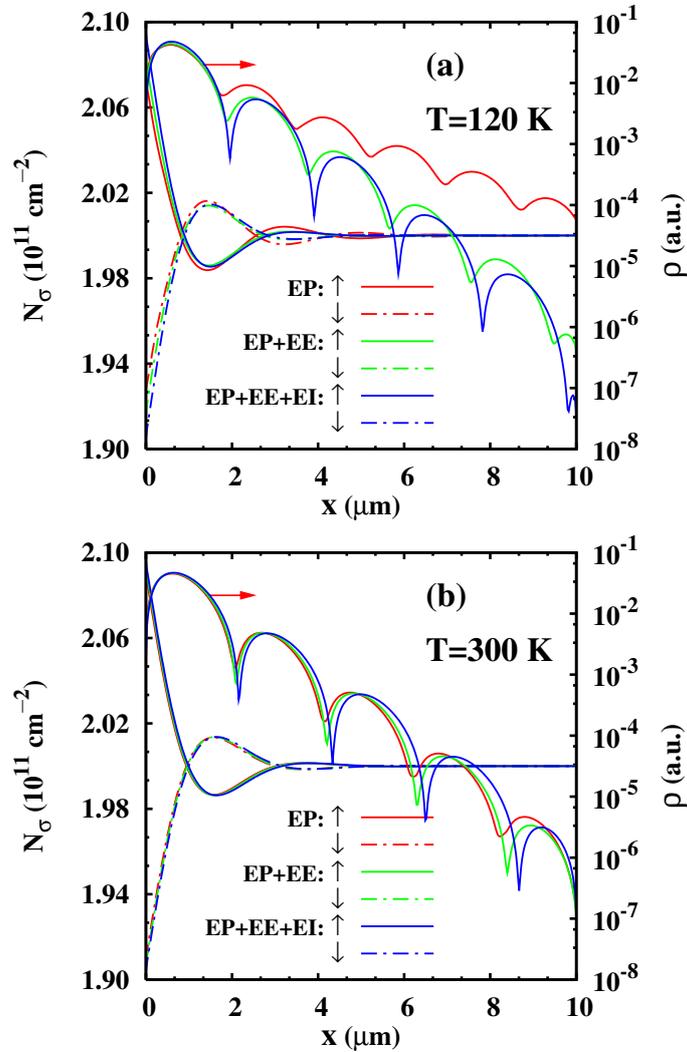


图 9-2: 散射对稳态下自旋扩散的作用。(a) $T = 120\text{ K}$; (b) $T = 300\text{ K}$ 。红线: 只考虑了电子-LO 声子 (EP) 散射; 绿线: 考虑了 EP 散射和电子-电子 (EE) 散射; 蓝线: 考虑了所有的散射, 包括 EP、EE 以及电子-杂质 (EI) 散射。杂质浓度为 $N_i = N_e$ 。其中自旋相干的非相干求和 ρ 的标度在图的右边。样品长度 $L = 10\text{ }\mu\text{m}$ 。

从上面结果可知, 散射项对于电子自旋扩散/输运有非常重要的影响, 图 9-2 中给出稳态时自旋相关的电子浓度 N_σ 和自旋相干的非相干求和 ρ 在不同散射下随着空间位置的演化。其中我们先只考虑了电子-LO 声子散射 (红线), 然后逐步加入电子-电子散射 (绿线) 和电子-杂质散射 (蓝线)。计算中杂质的浓度为 $N_i = N_e$, 温度为 $T = 120\text{ K}$ (a) 以及 300 K (b)。

和上一节中动量分辨的自旋扩散类似，即使外磁场 $B = 0$ ， N_σ 和 ρ 在空间位置上的演化存在着振荡 [57–59]。除此之外，从图 9-2 中我们还可以发现：首先是输运过程中有很强的自旋弛豫/去相位，并且自旋弛豫对散射表现出非常复杂的依赖关系：在温度为 $T = 120$ K 时，自旋弛豫/去相位总是随着一个新的散射的加入而变得更快。而在温度为 $T = 300$ K 时，当在只有电子-LO 声子散射的系统加入电子-电子散射以后，自旋弛豫速率变快；然而当我们进一步加入电子-杂质散射后，自旋弛豫速率又变慢了。另外，和上一节中的结果一致，左边界的自旋极化对于考虑所有的散射、只考虑电子-LO 声子散射以及只考虑电子-LO 声子散射的情况各不相同，在 $T = 120$ K 分别对应 4.75%，4.20% 和 3.60% 以及 $T = 300$ K 分别对应 4.8%，4.7% 和 4.6%。因此，左边界的自旋极化总是随着散射的增强而变大，无论散射是因为加入了新的散射还是因为温度的升高而变强的。

没有外磁场时，稳态输运中自旋极化在空间上振荡的结果是和最近的在体材料的自旋输运中发现的振荡一致 [56]。不过这不同于没有外磁场时空间均匀系统中自旋极化随时间的振荡 [174]。我们知道，在没有外磁场时，只有在非常低的温度下 ($T < 2$ K) 才能发现自旋极化随时间的振荡，这是因为在时域的自旋弛豫问题中的非均匀扩展是由自旋轨道耦合 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 所决定，而它的平均值 $\langle \mathbf{h}(\mathbf{k}) \rangle = 0$ 。由于散射的随机性倾向于消除非均匀扩展产生的各向异性，从而自旋轨道耦合所产生的自旋振荡的频率趋向于它们的平均值，散射越强则越接近于平均值。当温度高于 2 K 时，散射已经足够的强从而看不到自旋极化随时间的振荡。然而自旋的空间输运中，非均匀扩展是由 $\omega(\mathbf{k})$ 决定，其平均值给出 $\langle \omega(\mathbf{k}) \rangle = \omega_0 \neq 0$ 。从前一节中的结果可以知道，越是强的散射，每个电子的自旋振荡频率越接近 ω_0 ，从而总的自旋极化在空间上给出越明显的振荡。所以即使是高温条件下，这种空间上自旋振荡也仍然存在。然而 Beck 等人 [56] 的实验材料是体材料，给出 $\langle k_y^2 \rangle = \langle k_z^2 \rangle$ 导致 $\omega_0 = 0$ ，非常类似时间域中的结果，这部分在高温下对空间上的自旋振荡没有贡献。虽然他们的样品中存在由应力引起的自旋轨道耦合，会提供一个不为零的 ω_0 ，不过其值太小从而给出非常长的自旋振荡周期。因此在他们的实验中只有在非常低的温度下才能观察到这种自旋振荡。

复杂的散射依赖关系非常类似于时域中的自旋弛豫/去相位的散射依赖关系 [335]。在时域问题中，在强散射区域和弱散射区域时自旋弛豫时间对散射的依赖关系是不同的。在弱散射区，散射主要提供在有非均匀扩展系统中的自旋弛豫的通道，因此散射越强自旋弛豫速度越快，给出越小的自旋弛豫时间。而在强散射区，散射对非均匀扩展的反作用起着决定性的作用，加入新的散射会对非均匀扩展有个更强的抑制作用，从而自旋弛豫时间变长。并且是处在弱散射极限还是强散射极限可以由 $\langle \omega_{\mathbf{k}} \rangle \tau_p$ 决定，当 $\langle \omega_{\mathbf{k}} \rangle \tau_p \gg 1$ 是处在弱散射极限，而 $\langle \omega_{\mathbf{k}} \rangle \tau_p \ll 1$ 给出强散射极限。在空间输运中有着类似的结果，自旋扩散长度由非均匀扩展和散射共同决定，根据他们的相对强度可以将系统分为强散射区域和弱散射区域。在 $T = 120$ K 时，电子-LO 声子散射非常的弱，系统处在弱散射区域，从而任何新加入的散射都会使自旋扩散长度变短。当温度为 300 K 时，结果显示此时系统处在弱散射和强散射的转变区域中，导致散射的变化对

自旋弛豫的影响很小。

9.2.3 自旋扩散的温度依赖关系

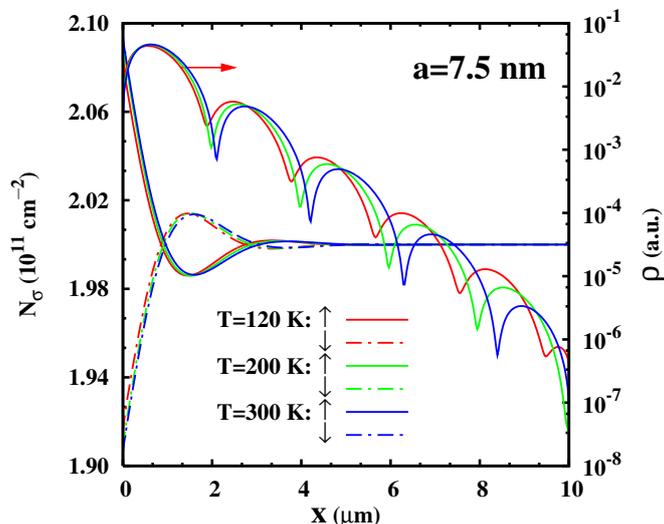


图 9-3: N_σ 和 ρ 在不同温度下随着空间位置的变化。其中红线: $T = 120$ K; 绿线: $T = 200$ K; 蓝线: $T = 300$ K。杂质浓度 $N_i = 0$, 样品长度 $L = 10 \mu\text{m}$ 。其中自旋相干的非相干求和 ρ 的标度在图的右边。

图 9-3 中我们给出不同温度 $T = 120$ (红线)、 200 (绿线) 以及 300 K (蓝线) 下的稳态输运中自旋相关的电子浓度 N_σ 和自旋相干的非相干求和 ρ 随着空间位置的变化。计算中只考虑了内禀散射, 即杂质浓度 $N_i = 0$ 。从图 9-3 可以得出: (i) 自旋进动周期随着温度的升高而变长。从前面结果可知, 自旋进动周期大小大概是 $|\omega_0^{-1}| = [m^*\gamma|\langle k_y^2 \rangle - (\pi/a)^2]^{-1}$ 。随着温度的升高, $\langle k_y^2 \rangle$ 变大, 在 $\langle k_y^2 \rangle < (\pi/a)^2$ 条件下进动周期变长。(ii) 自旋扩散长度随着温度的升高而减小。这个结果很容易从非均匀扩展随着温度的变化来理解: 随着温度的升高, 电子倾向于分布在更大以及更宽的动量范围上, 从而会感受到更大的非均匀扩展, 给出更短的自旋扩散长度; 但是同时散射项也变强, 不过在弱散射区域, 更强的散射将给出更多的散射通道, 从而也是使自旋扩散长度变短。因此, 温度升高会使自旋扩散长度变短, 不过在温度从 120 K 变化到 300 K 的过程中, 自旋扩散长度变化非常小, 远远没有进动周期的变化明显。

9.2.4 自旋扩散的阱宽依赖关系

图 9-4 我们给出温度为 $T = 120$ K 时不同阱宽 $a = 7.5$ 、 10 、 12.5 以及 15 nm 时稳态输运中自旋相关的电子浓度 N_σ 和自旋相干的非相干求和 ρ 随着空间位置的变化。其中 N_\uparrow 和 ρ 由实线给出, N_\downarrow 由虚线给出。由于在不同阱宽下自旋扩散长度差别非常大, 因此我们所取的样品长度对不同的阱宽不一样, 分别对应为 10 、 20 、 25 及 30 nm。从

图上可以看出，随着阱宽变大，自旋振荡周期以及自旋扩散长度都快速增加。这是与时域的自旋弛豫/去相位时间随着阱宽的变化关系一致，主要是由于 Dresselhaus 自旋轨道耦合的线性项是正比与 $1/a^2$ 。则当量子阱阱宽变大时，自旋轨道耦合变弱，非均匀扩展变小，从而使自旋扩散长度变大；同时大阱宽时 ω 也快速减小，使得振荡周期变大。

9.2.5 自旋扩散的磁场依赖关系

现在我们讨论自旋扩散中的自旋弛豫/去相位随着磁场的变化。Weng 和 Wu [195]指出，磁场在自旋扩散/输运中起的作用和在空间均匀时域系统中的作用完全不一样：在自旋进动的时间演化中，如果没有自旋轨道耦合而仅仅考虑磁场的话，自旋极化将不会有任何的弛豫或者去相位，因为磁场本身在时域系统中并不会给出非均匀扩展。然而在空间不均匀的输运/扩散问题中，即使没有自旋轨道耦合，磁场导致自旋极化在空间进动的频率由式 (9.14) 给出 $\omega_{\mathbf{k}} = m^*g\mu_B\mathbf{B}/k_x$ ，动量 \mathbf{k} 的依赖给出非均匀扩展，从而当有任何的自旋守恒散射作用时，自旋极化都会在空间上弛豫/去相位。另外，从公式 (9.14) 也可以看出，在考虑了 Dresselhaus 自旋轨道耦合以后，非均匀扩展将会依赖外磁场的方向。从而对于不同方向的磁场自旋扩散长度也不同。

图 9-5 中我们给出稳态扩散中自旋扩散长度 L_d (■) 和自旋振荡周期 L_0 (●) 随着外磁场的变化。这里 L_d 和 L_0 是用 $\Delta N_z(x)/N_e = C \exp(-x/L_d) \cos(2\pi x/L_0 + \phi)$ 拟合自旋极化得到。图中给出了两个不同方向的磁场对自旋输运的影响：垂直于扩散方向的磁场 (虚线) 和沿着扩散方向的磁场 (实线)。可见，无论哪个方向的磁场都引起了额外的自旋弛豫/去相位，使自旋扩散长度变短。然而，两个不同方向的磁场自旋扩散长度具有不同的对称性：当磁场方向垂直于自旋扩散方向，即沿着 y 轴时， $L_d(B) = L_d(-B)$ ；而当磁场方向平行与自旋扩散方向，即沿着 x 轴时， $L_d(B) \neq L_d(-B)$ 。这个结果很容易通过分析输运方程 (9.1) 对称性中得到。当磁场沿着 y 轴时，如果将方程 (9.1) 中代换 $k_y \rightarrow -k_y$ ， $\rho_{k_x, k_y} \rightarrow \rho_{k_x, -k_y}$ ，则得到对应着磁场为 $-\mathbf{B}$ 的方程，并且初始条件和边界条件都没变化，从而得到 $\rho_{k_x, k_y}(B) = \rho_{k_x, -k_y}(-B)$ 。然而当磁场沿着 x 轴方向时，输运方向的不对称性破坏了这种对称性，给出不对称的自旋扩散长度。

相比较于自旋扩散长度，自旋极化的进动周期 L_0 随着磁场的变化关系更加复杂。对于沿着 y 方向的磁场，随着磁场大小的增加， L_0 都是减小的；对于沿着 x 方向的磁场，当磁场从 $-x$ 方向逐渐变化到 $+x$ 方向时 L_0 单调增加，直到 $B = 4$ 时自旋振荡消失，然后即使继续增加磁场也不会出现振荡。根据前面的讨论，我们知道自旋进动的周期由 $\omega_0 + m^*g\mu_B\mathbf{B}/\langle k_x \rangle$ 的大小决定，其中 ω_0 沿着 x 方向， $\langle k_x \rangle = \sum_{\mathbf{k}} k_x \Delta f_{\mathbf{k}} / \sum_{\mathbf{k}} \Delta f_{\mathbf{k}}$ 是自旋注入速度的平均值。因为样品中从左边界到右边界存在自旋极化的空间梯度，故 $\langle k_x \rangle > 0$ 。因此当磁场沿着 y 方向时，自旋振荡周期由 $[\sqrt{(m^*g\mu_B\mathbf{B})^2 / \langle k_x \rangle^2 + \omega_0^2}]^{-1}$ 决定，它总是随着磁场的强度的增加而减小。然而，当磁场方向平行于 x 方向时，自旋振荡的周期由 $|\gamma(\langle k_y^2 \rangle - \langle k_z^2 \rangle) + g\mu_B B / \langle k_x \rangle|^{-1}$ 决

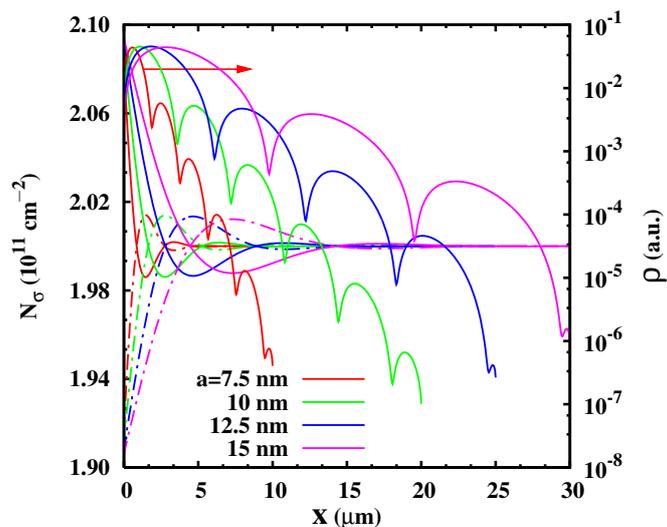


图 9-4: N_c 和 ρ 在不同量子阱宽度下随着空间位置的变化。其中阱宽取 $a = 7.5$ 、 10 、 12.5 以及 15 nm, 对应的样品长度分别为 $L = 10$ 、 20 、 25 和 30 μm , 温度为 $T = 120$ K。实线: N_c 和 ρ ; 虚线: N_c 。其中自旋相干的非相干求和 ρ 的标度在图的右边。

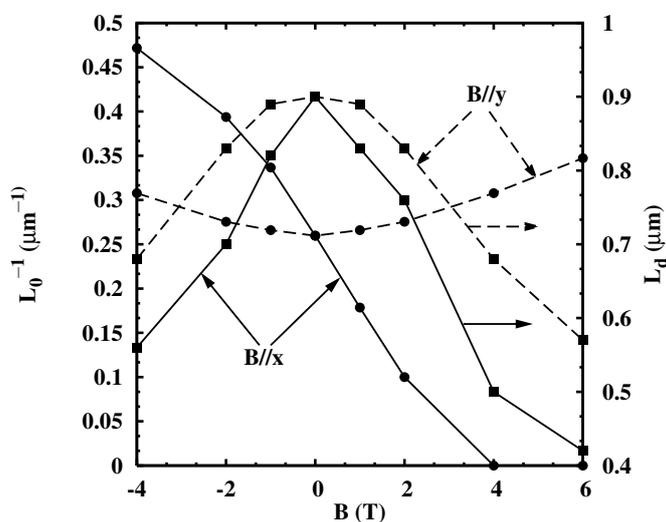


图 9-5: 自旋振荡周期的倒数 L_0^{-1} (带 \bullet 的线) 和自旋扩散长度 L_d (带 \blacksquare 的线) 随着外磁场 \mathbf{B} 的变化。磁场的方向可以沿着垂直 ($//y$, 虚线) 或者平行 ($//x$, 实线) 于自旋扩散方向, 温度为 $T = 120$ K, 杂质浓度 $N_i = 0$ 。其中自旋扩散长度 L_d 的标度在图的右边。

定，它的值随着磁场从 $-x$ 方向向 x 方向的增加而增加。值得注意的是，在 $B = 4$ T 时， $|\gamma(\langle k_y^2 \rangle - \langle k_z^2 \rangle) + g\mu_B B / \langle k_x \rangle|^{-1} \sim 0$ 使自旋振荡消失，然而进一步增大磁场并不会产生新的振荡，这是因为此时磁场引起了很强的非均匀扩展。

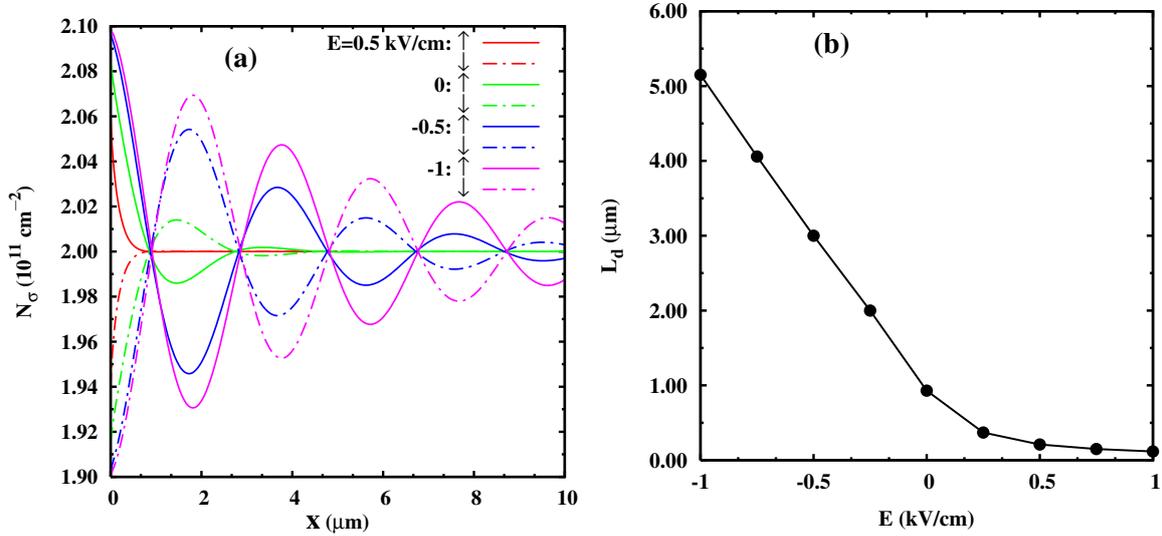


图 9-6: (a) N_σ 在不同电场 $E = 0.5$ 、 0 、 -0.5 和 -1 kV/cm 下随着空间位置变化。其中温度 $T = 120$ K，杂质浓度为零。虽然我们只给出空间位置在 $[0, 10]$ μm 内的电子浓度，但是在数值计算中，我们取的样品长度对不同电场是不一样的：当电场为 $E = -1.0$ 和 -0.75 kV/cm 时 $L = 25$ μm ， $E = -0.5$ 和 -0.25 kV/cm 时为 20 μm ， $E = 0$ kV/cm 时为 10 μm ， $E = 0.5$ 、 0.75 和 1.0 kV/cm 时为 5 μm 。(b) 自旋注入长度随着电场的变化。

9.2.6 电场对自旋扩散的影响

现在我们讨论自旋输运的电场依赖关系。电场沿着自旋扩散方向，即 x 方向。当电场场强足够大时，自旋输运落在热电子区域。在空间均匀系统中，热电子效应对自旋弛豫/去相位已经被仔细研究过 [147, 334]，发现热电子效应不仅仅对自旋弛豫/去相位时间有非常大的影响，而且还提供了一个大小为 $\gamma v_d \pi^2 / (a^2 m^*)$ 的有效磁场 [147]，从而影响自旋进动周期。这个有效磁场正比于电场的大小，是电场作用下电子分布的质心漂移 $v_d = \mu E$ 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合的共同作用产生的。即使没有外加磁场，自旋极化也会在此有效磁场的作用下进动并且进动频率随着外电场变化 [78, 147]。则在空间不均匀的自旋输运/扩散中，此有效磁场会象改变时域问题中的自旋进动的频率一样改变自旋极化在空间上进动的频率吗？答案是否定的，这仍然是因为输运方程 (9.1) 中的第三项即扩散项中的 k_x 对输运中自旋进动的重要影响，给出一个与动量无关的自旋进动频率 ω_0 。因此，在空间输运中，电场不会造成任何额外的自旋在空间上的进动。进一步可以看出， $\langle k_x \rangle$ 是由迁移速度以及自旋梯度所决定。对于电场 $E_x > 0$ ($E_x < 0$)， $\langle k_x \rangle$ 随着电场增大而减小 (增加)，从而自旋扩散长度依赖于电场方向。

图 9-6 中我们给出了在有外电场作用时自旋相关的电子浓度 N_σ 随着空间位置的演化 [图(a)], 以及自旋扩散长度随着电场大小的变化 [图(b)]。计算中温度取为 $T = 120$ K, 并且只考虑内禀散射。图 (a) 中我们给出不同的电场 $E = 0.5$ 、 0 、 -0.5 以及 -1 kV/cm 时的输运结果。可以看出自旋进动周期几乎不变, 与外加电场无关。这和最近在体材料中的实验结果一致 [55, 56]。不过, 外加电场可以显著影响自旋扩散长度。图 (b) 中我们画出自旋扩散长度对着电场的依赖关系: 随着电场的增加, 自旋扩散长度单调地减小。这个结果可以这样理解: 在电场沿着 $-x$ ($+x$) 方向时, 电场导致的扩散速度沿着 $+x$ ($-x$) 方向, 从而增加 (减小) 由自旋极化得空间梯度引起扩散速度, 使得 $\langle k_x \rangle$ 增加 (较小), 以及非均匀扩展减小 (增加), 给出更长 (短) 的自旋扩散长度。

第十章 GaAs 量子阱中自旋输运中的各向异性

为了在 (001)-GaAs 量子阱中得到最优的自旋扩散长度，我们通过自洽的求解考虑了电子-LO 声子散射和电子-电子散射的动力学自旋 Bloch 方程，研究了强度相近的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合同时存在的系统中的各向异性问题。我们发现，当 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的强度相同时，自旋扩散长度不仅仅对自旋极化方向表现出非常强的各向异性，而且对自旋注入方向也有相同的结果。这里有两个非常特殊的方向可以获得很长的自旋扩散长度： (110) 和 $(\bar{1}10)$ 方向。在不考虑 Dresselhaus 三次方项的贡献并且 Dresselhaus 和 Rashba 线性项的系数相同时，如下的两种情况都给出无穷长的自旋扩散长度：(i) 当自旋扩散/注入方向沿着 $(\bar{1}10)$ 方向时，自旋极化方向沿着任意方向；(ii) 当自旋极化方向沿着 (110) 方向时，自旋扩散方向沿着任意方向。然而，由于三次方项的贡献不能忽略，自旋扩散长度变为一个有限值，并且随着温度的升高和电子浓度的变大而减小。不过，自旋扩散长度的各向异性仍然被保留了下来。当自旋扩散方向沿着 $(\bar{1}10)$ 时，我们研究了自旋扩散长度对 Rashba 自旋轨道耦合的依赖关系，这里 Rashba 自旋轨道耦合可以通过调节门电压的大小来改变。当 Rashba 强度从零开始增强到略微小于（不是通常认为的等于）Dresselhaus 线性项的强度时，自旋扩散长度一直增加到一个最大值，然后随着 Rashba 强度的增加而减小。

10.1 理论模型

我们考虑 (001) 方向生长的 GaAs 量子阱，将其生长方向设为 z -轴，自旋注入方向始终设为 x -轴，和方向 (100) 的夹角为 θ 。具体见示意图 10-1。然而，以前给出的 Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合导致的有效磁场 $\Omega^D(\mathbf{k})$ [见公式 (2.30)] 和 $\Omega^R(\mathbf{k})$ [见公式 (2.36)] 都是沿着晶轴 (100) 、 (010) 以及 (001) 方向，从而为了得到新坐标系下的自旋轨道耦合形式，可以利用公式 (2.54) 对其做沿着 \hat{z} 方向的 θ 角度旋转，然后才能应用到我们的模型当中。不过对于动力学自旋 Bloch 方程，因为我们始终把输运方向当作 x 方向，它形式上是和上一章中用到的一致。

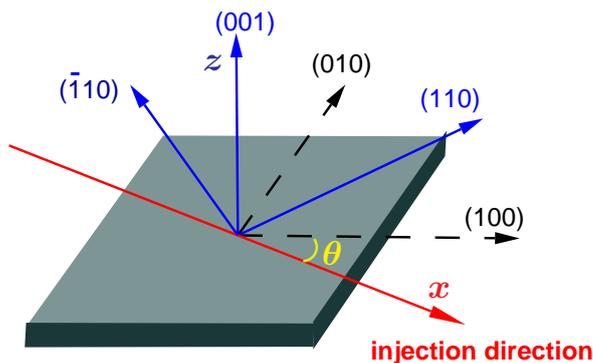


图 10-1: 自旋极化方向 ((110), ($\bar{1}10$) 和 (001) 方向) 和自旋扩散/注入方向 (x 轴) 的示意图。

10.1.1 自旋轨道耦合

沿着 \hat{z} 方向的 θ 角度旋转可以用矩阵

$$U(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (10.1)$$

表示, 则新的坐标系下的自旋轨道耦合的有效磁场记为

$$\Omega'(\mathbf{k}) = U^{-1}\Omega(U\mathbf{k}).$$

则 Dresselhaus 自旋轨道耦合的有效磁场化作

$$\Omega'_D(\mathbf{k}) = \beta \begin{pmatrix} -k_x \cos 2\theta + k_y \sin 2\theta \\ k_x \sin 2\theta + k_y \cos 2\theta \\ 0 \end{pmatrix} + \gamma \left(\frac{k_x^2 - k_y^2}{2} \sin 2\theta + k_x k_y \cos 2\theta \right) \begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (10.2)$$

其中 $\beta = \gamma \langle k_z^2 \rangle$, 波矢写在新的坐标系下; Rashba 自旋轨道耦合的有效磁场化作

$$\Omega'_R(\mathbf{k}) = \alpha \begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (10.3)$$

可见, Rashba 自旋轨道耦合的有效磁场在旋转下不变。本章中我们主要讨论自旋输运过程中的各向异性以及如何才能获得最长的自旋扩散长度。因此, 我们集中精力在如下的两种条件下的自旋输运问题中: (i) 在 $\alpha = \beta$ 时。根据第8章中结果可知, 对于 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合同时存在的系统中自旋弛豫对于自旋极化方向

是各向异性的，特别是 (110) 这个特殊方向上的自旋弛豫时间，要远比其它方向长。因此很有必要仔细研究一下自旋扩散长度对自旋极化方向各向异性问题。对于沿着 θ 角度的注入，总的自旋轨道耦合导致的磁场记作

$$\boldsymbol{\Omega}'(\mathbf{k}) = 2\beta \left(\sin\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right)k_x + \cos\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right)k_y \right) \hat{\mathbf{n}}_0 + \gamma \left(\frac{k_x^2 - k_y^2}{2} \sin 2\theta + k_x k_y \cos 2\theta \right) \begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (10.4)$$

其中 $\hat{\mathbf{n}}_0 = \begin{pmatrix} \cos(\pi/4 - \theta) \\ \sin(\pi/4 - \theta) \\ 0 \end{pmatrix}$ 给出特殊方向 (110) 在新坐标系的坐标。(ii) 由于 Rashba 自旋轨道耦合的系数可以通过门电压调节，我们考虑门电压对自旋扩散的影响。

10.1.2 动力学自旋 Bloch 方程

动力学自旋 Bloch 方程由方程 (6.23) 给出，在联立泊松方程 (9.2) 以后可以自洽的求解出电子的单粒子密度矩阵 $\rho_{\mathbf{k}}(x, t)$ 。在系统达到稳态时，输运方程化作

$$\frac{k_x}{m^*} \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x, t)}{\partial x} + i[\boldsymbol{\Omega}'(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathcal{E}_{\text{HF}}(x, t), \rho_{\mathbf{k}}(x, t)] = \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x, t)}{\partial t} \Big|_{\mathbf{s}}. \quad (10.5)$$

对于散射项，我们只考虑电子-LO声子散射和电子-电子散射。在没有散射项和 Hartree-Fock 项时，上面的方程可以解析的求解，给出解 (9.13):

$$\rho_{\mathbf{k}}(x) = \begin{cases} e^{-i\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} x} \rho_{\mathbf{k}}(x=0) e^{i\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} x}, & k_x > 0 \\ \rho_{\mathbf{k}}(x=L), & k_x < 0 \end{cases}.$$

其中有效的进动磁场

$$\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} = \frac{m^*}{2k_x} \boldsymbol{\Omega}'(\mathbf{k}) \quad (10.6)$$

给出电子自旋极化在空间上的进动方向以及频率。同时，它的动量依赖关系也给出电子自旋极化在空间上的非均匀扩展。则在有任何的散射包括自旋守恒散射时，这个非均匀扩展都会导致不可逆自旋弛豫/去相位。在给出数值计算结果之前，我们先在理论上研究一种非常特殊的情况： $\alpha = \beta$ 。

此时

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} = & \frac{m^*}{2} \left\{ 2\beta \left(\sin\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) + \cos\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) \frac{k_y}{k_x} \right) \hat{\mathbf{n}}_0 \right. \\ & \left. + \gamma \left(\frac{k_x^2 - k_y^2}{2} \sin 2\theta + k_x k_y \cos 2\theta \right) \begin{pmatrix} k_y/k_x \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}. \end{aligned} \quad (10.7)$$

我们发现 $\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}}$ 包括两部分：波矢大小 k 的零阶项和二阶项。其中零阶项始终沿着固定的方向 $\hat{\mathbf{n}}_0$ ，并且既有动量（角度）依赖部分也有动量无关部分，不过二阶项总是动量相关的。根据以前的结果，我们知道只有动量相关的部分才会贡献非均匀扩展，从而对自旋弛豫有贡献。

我们首先分析在不考虑 Dresselhaus 自旋轨道耦合三次方项（即 $\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}}$ 的二次方项）的贡献时的自旋扩散。在这种情况下，有效进动磁场的方向变为动量 \mathbf{k} 无关，总是指向方向 $\hat{\mathbf{n}}_0$ 。从第8章中的讨论我们知道，在空间均匀的系统，自旋弛豫时间对自旋极化方向表现出非常强的各向异性：沿着 $\hat{\mathbf{n}}_0$ 方向的自旋极化有着无穷长的自旋弛豫时间，而其他两个垂直方向的弛豫时间却因为很强的自旋轨道耦合而变得非常的短。在物理上的理解是：对于沿着 $\hat{\mathbf{n}}_0$ 方向的自旋极化，由于和有效磁场 $\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}}$ 的方向相同，从而不会围绕有效磁场进动，导致没有非均匀扩展，在只有自旋守恒散射作用时，自旋弛豫时间变得无穷长；而对于其他两个方向，自旋进动的频率非常的快，给出很强的非均匀扩展以及很短的自旋弛豫时间。对于自旋输运也由同样的结果：当自旋极化沿着 $\hat{\mathbf{n}}_0$ 方向，和 $\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}}$ 方向一样时，无论沿着什么方向注入的自旋极化在空间上都不会衰减，这个结果即使在包括散射时也是正确的。同样的，对于方向垂直于 $\hat{\mathbf{n}}_0$ 的自旋极化，其自旋扩散长度却由于非常强的自旋轨道耦合而变的非常短。

然而，和空间均匀系统中的自旋弛豫完全不一样的是，在自旋扩散/输运中还有另外独立于自旋极化方向的新的自由度，即自旋注入方向。这个自由度会在自旋扩散中给出一个新的各向异性。当自旋注入方向 $\theta = 3\pi/4$ ，即沿着 $(\bar{1}10)$ 方向，在不考虑 Dresselhaus 项的三次方项的贡献时，有效进动磁场变为 $\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} = m^* \beta \hat{\mathbf{n}}_0$ ，它是动量无关的量。此时如下的解

$$\rho_{\mathbf{k}}(x) = e^{im^* \gamma (k_z^2) \sigma_y x} \rho_{\mathbf{k}}(x=0) e^{-im^* \gamma (k_z^2) \sigma_y x} \quad (10.8)$$

可以满足方程 (10.5)，即使在包括散射项以后这个解仍然是满足的。其中 $\rho_{\mathbf{k}}(x=0)$ 是左边边界的有极化的费米分布。从解 (10.8) 中可以看出，对于所有的动量 \mathbf{k} 的电子而言，自旋极化的进动频率都是一样的，值为 $\frac{\pi}{m^* \gamma (k_z^2)}$ 。因此，自旋系统的进动频率同样没有非均匀扩展，从而给出无穷长的自旋扩散长度。这个结论对于沿着任何方向的自旋极化都是成立的。产生这种结果的物理原因是：在空间不均匀的系统中自旋输运时，自旋极化的进动频率不仅仅是由自旋轨道耦合决定，而且也由扩散速度 k_x 决定，见

式 (10.6)。因此在空间均匀的系统里是得不到这个结果的，那里自旋极化的进动频率仅仅由自旋轨道耦合决定。不过，在考虑了 Dresselhaus 三次方项的贡献以后，进动的频率将会依赖于电子动量，从而导致非均匀扩展，给出有限长的自旋扩散长度。下面我们给出用上一章中提到的数值计算方法自洽的求解包括了 Dresselhaus 三次方项以后的结果。

10.2 计算结果

我们在阱宽为 $a = 5 \text{ nm}$ 的 GaAs 量子阱中数值求解动力学自旋 Bloch 方程，其中考虑电子-电子散射和电子-LO 声子散射。我们取 Dresselhaus 自旋轨道耦合系数为 $\gamma = 25 \text{ eV}\cdot\text{\AA}^3$ ，在没有特别说明的时候，电子浓度以及温度分别取做 $N_e = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 和 $T = 200 \text{ K}$ 。散射项的矩阵元和前面一样。这里，对于自旋极化沿着不同方向 $\hat{\mathbf{n}}$ 的输运，我们通过取不同的边界条件来实现：

$$\begin{cases} \rho_{\mathbf{k}}(x=0, t)|_{k_x > 0} = \frac{F_{\mathbf{k},\uparrow} + F_{\mathbf{k},\downarrow}}{2} + \frac{F_{\mathbf{k},\uparrow} - F_{\mathbf{k},\downarrow}}{2} \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \\ \rho_{\mathbf{k}}(x=L, t)|_{k_x < 0} = \frac{F_{\mathbf{k},\uparrow} + F_{\mathbf{k},\downarrow}}{2}, \end{cases} \quad (10.9)$$

其中 $F_{\mathbf{k},\sigma} = [e^{(k^2/2m^* - \mu_\sigma)/k_B T} + 1]^{-1}$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) 是费米分布以及 μ_σ 是化学势。通过求出的单粒子密度矩阵可以得到沿着任何方向 $\hat{\mathbf{n}}$ 的总自旋极化

$$\Delta N(x) = \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(x) \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}] \quad (10.10)$$

的空间演化，我们对其用函数

$$\Delta N(x) = C \exp\left(-\frac{x}{L_d}\right) \cos\left(\frac{2\pi x}{L_0} + \phi\right) \quad (10.11)$$

拟合，可以得到自旋扩散长度 L_d 以及自旋振荡周期 L_0 。

10.2.1 $\alpha = \beta$ 时自旋扩散/注入方向以及自旋极化方向的依赖关系

考虑了 Dresselhaus 自旋轨道耦合的三次方项的贡献后，我们先研究在自旋极化方向沿着 (110) 方向 (即 $\hat{\mathbf{n}}_0$) 时自旋注入方向对自旋扩散长度的影响。作为比较，我们同时考虑了沿着垂直于 $\hat{\mathbf{n}}_0$ 方向的 $\hat{\mathbf{z}}$ 和 $\hat{\mathbf{n}}_1 = \hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{n}}_0$ 两个方向的自旋极化的注入，给出自旋扩散长度随着自旋注入方向的变化。

图 10-2 中给出了在 $\alpha = \beta$ 以及自旋极化沿着三个不同方向 $\hat{\mathbf{n}}_0$ (■)、 $\hat{\mathbf{n}}_1$ (○) 以及 $\hat{\mathbf{z}}$ (×) 时自旋扩散长度 L_d (实线) 和自旋振荡周期的倒数 L_0^{-1} (虚线) 随着自旋注入方向 θ 的变化。从图上可以看出，随着 Dresselhaus 自旋轨道耦合的三次方项的加入，自

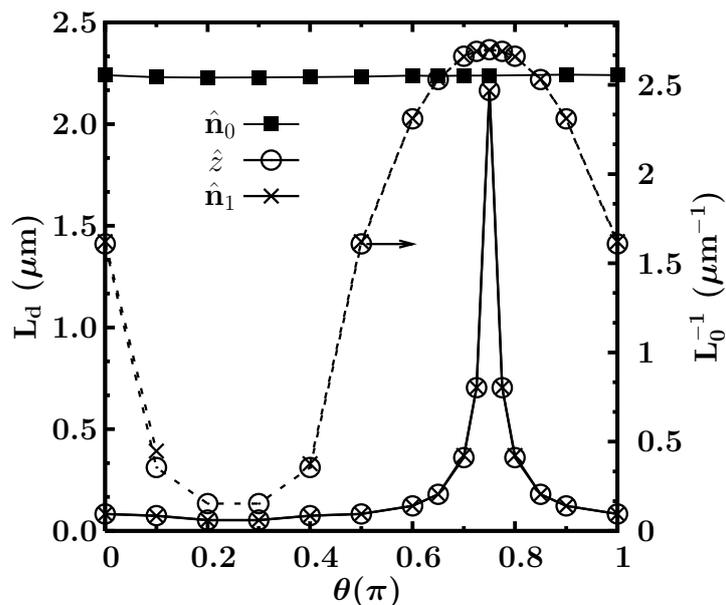


图 10-2: 在 $\alpha = \beta$ 以及自旋极化沿着三个不同方向 \hat{n}_0 (■)、 \hat{n}_1 (○) 以及 \hat{z} (×) 时自旋扩散长度 L_d (实线) 和自旋振荡周期的倒数 L_0^{-1} (虚线) 随着自旋注入方向 θ 的变化。温度 $T = 200$ K。其中自旋振荡周期的标度在图的右边。

旋扩散长度变为有限值。但是对于极化方向沿着 (110) (即 \hat{n}_0) 方向的自旋扩散长度几乎和自旋注入方向无关, 这和前面讨论的没有考虑 Dresselhaus 自旋轨道耦合三次方项时自旋扩散长度对任何方向的自旋注入都是无穷长的结果是一致的。同时, 沿着这个方向的自旋极化在注入时的振荡周期为无穷长。这是因为自旋振荡的周期基本是由有效进动磁场 $\omega_{\mathbf{k}}$ 中的动量无关的零阶项所决定的, 不过由于它的方向和自旋极化的方向相同, 故不会引起自旋振荡。在以前的工作和实验中都指出: 在散射足够强的时候, 提供非均匀扩展的有效进动磁场不会造成自旋极化的进动 [61, 174, 335]。所考虑的系统非均匀扩展是由有效进动磁场中的二次方项提供, 即

$$\frac{m^* \gamma k^2}{2\hbar^2} \frac{1}{2} \sin(2\theta_{\mathbf{k}} + 2\theta) \begin{pmatrix} ky/kx \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

其中 k 和 $\theta_{\mathbf{k}}$ 是动量 \mathbf{k} 的大小和方向。从上面的表达式可以很容易看出, 自旋注入方向 θ 几乎对非均匀扩展的大小没有影响, 给出自旋扩散长度不随着自旋注入方向变化。

同时, 从图上可以看出, 当极化方向沿着垂直于 \hat{n}_0 的两个方向 \hat{z} 以及 \hat{n}_1 时, 自旋扩散长度在除了自旋注入方向 $\theta = 3\pi/4$ 附近的值都远远小于沿着 \hat{n}_0 方向的自旋扩散长度, 使自旋扩散长度对于自旋极化方向表现出非常强的各向异性。进一步, 可以很容易看出对于两个垂直方向的自旋极化的自旋扩散长度 L_d 和自旋振荡周期 L_0 都对自旋注入方向表现出非常强的各向异性。同时, 这两个方向的自旋扩散长度以及振荡周期几乎都是一样的。这个结果可以很容易从由 $\omega_{\mathbf{k}}$ 导致的非均匀扩展中理解: 由

于 $\beta \gg \gamma(k^2)$, 自旋极化方向沿着 $\hat{\mathbf{n}}_1$ 和 $\hat{\mathbf{z}}$ 方向的非均匀扩展主要是由 $\omega_{\mathbf{k}}$ 中的动量相关的零阶项决定, 而这一项对于这两个方向的自旋极化的作用总是相同的并且对自旋扩散方向 θ 非常敏感, 从而使这两个方向的自旋扩散长度相同。同时, 由于自旋振荡周期是由 $\omega_{\mathbf{k}}$ 的动量无关的零阶项决定, 即 $m^*\beta \sin(\theta - \pi/4)$, 和我们计算结果符合的很好。

现在我们讨论自旋注入方向沿着 $\theta = 3\pi/4$ 时而自旋极化沿着不同方向的扩散问题。从图上可以看出, 和没有考虑 Dresselhaus 三次方项的结果类似, 此时这三个自旋极化方向的自旋扩散长度几乎相同, 自旋极化方向各向异性在这个特殊的自旋注入方向中消失了。这是因为当 $\theta = 3\pi/4$ 时, $\omega_{\mathbf{k}}$ 中的动量相关的零阶项始终为零, 从而所有的非均匀扩展都是有它的二阶项贡献, 给出非均匀扩展对于任何的自旋极化方向都是一样的, 并且得到比较长的自旋扩散长度。接下来我们主要集中精力研究自旋注入方向沿着 $\theta = 3\pi/4$ 时的结果。

10.2.2 温度和电子浓度的依赖关系

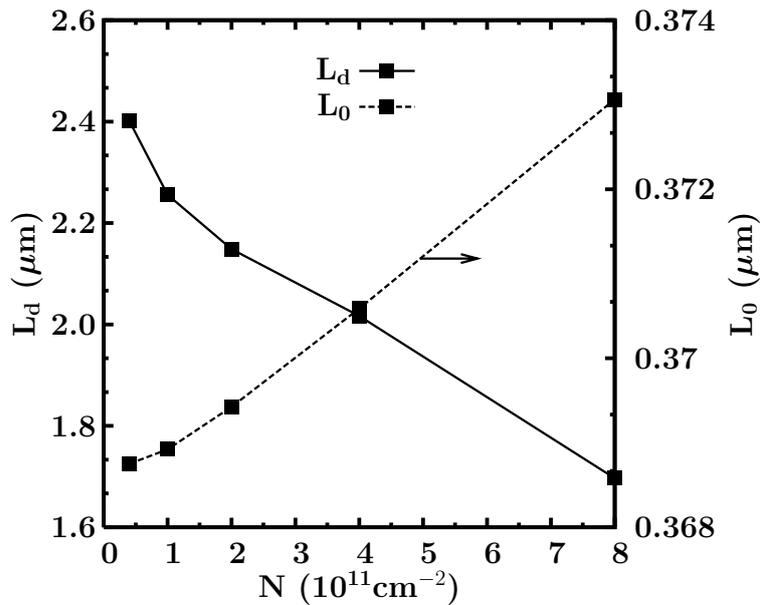


图 10-3: 自旋扩散长度 L_d (实线) 和自旋振荡周期 L_0 (虚线) 随着电子浓度的变化。其中 $\alpha = \beta$ 、自旋注入沿着方向 $\theta = 3\pi/4$ ($\hat{\mathbf{n}}_1$)、自旋极化方向沿着 z 方向以及温度 $T = 200 \text{ K}$ 。自旋振荡周期的标度在图的右边。

当 $\alpha = \beta$ 并且自旋注入方向沿着 $\hat{\mathbf{n}}_1$ 方向 (即 $\theta = 3\pi/4$) 时, 图 10-4 和图 10-3 分别给出自旋扩散长度的电子浓度和温度的依赖关系。在前一节的讨论我们知道, 这种条件下的自旋扩散长度对于自旋极化方向是各向同性的, 因此我们选择自旋极化方向为 $\hat{\mathbf{z}}$ 方向。从图上可以看出, 随着电子浓度的增加或者温度的升高, 自旋扩散长度都有比较大的减小。同时自旋振荡的周期有几乎可以忽略的增加。这种依赖关系仍然可以用非均匀扩展导致的自旋弛豫的观点来理解。和在上一章中仅仅考虑 Dresselhaus 自

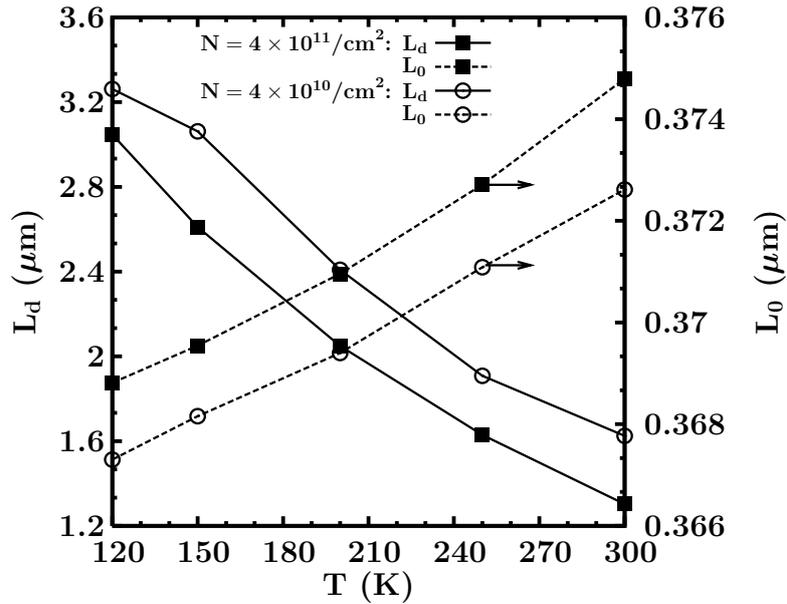


图 10-4: 自旋扩散长度 L_d (实线)和自旋振荡周期 L_0 (虚线) 随着温度的变化。其中 $\alpha = \beta$ 、自旋注入沿着方向 $\theta = 3\pi/4$ (\hat{n}_1) 以及自旋极化方向沿着 z 方向, 这里我们考虑了两种不同电子浓度 $N_e = 4 \times 10^{11}$ (■) 以及 $N_e = 4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ (○)。自旋振荡周期的标度在图的右边。

旋轨道耦合时的自旋扩散长度非常弱的温度依赖关系不一样, 这里对于温度的依赖关系非常的强。这一点可以从 $\omega_{\mathbf{k}}$ 各向异性的进动频率所给出的非均匀扩展在这两种情形下不同的行为中得到理解: 在上一章的结果中, 非均匀扩展主要是由 $\omega_{\mathbf{k}}$ 的动量依赖的零阶项决定, 它对电子浓度和温度的依赖都很弱; 然而, 在现在所讨论问题中, 由于 $\alpha = \beta$ 且 $\theta = 3\pi/4$, 动量依赖的零阶项的始终为零, 使得非均匀扩展是由二阶项决定。这一项正比于 k^2 , 从而对于温度和电子浓度的变化非常敏感, 从而给出有着显著下降的自旋扩散长度。对于自旋振荡周期, 它是由 $\omega_{\mathbf{k}}$ 的动量无关的零阶项所决定, 从而对电子浓度和温度的依赖关系不是很大。计算结果中的些许变化是由二阶项和散射的贡献所引起。

10.2.3 门电压的影响

现在我们通过调节门电压来改变 Dresselhaus 自旋轨道耦合和 Rashba 自旋轨道耦合的相对强弱。这里我们取自旋注入方向沿着 $\theta = 3\pi/4$, 温度 $T = 200 \text{ K}$ 。图 10-5 给出自旋极化分别沿着不同方向 \hat{n}_0 (■)、 \hat{n}_1 (○) 以及 z (×) 时的自旋扩散长度 L_d (实线)和自旋振荡周期 L_0 (虚线) 随着 α/β 的变化。由于当自旋极化方向沿着 \hat{n}_0 时自旋振荡周期为无穷长, 图上我们仅仅给出了另外两个方向的振荡周期。从图上可以看出有三个主要结果: (i) 对于各个方向的自旋极化, 考虑了 Dresselhaus 自旋轨道耦合的三次方项以后自旋扩散长度的最大值出现在 $\alpha/\beta \sim 0.95$ 处, 这和不考虑三次方项时自旋扩散长度的最大值出现在 $\alpha/\beta = 1$ 时的结果 (无穷长的自旋扩散长度) 完全不一样。(ii)

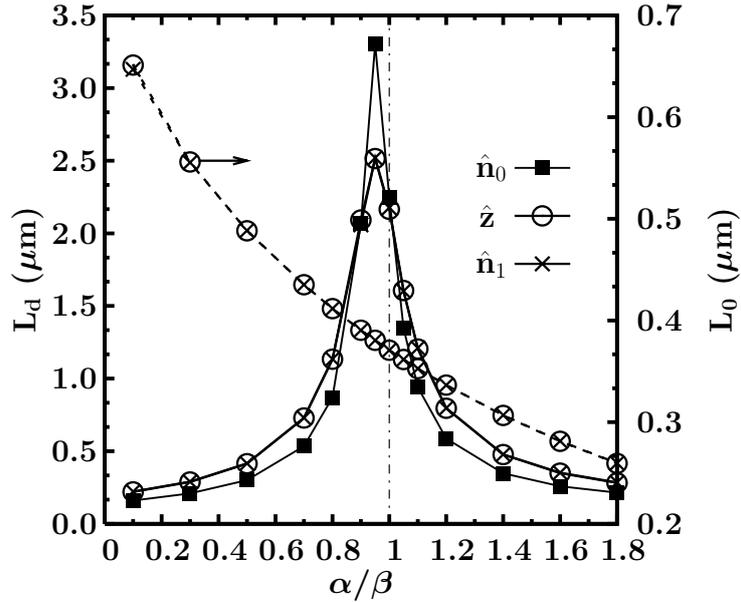


图 10-5: 自旋扩散长度 L_d (实线) 和自旋振荡周期 L_0 (虚线) 随着 α/β 的变化。其中自旋注入沿着方向 $\theta = 3\pi/4$ (\hat{n}_1), 自旋极化分别沿着 \hat{n}_0 (■)、 \hat{n}_1 (○) 以及 z (×) 方向。自旋振荡周期的标度在图的右边。

除了在 $\alpha/\beta \sim 0.9$ 附近外, 自旋扩散长度对自旋注入方向各向异性在很大程度上受到抑制, 并且对于自旋极化方向沿着 \hat{z} 和 \hat{n}_1 的自旋扩散长度始终是一样的。(iii) 自旋振荡周期随着 α/β 的增大而下降。这些结果仍然可以从非均匀扩展的观点来理解: 当 $\theta = 3\pi/4$ 时, 自旋扩散方向的自旋振荡频率是由

$$\omega_{\mathbf{k}} = \left[\left(-\beta + \alpha + \frac{\gamma k^2}{2} \right) \frac{k_y}{k_x} - \gamma k_x k_y \right] \hat{n}_1 - \left[\beta + \alpha - \frac{\gamma}{2} (k_x^2 - k_y^2) \right] \hat{n}_0 \quad (10.12)$$

给出。在温度为 $T = 200$ K 时, $\langle k^2 \rangle / 2 \sim 0.11(\pi/a)^2$, 其中 $\langle \dots \rangle$ 表示对自旋极化的平均。因此当 $\alpha/\beta \sim 0.95$ 时 $(-\beta + \alpha + \frac{\gamma k^2}{2}) \frac{k_y}{k_x} \hat{n}_1$ 几乎为零从而几乎不会对非均匀扩展有贡献, 从而给出一个自旋扩散长度的最大值。进一步可以看出, $\frac{\gamma}{2}(k_x^2 - k_y^2) \hat{n}_0$ 只对自旋极化方向沿着 \hat{z} 和 \hat{n}_1 的运输中的非均匀扩展有贡献, 而几乎不影响自旋极化方向沿着 \hat{n}_0 时的非均匀扩展, 这就解释了为什么在 $\alpha/\beta \sim 0.95$ 时自旋极化沿着 \hat{n}_0 方向的自旋扩散长度要远大于自旋极化沿着另外两个方向的自旋扩散长度。最后, 由于自旋振荡周期 L_0 是由 $\omega_{\mathbf{k}}$ 中动量无关的量大小所决定的, 即 $\beta(\alpha/\beta + 1) \hat{n}_0$ 。它随着 α/β 的增加而变大, 从而给出 L_0 随着 α/β 下降。

第十一章 动力学方法研究由偏转散射导致的外禀自旋霍尔效应

从前面几章中我们知道自旋守恒散射对电子自旋弛豫过程有非常重要的影响。而对于 EY 自旋轨道耦合，在量子阱系统中它只与自旋的 z 分量有关，所以对自旋弛豫过程的影响不大。然而在有外场驱动下系统从平衡态演化到稳态的过程中，EY 自旋轨道耦合可能会对系统稳态的自旋性质有着重要的影响。本章中我们通过自洽求解完全微观的动力学自旋 Bloch 方程的方法来研究在 n 型 (001)-GaAs 对称量子阱中由偏转散射 (skew scattering) 导致的外禀自旋霍尔效应 (extrinsic spin Hall effect) 的动力学性质。我们发现在稳态时，如果自旋轨道耦合仅包含动量的线性项，外禀自旋霍尔电流/电导消失；在包含了动量的三次方项贡献后，外禀自旋霍尔电流/电导不为零，但是是一个非常小的值。这和 Tse 和 Sarma [110] 考虑自旋轨道耦合对自旋霍尔电导的顶角修正的 Kubo 公式得到的结果一致。对于稳态时这种外禀自旋霍尔电流/电导的消失，由 Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合引起的自旋进动起着非常重要的作用。同时，自旋进动和偏转散射的共同作用可以在半导体内部产生平面内的自旋极化，并且这种自旋极化和流致极化具有完全不一样的性质，包括具有不同的自旋极化方向、量子阱阱宽和杂质浓度的依赖关系。

11.1 EY 自旋轨道耦合

首先我们给出 EY 自旋轨道耦合在动力学 Bloch 方程中的表达式。和 Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合是决定系统的相干性质不同，EY 自旋轨道耦合必须在散射中心附近，比如杂质、声子或者电子-电子散射过程中才能表现出来，并且只有考虑到三阶的贡献才会对电子稳态的自旋性质有影响。我们重新写出包括 EY 自旋轨道耦合的电子-杂质相互作用 [见公式 (2.41)] 如下

1. 三维系统

$$H_{ei} = \sum_{\mathbf{K}\sigma_1; \mathbf{Q}\sigma_2} c_{\mathbf{K}\sigma_1}^\dagger \langle \sigma_1 | V_{\mathbf{K}\mathbf{Q}} | \sigma_2 \rangle c_{\mathbf{Q}\sigma_2}, \quad (11.1)$$

其中 $V_{\mathbf{K}\mathbf{Q}} = v^i(\mathbf{K} - \mathbf{Q})[1 - i\lambda_c(\mathbf{K} \times \mathbf{Q}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] \rho_i(\mathbf{K} - \mathbf{Q})$ 是杂质散射在动量空间的矩阵元， $v^i(\mathbf{Q})$ 是电子-杂质相互作用 $v^i(\mathbf{R})$ 的傅立叶分量，而 $c_{\mathbf{K}\sigma}$ 是电子的湮灭算符。

2. 量子阱系统

$$H_{ei} = \sum_{\mathbf{k}\sigma_1; \mathbf{q}\sigma_2} c_{\mathbf{k}\sigma_1}^\dagger \langle \sigma_1 | V_{\mathbf{k}\mathbf{q}} | \sigma_2 \rangle c_{\mathbf{q}\sigma_2}, \quad (11.2)$$

其中 $V_{\mathbf{k}\mathbf{q}} = \sum_{q_z} v^i(\mathbf{k} - \mathbf{q}; q_z) I(q_z) [1 - i\lambda_c(\mathbf{k} \times \mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] \rho_i(\mathbf{k} - \mathbf{q}; q_z)$ 是杂质散射在动量空间的矩阵元, $I(q_z)$ 是量子阱系统的形状因子, 而 $c_{\mathbf{q}\sigma}$ 是二维电子的湮灭算符。这里我们考虑的是对称量子阱中的长程相互作用。

11.1.1 偏转散射

可以看出, 无论对于三维还是二维系统, EY 自旋轨道耦合都给出了额外的自旋相关的项。为了更清楚的了解这种额外项在散射过程中对电子自旋的影响, 我们将其从动量空间变换到实空间。为了简单起见, 我们以三维系统为例, 考虑一个杂质散射中心, 即在 $\rho_i(\mathbf{K} - \mathbf{Q}) = 1$ 时, 有

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{R}_1 | V | \mathbf{R}_2 \rangle \\ &= \langle \mathbf{R}_1 | \mathbf{K}_1 \rangle V_{\mathbf{K}_1 \mathbf{K}_2} \langle \mathbf{K}_2 | \mathbf{R}_2 \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{K}_1 d\mathbf{K}_2 e^{-i\mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{R}_1 + i\mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{R}_2} v^i(\mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_2) [1 - i\lambda_c(\mathbf{K}_1 \times \mathbf{K}_2) \cdot \boldsymbol{\sigma}] \\ &= \left[1 - i\lambda_c(\nabla_{\mathbf{R}_1} \times \nabla_{\mathbf{R}_2}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] \int \frac{d\mathbf{K}_1 d\mathbf{K}_2}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{R}_1 + i\mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{R}_2} v^i(\mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_2). \end{aligned} \quad (11.3)$$

作变换 $\mathbf{K} = \frac{\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2}{2}$ 和 $\mathbf{Q} = \mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_2$ 后, 上式化作

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{R}_1 | V | \mathbf{R}_2 \rangle \\ &= \left[1 - i\lambda_c(\nabla_{\mathbf{R}_1} \times \nabla_{\mathbf{R}_2}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) v^i\left(\frac{\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2}{2}\right) \\ &= \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) v^i(\mathbf{R}_2) + \lambda_c \left[(-i\nabla_{\mathbf{R}_1} \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)) \times (\nabla_{\mathbf{R}_2} v^i\left(\frac{\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2}{2}\right)) \right] \cdot \boldsymbol{\sigma}. \end{aligned} \quad (11.4)$$

因此, 坐标空间内的算符形式为

$$V(\mathbf{R}) = v^i(\mathbf{R}) + \lambda_c \left[\mathbf{P} \times (\nabla_{\mathbf{R}} v^i(\mathbf{R})) \right] \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (11.5)$$

对于二维量子阱系统, EY 自旋轨道耦合在坐标空间内表示为:

$$V(\mathbf{r}) = v^{2D}(\mathbf{r}) + \lambda_c \left[\mathbf{p} \times (\nabla_{\mathbf{r}} v^{2D}(\mathbf{r})) \right] \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (11.6)$$

其中 $v^{2D}(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \sum_{q_z} v^i(\mathbf{k}, q_z) I(q_z)$ 。其中第二项就是偏转散射的散射势。从公式 (11.5) 和 (11.6) 中自旋相关部分的势的分布可以大致了解电子在散射过程中的运

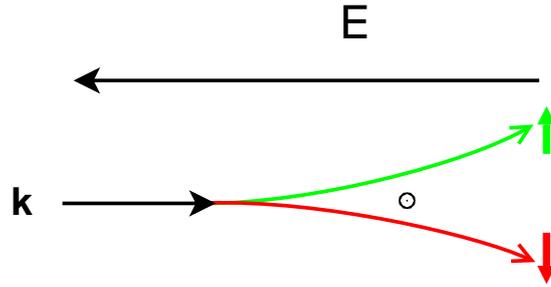


图 11-1: 偏转散射的示意图。经过一个散射中心后, 自旋朝上的电子总是向左偏转而自旋朝下的电子总是向右偏转。

动状况。对于电子和散射中心的相互作用 $v(\mathbf{R}) = -\frac{e^2}{R}$ 可以知道, $\mathbf{P} \times (\nabla_{\mathbf{R}} v^i(\mathbf{R})) = \frac{e^2}{R^3} \mathbf{P} \times \mathbf{R}$, 因此在经过散射中心时, 对于自旋朝上的电子而言, 始终是运动方向左边的势能较小; 而对于自旋朝下的电子而言, 始终是右边的势能较小, 从而给出自旋朝上的电子总是向左偏转而自旋朝下的电子总是向右偏转。具体见示意图 11-1。

11.1.2 偏转散射项表达式

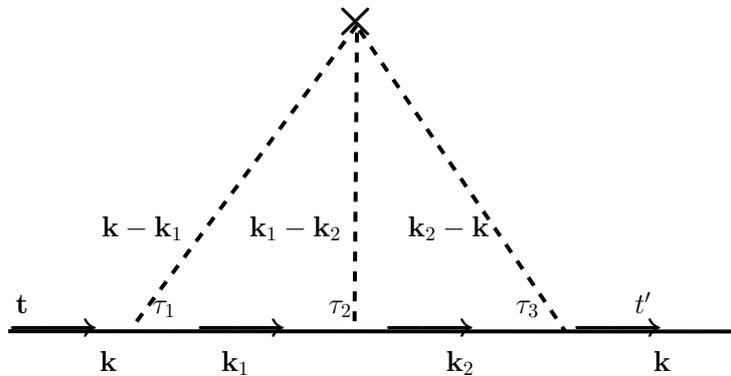


图 11-2: 杂质引起的 EY 自旋轨道耦合引起的偏转散射对应的费曼图, 这是一个三阶过程。

接下来我们给出空间均匀量子阱系统中偏转散射的散射项表达式。为了给出偏转散射, 必须考虑到 EY 自旋轨道耦合三阶展开项的贡献。考虑如图 11-2 所示的散射过程, 其对自能项的贡献为:

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^i(\tau_1, \tau_3) = \int d\tau_2 V_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} G_{\mathbf{k}_1}(\tau_1, \tau_2) V_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} G_{\mathbf{k}_2}(\tau_2, \tau_3) V_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}}. \quad (11.7)$$

按照附录 B 中的推导方法, 在作了 Markov 近似并且只考虑到自旋轨道的最低阶后, 可

以得到偏转散射的表达式为:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{ss} &= -2\pi^2 N_i \lambda_c \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2; q_1 q_2} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) v^i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1, q_1) I(q_1) v^i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, q_2) I(q_2) \\ &\quad \times v^i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}, -q_1 - q_2) I(-q_1 - q_2) \{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \times (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \rho_{\mathbf{k}_2}\}. \end{aligned} \quad (11.8)$$

11.2 自旋流

11.2.1 反常位置算符和反常速度算符

在半导体中, 由于自旋轨道耦合的作用, 导带和价带的波函数混合在一起。在第2章中我们采用附录 A 中给出的幺阵变换 e^S 将两能带哈密顿量变换为块对角的形式, 则变化后的导带和价带之间的关联消失。其中 S 的具体表达式由公式 (2.22) 和 (2.24) 给出。这个变换作用在其它算符-如位置算符和动量算符等-作用后会出现额外的自旋相关项。即

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{r}} &= e^{-S} \mathbf{r} e^S \\ &= \mathbf{r} + \delta \mathbf{r}. \end{aligned} \quad (11.9)$$

其中 $\delta \mathbf{r}$ 给出速度算符的反常项。在展开到自旋轨道耦合系数的最低阶时, 导带部分的反常项给出

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{r} &= \frac{1}{2} (s_{\mathbf{k}} [\mathbf{r}, s_{\mathbf{k}}^\dagger] - [\mathbf{r}, s_{\mathbf{k}}] s_{\mathbf{k}}^\dagger) \\ &= \lambda_c \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}. \end{aligned} \quad (11.10)$$

由于含有动量相关的项, 位置算符各个分量之间不再对易, 满足 $[\tilde{r}_i, \tilde{r}_j] = 2i\varepsilon_{ijl}\sigma_l$, 其中 ε_{ijl} 是 Levi-Civita 张量。相互作用在实空间中的变换为

$$\begin{aligned} \tilde{V}(\mathbf{r}) &= V(\tilde{\mathbf{r}}) = V(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) \\ &\sim V(\mathbf{r}) + \nabla V(\mathbf{r}) \cdot \delta \mathbf{r}. \end{aligned} \quad (11.11)$$

在有外场驱动的系统, 系统包括了杂质散射的 Kane 模型哈密顿量 (2.12) 写作

$$H = H_{8 \times 8}(\mathbf{k}_i) - e \mathbf{E} \cdot \mathbf{r} + V_i(\mathbf{r}). \quad (11.12)$$

对 H 使用附录 A 中 Löwdin-Partitionig 方法, 将 $H_{8 \times 8}$ 通过幺阵变化块对角的过程中, 导带和价带都会出现额外的自旋轨道耦合项。同时, 电场驱动项和杂质散射也会有额外

的项出现, 给出

$$\tilde{H} = \frac{\mathbf{k}^2}{2m^*} + H_{so}(\mathbf{k}) - e\mathbf{E} \cdot (\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) + V_i(\mathbf{r}) + \nabla V(\mathbf{r}) \cdot \delta\mathbf{r}. \quad (11.13)$$

则变换后的电子速度算符化作

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{v}} &= -i[\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{H}] \\ &= \frac{\hbar\mathbf{k}}{m^*} - i[\mathbf{r}, H_{so}(\mathbf{k})] + \delta\mathbf{v}. \end{aligned} \quad (11.14)$$

其中 $\delta\mathbf{v}$ 给出反常速度算符,

$$\delta\mathbf{v} = 2\lambda_c e\mathbf{E} \times \boldsymbol{\sigma} - 2\lambda_c \nabla_{\mathbf{r}_i} V_i(\mathbf{r}) \times \boldsymbol{\sigma}. \quad (11.15)$$

11.2.2 自旋流的定义

自旋流的定义一直都存在着很多的争议 [97, 98, 127–130]。这完全是由于在有自旋轨道耦合的系统, 自旋朝上的态和自旋朝下的态之间可以翻转, 导致自旋不是守恒量, 从而不能给出一个守恒的流 [102]。我们在这里采用自旋流最简单也是应用最广泛的定义

$$J_l^i(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \{ \tilde{v}_l, \sigma_i \}, \quad (11.16)$$

表示沿着 l 方向流动具有自旋极化方向沿着 i 的自旋流。虽然自旋流本身不能被直接测量, 并且这个定义本身也不能直接和自旋积累联系, 但是它仍然是个有效的模型参量用于比较各种不同的自旋轨道耦合作用 [102]。考虑两维电子气, 施加电场在 x 方向, 并且考虑流沿着 y 方向而自旋极化沿着 z 方向的自旋霍尔流。在同时考虑 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合后得到

$$J_y^z(\mathbf{k}) = \frac{k_y}{m^*} \sigma_z - 2\lambda_c e E_x - 2\lambda_c \frac{\partial}{\partial x} v^{2D}(\mathbf{r}). \quad (11.17)$$

上式中后两项给出 side-jump 机制对自旋霍尔流的贡献。不过在我们考虑的动力学方程中, 认为电子动量弛豫非常的快, 从而电子单粒子密度矩阵对动量而言始终是对角的。在对杂质作无规相位近似后, 其对自旋流的 side-jump 贡献变为零, 即

$$\begin{aligned} J_y^z &= \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr}[J_y^z(\mathbf{k})\rho_{\mathbf{k}}] \\ &= 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{k_y}{m^*} s_{\mathbf{k}}^z - 2\lambda_c e E_x N. \end{aligned} \quad (11.18)$$

其中 $s_{\mathbf{k}}^z = \frac{f_{\mathbf{k},\uparrow} - f_{\mathbf{k},\downarrow}}{2}$ 是动量为 \mathbf{k} 的沿着 z 方向的自旋极化, 而 N 为系统总的电子数目。

因此，在没有考虑电子不同动量之间关联的时候，side-jump 机制对自旋霍尔流的贡献为 $-2\lambda_c e E_x N$ ，不随时间演化。对于定义中的第一项，当沿着 z 方向的自旋极化对动量 \mathbf{k} 分布不对称时就可以形成自旋霍尔流。前面给出的偏转散射就可以使电子的自旋极化在散射后的关于动量不对称：对于向右运动的电子，当散射后 $k_y > 0$ 时，自旋极化朝上，而当散射后 $k_y < 0$ 时，自旋极化朝下。因此，偏转散射可以给出不为零的自旋霍尔流，对应的自旋霍尔电导为 $\sigma_y^z = J_y^z / E_x$ 。接下来将研究自旋霍尔流在系统从施加电场到达稳态的动力学过程。

11.3 动力学自旋 Bloch 方程

考虑空间均匀系统二维电子气中的动力学自旋 Bloch 方程为：

$$\frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(t)}{\partial t} - eE \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} + \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{coh} + \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{scat} + \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{ss} = 0. \quad (11.19)$$

其中 $\left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{ss}$ 为前面给出的偏转散射。在计算中，我们考虑了所有的散射项，包括电子-杂质散射、电子-声子散射以及电子-电子散射。我们首先在只有线性自旋轨道耦合时解析的分析上面的动力学方程。

11.3.1 稳态时线性项自旋轨道耦合给出的外禀自旋流为零

我们将方程 (11.19) 两边分别对所有的动量 \mathbf{k} 求和，则得到：

$$\frac{\partial S(t)}{\partial t} - \sum_{\mathbf{k}} \Omega^{2D}(\mathbf{k}) \times \mathbf{s}_{\mathbf{k}}(t) - g\mu_B \mathbf{B} \times \mathbf{S}(t) = 0. \quad (11.20)$$

其中 $\mathbf{S}(t) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{s}_{\mathbf{k}}(t)$ 是系统中的总自旋极化以及 $\mathbf{s}_{\mathbf{k}}(t) = \frac{1}{2} \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\sigma}]$ 为动量 \mathbf{k} 的自旋极化。从第8章可以知道所有的自旋守恒的散射对于动量 \mathbf{k} 的求和都为零。同时由于在二维系统中偏转散射不会翻转自旋，只会偏转电子运动的方向而保持自旋极化方向不变，从而其对动量的求和同样也为零以保证粒子数守恒。这个方程和 Dimitrova [365] 利用算符的对易关系得到的结果一致。仅仅考虑线性项的 Dresselhaus 自旋轨道耦合：

$$\Omega^{2D} = \beta \begin{pmatrix} -k_x \\ k_y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.21)$$

则方程 (11.20) 中第二项可以写为

$$\sum_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\Omega}^{2D}(\mathbf{k}) \times \mathbf{s}_{\mathbf{k}}(t) = \beta \begin{pmatrix} J_y^z \\ J_x^z \\ -J_x^y - J_y^x \end{pmatrix}. \quad (11.22)$$

在稳态条件下, 由方程 (11.20) 中对 x 和 y 的分量可以得到

$$J_y^z = \frac{B_y}{\beta} \frac{eg\mu_B}{m^*} S^z. \quad (11.23)$$

从这里可以看出, 在没有外磁场时, 稳态的自旋流 J_y^z 为零。这个结果与 Tse 和 Sarma [110] 在用 Kubo 公式考虑自旋轨道耦合对自旋霍尔电导的顶角修正后得到的结果一致。由于在量子阱中 Dresselhaus 三次方项远比线性方项小, 可以作近似 $\sum_{\mathbf{k}} k_x k_y^2 s_{\mathbf{k}}^z = -\frac{m^*}{e} \langle k_y^2 \rangle J_x^z$ 和 $\sum_{\mathbf{k}} k_y k_x^2 s_{\mathbf{k}}^z = -\frac{m^*}{e} \langle k_x^2 \rangle J_y^z$, 其中 $\langle k_{x/y}^2 \rangle$ 是 $k_{x/y}^2$ 的平均值。则

$$J_y^z = \frac{\gamma((\frac{\pi}{a})^2 - \langle k_y^2 \rangle) B_y - 2\alpha B_x}{\gamma^2((\frac{\pi}{a})^2 - \langle k_x^2 \rangle)((\frac{\pi}{a})^2 - \langle k_y^2 \rangle) - 4\alpha^2} \frac{eg\mu_B}{m^*} S^z. \quad (11.24)$$

可见, 在此近似下, 自旋流 J_y^z 仍然为零。然而从前面的分析可以知道, 在电场的作用下, 偏转散射的确产生了自旋流。下面我们从动力学的角度来分析自旋流消失的物理原因。

11.3.2 自旋流转化为自旋极化

在没有外磁场并且仅仅考虑线性 Dresselhaus 项的贡献时, 我们把方程 (11.20) 的 x 分量重新写为

$$\partial S^x / \partial t = m^* \beta J_y^z / e. \quad (11.25)$$

很容易看出, 只要自旋霍尔流不为零, 它就会转化为沿着 x 方向的自旋极化。图 11-3 有助于理解这种转化。图中蓝色的箭头表示 Dresselhaus 线性自旋轨道耦合的有效磁场方向, 红色箭头表示在有散射作用下的自旋极化方向。在有沿着正向的外电场驱动时, 偏转散射会造成 \mathbf{k} 空间中上半平面的自旋极化方向朝下 (\otimes), 而在下半平面的自旋极化方向朝上 (\odot), 从而产生沿着 y 方向的自旋流。不过此自旋极化会沿着 Dresselhaus 自旋轨道耦合的有效磁场 (方向沿着蓝色箭头) 进动, 并且对上 (下) 半平面的自旋极化进动方向相同, 则在有散射存在的情况下, 最终会产生净的沿着 x 方向的极化 (方向沿着红色箭头)。因此, 自旋霍尔流转化为平面内的自旋极化。

和线性 Dresselhaus 自旋轨道耦合作用下会产生沿着 x 方向的自旋极化不同, Rashba 自旋轨道耦合 (以及由应力导致的自旋轨道耦合) 产生沿着 y 方向的自旋极化。

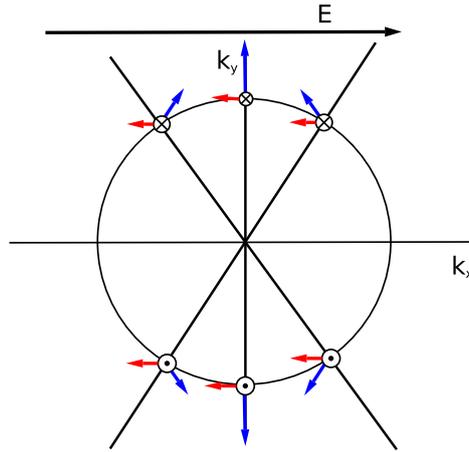


图 11-3: 自旋流转化为沿着 x 方向的极化的示意图。蓝色的箭头表示自旋轨道耦合的有效磁场方向, 红色箭头表示在有散射作用下的自旋极化方向。 \odot (\otimes) 表示自旋朝上 (下) 的极化。

11.4 计算结果

下面我们数值上自洽的求解动力学方程 (11.19), 从而给出在考虑了 Dresselhaus 三次方项时, 自旋霍尔电导 σ_y^z 以及自旋极化度 $P_x = S^x/N_e$ 的时间演化。其中我们考虑了所有的自旋守恒散射, 包括电子-杂质散射、电子-LO 声子散射以及电子-电子散射。其它的参数取为 $N_e = N_i = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-1}$, 量子阱宽 $a = 7.5 \text{ nm}$, $E = 0.1 \text{ kV/cm}$, $\gamma = 11.4 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^3$, 以及 $\lambda_c = 2.07 \text{\AA}$ 。计算结果见图 11-4。从图上可以看出, 在施加电场 1 ps 内, 自旋霍尔电导快速的从零达到最大值, 然后在 50 ps 的特征时间内缓慢的降到一个非常小的稳定值, 这个值不为零的原因主要是三次方项的贡献。同时, 沿着 $-x$ 方向自旋极化从零缓慢的增加达到稳定值 $P_x = 1.2 \times 10^{-4}$ 。

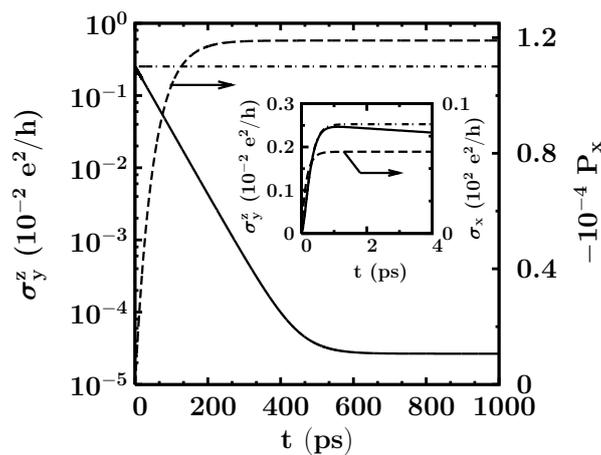


图 11-4: 自旋霍尔电导 (实线和点划线分别是包括/没包括相干项的结果) 以及沿着 $-x$ 方向的自旋极化 (虚线) 随时间的演化。插图中给出了时间小于 4 ps 的自旋霍尔电导和电导的放大图。其中自旋极化和电导的标度在图形的右边。

图 11-3 有助于理解自旋霍尔电导和自旋极化随时间的演化。在施加了正向电场后，电子气在动量空间将会向逆着电场的方向偏移。按照前面对偏转散射的分析，此时自旋朝下的电子将会被散射到上半平面而自旋朝上的电子被散射到下半平面，给出流沿着 y 方向而自旋极化沿着 z 方向的自旋流。由于偏转散射的强度是由电子分布在 \mathbf{k} 空间偏移的大小决定的，从而在电子的动量偏移达到最大值，即系统的电流达到最大值时，自旋霍尔电流达到最大值 $\sigma_y^z \sim 2.5 \times 10^{-3} \frac{e^2}{h}$ 。这点在图 11-4 的插图中可以很容易看出：虚线给出电导随时间的演化，在电导达到稳定值之前，自旋霍尔电导一直增加，这个时间尺度刚好是系统的动量弛豫时间。然后自旋进动开始起作用，不同动量 \mathbf{k} 的自旋极化围绕着各自的 Dresselhaus 有效磁场的 y 分量进动，在散射作用下，最终会在 $-x$ 方向产生净的自旋极化。由对称性可知沿着 y 和 z 方向的自旋极化都为零。

更为有趣的是，我们发现稳态时的自旋霍尔电导远小于以往在文献中广泛采用的 Kubo 公式计算的结果。由于 Kubo 公式是在线性响应理论得到的流对力的响应公式，在最低阶下对不同的力的响应是线性相加的。偏转散射可以导致外禀自旋霍尔电流，因此它是驱动自旋流的力，且在文献中广泛的认为它所给出的就是外禀自旋霍尔电流。从而杂质偏转散射给出的零温下的自旋霍尔电导的 Kubo 公式为： $\frac{2\pi m^* \lambda_c \varepsilon_F}{\hbar^2} \sigma_x \sim 3.37 \times 10^{-3} \sigma_x$ ，其中电导 $\sigma_x = \frac{N_e e^2 \tau}{m^*}$ 。和我们用动力学方法给出的稳态结果 $\sigma_y^z \sim 4.1 \times 10^{-8} \sigma_x$ 相比，有着数量级上的差别。我们知道，Kubo 公式给出的结果的正确性是需要通过 Boltzman 方程或者动力学方程的检验的。比如，在仅仅考虑杂质散射时，Kubo 公式给出电导在最低阶近似下就不正确，只有考虑顶角修正以后才和 Boltzman 方程的结果相同。不过这里的差异来源于由 Dresselhaus 自旋轨道耦合引起的自旋进动给出的非均匀扩展。为了进一步看清楚这一点，我们在图 11-4 中用点划线给出了没有考虑自旋进动时的数值结果。可以看出此时的稳态的自旋霍尔电导给出 $\sigma_y = 0.4 \times 10^{-3} \sigma_x$ ，和 Kubo 公式给出的结果大为接近。它们的差异来源于在 Kubo 公式中只考虑了杂质散射零温的贡献，而动力学方程中却在高温下且包括了所有的散射，特别是电子-LO 声子的散射，会使电导大大减小。因此在计算外禀的自旋霍尔电导时不考虑自旋进动是不合适的。如果希望 Kubo 公式可以给出正确的结果，则需要合适的考虑自旋轨道耦合引起的顶角或者其他高阶的修正 [110]。进一步，side-jump 机制给出一个时间无关的贡献 $\sigma_y^z = -2\lambda\gamma^2 e^2 N_e \sim -2 \times 10^{-3} e^2/h$ ，和偏转散射给出的自旋霍尔电导的符号相反。

需要注意的是，尽管有效磁场引起的自旋进动使自旋霍尔电导为零，它却在产生自旋极化的过程中起着非常重要的作用。从上面的讨论可以知道，由于自旋极化在 $\pm k_y$ 的反对称性，偏转散射单独不会导致任何的自旋极化。与在流致自旋极化中自旋轨道耦合提供了流致有效磁场从而导致自旋极化不同，这里自旋轨道耦合主要是用来提供一个反对称的进动场，和在由自旋相关的声子散射导致的自旋极化中的作用一致。同时，偏转散射导致的自旋极化和流致自旋极化有着不同的性质：

1. 阱宽依赖关系不一样

对于流致自旋极化，它的大小由流致有效磁场的大小决定，流致有效磁场越大，

流致自旋极化越大。在量子阱系统中，由于自旋轨道耦合给出的有效磁场中动量的线性项占主导地位，从而对于阱宽越小的阱，有效磁场越大，给出越大的流致自旋极化。对于由偏转散射和自旋进动同时导致的自旋极化可以如下分析：

从图 11-4 中可知外禀自旋霍尔电流的时间演化可以写为 $J_y^z(t) = J_{y,0}^z e^{-t/\tau_s}$ ，其中 τ_s 是自旋流的弛豫时间， $J_{y,0}^z$ 是自旋霍尔电流近似为在没有考虑自旋进动时的值。根据公式 (11.24)，给出自旋极化

$$S^x = m^* \tau_s \gamma ((\pi/a)^2 - \langle k_x^2 \rangle) J_{y,0}^z / e .$$

从 DP 机制 [170] 可以给出 $\tau_s \propto [\gamma((\pi/a)^2 - \langle k_x^2 \rangle)]^{-2}$ ，则 $S^x \propto \gamma((\pi/a)^2 - \langle k_x^2 \rangle)^{-1}$ 。可见偏转散射引起的自旋极化是随着量子阱的阱宽增大而增大的。

2. 自旋极化的方向

在外电场沿着 x 方向时，对于 Dresselhaus 自旋轨道耦合，流致有效磁场方向沿着 x 方向，导致流致自旋极化沿着 x 方向。然而对于由偏转散射引起的自旋极化，从上面的分析中很容易知道其方向沿着 $-x$ 方向。如果考虑 Rashba 自旋轨道耦合，这两种自旋极化都沿着 y 方向。

3. 杂质浓度的依赖关系不同

流致磁场正比于电子在动量空间的偏移，即系统的迁移率。因此杂质浓度越大，系统的迁移率越小，流致磁场变小，导致流致自旋极化变小。然而，随着杂质浓度的增加，偏转散射本身变强，给出较大的 $J_{y,0}^z$ ，同时由于杂质浓度的增加，自旋弛豫时间 τ_s 也是变大的，从而导致总的由偏转散射引起的自旋极化变大。

第十二章 总结

本论文中，首先我们通过回顾自旋电子学的历史发展过程，半导体自旋电子学的各种实验手段和理论上研究方法，以及最新的研究进展之，大致了解自旋电子学发展的目标以及其中遇到的困难。接着我们在不同的受限系统中就半导体自旋电子学中自旋相干性质以及对自旋的操纵做了详细的讨论。

在讨论受限半导体系统之前，我们仔细回顾了闪锌矿半导体—特别是 GaAs/InAs 材料—的能带结构，讨论了自旋轨道耦合相互作用在固体中的来源以及表达式。对闪锌矿结构的半导体材料能带结构有影响的自旋轨道耦合主要有两种来源：晶格结构的体反演不对称给出了 Dresselhaus 内禀自旋轨道耦合以及由于样品结构反演不对称给出的 Rashba 内禀自旋轨道耦合。除此之外，自旋轨道耦合还会对电子的波函数有很大的影响，给出 EY 自旋轨道耦合，它和自旋守恒散射结合在一起就会给出自旋偏转散射。另外我们给出了有约束势的系统，特别是量子阱系统中的子带结构以及相互作用形式。

对于半导体系统中自旋弛豫/去相位，我们首先在一个简单的两能级系统中介绍了单电子系统中的自旋弛豫/去相位的概念，给出了如何用费米黄金规则以及运动方程求解自旋弛豫/去相位时间。其次将其推广到自旋系综中，给出引起自旋弛豫/去相位的机制的起源以及对应的适用范围，这里包括 EY 机制，DP 机制、BAP 机制、和原子核的超精细相互作用产生的弛豫/去相位机制以及由于非均匀扩展引起的弛豫/去相位机制。其中非均匀扩展引起的自旋弛豫/去相位从一个新的角度大大扩展了 DP 机制对自旋弛豫/去相位过程的理解。对于闪锌矿半导体材料，非均匀扩展引起的自旋弛豫过程占主导地位。然后我们详细讨论了动力学自旋 Bloch 方程对空间均匀系统的时间演化中的自旋弛豫以及空间不均匀系统中输运过程中自旋弛豫的处理。使用动力学自旋 Bloch 方程以及用非均匀扩展的观点，可以很好地理解体材料、量子阱以及量子线系统的自旋弛豫过程。

在对单体问题的研究中，我们首先考虑了量子点系统中的自旋弛豫。由于自旋轨道耦合的存在，量子点中电子的波函数不再是 σ_z 的严格本征态，在自旋守恒散射如电子-声学声子的散射过程中，电子会在不同自旋的电子态之间翻转，给出一个有效的自旋翻转散射。我们采用严格对角化的方法求出包括了自旋轨道耦合在内的电子的波函数，通过费米黄金规则求出不同自旋态之间的跃迁几率，给出自旋弛豫时间。而在以往文献中却是采用微扰方法在最低的几个态之间得到自旋轨道耦合对波函数的一阶修正，然后根据费米黄金规则计算能量最低的两个修正以后的 Zeeman 劈裂能级之间的自旋弛豫时间。我们发现在垂直磁场情况下，使用完全对角化得到的自旋弛豫时间和以往在文献中得到的结果有着数量级上的差异。进一步的研究发现导致这部分差别的原因有两

点: (i) 自旋轨道耦合对能级的二阶修正和 Zeeman 劈裂能量可比拟; (ii) 高能级对低能级能量及波函数的修正不可忽略。以往的文献却没有考虑这两点的贡献。其中第 (ii) 点对于平行磁场的系统也是成立的。因此, 使用完全对角化的方法可以很好地研究量子点系统中的自旋弛豫过程。在此基础上, 我们讨论了外加磁场、量子点的大小、温度以及量子阱的宽度对自旋弛豫时间的影响。随着外加磁场的增大或者量子点半径的增大, 在弛豫过程中都需要包括更多的能级, 使得散射通道增多, 自旋弛豫时间变短; 随着温度的升高, 电子-声学声子散射变强, 从而使弛豫时间变短; 随着量子阱宽变小, 自旋轨道耦合变大, 从而使得不同自旋的散射变得更容易, 使得自旋弛豫时间变短。

接着考虑了强 THz 电场对 InAs 二维电子气态密度的影响。我们使用 Floquet 定理严格求解出包括了 THz 场以后的电子波函数, 然后使用 Green 函数方法求得系统的态密度和自旋极化密度。我们发现, THz 场对态密度和自旋极化密度有非常大的影响, 分别表现在出现子带效应、主吸收峰的蓝移以及和 Rashba 自旋轨道耦合共同作用下的在每个子带带边上的平方根的发散。THz 的电场可以诱导出一个 THz 的磁距。我们指出可以用这个效应将 THz 的电信号转化成 THz 的磁信号。这里我们也考虑 Collinear 表象和 Helix 表象之间的差别。

对于系统的自旋性质, 我们从多体的角度考虑量子线和量子阱系统中的自旋弛豫。通过 Green 函数方法推导出一维和二维系统中的动力学自旋 Bloch 方程的普遍形式, 给出所有散射项——特别是电子-电子散射——的具体形式, 并且给出 Helix 统计和 Collinear 统计下散射项的差别, 主要表现在散射项中是否包括了自旋轨道耦合的影响。接着在二维系统和一维系统中近似求解了仅仅考虑弹性散射时的动力学自旋 Bloch 方程, 给出了散射和非均匀扩展之间的相互作用以及他们对自旋弛豫时间的影响。给出了这两个系统中强弱散射的判据。

我们用数值求解动力学自旋 Bloch 方程的方法研究了 InAs 量子线系统中两种不同方向的自旋极化在 Rashba 自旋轨道耦合作用下的自旋弛豫过程, 发现其中一种方向 (当自旋极化方向沿着量子线生长方向, 但是外加磁场方向和量子线垂直) 下界面电场的取向可以有效的调节自旋弛豫时间, 而在另外一种方向 (当自旋极化方向垂直于量子线生长方向, 但是外加磁场方向沿着量子线方向) 下随着界面电场取向的变化自旋弛豫时间几乎没有变化。并且我们给出了在量子线系统中非均匀扩展的解析表达式: 进动频率的均方差。它可以很好地描述量子线系统中的自旋弛豫过程。

然后我们讨论了等强度 Dresselhaus 项和 Rashba 项的 GaAs 量子阱在高温时 ($T > 120$ K) 的自旋弛豫。数值结果表明发现 Helix 统计和 Collinear 统计下的自旋弛豫几乎没有差别, 这是因为自旋轨道耦合对应的能量和系统的费米能以及温度对应能量相比很小, 可以忽略不计。同时在等强度的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合系统中, 不同自旋极化方向的自旋弛豫表现出很强的各向异性: 在没有考虑 Dresselhaus 项的三次方项贡献时, 沿着 (110) 方向的自旋弛豫时间是无穷长, 而其它方向两个方向 (001) 和 ($\bar{1}10$) 的自旋弛豫时间却非常短; 即使在考虑了三次方项贡献, (110) 方向的自旋弛豫时间变为有限长, 它仍然要远远大于另外两个方向的弛豫时间。紧接着, 我们

研究了 (110) 方向的自旋弛豫时间的温度、电子浓度和量子阱阱宽依赖关系, 这些结果都可以由非均匀扩展引起的自旋弛豫机制很好地解释: 随着温度的升高、电子浓度的升高以及量子阱阱宽的变大, 自旋弛豫时间都在变小。

上面的研究都是在空间均匀系统中的自旋极化随着时间的演化, 除此在外, 我们还研究了自旋极化的空间输运。我们考虑高温下 ($T > 120$ K) n -型 GaAs 量子阱系统在 Dresselhaus 自旋轨道耦合作用下的自旋输运问题, 这里我们考虑了所有散射的作用, 包括电子-杂质散射、电子-LO声子散射以及电子-电子散射。在数值计算方面, 我们采用了一个新方法求解双边注入下的动力学自旋 Bloch 方程, 和以往的单边注入问题相比, 这个方法可以避开粘滞系数这个计算参数, 并且可以在考虑电子-电子散射的情况下计算比较长的样品。我们指出在输运过程中空间振荡频率是由自旋轨道耦合以及自旋注入速度 k_x 的商决定的, 而非均匀扩展是由空间振荡频率中的各向异性部分决定。我们发现即使在没有外磁场时, 自旋极化/相干也会在扩散/输运方向上出现振荡; 并且在散射足够强的时候—内禀的散射即电子-电子散射就满足这个条件—不同动量的电子自旋具有相同的振荡频率以及相位, 导致横向的自旋注入长度和系综的横向注入长度相等。这是因为在自旋轨道耦合和动量 k_x 相除以后, 会出现一项与动量 \mathbf{k} 无关的项, 提供了这个振荡的磁场。并且这个振荡的周期和外加电场无关, 这是因为外加电场虽然会使电子分布在动量空间内偏移, 但是使自旋极化振荡的磁场本身与动量 \mathbf{k} 无关, 从而不会使振荡频率发生变化。进一步我们研究了自旋扩散/输运长度的散射、温度、量子阱宽、外磁场以及外电场的依赖关系。所有的结果都可以用在输运过程中的非均匀扩展导致的自旋弛豫机制很好地解释。随着散射从弱散射区域慢慢增强到强散射区域, 在由非均匀扩展导致的自旋弛豫机制下, 自旋扩散长度按照先减小后增加的方式变化。整体上来说, 输运过程中散射和温度对自旋扩散长度的影响都不大。而随着量子阱阱宽变大, 自旋轨道耦合变弱, 从而使的自旋扩散长度以及自旋振荡周期变大。当平面内磁场沿着和垂直于注入方向时, 自旋扩散长度都随着磁场变强而变短。这是因为随着磁场的增加, 输运中的非均匀扩展会因为 $g\mu_B B/k_x$ 增加而变大, 导致自旋扩散长度减小。但是他们对自旋振荡周期表现出很不一样的作用: 当磁场沿着注入方向时, 随着磁场从逆着注入方向慢慢增大, 自旋振荡慢慢增大, 直到不再出现周期为止; 而当磁场垂直于注入方向时, 振荡周期只随着磁场的大小增加而变小。对于电场的作用, 当其方向是逆着/沿着注入方向增加时, 随着其大小增加, 自旋注入长度增加/减小, 但是自旋在空间上的振荡周期不变。

接着我们在量子阱系统研究了在 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的强度可比拟的时候的自旋输运过程中的各向异性。这种情况下, 自旋扩散长度不仅仅对自旋极化的方向也对自旋注入方向表现出非常强的各向异性。并且在不考虑 Dresselhaus 三次方项的贡献并且 Dresselhaus 和 Rashba 线性项的系数相同时, 如下的两种情况都给出无穷长的自旋扩散长度: (i) 当自旋扩散/注入方向沿着 $(\bar{1}10)$ 方向时, 自旋极化方向沿着任意方向; (ii) 当自旋极化方向沿着 (110) 方向时, 自旋扩散方向沿着任意方向。然而在考虑三次方项的贡献后, 自旋扩散长度变为一个有限值, 并且随着温度的

升高和电子浓度的变大而减小；不过，此时自旋扩散长度对自旋极化方向以及自旋注入方向各向异性仍然被保留了下来。考虑沿着 $(\bar{1}10)$ 方向的自旋注入，通过调节门电压的方式使得 Rashba 自旋轨道耦合的强度从零开始增强到略微小于（不是通常认为的等于） Dresselhaus 线性项的强度时，自旋扩散长度一直增加到一个最大值，然后随着 Rashba 强度的增加而减小。

最后我们考虑了由 EY 自旋轨道耦合产生的外禀自旋流以及在样品内部产生面内自旋极化。通过建立微观的动力学自旋 Bloch 方程，我们得到在只考虑自旋轨道耦合的线性项的贡献时，稳态时外禀的自旋霍尔电导始终为零；在考虑了 Dresselhaus 自旋轨道耦合的三次方项的贡献以后，稳态时可以得到非常小的自旋霍尔电导。这和 Tse 和 Sarma [110] 考虑了线性自旋轨道耦合的对自旋霍尔电导的顶角修正以后的 Kubo 公式给出的结果一致。但是用动力学方法检验 Kubo 公式的正确性是很重要的。这种稳态时外禀自旋霍尔电流/电导的消失，是因为由 Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合引起的自旋进动将自旋霍尔电流转化为了样品内部的面内极化。这种自旋极化来源于自旋进动和偏转散射的共同作用，和流致极化具有完全不一样的性质，包括具有相反的量子阱的阱宽和杂质浓度的依赖关系。Dresselhaus 自旋轨道耦合下给出相反，而 Rashba 自旋轨道耦合却给出相同的自旋极化方向。

附录A Löwdin Partitioning方法 ^①

准简并微扰理论 (Löwdin Partition) 是一种应用广泛并且功能强大的用于块对角化不含时哈密顿量的方法。我们用这种方法块对角化 8×8 的 Kane 模型的哈密顿量。对于给定的哈密顿量

$$H = H^0 + \lambda H^1 + \lambda H^2 .$$

其中 H^0 是可解的部分, 给出本征值 E_n 和本征矢 $|\psi_n\rangle$, 我们可以区分所有的本征矢为两部分: A 和 B , 并且我们只对 A 部分感兴趣。 H^1 只在 A 和 B 内矩阵元不为零, H^2 只在 A 和 B 之间矩阵元不为零, λ 是一个参量。寻找一个么阵变换 e^{-S} , 让变换矩阵

$$\tilde{H} = e^{-S} H e^S .$$

关于 A 和 B 是块对角的, 即 ${}_A\langle\psi|\tilde{H}|\psi\rangle_B = 0$ 。为了让 \tilde{H} 是对角的, S 可以取成和 H^2 一样的只有块非对角元不为0的形式, 且 $S = -S^\dagger$ 。展开 $e^S = 1 + S + \frac{1}{2!}S^2 + \frac{1}{3!}S^3 + \dots$ 后得到 $\tilde{H} = \tilde{H}_d + \tilde{H}_n$, 其中

$$\tilde{H}_d = H^0 + \lambda H^1 + [\lambda H^2, S] + \frac{1}{2!}[[H^0 + \lambda H^1, S], S] + O(\lambda^4) , \quad (\text{A.1})$$

$$\tilde{H}_n = \lambda H^2 + [H^0 + \lambda H^1, S] + \frac{1}{2!}[[\lambda H^2, S], S] + \frac{1}{3!}[[[H^0, S], S], S] + O(\lambda^4). \quad (\text{A.2})$$

要求 $\tilde{H}_n = 0$ 。展开 $S = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^i S^{(i)}$ 带入上式, 得到

$$\begin{aligned} \tilde{H}_d &= \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i \tilde{H}_d^{(i)} , \\ \tilde{H}_n &= \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^i \tilde{H}_n^{(i)} . \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

^①这里介绍的块对角化方法是摘取至文献 [286]。

其中

$$\begin{aligned}
\tilde{H}_d^{(0)} &= H^0, & \tilde{H}_d^{(1)} &= H^1, \\
\tilde{H}_d^{(2)} &= [H^2, S^{(1)}] + \frac{1}{2!} [[H^0, S^{(1)}], S^{(1)}], \\
\tilde{H}_d^{(3)} &= [H^2, S^{(2)}] + \frac{1}{2!} [[H^0, S^{(1)}], S^{(2)}] + \frac{1}{2!} [[H^0, S^{(2)}], S^{(1)}], \\
&\quad + \frac{1}{2!} [[H^1, S^{(1)}], S^{(1)}].
\end{aligned} \tag{A.4}$$

和

$$\begin{aligned}
\tilde{H}_n^{(1)} &= [H^0, S^{(1)}] + H^2, & \tilde{H}_n^{(2)} &= [H^0, S^{(2)}] + [H^1, S^{(1)}], \\
\tilde{H}_n^{(3)} &= [H^0, S^{(3)}] + [H^1, S^{(2)}] + \frac{1}{2!} [[H^2, S^{(1)}], S^{(1)}], \\
&\quad + \frac{1}{3!} [[[H^0, S^{(1)}], S^{(1)}], S^{(1)}].
\end{aligned} \tag{A.5}$$

由 $\tilde{H}_n^{(i)} = 0$ 得到

$$\begin{aligned}
[H^0, S^{(1)}] &= -H^2, \\
[H^0, S^{(2)}] &= -[H^1, S^{(1)}], \\
[H^0, S^{(3)}] &= -[H^1, S^{(2)}] - \frac{1}{6} [[H^2, S^{(1)}], S^{(1)}].
\end{aligned} \tag{A.6}$$

方程 (A.6) 的解是

$$\begin{aligned}
S_{nm}^{(1)} &= \frac{-(H^2)_{nm}}{E_n - E_m}, \\
S_{nm}^{(2)} &= \frac{-[H^1, S^{(1)}]_{nm}}{E_n - E_m}, \\
S_{nm}^{(3)} &= \frac{-([H^1, S^{(2)}] + \frac{1}{6} [[H^2, S^{(1)}], S^{(1)}])_{nm}}{E_n - E_m}.
\end{aligned} \tag{A.7}$$

这里, n, m 分别属于 A 和 B 部分的本征矢量。微扰后的系统的哈密顿量变为:

$$\begin{aligned}
\tilde{H}_d^{(2)} &= \frac{1}{2} [H^2, S^{(1)}], \\
\tilde{H}_d^{(3)} &= \frac{1}{2} [H^2, S^{(2)}].
\end{aligned} \tag{A.8}$$

对应的微扰的波函数为 $|\tilde{\psi}\rangle = e^S |\psi\rangle$ 。

附录B 动力学自旋 Bloch 方程的推导^①

系统未微扰的哈密顿量为 $H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ ，其中 $\mathbf{R} = (\mathbf{r}, \mathbf{r}_c)$ 。 \mathbf{r} 是电子可以自由运动的方向的坐标， \mathbf{r}_c 为约束方向坐标。则自由运动方向有好量子数准动量 \mathbf{k} 。未微扰波函数记为

$$\psi'_{\mathbf{k},n}(\mathbf{R}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}_c) . \quad (\text{B.1})$$

满足定态薛定谔方程

$$H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R})|\psi'_{\mathbf{k},n}\rangle = E_n(\mathbf{k})|\psi'_{\mathbf{k},n}\rangle . \quad (\text{B.2})$$

$E_{n,\mathbf{k}}$ 是系统的本征能级，且 r 是自由运动方向的维数。类似于 Bloch 波函数， $\phi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}_c)$ 对指标 n 是正交完备的。因此我们可以将 $\phi_{\mathbf{k},n}$ 展开到 $\phi_{0,n}$ 下，即得到另外一组正交完备基：

$$\psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{R}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \phi_{0,n}(\mathbf{r}_c) . \quad (\text{B.3})$$

这组基不是 H_0 的本征态，它和第一组基之间通过么阵变换联系。

二次量子化以后哈密顿量化为 $H_0 = \int d\mathbf{R} \Psi^\dagger(t) H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \Psi(\mathbf{R}, t)$ ，其中产生算符时间演化满足

$$\begin{aligned} i\partial_t \Psi(\mathbf{R}, t) &= [\Psi(\mathbf{R}, t), H_0] = H(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \Psi(\mathbf{R}, t) , \\ i\partial_t \Psi^\dagger(\mathbf{R}, t) &= -\Psi^\dagger(\mathbf{R}, t) H(-\mathbf{P}', \mathbf{R}') . \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

在不引起混乱的情况下，我们用 $\mathbf{1} = (\mathbf{R}_1, t_1)$ 和 $\mathbf{2} = (\mathbf{R}_2, t_2)$ 表示两个坐标。空间两点闭路格林函数定义为：

$$G(\mathbf{1}; \mathbf{2}) = -i \langle T_c \Psi(\mathbf{1}) \Psi^\dagger(\mathbf{2}) \rangle . \quad (\text{B.5})$$

这里 T_c 是作用在时间回路上的编时算符。对未微扰的格林函数来说， $\langle \dots \rangle$ 是相对于未微扰的哈密顿量 H_0 求统计平均，满足：

$$\begin{aligned} -i\partial_{t_2} G_0(\mathbf{1}, \mathbf{2}) - G_0(\mathbf{1}; \mathbf{2}) H_0(-\mathbf{P}_2, \mathbf{R}_2) &= \delta(\mathbf{1} - \mathbf{2}) , \\ (i\partial_{t_1} - H_0(\mathbf{P}_1, \mathbf{R}_1)) G_0(\mathbf{1}; \mathbf{2}) &= \delta(\mathbf{1} - \mathbf{2}) . \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

考虑了各种不能严格求解的哈密顿量 H_I 以后，统计平均不能直接求得，可以根

^①这里的推导主要步骤参考文献 [330] [195]

据 Dyson 方程将系统的格林函数可以按照未微扰的格林函数展开:

$$G(\mathbf{1}; \mathbf{2}) = G_0(\mathbf{1}; \mathbf{2}) + \int d\mathbf{3} G_0(\mathbf{1}; \mathbf{2}) U(\mathbf{3}) G(\mathbf{3}; \mathbf{2}) \\ + \int_{c_v} d\mathbf{3} \int_{c_v} d\mathbf{4} G_0(\mathbf{1}; \mathbf{3}) \Sigma(\mathbf{3}; \mathbf{4}) G(\mathbf{4}; \mathbf{2}) . \quad (\text{B.7})$$

其中 $U(\mathbf{1})$ 是等时自能项, 包括外驱动场、Hartree-Fock 项等。 $\Sigma(\mathbf{1}; \mathbf{2})$ 是系统的自能项。Dyson 方程满足

$$-i\partial_{t_2} G(\mathbf{1}; \mathbf{2}) = \delta(\mathbf{1} - \mathbf{2}) + G(\mathbf{1}; \mathbf{2}) [H_0(-\mathbf{P}_2, \mathbf{R}_2) + U(\mathbf{2})] + \int_{c_v} d\mathbf{3} G(\mathbf{1}; \mathbf{3}) \Sigma(\mathbf{3}; \mathbf{2}) , \\ i\partial_{t_1} G(\mathbf{1}; \mathbf{2}) = \delta(\mathbf{1} - \mathbf{2}) + [H_0(\mathbf{P}_1, \mathbf{R}_1) + U(\mathbf{1})] G(\mathbf{1}; \mathbf{2}) + \int_{c_v} d\mathbf{3} \Sigma(\mathbf{1}; \mathbf{3}) G(\mathbf{3}; \mathbf{2}) . \quad (\text{B.8})$$

两式相减得

$$(i\partial_{t_1} + i\partial_{t_2}) G(\mathbf{1}; \mathbf{2}) = [H_0(\mathbf{P}_1, \mathbf{R}_1) + U(\mathbf{1})] G(\mathbf{1}; \mathbf{2}) - G(\mathbf{1}; \mathbf{2}) [H_0(-\mathbf{P}_2, \mathbf{R}_2) + U(\mathbf{2})] \\ + \int_{c_v} d\mathbf{3} [\Sigma(\mathbf{1}; \mathbf{3}) G(\mathbf{3}; \mathbf{2}) - G(\mathbf{1}; \mathbf{3}) \Sigma(\mathbf{3}; \mathbf{2})] . \quad (\text{B.9})$$

简记为

$$(i\partial_{t_1} + i\partial_{t_2}) G = [H_0 + U, G] + \int [\Sigma, G] . \quad (\text{B.10})$$

对自由运动坐标和时间做 Wigner 坐标变换, 即

$$X = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2 \quad T = (t_1 + t_2)/2 \\ x = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad t = t_1 - t_2 \quad (\text{B.11})$$

则

$$G(\mathbf{1}; \mathbf{2}) = G(X + \frac{x}{2}, T + \frac{t}{2}, \mathbf{r}_{c,1}; X - \frac{x}{2}, T - \frac{t}{2}, \mathbf{r}_{c,2}) = G(X, x; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) \quad (\text{B.12})$$

在后一种记号中, 我们把约束方向的坐标当成矩阵的行和列, 不明确的写出来。利用

$$U(\mathbf{r}_1, t_1, \mathbf{r}_{c,1}) = U(X + \frac{x}{2}, T + \frac{t}{2}, \mathbf{r}_{c,1}) = e^{\frac{x}{2}\partial_x} U(X, T + \frac{t}{2}) \\ G(\mathbf{1}; \mathbf{3}) = G(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_3}{2}, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3; T + \frac{t}{2}, t_3) \\ = e^{\frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3}{2}\partial_x} G(X, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3; T + \frac{t}{2}, t_3) , \\ G(\mathbf{3}; \mathbf{2}) = e^{\frac{\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1}{2}\partial_x} G(X, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2; t_3, T - \frac{t}{2}) . \quad (\text{B.13})$$

并对位置 x 作傅立叶变换,

$$\tilde{G}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) = \int d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot x} G(X, x; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}). \quad (\text{B.14})$$

方程 (B.9) 化作

$$\begin{aligned} & i\partial_T \tilde{G}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) \\ = & \left[H_0(\frac{1}{2}P_X + \mathbf{k}) + e^{\frac{i}{2}\partial_{\mathbf{k}}^G \partial_X^U} U(X, T + \frac{t}{2}) \right] \tilde{G}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) \\ & - \tilde{G}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) \left[H_0(-\frac{1}{2}P_X + \mathbf{k}) + e^{-\frac{i}{2}\partial_{\mathbf{k}}^G \partial_X^U} U(X, T - \frac{t}{2}) \right] \\ & + \int_{c_v} dt_3 \left[e^{-\frac{i}{2}\partial_{\mathbf{k}}^G \partial_X^{\tilde{\Sigma}}} \tilde{\Sigma}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, t_3) e^{-\frac{i}{2}\partial_{\mathbf{k}}^G \partial_X^G} \tilde{G}(X, \mathbf{k}; t_3, T - \frac{t}{2}) \right. \\ & \left. - e^{-\frac{i}{2}\partial_{\mathbf{k}}^{\tilde{\Sigma}} \partial_X^G} \tilde{G}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, t_3) e^{-\frac{i}{2}\partial_{\mathbf{k}}^{\tilde{\Sigma}} \partial_X^{\tilde{\Sigma}}} \tilde{\Sigma}(X, \mathbf{k}; t_3, T - \frac{t}{2}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

我们保留 $\partial_{\mathbf{k}}^G$ 和 $\partial_X^{\tilde{\Sigma}}$ 分别到一阶, 并且对回路积分运用 Langreth 定理 [309] 得到

$$\begin{aligned} & i\partial_T \tilde{G}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) \\ = & \left[(1 + \frac{1}{2}P_X^G \cdot \partial_{\mathbf{k}}^H) H_0(\mathbf{k}) + U(X, T + \frac{t}{2}) \right] \tilde{G}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) \\ & - \tilde{G}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) \left[(1 - \frac{1}{2}P_X^G \cdot \partial_{\mathbf{k}}^H) H_0(\mathbf{k}) + U(X, T - \frac{t}{2}) \right] \\ & + \frac{i}{2} \left\{ \partial_X U(X, T + \frac{t}{2}) \partial_{\mathbf{k}} \tilde{G}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) - \partial_{\mathbf{k}} \tilde{G}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) \right. \\ & \quad \left. \times \partial_X U(X, T - \frac{t}{2}) \right\} + \int dt_3 \left[\tilde{\Sigma}^r(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, t_3) \tilde{G}^<(X, \mathbf{k}; t_3, T - \frac{t}{2}) \right. \\ & \quad \left. + \tilde{\Sigma}^<(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, t_3) \tilde{G}^a(X, \mathbf{k}; t_3, T - \frac{t}{2}) - \tilde{G}^r(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, t_3) \right. \\ & \quad \left. \times \tilde{\Sigma}^<(X, \mathbf{k}; t_3, T - \frac{t}{2}) - \tilde{G}^<(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, t_3) \tilde{\Sigma}^a(X, \mathbf{k}; t_3, T - \frac{t}{2}) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

取 $t = 0^-$ 并且由

$$\begin{aligned} G^r(t_1, t_2) &= \theta(t_1 - t_2) [G^>(t_1, t_2) - G^<(t_1, t_2)] \\ G^a(t_1, t_2) &= \theta(t_2 - t_1) [G^<(t_1, t_2) - G^>(t_1, t_2)] \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

可将方程 (B.16) 化作

$$\begin{aligned}
i\partial_T \tilde{G}^<(X, \mathbf{k}; T, T) &= [H_0(\mathbf{k}) + U(X, T), \tilde{G}^<(X, \mathbf{k}; T, T)] \\
&- \frac{i}{2} \{ \partial_X \tilde{G}^<(X, \mathbf{k}; T, T), \partial_{\mathbf{k}} H_0(\mathbf{k}) \} + \frac{i}{2} \{ \partial_{\mathbf{k}} \tilde{G}^<(X, \mathbf{k}; T, T), \partial_X U(X; T) \} \\
&+ \int_{-\infty}^t d\tau [\tilde{\Sigma}^>(X, \mathbf{k}; T, \tau) \tilde{G}^<(X, \mathbf{k}; \tau, T) + \tilde{G}^<(X, \mathbf{k}; \tau, T) \tilde{\Sigma}^>(X, \mathbf{k}; T, \tau) \\
&- \tilde{\Sigma}^<(X, \mathbf{k}; T, \tau) \tilde{G}^>(X, \mathbf{k}; \tau, T) - \tilde{G}^>(X, \mathbf{k}; \tau, T) \tilde{\Sigma}^<(X, \mathbf{k}; T, \tau)] \quad (\text{B.18})
\end{aligned}$$

我们将各个算符展开到正交完备基 $\{\psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{R})\}$ 下,

$$\Psi(\mathbf{R}, t) = \sum_{\mathbf{k},n} \psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{R}) c_{\mathbf{k},n}(t) \quad (\text{B.19})$$

其中 $c_{\mathbf{k},n}(t)$ 是湮灭一个处在态 $\psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{R})$ 上电子的湮灭算符。则

$$\begin{aligned}
G(X, x; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) &= \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ n_1, n_2}} \psi_{\mathbf{k}_1, n_1}(X + \frac{x}{2}, \mathbf{r}_{c,1}) \psi_{\mathbf{k}_2, n_2}^\dagger(X - \frac{x}{2}, \mathbf{r}_{c,2}) \\
&\times \left\{ -i \langle T_c c_{\mathbf{k}_1, n_1}(T + \frac{t}{2}) c_{\mathbf{k}_2, n_2}^\dagger(T - \frac{t}{2}) \rangle \right\} \quad (\text{B.20})
\end{aligned}$$

傅立叶变换以后得到:

$$\tilde{G}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) = \phi_{0, n_1}(\mathbf{r}_{c,1}) \tilde{G}_{n_1, n_2}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) \phi_{0, n_2}^\dagger(\mathbf{r}_{c,2}) \quad (\text{B.21})$$

其中

$$\tilde{G}_{n_1, n_2}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) = \sum_{\mathbf{k}_1, n_1, n_2} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot X} \left[-\frac{i}{(2\pi)^r} \langle T_c c_{\mathbf{k} + \frac{\mathbf{k}_1}{2}, n_1}(T + \frac{t}{2}) c_{\mathbf{k} - \frac{\mathbf{k}_1}{2}, n_2}^\dagger(T - \frac{t}{2}) \rangle \right] \quad (\text{B.22})$$

对于不同动量之间的关联, 和我们关心的分立能级如自旋之间的关联相比, 总是很快的弛豫到零, 因此一般可以不用考虑不同动量之间的关联, 则上式中求统计平均的部分有 $\mathbf{k}_1 = 0$, 即

$$\tilde{G}_{n_1, n_2}(X, \mathbf{k}; T + \frac{t}{2}, T - \frac{t}{2}) = -i \langle T_c c_{\mathbf{k}, n_1}(T + \frac{t}{2}) c_{\mathbf{k}, n_2}^\dagger(T - \frac{t}{2}) \rangle \quad (\text{B.23})$$

考虑了不同的束缚态之间关联之后, 可以将 \tilde{G} , $\tilde{\Sigma}$ 看成关于分立能级的矩阵, 则方程 (B.18) 给出的就是矩阵方程。

为了和可以观测量如粒子占据数、流等联系起来, 采用推广的 Kadanoff-Baym 假

设 [309]:

$$\tilde{G}^{\lessgtr}(X, \mathbf{k}; t_1, t_2) = \mp [\tilde{G}^r(\mathbf{k}; t_1, t_2) \rho^{\lessgtr}(X, \mathbf{k}; t_2) - \rho^{\lessgtr}(X, \mathbf{k}; t_1) \tilde{G}^a(\mathbf{k}; t_1, t_2)] \quad (\text{B.24})$$

其中 $\rho_{n_1 n_2}^{\lessgtr}(X, \mathbf{k}, t) = \langle c_{\mathbf{k}, n_2}^\dagger(t) c_{\mathbf{k}, n_1}(t) \rangle = \rho_{n_1 n_2}(X, \mathbf{k}, t)$, 以及 $\rho_{n_1 n_2}^{\lessgtr} = \delta_{n_1 n_2} - \rho_{n_1 n_2}$ 。 并且对于推广的 Kadanoff-Baym 假设中的推迟和超前格林函数采用没有微扰的量代替, 即

$$\begin{aligned} G^{0,r}(\mathbf{k}; t_1, t_2) &= -i\theta(t_1 - t_2) e^{-iE_{\mathbf{k}}(t_1 - t_2)} \\ G^{0,a}(\mathbf{k}; t_1, t_2) &= i\theta(t_2 - t_1) e^{-iE_{\mathbf{k}}(t_1 - t_2)} \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

这里 $E_{\mathbf{k}}$ 是未微扰的哈密顿量在基 $\{\psi_{\mathbf{k}, n}(\mathbf{R})\}$ 下的表示, 即

$$(E_{\mathbf{k}})_{n_1 n_2} = \langle \psi_{\mathbf{k}, n_1} | H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R}) | \psi_{\mathbf{k}, n_2} \rangle$$

附录C Helix 表象下的量子阱系统中电子的动力学自旋 Bloch 方程^①

通过么阵变换 $U_{\mathbf{k}}$ (6.27), 我们把在 Collinear 表象下的动力学自旋 Bloch 方程 (6.23) 化作:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t) = & eE \partial_{k_x} \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t) + eE \left[U_{\mathbf{k}}^\dagger \frac{\partial}{\partial k_x} U_{\mathbf{k}}, \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t) \right] - \frac{k_x}{m^*} \partial_x \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t) \\ & - i \left[\begin{pmatrix} \varepsilon_+(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \varepsilon_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix} + \mathcal{E}_{\text{HF}}^h, \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t) \right] + \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t) \Big|_{\text{scat}}. \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

Hartree-Fock 项变为: $\mathcal{E}_{\text{HF}}^h = - \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{k}, \mathbf{k}-\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^h(\mathbf{r}, t) S_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}}$ 其中 $S_{\mathbf{k}, \mathbf{k}-\mathbf{q}} = U_{\mathbf{k}}^\dagger U_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ 。
散射项为:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t) \Big|_{\text{scat}} = - \left\{ S^h(>, <) - S^h(<, >) + S^h(>, <)^\dagger - S^h(<, >)^\dagger \right\} \quad (\text{C.2})$$

其中 $S^h(>, <)$ 是从公式 (6.24) 作么阵变化而来:

$$\begin{aligned} S^h(>, <) = & \pi \sum_{\mathbf{q}; \eta_1, \eta_2} |U_{\mathbf{q}}|^2 S_{\mathbf{k}, \mathbf{k}-\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{h, >}(t) T_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \eta_1}^h S_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}} T_{\mathbf{k}, \eta_2}^h \rho_{\mathbf{k}}^{h, <}(t) \delta(\varepsilon_{\eta_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{\eta_2}(\mathbf{k})) \\ & + \pi \sum_{\mathbf{Q}; \eta_1, \eta_2} |g_{\mathbf{Q}, \lambda}|^2 S_{\mathbf{k}, \mathbf{k}-\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{h, >}(t) T_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \eta_1}^h S_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}} T_{\mathbf{k}, \eta_2}^h \rho_{\mathbf{k}}^{h, <}(t) \\ & \times [N^<(\mathbf{Q}) \delta(\varepsilon_{\eta_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{\eta_2}(\mathbf{k}) + \omega_{\mathbf{Q}}) + N^>(\mathbf{Q}) \delta(\varepsilon_{\eta_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{\eta_2}(\mathbf{k}) - \omega_{\mathbf{Q}})] \\ & + \pi \sum_{\substack{\mathbf{q}, \mathbf{k}' \\ \eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4}} V_{\mathbf{q}}^2 S_{\mathbf{k}, \mathbf{k}-\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{h, >}(t) T_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \eta_1}^h S_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}} T_{\mathbf{k}, \eta_2}^h \rho_{\mathbf{k}}^{h, <}(t) \\ & \times \text{Tr}[S_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}'}^{h, >}(t) T_{\mathbf{k}', \eta_3}^h S_{\mathbf{k}', \mathbf{k}'-\mathbf{q}} T_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \eta_4}^h \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{h, <}(t)] \\ & \times \delta(\varepsilon_{\eta_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{\eta_2}(\mathbf{k}) + \varepsilon_{\eta_3}(\mathbf{k}') - \varepsilon_{\eta_4}(\mathbf{k}'-\mathbf{q})). \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

这里, $|U_{\mathbf{k}}|^2$ 、 $|g_{\mathbf{k}, \lambda}|^2$ 以及 $V_{\mathbf{q}}^2$ 分别是电子—非磁性杂质、电子—声子以及电子—电子散射的矩阵元。其中, 投影算符化作 $T_{\mathbf{k}, \xi}^h = U_{\mathbf{k}}^\dagger T_{\mathbf{k}, \xi} U_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}(1 + \xi \sigma_z)$ 。

^①在我们的工作 [65] 中有详细介绍

附录D 2DEG 中 Collinear 统计下库仑散射的数值处理

$$\left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|_{\text{scat}}^{\text{ee}} = \pi \sum_{\mathbf{q}; \mathbf{k}'} V_{\mathbf{q}}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}) \left\{ (1 - \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \rho_{\mathbf{k}} \text{Tr}[(1 - \rho_{\mathbf{k}'}) \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}] \right. \\ \left. - \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (1 - \rho_{\mathbf{k}}) \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}'} (1 - \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}})] \right\} + \left\{ \dots \right\}^{\dagger}. \quad (\text{D.1})$$

将其中求和变量 \mathbf{q} 变换为 $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ 得到

$$\left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|_{\text{scat}}^{\text{ee}} = \pi \sum_{\mathbf{q}; \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \left\{ (1 - \rho_{\mathbf{q}}) \rho_{\mathbf{k}} \text{Tr}[(1 - \rho_{\mathbf{k}'}) \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}] \right. \\ \left. - \rho_{\mathbf{q}} (1 - \rho_{\mathbf{k}}) \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}'} (1 - \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}})] \right\} + \left\{ \dots \right\}^{\dagger}. \quad (\text{D.2})$$

记 $F(\mathbf{q}, \mathbf{k}) = (1 - \rho_{\mathbf{q}}) \rho_{\mathbf{k}}$ 则

$$\left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|_{\text{scat}}^{\text{ee}} = \pi \sum_{\mathbf{q}; \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \\ \times \left\{ F(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \text{Tr}[F(\mathbf{k}', \mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q})] - F(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \text{Tr}[F(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}')] \right\} + \left\{ \dots \right\}^{\dagger} \quad (\text{D.3})$$

现在验证带入平衡态的时候散射项为零 (8.7) 以及粒子数守恒 (8.8) 的结果。

1. 平衡分布时散射项为零

当取平衡态

$$\rho_{\mathbf{k}}^0 = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}}$$

时

$$F(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \text{Tr}[F(\mathbf{k}', \mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q})] = 2e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{q}} - \mu)} e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \mu)} \rho_{\mathbf{k}}^0 \rho_{\mathbf{q}}^0 \rho_{\mathbf{k}'}^0 \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 \\ F(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \text{Tr}[F(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}')] = 2e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \mu)} \rho_{\mathbf{k}}^0 \rho_{\mathbf{q}}^0 \rho_{\mathbf{k}'}^0 \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 \quad (\text{D.4})$$

由 δ 函数可知 $\varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} = \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}$, 即上式中的两项值相同, 故库仑散射的任何一项对于平衡分布而言都是零。从这里可以看出, 这一条件要满足的话必须要求在数值计算中 δ 中的能量守恒要严格满足。

2. 粒子数守恒

对于粒子数守恒，只需要把公式 (D.3) 中第一个大括号中的第二项作变换 $\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{q}$ 以及 $\mathbf{k}' \leftrightarrow \mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}$ ，则可以保证 $\sum_{\mathbf{k}} \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|_{\text{scat}}^{\text{ee}} = 0$ 。因此在数值处理过程中，分割的格点也需要满足相同的变换。

D.1 优化前的数值处理 ^①

对于 \mathbf{k} 空间的分割，我们采取的是按照能量和角度均匀分割的方法。则公式 (D.3) 中 $\rho_{\mathbf{k}}$ 和 $\rho_{\mathbf{q}}$ 都是可以落在分割的格点上，但是 $\rho_{\mathbf{k}'}$ 以及 $\rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ 的位置却需要由 δ 函数给出。我们将 δ 函数中的 $\theta_{\mathbf{k}'}$ 对应的积分积掉，则剩下的积分变量 \mathbf{k}' 的能量项 $\varepsilon_{\mathbf{k}'}$ 是可以选取在能量分割格点上的，即 $\rho_{\mathbf{k}'}$ 在能量分割格点上。由 δ 函数可得

$$\varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}} = \varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} . \quad (\text{D.5})$$

因此 $\rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ 也是可以保证处在能量的分割格点上。现在我们计算 $\rho_{\mathbf{k}'}$ 以及 $\rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ 对应的角度分割格点。由

$$\begin{aligned} \delta(\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}) &= \delta\left(2\frac{\hbar^2}{2m^*}\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q}) - (\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}})\right) \\ &= \frac{1}{2}\delta\left(\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}'}\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}\cos(\theta_{\mathbf{k}'} - \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}\right) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=\pm} \frac{\delta(\theta_{\mathbf{k}'} - \theta_{\mathbf{k}'}^i)}{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}'}\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}|\sin(\theta_{\mathbf{k}'}^i - \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})|}} \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

其中 $\theta_{\mathbf{k}'}^i$ 满足

$$\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}'}\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}\cos(\theta_{\mathbf{k}'}^i - \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2} = 0 .$$

因此 $\theta_{\mathbf{k}'}$ 有两个解，

$$\theta_{\mathbf{k}'}^i = \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \pm \arccos\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}'}\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}}\right) . \quad (\text{D.7})$$

以及

$$|\sin(\theta_{\mathbf{k}'}^i - \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})| = \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}'}\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}}\right)^2} \quad (\text{D.8})$$

这里可以看出， $\rho_{\mathbf{k}'}$ 对应的角度分割点由矢量 $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ 、 $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ 、 $\varepsilon_{\mathbf{q}}$ 以及 $\varepsilon_{\mathbf{k}'}$ 所决定。其

^①这种方法最初是由我们组的翁明其给出，它可以在数值计算过程中保证动力学方程的对称性。

中 $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ 给出

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} &= \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{q}} - 2\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{q}}}\cos(\theta_{\mathbf{k}} - \theta_{\mathbf{q}}) \\ \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} &= \theta_{\mathbf{k}} \pm \arccos\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}}\right)\end{aligned}\quad (\text{D.9})$$

对于给定的 \mathbf{k} 和 \mathbf{q} , $\theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ 的取值是固定的, 在限定 $\theta_{\mathbf{k}} - \theta_{\mathbf{q}} \in [-\pi, \pi]$ 时, 则正负号的取值和 $\theta_{\mathbf{k}} - \theta_{\mathbf{q}}$ 一致。

对于 $\rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ 的角度分割点有如下的等式

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2}{2m^*}(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q}) &= \frac{\hbar^2}{2m^*}\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}, \\ \frac{\hbar^2}{2m^*}(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q}) &= \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}\cos(\theta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}).\end{aligned}\quad (\text{D.10})$$

利用 δ 函数可知 $\frac{\hbar^2}{2m^*}\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q}) = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}$, 则

$$\theta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^i = \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \pm \arccos\left(\frac{-\varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{2\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}}\right).\quad (\text{D.11})$$

由于矢量 \mathbf{k}' , $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ 和 $\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}$ 可以构成三角形, 故在表达式 (D.7) 和 (D.11) 中同时取正号或者负号。由于角度 $\theta_{\mathbf{k}'}$ 和 $\theta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^i$ 都不是严格的落在分割格点上, 在计算中需要对 $\rho_{\mathbf{k}'}$ 和 $\rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ 做角度插值。

对于这种数值处理方法, 由于能量守恒是在分割格点上严格得到满足的, 故第一个条件是得到满足的。对于第二个条件, 我们把分割格点 $\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{q}$ 互换以后, $\theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \rightarrow \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \pi$ 且 $\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ 保持不变, 然后只需要用格点 $\varepsilon_{\mathbf{k}'} + \varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}$ 代替 $\varepsilon_{\mathbf{k}'}$ 的值, 则可以满足 $\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q} \leftrightarrow \mathbf{k}'$, 这说明第二个条件在格点上也是满足的。对于这种方法, 在将 δ 函数积掉以后, 计算所有动量 \mathbf{k} 的结果共需要五重求和, 则散射项的第一部分化作:

$$\begin{aligned}A_1(\mathbf{k}) &= \pi \sum_{\mathbf{q}; \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}) F(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \text{Tr}[F(\mathbf{k}', \mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q})] \\ &= \frac{\pi}{(2\pi)^4} \left(\frac{m^*}{\hbar^2}\right)^2 \sum_{i=\pm} \int d\varepsilon_{\mathbf{q}} d\theta_{\mathbf{q}} d\varepsilon_{\mathbf{k}'} \frac{V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2}{\sqrt{4\varepsilon_{\mathbf{k}'}\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - (\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}})^2}} \\ &\quad \times F(\varepsilon_{\mathbf{q}}, \theta_{\mathbf{q}}; \varepsilon_{\mathbf{k}}, \theta_{\mathbf{k}}) \text{Tr}[F(\varepsilon_{\mathbf{k}'}, \theta_{\mathbf{k}'}^i; \varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'}, \theta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^i)] \\ &= \frac{\pi}{(2\pi)^4} \left(\frac{m^*}{\hbar^2}\right)^2 \sum_{i=\pm} \int d\varepsilon_{\mathbf{q}} d\theta_{\mathbf{q}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}} d\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \frac{(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2 \\ &\quad \times F(\varepsilon_{\mathbf{q}}, \theta_{\mathbf{q}}; \varepsilon_{\mathbf{k}}, \theta_{\mathbf{k}}) \text{Tr}[F(\varepsilon_{\mathbf{k}'}, \theta_{\mathbf{k}'}^i; \varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'}, \theta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^i)\end{aligned}\quad (\text{D.12})$$

D.2 优化后的数值处理

重新将公式 (D.7) 和 (D.11) 写为如下形式:

$$\begin{aligned}\theta_{\mathbf{k}'}^i &= \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \pm \arccos\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}'}\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}}\right), \\ \theta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^i &= \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \pm \arccos\left(\frac{-\varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{2\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{q}})\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}}\right).\end{aligned}\quad (\text{D.13})$$

设 $y_1 = \varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}$, $y_2 = \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ 以及 $y_3 = \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$, 则

$$\begin{aligned}\theta_{\mathbf{k}'}^i &= y_3 \pm \arccos\left(\frac{y_2 - y_1}{2\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}'}y_2}}\right), \\ \theta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^i &= y_3 \pm \arccos\left(\frac{-y_1 - y_2}{2\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}'} + y_1)y_2}}\right).\end{aligned}\quad (\text{D.14})$$

同时

$$\delta(\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}) = \sum_{i=\pm} \frac{\delta(\theta_{\mathbf{k}'}^i - \theta_{\mathbf{k}'}^i)}{\sqrt{4\varepsilon_{\mathbf{k}'}y_2 - (y_2 - y_1)^2}} \quad (\text{D.15})$$

将 $A_1(\mathbf{k})$ 重新记作

$$A_1(\mathbf{k}) = \pi \sum_{\mathbf{q}} F(\mathbf{q}, \mathbf{k}) H(y_1, y_2, y_3) \quad (\text{D.16})$$

其中

$$\begin{aligned}H(y_1, y_2, y_3) &= \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \text{Tr}[F(\mathbf{k}', \mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q})] \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{m^*}{\hbar^2} \int d\varepsilon_{\mathbf{k}'} \frac{V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2 \text{Tr}[F(\varepsilon_{\mathbf{k}'}, \theta_{\mathbf{k}'}^i; \varepsilon_{\mathbf{k}'} + y_1, \theta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^i)]}{\sqrt{4\varepsilon_{\mathbf{k}'}y_2 - (y_2 - y_1)^2}}\end{aligned}\quad (\text{D.17})$$

同时很容易验证

$$\begin{aligned}H(-y_1, y_2, \pi + y_3) &= \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \text{Tr}[F(\mathbf{k}', \mathbf{k}' + \mathbf{k} - \mathbf{q})] \\ &= \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \text{Tr}[F(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}']\end{aligned}$$

所以库仑散射可以写为

$$\left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|_{\text{scat}}^{\text{ee}} = \pi \sum_{\mathbf{q}} \{F(\mathbf{q}, \mathbf{k})H(y_1, y_2, y_3) - F(\mathbf{k}, \mathbf{q})H(-y_1, y_2, \pi + y_3)\} + \{\dots\}^\dagger \quad (\text{D.18})$$

如果我们不仅仅对动量 \mathbf{k} 均匀分割，同时也对 y_1 , y_2 和 y_3 均匀分割以先计算求得所有的 $H(y_1, y_2, y_3)$ 。然后根据动量空间的 \mathbf{k} 和 \mathbf{q} 的分割求得各个 y_i ，在散射项中调用已求出的 $H(y_1, y_2, y_3)$ ，这一步需要对 y_2 和 y_3 进行插值。由此可以求得所有的散射项。对于计算复杂度，所有 $H(y_1, y_2, y_3)$ 共需要四重求和，计算所有的散射项也需要四重求和，因此整个散射项的计算都是四重，比上一小节中的结果少了一重，大大提高了计算速度。

采用这种数值处理方法，可以考虑电子-电子相互作用对自旋输运的影响。我们先用这种方法应用在研究自旋波包输运中 [59]，发现库仑拽引效应起着非常重要的作用。然后我们重新考虑了在扩散/输运中电子-电子相互作用，并且考虑了高场下的自旋输运 [61, 62]，指出电子-电子散射作为内禀散射会使得横向的自旋注入长度和系综的横向注入长度相等。

附录E 动力学自旋 Bloch 方程输运部分的数值处理 ^①

动力学自旋 Bloch 方程 (6.23) 可以写为:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(x, t) + \frac{k_x}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} \rho_{\mathbf{k}}(x, t) = G_{\mathbf{k}}[x, t] \quad (\text{E.1})$$

其中 $G_{\mathbf{k}}[x, t]$ 包括驱动项、相干项以及散射项, 即 $G_{\mathbf{k}}[x, t] = \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x, t)}{\partial t} \right|_{\text{dr}} + \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x, t)}{\partial t} \right|_{\text{coh}} + \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x, t)}{\partial t} \right|_{\text{scat}}$. 按照如下的方法离散化时间和空间坐标,

$$\frac{1}{2} \left[\frac{\rho_{\mathbf{k}}(x, t + \Delta t) - \rho_{\mathbf{k}}(x, t)}{\Delta t} + \frac{\rho_{\mathbf{k}}(x + \Delta x, t + \Delta t) - \rho_{\mathbf{k}}(x + \Delta x, t)}{\Delta t} \right] + \frac{k_x}{m^*} \frac{\rho_{\mathbf{k}}(x + \Delta x, t + \Delta t) - \rho_{\mathbf{k}}(x, t + \Delta t)}{\Delta x} = \frac{1}{2} (G_{\mathbf{k}}[x, t] + G_{\mathbf{k}}[x + \Delta x, t]) . \quad (\text{E.2})$$

当 $k_x > 0$, 电子在样品中从左边向右边运动。因此根据方程 (E.2), 迭代格式为

$$\rho_{\mathbf{k}}(x + \Delta x, t + \Delta t) = -\frac{1-r}{1+r} \rho_{\mathbf{k}}(x, t + \Delta t) + \frac{1}{1+r} (\rho_{\mathbf{k}}(x, t) + \rho_{\mathbf{k}}(x + \Delta x, t)) + \frac{\Delta t}{1+r} (G_{\mathbf{k}}[x, t] + G_{\mathbf{k}}[x + \Delta x, t]) . \quad (\text{E.3})$$

当 $k_x < 0$, 电子在样品中从右边向左边运动, 则迭代格式变为

$$\rho_{\mathbf{k}}(x, t + \Delta t) = -\frac{1-r}{1+r} \rho_{\mathbf{k}}(x + \Delta x, t + \Delta t) + \frac{1}{1+r} (\rho_{\mathbf{k}}(x + \Delta x, t) + \rho_{\mathbf{k}}(x, t)) + \frac{\Delta t}{1+r} (G_{\mathbf{k}}[x, t] + G_{\mathbf{k}}[x + \Delta x, t]) . \quad (\text{E.4})$$

其中 $r = \frac{2|k_x|\Delta t}{m^*\Delta x}$ 。

^①这部分内容主要用在我们的工作 [61]中

参考文献

- [1] H. Ohno, *Science* **281**, 951 (1998).
- [2] Tomasz Dietl, *Acta Phys. Polon. A* **100 (Suppl.)**, 139 (2001) [cond-mat/0201279].
- [3] D. D. Awschalom and J. M. Kikkawa, *Physics Today* **52**, 33 (1999).
- [4] S. D. Sarma, *American Scientist* **89**, 516 (2001).
- [5] D. Grundler, *Physics World* **15**, 39 (2002).
- [6] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [7] David D. Awschalom and Michael E. Flatté, *Nature Phys.* **3**, 153 (2007).
- [8] M. E. Flatté, *IEEE Transcation on Electron Devices* **54**, 907 (2007).
- [9] W. V. Roy, P. V. Dorpe, R. Vanheertum, P.-Jan Vandormael, and G. Borghs, *IEEE Transcation on Electron Devices* **54**, 933 (2007).
- [10] M. I. Dyakonov, in *Future Trends in Microelectronics: The Nano, the Giga, and the Ultra.*, edited by S. Luryi, J. Xu, and A. Zaslavsky (Wiley-IEEE Press, 2004), p. 157.
- [11] J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler, P. Stano, and I. Žutić, *acta physica slovacca* **57**, 565 (2007).
- [12] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger, *Science* **294**, 1488 (2001).
- [13] D. D. Awschalom, M. E. Flatté, and N. Samarth, *Scientific American* **286**, 66 (2002).
- [14] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).
- [15] J. Barnaś, A. Fuss, R. E. Camley, P. Grünberg, and W. Zinn, *Phys. Rev. B* **42**, 8110 (1990).
- [16] G. Prinz, *Science* **282**, 1660 (1998).
- [17] B. Dieny, V. S. Speriosu, S. S. P. Parkin, B. A. Gurney, D. R. Wilhoit, and D. Mauri, *Phys. Rev. B* **43**, 1297 (1991).
- [18] R. von Helmolt, J. Wecker, B. Holzapfel, L. Schultz, and K. Samwer, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2331 (1993).
- [19] J. S. Moodera, Lisa R. Kinder, Terrilyn M. Wong, and R. Meservey, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3273 (1995).
- [20] T. Miyazaki and N. Tezuka, *J. Magn. Magn. Mater.* **151**, 403 (1995).
- [21] S. Datta and B. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990).

-
- [22] X. Cartoixà, D. Z.-Y. Ting, and Y.-C. Chang, Appl. Phys. Lett. **83**, 1462 (2003) ; J. Supercond. **18**, 163 (2005).
- [23] K. C. Hall, Wayne H. Lau, K. Gündogdu, Michael E. Flatté, and Thomas F. Bogges, Appl. Phys. Lett. **83**, 2937 (2003).
- [24] J. Schliemann, J. C. Egues, and D. Loss, Phys. Rev. Lett. **90**, 146801 (2003).
- [25] M. E. Flatté and G. Vignale, Appl. Phys. Lett. **78**, 1273 (2001).
- [26] M. E. Flatté and G. Vignale, J. Appl. Phys. **97**, 104508 (2005).
- [27] M. Deutsch, G. Vignale, and M. E. Flatté, J. Appl. Phys. **96**, 7424 (2004).
- [28] P. Chen, J. Moser, P. Kotissek, J. Sadowski, M. Zenger, D. Weiss, and W. Wegscheider, Phys. Rev. B **74**, 241302 (2006).
- [29] Igor Žutić, Jaroslav Fabian, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **88**, 066603 (2002).
- [30] Jaroslav Fabian, Igor Žutić, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **66**, 165301 (2002).
- [31] M. E. Flatté, Z. G. Yu, E. Johnston-Halperin, and D. D. Awschalom, Appl. Phys. Lett. **82**, 4740 (2003).
- [32] Jaroslav Fabian, Igor Zutić, and S. Das Sarma, Appl. Phys. Lett. **84**, 85 (2004).
- [33] D. J. Monsma, J. C. Lodder, Th. J. A. Popma, and B. Dieny, Phys. Rev. Lett. **74**, 5260 (1995).
- [34] M. Johnson, Science **260**, 320 (1993); Mat. Sci. and Eng. B **31**, 199 (1995); Appl. Phys. Lett. **63**, 1435 (1993).
- [35] A. Stean, Rep. Prog. Phys. **6**, 117 (1998).
- [36] C. H. Bennett and D. P. DiVincenzo, Nature **404**, 247 (2000).
- [37] Hans-Andreas Engel, L. P. Kouwenhoven, Daniel Loss, and C. M. Marcus, Quantum Information Processing **3**, 115 (2004).
- [38] D. P. DiVincenzo, cond-mat/9612126; in *Mesoscopic Electron Transport*, Vol. **345** of *NATO Advanced Study Institute, Series E: Applied Sciences*, edited by L. Sohn, L. Kouwenhoven, and G. Schoen (Kluwer, Dordrecht, 1997).
- [39] D. Loss and D. P. DiVincenzo, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).
- [40] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, and L. M. K. Vandersypen, Rev. Mod. Phys. **79**, 1217 (2007).
- [41] J. L. Cheng, M. W. Wu, and C. Lü, Phys. Rev. B **69**, 115318 (2004).
- [42] C. Lü, J. L. Cheng, and M. W. Wu, Phys. Rev. B **71**, 075308 (2005).
- [43] J. H. Jiang, Y. Y. Wang, and M. W. Wu, arXiv:0704.0148 .
- [44] Y. Y. Wang and M. W. Wu, Phys. Rev. B **74**, 165312 (2006).
- [45] K. Shen and M. W. Wu, arXiv:0708.2592.
- [46] R. Landauer, "Irreversibility and heat generation in the computing process", IBM J. Res. Develop. **5**, 183 (1961).
- [47] Y. Ohno, D. K. Young, B. Beschoten, F. Matsukura, H. Ohno, and D. D. Awschalom,

- Nature **402**, 790 (1999).
- [48] R. Fiederling, M. Keim, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag, and L. W. Molenkamp, Nature **402**, 787 (1999).
- [49] H. Dery, P. Dalal, L. Cywiński, and L. J. Sham, Nature **447**, 573 (2007).
- [50] Y. A. Bychkov and E. Rashba, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **39**, 66 (1984) [Sov. Phys. JETP Lett. **39**, 78 (1984)].
- [51] M. W. Wu and C. Z. Ning, Eur. Phys. J. B **18**, 373 (2000).
- [52] M. Q. Weng and M. W. Wu, Phys. Rev. B **68**, 075312 (2003).
- [53] M. M. Glazov and E. L. Ivchenko, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **126**, 1465 (2004) [JETP **99**, 1279 (2004)].
- [54] J. Zhou, J. L. Cheng, and M. W. Wu, Phys. Rev. B **75**, 045305 (2007).
- [55] S. A. Crooker and D. L. Smith, Phys. Rev. Lett. **94**, 4 (2005).
- [56] M. Beck, C. Metzner, S. Malzer, and G. H. Dohler, Europhys. Lett. **75**, 597 (2006).
- [57] M. Q. Weng and M. W. Wu, J. Appl. Phys. **93**, 410 (2003).
- [58] M. Q. Weng, M. W. Wu, and Q. W. Shi, Phys. Rev. B **69**, 125310 (2004).
- [59] L. Jiang, M. Q. Weng, M. W. Wu, and J. L. Cheng, J. Appl. Phys. **98**, 113702 (2005).
- [60] M. Hruska, S. Kos, S. A. Crooker, A. Saxena, and D. L. Smith, Phys. Rev. B **73**, 075306 (2006).
- [61] J. L. Cheng and M. W. Wu, J. Appl. Phys. **101**, 073702 (2007).
- [62] J. L. Cheng, M. W. Wu, and I. C. da Cunha Lima, Phys. Rev. B **75**, 205328 (2007).
- [63] J. Schliemann and D. Loss, Phys. Rev. B **68**, 165311 (2003).
- [64] G. Dresselhaus, Phys. Rev. **100**, 580 (1955).
- [65] J. L. Cheng and M. W. Wu, J. Appl. Phys. **99**, 083704 (2006).
- [66] A. Cabbibo, J. R. Childress, S. J. Pearton, F. Ren, and J. M. Kuo, J. Vac. Sci. Technol. A **15**, 1215 (1997).
- [67] G. Meier and T. Matsuyama, Appl. Phys. Lett. **76**, 1315 (2000).
- [68] Hans-Andreas Engel, L. P. Kouwenhoven, Daniel Loss, and C. M. Marcus, Quantum Information Processing **3**, 115 (2004).
- [69] F. Meier and B.P. Zakharchenya, *Optical Orientation* (North-Holland, Amsterdam, 1984).
- [70] A. H. Clark, R. D. Burnham, D. J. Chadi, and R. M. White, Phys. Rev. B **12**, 5758 (1975).
- [71] Garbuzov D. Z., Ekimov A. I., and Safarov V. I., Zh. Eksp. Teor. Fiz. Pis'ma Red. **13**, 36 (1971) [JETP Lett. **13**, 24 (1971)].
- [72] E. M. Komova A. N. Titkov, E. I. Chaikina and N. G. Ermakova, Fiz. Tekh. Poluprovodn. **15**, 345 (1981) [Sov. Phys. **15**, 198 (1981)].

-
- [73] A. H. Clark, R. D. Burnham, D. J. Chadi, and R. M. White, *Solid State Commun.* **20**, 385 (1975).
- [74] J. M. Kikkawa, I. P. Smorchkova, N. Samarth, and D. D. Awschalom, *Science* **277**, 1284 (1997).
- [75] J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4313 (1998).
- [76] J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom, *Nature* **397**, 139 (1999).
- [77] Y. Ohno, R. Terauchi, T. Adachi, F. Matsukura, and H. Ohno, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4196 (1999).
- [78] Y. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Nature* **427**, 50 (2004).
- [79] M. Oestreich, S. Hallstein, A. P. Heberle, K. Eberl, E. Bauser, and W. W. Rühle, *Phys. Rev. B* **53**, 7911 (1996).
- [80] T. Matsuyama, H. Horinaka, W. Wada, T. Kondo, M. Hangyo, T. Nakanishi, S. Okumi, and K. Togawa, *Jpn. J. Appl. Phys.* **40**, L555 (2001).
- [81] D. Stich, J. Zhou, T. Korn, R. Schulz, D. Schuh, W. Wegscheider, M. W. Wu, and C. Schüller, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 176401 (2007).
- [82] D. Stich, J. Zhou, T. Korn, R. Schuh, D. Schuh, W. Wegscheider, M. W. Wu, and C. Schüller, *Phys. Rev. B* **76**, 205301 (2007).
- [83] R. D. R. Bhat, P. Nemeč, Y. Kerachian, H. M. van Driel, J. E. Sipe, and Arthur L. Smirl, *Phys. Rev. B* **71**, 035209 (2005).
- [84] W. Hanle, *Z. Phys.* **30**, 93 (1924).
- [85] E. L. Ivchenko, *Sov. Phys. Solid State* **14**, 2942 (1973).
- [86] R. D. R. Bhat and J. E. Sipe, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5432 (2000).
- [87] Martin J. Stevens, R. D. R. Bhat, J. E. Sipe, H. M. van Driel, and Arthur L. Smirl, *Phys. Status Solidi B* **238**, 568 (2003).
- [88] C.-M. Hu, Junsaku Nitta, A. Jensen, J. B. Hansen, and Hideaki Takayanagi, *Phys. Rev. B* **63**, 125333 (2001).
- [89] G. Schmidt, D. Ferrand, L. W. Molenkamp, A. T. Filip, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **62**, R4790 (2000).
- [90] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 2024 (1983).
- [91] K. P. Kämper, W. Schmitt, G. Güntherodt, R. J. Gambino, and R. Ruf, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2788 (1987).
- [92] A. Fert and H. Jaffrès, *Phys. Rev. B* **64**, 184420 (2001).
- [93] E. I. Rashba, *Phys. Rev. B* **62**, R16267 (2000).
- [94] A. G. Petukhov, J. Niggemann, V. N. Smelyanskiy, and V. V. Osipov, *J. Phys.:Condens. Matter* **19**, 315205 (2007).
- [95] P. R. Hammar, B. R. Bennett, M. J. Yang, and Mark Johnson, *Phys. Rev. Lett.* **83**,

- 203 (1999).
- [96] X. Jiang, R. Wang, R. M. Shelby, R. M. Macfarlane, S. R. Bank, J. S. Harris, and S. S. P. Parkin, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 056601 (2005).
- [97] S. Murakami, N. Nagaosa, and S. C. Zhang, *Science* **301**, 1348 (2003).
- [98] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126603 (2004).
- [99] S. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 393 (2000).
- [100] M. I. D'yakonov and V. I. Perel', *Zh. Eksp. Teor. Fiz. Pis'ma Red.* **13**, 657 (1971) [*JETP Lett.* **13**, 467 (1971)]; *Phys. Lett.* **35A**, 459 (1971).
- [101] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1834 (1999).
- [102] Hans-Andreas Engel, Emmanuel I. Rashba, and Bertrand I. Halperin, in *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*, edited by H. Kronmüller and S. Parkin (John Wiley & Sons Ltd, Chichester, UK, 2007), pp. 2858–2877, ; cond-mat/0603306.
- [103] J. Schliemann, *Int. J. Mod. Phys. B* **20**, 1015 (2006).
- [104] E. G. Mishchenko, A. V. Shytov, and B. I. Halperin, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 226602 (2004).
- [105] S. Y. Liu, X. L. Lei, and Norman J. M. Horing, *Phys. Rev. B* **73**, 035323 (2006).
- [106] W. Q. Chen, Z. Y. Weng, and D. N. Sheng, *Phys. Rev. B* **72**, 235315 (2005).
- [107] D. N. Sheng, L. Sheng, Z. Y. Weng, and F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. B* **72**, 153307 (2005).
- [108] A. Khaetshii, *Phys. Rev. B* **73**, 115323 (2006).
- [109] A. V. Shytov, E. G. Mishchenko, H.-A. Engel, and B. I. Halperin, *Phys. Rev. B* **73**, 075316 (2006).
- [110] W. K. Tse and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 056601 (2006); *Phys. Rev. B* **74**, 245309 (2006).
- [111] E. Ya. Sherman, A. Najmaie, H. M. van Driel, A. L. Smirl, and J. E. Sipe, *Solid State Commun.* **139**, 439 (2006).
- [112] A. Kavokin, G. Malpuech, and M. Glazov, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 136601 (2005).
- [113] S. Y. Liu, Norman J. M. Horing, and X. L. Lei, *Phys. Rev. B* **74**, 165316 (2006).
- [114] H. C. Huang, O. Voskoboynikov, and C. P. Lee, *J. Appl. Phys.* **95**, 1918 (2004).
- [115] H.-A. Engel, B. I. Halperin, and E. I. Rashba, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 166605 (2005).
- [116] E. M. Hankiewicz, G. Vignale, and M. E. Flatté, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 266601 (2006).
- [117] R. Golizadeh-Mojarad and S. Datta, cond-mat/0703280.
- [118] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Science* **306**, 1910 (2004).
- [119] V. Sih, R. C. Myers, Y. K. Kato, W. H. Lau, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom,

- Nature Phys. **1**, 31 (2005).
- [120] V. Sih, W. H. Lau, R. C. Myers, V. R. Horowitz, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, Phys. Rev. Lett. **97**, 096605 (2006).
- [121] N. P. Stern, S. Ghosh, G. Xiang, M. Zhu, N. Samarth, and D. D. Awschalom, Phys. Rev. Lett. **97**, 126603 (2006).
- [122] J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova, and T. Jungwirth, Phys. Rev. Lett. **94**, 047204 (2005).
- [123] S. O. Valenzuela and M. Tinkham, Nature **442**, 176 (2006).
- [124] S. D. Ganichev, E. L. Ivchenko, S. N. Danilov, J. Eroms, W. Wegscheider, D. Weiss, and W. Prettl, Phys. Rev. Lett. **86**, 4358 (2001).
- [125] S. D. Ganichev, V. V. Bel'kov, S. N. Danilov, S. A. Tarasenko, S. Giglberger, C. Hoffmann, E. L. Ivchenko, D. Weiss, W. Wegscheider, D. Schuh, C. Gerl, J. Stahl, J. D. Boeck, G. Borghs, and W. Prettl, Nature Phys. **2**, 609 (2006).
- [126] S. D. Ganichev, S. N. Danilov, V. V. Bel'kov, S. Giglberger, S. A. Tarasenko, E. L. Ivchenko, D. Weiss, W. Jantsch, F. Schäffler, D. Gruber, and W. Prettl, Phys. Rev. B **75**, 155317 (2007).
- [127] J. Sinova, S. Murakami, S. Q. Shen, and M.-S. Choid, Solid State Commun. **138**, 214 (2006).
- [128] S. Zhang and Z. Yang, Phys. Rev. Lett. **94**, 066602 (2005).
- [129] J. R. Shi, P. Zhang, D. Xiao, and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **96**, 076604 (2006).
- [130] V. V. Bryksin and P. Kleinert, PRB **73**, 165313 (2006).
- [131] J. L. Cheng and M. W. Wu, arXiv:0706.0370.
- [132] J. Smit, Physica **24**, 39 (1955).
- [133] L. Berger, Phys. Rev. B **2**, 4559 (1970).
- [134] J. I. Inoue, G. E. W. Bauer, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. B **70**, 041303(R) (2004).
- [135] S. Murakami, Phys. Rev. B **69**, 241202(R) (2004).
- [136] O. Chalaev and D. Loss, Phys. Rev. B **71**, 245318 (2005).
- [137] S. Y. Liu and X. L. Lei, cond-mat/0502392.
- [138] John Schliemann and Daniel Loss, Phys. Rev. B **71**, 085308 (2005).
- [139] A. G. Mal'shukov and K. A. Chao, Phys. Rev. B **71**, 121308 (2005).
- [140] B. A. Bernevig and S. C. Zhang, cond-mat/0412550.
- [141] S. A. Tarasenko, Pis'ma zh. Eksp. Teor. Fiz. **84**, 233 (2006) [JETP Lett. **84**, 199 (2006)].
- [142] İnanç Adagideli and Gerrit E. W. Bauer, Phys. Rev. Lett. **95**, 256602 (2005).
- [143] K. Nomura, J. Wunderlich, J. Sinova, B. Kaestner, A. H. MacDonald, and T. Jungwirth, Phys. Rev. B **72**, 245330 (2005).

-
- [144] Y. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Nature* **427**, 50 (2003); *Phys. Rev. Lett.* **93**, 176601 (2004).
- [145] H.-A. Engel, E. I. Rashba, and B. I. Halperin, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 036602 (2007).
- [146] M. Trushin and J. Schliemann, *Phys. Rev. B* **75**, 155323 (2007).
- [147] M. Q. Weng, M. W. Wu, and L. Jiang, *Phys. Rev. B* **69**, 245320 (2004).
- [148] A. A. Bakun, B. P. Zakharchenya, A. A. Rogachev, M. N. Tkachuk, and V. G. Fleisher, *Zh. Eksp. Teor. Fiz. Pisma Red.* **40**, 464 (1984) [*Sov. Phys. JETP Lett.* **40**, 1293 (1984)].
- [149] N. P. Stern, D. W. Steuerman, S. Mack, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 062109 (2007).
- [150] Ilya G. Finkler, Hans-Andreas Engel, Emmanuel I. Rashba, and Bertrand I. Halperin, *Phys. Rev. B* **75**, 241202 (2007).
- [151] S. O. Valenzuela and M. Tinkham, *Electrical detection of spin currents: The spin-current induced Hall effect (invited)* (AIP, 2007), No. 9, p. 09B103.
- [152] B. T. Jonker, Y. D. Park, B. R. Bennett, H. D. Cheong, G. Kioseoglou, and A. Petrou, *Phys. Rev. B* **62**, 8180 (2000).
- [153] R. R. Parsons, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 1152 (1969).
- [154] Y. Ohno, R. Terauchi, T. Adachi, F. Matsukura, and H. Ohno, *Physica E* **6**, 817 (2000).
- [155] T. Adachi, Y. Ohno, F. Matsukura, and H. Ohno, *Physica E* **10**, 36 (2001).
- [156] Th. Östreich, K. Schönhammer, and L. J. Sham, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4698 (1995).
- [157] J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom, *Science* **287**, 473 (2000).
- [158] I. Malajovich, J. M. Kikkawa, D. D. Awschalom, J. J. Berry, and N. Samarth, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1015 (2000).
- [159] S. A. Crooker, J. J. Baumberg, F. Flack, N. Samarth, and D. D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2814 (1996).
- [160] S. A. Crooker, D. D. Awschalom, J. J. Baumberg, F. Flack, and N. Samarth, *Phys. Rev. B* **56**, 7574 (1997).
- [161] D. Stich, J. H. Jiang, T. Korn, R. Schulz, D. Schuh, W. Wegscheider, M. W. Wu, and C. Schüller, *Phys. Rev. B* **76**, 073309 (2007).
- [162] S. A. Crooker, M. Furis, X. Lou, C. Adelman, D. L. Smith, C. J. Palmstrom, and P. A. Crowell, *Science* **309**, 2191 (2005).
- [163] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 4 (2004).
- [164] Mark Johnson, *Phys. Rev. B* **58**, 9635 (1998).
- [165] G. Schmidt, C. Gould, P. Grabs, A. M. Lunde, G. Richter, A. Slobodskyy, and L. W. Molenkamp, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 226602 (2004).

- [166] X. Lou, C. Adelman, M. Furis, S. A. Crooker, C. J. Palmström, and P. A. Crowell, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 176603 (2006).
- [167] X. Lou, C. Adelman, S. A. Crooker, E. S. Garlid, J. Zhang, K. S. M. Reddy, S. D. Flexner, C. J. Palmström, and P. A. Crowell, *Nature Phys.* **3**, 197 (2007).
- [168] N. F. Mott, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **153**, 699 (1936); *ibid.* **156**, 368 (1936).
- [169] R. J. Elliott, *Phys. Rev.* **96**, 266 (1954).
- [170] M. I. D'yakonov and V. I. Perel', *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **60**, 1954 (1971) [*Sov. Phys. JETP* **38**, 1053 (1971)].
- [171] G. L. Bir, A. G. Aronov, and G. E. Pikus, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **69**, 1382 (1975) [*Sov. Phys. JETP* **42**, 705 (1976)].
- [172] N. Linder and L. J. Sham, *Physica E* **2**, 412 (1998).
- [173] A. Malinowski, R. S. Britton, T. Grevatt, R. T. Harley, D. A. Ritchie, and M. Y. Simmons, *Phys. Rev. B* **62**, 13034 (2000).
- [174] M. A. Brand, A. Malinowski, O. Z. Karimov, P. A. Marsden, R. T. Harley, A. J. Shields, D. Sanvitto, D. A. Ritchie, and M. Y. Simmons, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 236601 (2002).
- [175] M. M. Glazov and E. L. Ivchenko, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **75**, 476 (2002) [*JETP Lett.* **75**, 403 (2002)].
- [176] S. Döhrmann, D. Hägele, J. Rudolph, M. Bichler, D. Schuh, and M. Oestreich, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 147405 (2004).
- [177] J. Strand, X. Lou, C. Adelman, B. D. Schultz, A. F. Isakovic, C. J. Palmström, and P. A. Crowell, *Phys. Rev. B* **72**, 155308 (2005).
- [178] J. Stephens, J. Berezovsky, J. P. McGuire, L. J. Sham, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 097602 (2004).
- [179] A. M. Tyryshkin, S. A. Lyon, W. Jantsch, and F. Schäffler, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 126802 (2005).
- [180] L. Lombez, P.-F. Braun, H. Carrère, B. Urbaszek, P. Renucci, T. Amand, X. Marie, J. C. Harmand, and V. K. Kalevich, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 252115 (2005).
- [181] R. Winkler, cond-mat/0605390.
- [182] R. I. Dzhioev, B. P. Zakharchenya, V. L. Korenev, M. N. Stepanova, *Phys. Solid State* **39**, 1765 (1997).
- [183] D. Hägele, M. Oestreich, W. W. Rühle, N. Nestle, and K. Eberl, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1580 (1998).
- [184] A. R. Cameron, P. Riblet, and A. Miller, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4793 (1996).
- [185] C. P. Weber, N. Gedik, J. E. Moore, J. Orenstein, J. Stephens, and D. D. Awschalom, *Nature* **437**, 1330 (2005).
- [186] S. G. Carter, Z. Chen, and S. T. Cundiff, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 136602 (2006).

-
- [187] C. P. Weber, J. Orenstein, B. Andrei Bernevig, Shou-Cheng Zhang, Jason Stephens, and D. D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 076604 (2007).
- [188] M. Q. Weng, M. W. Wu, and H. L. Cui, arXiv:0708.1975.
- [189] Michael E. Flatté and Jeff M. Byers, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4220 (2000).
- [190] Z. G. Yu and M. E. Flatté, *Phys. Rev. B* **66**, 201202 (2002).
- [191] Z. G. Yu and M. E. Flatté, *Phys. Rev. B* **66**, 235302 (2002).
- [192] Ivar Martin, *Phys. Rev. B* **67**, 014421 (2003).
- [193] V. V. Osipov and A. M. Bratkovsky, *Phys. Rev. B* **70**, 205312 (2004).
- [194] D. Csontos and S. E. Ulloa, *Physica E* **32**, 412 (2006); *Phys. Rev. B* **74**, 155207 (2006).
- [195] M. Q. Weng and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **66**, 235109 (2002).
- [196] Yuriy V. Pershin, *Phys. Rev. B* **71**, 155317 (2005).
- [197] E. G. Mishchenko and B. I. Halperin, *Phys. Rev. B* **68**, 045317 (2003).
- [198] D. Schmeltzer, A. Saxena, A. R. Bishop, and D. L. Smith, *Phys. Rev. B* **68**, 195317 (2003).
- [199] O. Bleibaum, *Phys. Rev. B* **71**, 195329 (2005).
- [200] S. Saikin, *J. Phys.: Cond. Matt.* **16**, 5071 (2004).
- [201] Semion Saikin, Min Shen, Ming-C. Cheng, and Vladimir Privman, *J. Appl. Phys.* **94**, 1769 (2003).
- [202] Min Shen, Semion Saikin, and Ming-C. Cheng, *J. Appl. Phys.* **96**, 4319 (2004).
- [203] Min Shen, Semion Saikin, Ming-C. Cheng, and Vladimir Privman, *Math. Comput. Simul.* **65**, 351 (2004).
- [204] Y. Y. Wang and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **72**, 153301 (2005).
- [205] S. Pramanik, S. Bandyopadhyay, and M. Cahay, *Phys. Rev. B* **73**, 125309 (2006).
- [206] B. K. Nikolić and S. Souma, *Phys. Rev. B* **71**, 195328 (2005).
- [207] Y. Takahashi, K. Shizume, and N. Masuhara, *Phys. Rev. B* **60**, 4856 (1999).
- [208] H. Dery, L. Cywiński, and L. J. Sham, *Phys. Rev. B* **73**, 041306 (2006).
- [209] Y. Qi and S. Zhang, *Phys. Rev. B* **67**, 052407 (2003).
- [210] Yuriy V. Pershin and Vladimir Privman, *Phys. Rev. B* **69**, 073310 (2004).
- [211] J. R. Petta, A. C. Johnson, J. M. Taylor, E. A. Laird, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, *Science* **309**, 2180 (2005).
- [212] Y. Kato, R. C. Myers, D. C. Driscoll, A. C. Gossard, J. Levy, and D. D. Awschalom, *Science* **299**, 1201 (2003).
- [213] S. D. Ganichev, S. N. Danilov, P. Schneider, V. V. Bel'kov, L. E. Golub, W. Wegscheider, D. Weiss, and W. Prettl, *Physica E* **300**, 127 (2006).
- [214] Yuriy V. Pershin, *Phys. Rev. B* **75**, 165320 (2007).
- [215] W. Xu, *Phys. Rev. B* **70**, 193301 (2004).

- [216] W. Xu and L. B. Lin, J. Phys.: Condens. Matter **16**, 1777 (2004).
- [217] J. L. Cheng and M. W. Wu, Appl. Phys. Lett. **86**, 032107(2005).
- [218] J. L. Cheng, cond-mat/0411196.
- [219] W. Xu, Phys. Rev. B **72**, 159902(E) (2005).
- [220] J. H. Jiang, M. Q. Weng, and M. W. Wu, J. Appl. Phys. **100**, 063709 (2006).
- [221] J. H. Jiang and M. W. Wu, Phys. Rev. B **75**, 035307 (2007).
- [222] Y. Zhou, Physica E (2007) , in press [arXiv:0709.2774].
- [223] Y. Alhassid, Rev. Mod. Phys. **72**, 895 (2000).
- [224] S. M. Reimann and M. Manninen, Rev. Mod. Phys. **74**, 1283 (2002).
- [225] J. Park, A. N. Pasupathy, J. I. Goldsmith, C. Chang, Y. Yaish, J. R. Petta, M. Rinkoski, J. P. Sethna, H. D. Abruña, and P. L. McEuen, Nature **417**, 722 (2002).
- [226] J. R. Petta and D. C. Ralph, Phys. Rev. Lett. **87**, 266801 (2001).
- [227] J. von Delft and D. C. Ralph, Physics Reports **345**, 61 (2001).
- [228] D. C. Ralph, C. T. Black, and M. Tinkham, Phys. Rev. Lett. **74**, 3241 (1995).
- [229] S. Guéron, M. M. Deshmukh, E. B. Myers, and D. C. Ralph, Phys. Rev. Lett. **83**, 4148 (1999).
- [230] D. L. Klein, P. L. McEuen, J. E. B. Katari, R. Roth, and A. P. Alivisatos, Appl. Phys. Lett. **68**, 2574 (1996).
- [231] L. P. Kouwenhoven, C. M. Marcus, P. L. McEuen, S. Tarucha, R. M. Westervelt, and N. S. Wingreen, in *Mesoscopic Electron Transport*, edited by L. L. Sohn, L. P. Kouwenhoven, and G. Schön (Kluwer, Series E **345**, 1997), pp. 105–214.
- [232] L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, and S. Tarucha, Rep. Prog. Phys. **64**, 701 (2001).
- [233] M. T. Björk, A. Fuhrer, A. E. Hansen, M. W. Larsson, L. E. Froberg, and L. Samuelson, Phys. Rev. B **72**, 201307 (2005).
- [234] C. Dekker, Physics Today **52**, 22 (1999).
- [235] P. L. McEuen, Physics World **13**, 31 (2000).
- [236] M. Bayer, P. Hawrylak, K. Hinzer, S. Fafard, M. Korkusinski, Z. R. Wasilewski, O. Stern, and A. Forchel, Science **291**, 451 (2001).
- [237] B. Szafran, S. Bednarek, and J. Adamowski, Phys. Rev. B **64**, 125301 (2001).
- [238] E. A. Stinaff, M. Scheibner, A. S. Bracker, I. V. Ponomarev, V. L. Korenev, M. E. Ware, M. F. Doty, T. L. Reinecke, and D. Gammon, Science **311**, 636 (2006).
- [239] A. W. Holleitner, R. H. Blick, A. K. Huttel, K. Eberl, and J. P. Kotthaus, Science **297**, 70 (2002).
- [240] S. Sasaki, T. Fujisawa, T. Hayashi, and Y. Hirayama, Phys. Rev. Lett. **95**, 056803 (2005).
- [241] M. Ciorga, A. S. Sachrajda, P. Hawrylak, C. Gould, P. Zawadzki, S. Jullian, Y. Feng,

- and Z. Wasilewski, Phys. Rev. B **61**, R16315 (2000).
- [242] J. M. Elzerman, R. Hanson, J. S. Greidanus, L. H. Willems van Beveren, S. De Franceschi, L. M. K. Vandersypen, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, Phys. Rev. B **67**, 161308 (2003).
- [243] *Single Charge Tunnelling*, edited by H. Grabert and M. H. Devoret (New York, Plenum, 1991).
- [244] L. Jacak, P. Harylak, and A. Wojs, *Quantum Dots* (Berlin, Springer, 1998).
- [245] S. Laurent, B. Eble, O. Krebs, A. Lemaître, B. Urbaszek, X. Marie, T. Amand, and P. Voisin, Phys. Rev. Lett. **94**, 147401 (2005).
- [246] S. Cortez, O. Krebs, S. Laurent, M. Senes, X. Marie, P. Voisin, R. Ferreira, G. Bastard, J-M. Gérard, and T. Amand, Phys. Rev. Lett. **89**, 207401 (2002).
- [247] M. Kroutvar, Y. Ducommun, D. Heiss, M. Bichler, D. Schuh, G. Abstreiter, and J. J. Finley, Nature **432**, 81 (2004).
- [248] J. Dreiser, M. Atatüre, C. Galland, T. Müller, A. Badolato, and A. Imamoglu, arXiv:0705.3557.
- [249] K. Ono, D. G. Austing, Y. Tokura, and S. Tarucha, Science **297**, 1313 (2002).
- [250] T. Fujisawa, D. G. Austing, Y. Tokura, Y. Hirayama, and S. Tarucha, Nature **419**, 278 (2002).
- [251] O. Fujisawa, T. Hayashi, and S. Sasaki, Rep. Prog. Phys. **69**, 759 (2006).
- [252] A. C. Johnson, J. R. Petta, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, Phys. Rev. B **72**, 165308 (2005).
- [253] J. M. Elzerman, R. Hanson, L. H. Willems van Beveren, B. Witkamp, L. M. K. Vandersypen, and L. P. Kouwenhove, Nature **430**, 431 (2004).
- [254] R. Hanson, B. Witkamp, L. M. K. Vandersypen, L. H. Willems van Beveren, J. M. Elzerman, and L. P. Kouwenhoven, Phys. Rev. Lett. **91**, 196802 (2003).
- [255] R. Hanson, L. H. Willems van Beveren, I. T. Vink, J. M. Elzerman, W. J. M. Naber, F. H. L. Koppens, L. P. Kouwenhoven, and L. M. K. Vandersypen, Phys. Rev. Lett. **94**, 196802 (2005).
- [256] F. H. L. Koppens, C. Buizert, K. J. Tielrooij, I. T. Vink, K. C. Nowack, T. Meunier, L. P. Kouwenhoven, and L. M. K. Vandersypen, Nature **442**, 766 (2006).
- [257] A. C. Johnson, J. R. Petta, J. M. Taylor, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, Nature **435**, 925 (2005).
- [258] E. A. Laird, J. R. Petta, A. C. Johnson, C. M. Marcus, A. Yacoby, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett. **97**, 056801 (2006).
- [259] S. Amasha, K. MacLean, Iuliana Radu, D. M. Zumbuhl, M. A. Kastner, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, cond-mat/0607110.
- [260] T. Meunier, I. T. Vink, L. H. Willems van Beveren, K-J. Tielrooij, R. Hanson, F.

- H. L. Koppens, H. P. Tranitz, W. Wegscheider, L. P. Kouwenhoven, and L. M. K. Vandersypen, Phys. Rev. Lett. **98**, 126601 (2007).
- [261] T. Meunier, I. T. Vink, L. H. Willems van Beveren, F. H. L. Koppens, H. P. Tranitz, W. Wegscheider, L. P. Kouwenhoven, and L. M. K. Vandersypen, Phys. Rev. B **74**, 195303 (2006).
- [262] F. H. L. Koppens, J. A. Folk, J. M. Elzerman, R. Hanson, L. H. Willems van Beveren, I. T. Vink, H. P. Tranitz, W. Wegscheider, L. P. Kouwenhoven, and L. M. K. Vandersypen, Science **309**, 1346 (2005).
- [263] Vitaly N. Golovach and Alexander Khaetskii and Daniel Loss, cond-mat/0703427.
- [264] A. Grelich, D. R. Yakovlev, A. Shabaev, Al. L. Efros, I. A. Yugova, R. Oulton, V. Stavarache, D. Reuter, A. Wieck, and M. Bayer, Science **313**, 341 (2006).
- [265] M. Valín-Rodríguez, A. Puente, and L. Serra, Phys. Rev. B **66**, 235322 (2002).
- [266] O. Voskoboynikov, C. P. Lee, and O. Tretyak, Phys. Rev. B **63**, 165306 (2001).
- [267] M. Governale, Phys. Rev. Lett., **89**, 206802 (2002).
- [268] A. V. Khaetskii and Y. V. Nazarov, Phys. Rev. B **61**, 12639 (2000).
- [269] A. V. Khaetskii and Yu. V. Nazarov, Physica E **6**, 470 (2000).
- [270] A. V. Khaetskii and Y. V. Nazarov, Phys. Rev. B **64**, 125316 (2001).
- [271] L. M. Woods, T. L. Reinecke, and Y. Lyanda-Geller, Phys. Rev. B **66**, 161318 (2002).
- [272] Y. Y. Wang and M. W. Wu, arXiv:0708.3125.
- [273] C. F. Destefani and Sergio E. Ulloa, Phys. Rev. B **72**, 115326 (2005).
- [274] W. J. M. Naber, T. Fujisawa, H. W. Liu, and W. G. van der Wiel, Phys. Rev. Lett. **96**, 136807 (2006).
- [275] Denis V. Bulaev and Daniel Loss, Phys. Rev. B **71**, 205324 (2005).
- [276] Vitaly N. Golovach, Alexander Khaetskii, and Daniel Loss, Phys. Rev. Lett. **93**, 016601 (2004).
- [277] P. San-Jose, G. Zarand, A. Shnirman, and Gerd Schön, Phys. Rev. Lett. **97**, 076803 (2006).
- [278] W. A. Coish and Daniel Loss, Phys. Rev. B **70**, 195340 (2004).
- [279] Wang Yao, Ren-Bao Liu, and L. J. Sham, Phys. Rev. B **74**, 195301 (2006).
- [280] C. X. Deng and X. Hu, Phys. Rev. B **73**, 241303 (2006).
- [281] C. X. Deng and X. Hu, cond-mat/0608544.
- [282] S. I. Erlingsson and Y. V. Nazarov, Phys. Rev. B **70**, 205327 (2004).
- [283] V. A. Abalmassov and F. Marquardt, Phys. Rev. B **70**, 075313 (2004).
- [284] Y. G. Semenov and K. W. Kim, Phys. Rev. B **70**, 085305 (2004).
- [285] Peter Y. Yu and Manuel Cardona, *Fundamentals of Semiconductors* (Springer, 2005).

-
- [286] Roland Winkler, *Spin-orbit coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* (Springer, Berlin, 2003).
- [287] P. Pfeffer and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **41**, 1561 (1990).
- [288] Y. Yafet, in *Solid State Physics*, edited by F. Seitz and D. Turnbull (Academic, New York, 1963), Vol. 14, p. 1.
- [289] P. Murzyn, C. R. Pidgeon, P. J. Phillips, M. Merrick, K. L. Litvinenko, J. Allam, B. N. Murdin, T. Ashley, J. H. Jefferson, A. Miller, and L. F. Cohen, Appl. Phys. Lett. **83**, 5220 (2003).
- [290] K. L. Litvinenko, B. N. Murdin, J. Allam, C. R. Pidgeon, M. Bird, K. Morris, W. Branford, S. K. Clowes, L. F. Cohen, T. Ashley, and L. Buckle, New Journal of Physics **8**, 9 (2006).
- [291] N. S. Averkiev, L. E. Golub¹, and M. Willander, J. Phys.:Condens. Matter **14**, R271 (2002).
- [292] E. L. Ivchenko and G. E. Pikus, *Superlattices and Other Heterostructures. Symmetry and Optical Phenomena* (Springer, Berlin, 1997).
- [293] E. L. Ivchenko, *Optical spectroscopy of semiconductor nanostructures* (Harrow, U.K., 2005).
- [294] D. Richards, B. Jusserand, H. Peric, and B. Etienne, Phys. Rev. B **47**, 16028 (1993).
- [295] B. Jusserand, D. Richards, G. Allan, C. Priester, and B. Etienne, Phys. Rev. B **51**, 4707 (1995).
- [296] Dirk Grundler, Phys. Rev. Lett. **84**, 6074 (2000).
- [297] Y. Sato, T. Kita, S. Gozu, and S. Yamada, J. Appl. Phys. **89**, 8017 (2001).
- [298] P. D. Dresselhaus, C. M. A. Papavassiliou, R. G. Wheeler, and R. N. Sacks, Phys. Rev. Lett. **68**, 106 (1992).
- [299] T. Koga, J. Nitta, T. Akazaki, and H. Takayanagi, Phys. Rev. Lett. **89**, 046801 (2002).
- [300] L. Meier, G. Salis, I. Shorubalko, E. Gini, S. Schön, and K. Ensslin, Nature Phys. **3**, 650 (2007).
- [301] 黄昆、韩汝琦, 固体物理学 (高等教育出版社, 2000).
- [302] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin, *Solid State Physics* (Holt, Rinehart and Winston, New York, 1988).
- [303] John H. Davies, *The Physics of Low-dimensional Semiconductors* (Cambridge, 1998).
- [304] L. Allen and J. H. Eberly, *Optical Resonance and Two-Level Atoms* (Dover, New York, 1975).
- [305] P. N. Argyres and P. L. Kelley, Phys. Rev. **134**, A98 (1964).
- [306] F. Bloch, W. W. Hansen, and M. Packard, Phys. Rev. **70**, 474 (1946).

- [307] F. Bloch, Phys. Rev. **70**, 460 (1946).
- [308] H. C. Torrey, Phys. Rev. **104**, 563 (1956).
- [309] H. Haug and A.P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors* (Springer, Berlin, 1996).
- [310] X. Hu, R. De Sousa, and S. Das Sarma, cond-mat/0108339 (2001).
- [311] M. W. Wu and C. Z. Ning, Phys. Stat. Sol. (b) **222**, 523 (2000).
- [312] M. W. Wu, J. Supercond. **14**, 245 (2001).
- [313] P. Monod and F. Beuneu, Phys. Rev. B **19**, 911 (1979).
- [314] M. Q. Weng and M. W. Wu, J. Phys.:Condens. Matter **15**, 5563 (2003).
- [315] M. I. D'yakonov and V. I. Perel', Fiz. Tverd. Tela **13**, 3581 (1971) [Sov. Phys. Solid State **13**, 3023 (1972)].
- [316] M. I. D'yakonov and V. I. Perel', Zh. Eksp. Teor. Fiz. **65**, 362 (1973) [Sov. Phys. JETP **38**, 177 (1974)].
- [317] N. S. Averkiev and L. E. Golub, Phys. Rev. B **60**, 15582 (1999).
- [318] S. I. Erlingsson, J. Schliemann, and D. Loss, Phys. Rev. B **71**, 035319 (2005).
- [319] E. L. Ivchenko, Fiz. Tverd. Tela **15**, 1566 (1973) [Sov. Phys. Solid State **15**, 1048 (1973)].
- [320] B. P. Zakharchenya, E. L. Ivchenko, A. Ya. Ryskin, and A. V. Varfolomeev, Fiz. Tverd. Tela **18**, 230 (1976).
- [321] G. E. Pikus and G. L. Bir, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **60**, 195 (1971) [Sov. Phys. JETP **33**, 108 (1971)].
- [322] G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (Halsted Press, Jerusalem, London, 1974).
- [323] J. Zhou and M. W. Wu, arXiv:0705.0216 .
- [324] D. Paget, G. Lampel, B. Sapoval, and V. I. Safarov, Phys. Rev. B **15**, 5780 (1977).
- [325] J. Strand, B. D. Schultz, A. F. Isakovic, C. J. Palmstrøm, and P. A. Crowell, Phys. Rev. Lett. **91**, 036602 (2003).
- [326] A. Abragam, *The Principles of Nuclear Magnetism* (Oxford University Press, Oxford, 1961), Chaps. VI and IX.
- [327] M. W. Wu, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 2195 (2001).
- [328] E. Ya. Sherman, Appl. Phys. Lett. **82**, 209 (2003).
- [329] M. Q. Weng and M. W. Wu, Phys. Stat. Sol. (b) **239**, 121 (2003).
- [330] M. W. Wu and H. Metiu, Phys. Rev. B **61**, 2945 (2000).
- [331] M. Q. Weng and M. W. Wu, Chin. Phys. Lett. **22**, 671 (2005).
- [332] M. Q. Weng and M. W. Wu, Phys. Rev. B **70**, 195318 (2004).
- [333] J. L. Cheng, M. Q. Weng, and M. W. Wu, Solid State Commun. **128**, 365 (2003).
- [334] L. Jiang and M. W. Wu, Phys. Rev. B **72**, 033311 (2005).

- [335] C. Lü, J. L. Cheng, and M. W. Wu, Phys. Rev. B **73**, 125314 (2006).
- [336] W. J. H. Leyland, R. T. Harley, M. Henini, A. J. Shields, I. Farrer, and D. A. Ritchie, Phys. Rev. B **76**, 195305 (2007).
- [337] M. J. Yang, R. J. Wagner, B. V. Shanabrook, J. R. Waterman, and W. J. Moore, Phys. Rev. B **47**, 6807 (1993).
- [338] C. R. Pidgeon, D. L. Mitchell, and R. N. Brown, Phys. Rev. **154**, 737 (1967).
- [339] B. D. McCombe and R. J. Wagner, Phys. Rev. B **4**, 1285 (1971).
- [340] D. Stein, K. v. Klitzing, and G. Weimann, Phys. Rev. Lett. **51**, 130 (1983).
- [341] G. Lommer, F. Malcher, and U. Rössler, Phys. Rev. B **32**, 6965 (1985).
- [342] H. Mayer and U. Rössler, Phys. Rev. B **44**, 9048 (1991).
- [343] C. Lü, J. L. Cheng, M. W. Wu, and I. C. da Cunha Lima, Phys. Lett. A **365**, 501 (2007).
- [344] M. W. Wu and M. Kuwata-Gonokami, Solid Stat. Commun. **121**, 509 (2002).
- [345] G. L. Bir, A. G. Aronov, and G. E. Pikus, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **69**, 1382 (1975) [Sov. Phys. JETP **42**, 705 (1975)].
- [346] F. X. Bronold, A. Saxena, and D. L. Smith, Phys. Rev. B **70**, 245210 (2004).
- [347] C. Lechner and U. Rössler, Phys. Rev. B **72**, 045311 (2005).
- [348] C. Grimaldi, Phys. Rev. B **72**, 075307 (2005).
- [349] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics* (Plenum, New York, 1981).
- [350] L. Bányai, E. Reitsamer, and H. Haug, J. Opt. Soc. Am. B **13**, 1278 (1996).
- [351] M. Lindberg, R. Binder, and S. W. Koch, Phys. Rev. A **45**, 1865 (1992).
- [352] Tilmann Kuhn and Fausto Rossi, Phys. Rev. Lett. **69**, 977 (1992).
- [353] B. G. Streetman and S. Banerjee, *Solid State Electronic Devices* (Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 2000), Eq. (5.14); K. Tomizawa, *Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices* (Artech House, Boston, 1993), Eq. (4.16); M. V. Fischetti and S. E. Laux, *DAMOCLES Theoretical Manual*, (IBM Corporation, New York, 1995) Document No. 0.2, Eq. (3.34).
- [354] P. Vogl, in *Physics of Nonlinear Transport in Semiconductor*, edited by K. Ferry, J. R. Barker, and C. Jacoboni (Plenum, New York, 1980).
- [355] G. D. Mahan, in *Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductor*, edited by J. T. Devreese (North Holland, Amsterdam, 1972).
- [356] *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, edited by O. Madelung, M. Schultz, and H. Weiss, Landolt-Börnstein, New Series, Group III, vol. 17, Pt. a (Springer-Verlag, Berlin, 1982).
- [357] K. B. Nordstrom, K. Johnsen, S. J. Allen, A.-P. Jauho, B. Birnir, J. Kono, T. Noda, H. Akiyama, and H. Sakaki, Phys. Rev. Lett. **81**, 457 (1998).
- [358] P. Zhang and M. W. Wu, Phys. Rev. B **76**, (2007) in press.

- [359] S. Y. Liu and X. L. Lei, arXiv:cond-mat/0411629v2 (2004).
- [360] N. A. Sinitsyn, E. M. Hankiewicz, Winfried Teizer, and Jairo Sinova, Phys. Rev. B **70**, 081312 (2004).
- [361] B. H. Floyd and Y. L. Le Coz, J. Appl. Phys. **76**, 7889 (1996).
- [362] Y. L. Le Coz, Ph.D thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1988.
- [363] J. A. Carrillo, I. M. Gamba, A. Majorana, and C.-W. Shu, J. Comput. Phys. **184**, 493 (2003).
- [364] E. M. Conwell and M. O. Vassel, IEEE Trans. Educ. **13**, 22 (1966).
- [365] Olga V. Dimitrova, Phys. Rev. B **71**, 245327 (2005).

硕博连读期间发表的论文

1. **J. L. Cheng** and M. W. Wu, “*Excimers and their entanglement in double quantum dots*”, Solid State Commun. **124**, 203 (2002). (未包括在本论文中)
2. **J. L. Cheng**, M. Q. Weng, and M. W. Wu, “*Manipulation of spin dephasing in InAs quantum wires*”, Solid State Commun. **128**, 365 (2003). (公式部分对应第6章, 结果对应第7章)
3. **J. L. Cheng**, M. W. Wu, and C. Lü, “*Spin relaxation in semiconductor quantum dots*”, Phys. Rev. B **69**, 115318 (2004). (对应第4章)
4. C. Lü, **J. L. Cheng**, and M. W. Wu, “*Hole spin relaxation in semiconductor quantum dots*”, Phys. Rev. B **71**, 075308 (2005).
5. **J. L. Cheng** and M. W. Wu, “*Intense terahertz laser fields on a two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit coupling*”, Appl. Phys. Lett. **86**, 032107 (2005). (对应第5章)
6. L. Jiang, M. Q. Weng, M. W. Wu, and **J. L. Cheng**, “*Diffusion and transport of spin pulses in an n-type semiconductor quantum well*”, J. Appl. Phys. **98**, 113702 (2005). (文章中库仑散射的所采用的数值处理方法为本人在此工作中的贡献, 对应附录 D。)
7. **J. L. Cheng** and M. W. Wu, “*Spin relaxation under identical Dresselhaus and Rashba coupling strengths in GaAs quantum wells*”, J. Appl. Phys. **99**, 083704 (2006). (公式部分对应第6章以及附录 B、C, 数值计算方法在 附录 D, 而结果对应第8章。)
8. C. Lü, **J. L. Cheng**, and M. W. Wu, “*Hole spin dephasing in p-type semiconductor quantum wells*”, Phys. Rev. B **73**, 125314 (2006). (其附录部分内容对应第6章)
9. J. Zhou, **J. L. Cheng**, and M. W. Wu, “*Spin relaxation time in n-type GaAs quantum wells*”, Phys. Rev. B **75**, 045305 (2007).
10. **J. L. Cheng** and M. W. Wu, “*Spin diffusion/transport in n-type semiconductor quantum wells*”, J. Appl. Phys. **101**, 073702 (2007). (公式部分对应第6章以及附录 B, 数值计算方法在 附录 D、E, 结果对应第9章)
11. C. Lü, **J. L. Cheng**, M. W. Wu, and I. C. da Cunha Lima, “*Spin relaxation time, spin dephasing time and ensemble spin dephasing time in n-type GaAs quantum wells*”, Phys. Lett. A **365**, 501 (2007).
12. M. W. Wu, M. Q. Weng, and **J. L. Cheng**, (Review Article) “*Spin dynamics in*

- semiconductor nanostructures*”, in “*Physics, Chemistry and Application of Nanostructures: Reviews and Short Notes to Nanomeeting 2007*”, eds. V. E. Borisenko, V. S. Gurin, and S. V. Gaponenko (World Scientific, Singapore, 2007), pp. 14.
13. **J. L. Cheng**, M. W. Wu, and I. C. da Cunha Lima, “*Anisotropic spin transport in GaAs quantum wells in the presence of competing Dresselhaus and Rashba spin-orbit coupling*”, Phys. Rev. B **75**, 205328 (2007). (公式部分对应第6章以及附录 B, 数值计算方法在附录 D、E, 结果对应第10章)
 14. **J. L. Cheng** and M. W. Wu, “*Kinetic investigation on extrinsic spin Hall effect induced by skew scattering*”, arXiv:0706.0370. (公式部分对应第6章, 结果对应第11章)

会议报告

1. 程晋罗, 吴明卫, “*Anisotropic Spin Transport in GaAs Quantum Wells in the Presence of Competing Dresselhaus and Rashba Spin-Orbit Coupling*”, 第十六届全国半导体物理学术会议, 甘肃省兰州市, 2007年9月7日-13日。(邀请报告)
2. 程晋罗, 吴明卫, “*Kinetic Investigation on Extrinsic Spin Hall Effect induced by Skew Scattering*”, 第十六届全国半导体物理学术会议, 甘肃省兰州市, 2007年9月7日-13日。
3. **J. L. Cheng** and M. W. Wu, “*Intense terahertz laser fields on a two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit coupling*”, at Ioffe Physico-Technical Institute International Winter School 2006, St. Petersburg, RUSSIA, February 24-27, 2006.
4. 程晋罗, 吴明卫, “*Spin Transport in GaAs Quantum Wells Under Competing Dresselhaus and Rashba Coupling Strengths*”, 第十四届全国凝聚态理论与统计会议, 广东省广州市, 2006年10月10日。
5. 程晋罗, 吴明卫, “*Spin Diffusion/Transport in n-Type GaAs Quantum Wells*”, 第十四届全国凝聚态理论与统计会议, 广东省广州市, 2006年10月10日。
6. 程晋罗, 姜磊, 吴明卫, “*Spin Relaxation under Identical Dresselhaus and Rashba Coupling Strengths in GaAs Quantum Wells*”, 第十三届全国凝聚态理论与统计会议, 宁夏银川, 2005年8月25日-28日。
7. 程晋罗, 吴明卫, “*Intense Terahertz Laser Fields on a Two-Dimensional Electron Gas with Rashba Spin-Orbit Coupling*”, 第十三届全国凝聚态理论与统计会议, 宁夏银川, 2005年8月25日-28日。
8. 程晋罗, 翁明其, 吴明卫, “*Manipulation of Spin Dephasing in InAs Quantum Wires*”, 第十二届全国凝聚态理论与统计会议, 上海, 2003年10月10日。

致 谢

本论文的完成首先要归功于我的导师吴明卫教授的悉心指导，在这向吴老师致以衷心的感谢和最崇高的敬意。在这将近六年的研究生学习期间，吴老师严谨的治学态度、创造性的思维方式、极大的工作热情以及追求物理本质和清晰的物理图像的研究方法时刻影响着我，使我认识到如何才能成为一个合格的科研人员，这也是我研究生阶段最大的收获，是我在以后工作学习中追求的目标。另外，吴老师和他的夫人孙炜老师以及他的母亲陈宝珠老师在这几年对我生活上的关心和爱护，以他们丰富的生活阅历无私的帮助我规划将来的生活和学习，令我非常感动。再一次向他们表示衷心的感谢。

一直以来，吴老师和组里其他老师和同学营造出的良好学习氛围、启发性的讨论也使我的研究生学习生活中充满了乐趣和挑战。感谢翁明其副教授一直以来在日常生活、学习中帮助，并且在计算机的使用上非常耐心指导，以及在论文完成之际抽出宝贵时间来阅读和修改。感谢蒋建华、周俊、吕川、王元元、沈卡、张鹏、周扬等同学在这几年来对我生活上的帮助，以及与你们富有启发性的讨论。感谢蒋建华同学和沈卡同学抽空修改我的论文。

感谢科大九年中一起学习、生活和战斗过的朋友们。感谢室友周祥发，和你五年来的讨论使我受益良多。

特别感谢我的父母，感谢他们的养育以及在十几年求学过程中给予的一贯支持和无私奉献！

程晋罗

二零零七年十一月